درس‌نامه‌ی بس ذره ای

مدرس: دکتر سید اکبر جعفری

دانشگاه صنعتی شریف

پاییز ۱۳۹۱

به نام خدا

فهرست مطالب

فصل ۱

درآمدی بر بس ذره ای

در این بخش در مورد کلیت بس ذره ای توضیح میدهیم.

فصل ۲
مقدمه‌ای بر کوانتش دوم و مدل گاز الکترونی

معادله شرودینگر وابسته به زمان برای Nذره به صورت زیر است :

$$i\hbar\, \partial_t \Psi(x_۱, x_۲, \ldots, x_N, t) = H\Psi(x_۱, x_۲, \ldots, x_N, t) \qquad (۱.۲)$$

و هامیلتونی از دو بخش انرژی جنبشی، T، و انرژی پتانسیل برهم‌کنش بین ذرات، V، تشکیل شده است.

$$H = \sum_{k=۱}^{N} T(x_k) + \frac{۱}{۲} \sum_{k \neq l} V(x_k, x_l) \qquad (۲.۲)$$

مولفه‌ی x_k به مختصات ذره‌ی kام اشاره می‌کند که شامل مختصات فضایی $\mathbf{x}_k$ و هر متغیر گسسته‌ای مانند مولفه‌ی z اسپین برای یک سیستم فرمیونی باشد.

اکنون می‌توانیم تابع موج بس ذره‌ای را براساس مجموعه‌ی کاملی از توابع موج تک ذره‌ای بسط دهیم. توابع موج تک ذره‌ای برای یک سیستم همگن بزرگ می‌تواند مجموعه‌ای از امواج تخت باشد و یا برای ذرات در یک شبکه‌ی کریستالی به صورت مجموعه‌ی کاملی از توابع بلوخ در یک پتانسیل تناوبی مناسب درنظرگرفته شود. توابع موج تک ذره را به صورت زیر در نظر می‌گیریم:

$$\phi_{E_۱}(x_۱), \phi_{E_۲}(x_۲), \ldots, \phi_{E_N}(x_N)$$

که E_kها مجموعه‌ی کاملی از اعداد کوانتومی تک ذره را نمایش می‌دهد. به طور مثال برای یک سیستم بوزونی بدون اسپین $\mathbf{p}$ عدد کوانتومی مناسب است و یا برای سیستمی از فرمیون‌ها $\mathbf{p}$ و s_z.

بنابراین با بسط تابع موج بس ذره‌ای نسبت به x_1 داریم:

$$\Psi(x_1, x_2, \ldots, x_N, t) = \sum_{E_1} \bar{C}(x_2, \ldots, x_N, t)\, \phi_{E_1}(x_1)$$

و اگر این کار را $(N-1)$ بار دیگر تکرار کنیم، خواهیم داشت:

$$\Psi(x_1, x_2, \ldots, x_N, t) = \sum_{E_1, E_2, \ldots, E_N} C(E_1, E_2, \ldots, E_N, t)\phi_{E_1}(x_1)\, \phi_{E_2}(x_2) \ldots \phi_{E_N}(x_N) \tag{۳.۲}$$

توابع موج بس ذره‌ای یا متقارن هستند یا پادمتقارن. بنابراین برای حالتِ ساده‌ی توابع موج دو ذره‌ای داریم:

$$\Psi(x_1, x_2, t) = \lambda\, \Psi(x_2, x_1, t) \tag{۴.۲}$$

با جایگذاری Ψ در عبارت بالا خواهیم داشت :

$$\sum_{E_1, E_2} C(E_1, E_2, t)\, \phi_{E_1}(x_1)\, \phi_{E_2}(x_2) = \lambda \sum_{E'_1, E'_2} C(E'_1, E'_2, t)\, \phi_{E'_1}(x_2)\, \phi_{E'_2}(x_1)$$

حال با فرض $E'_1 = E_2$ و $E'_2 = E_1$ بدست می‌آوریم:

$$C(E_1, E_2, t) = \lambda\, C(E_2, E_1, t)$$

که برای تابع موج با N ذره نیز قابل تعمیم است. بنابراین ضرایب بسط مشخصاتی مشابه با تابع موج دارد.

اکنون تابع موج (۳.۲) را در معادله‌ی شرودینگر (۱.۲) جایگذاری می‌کنیم، با توجه به این که وابستگی زمانی تابع موج بس ذره‌ای در ضریب بسط قرار دارد.

$$\begin{aligned} &i\hbar \sum_{E'_1 \ldots E'_N} \partial_t\, C(E'_1, \ldots, E'_N, t)\, \phi_{E'_1}(x_1) \ldots \phi_{E'_N}(x_N) \\ &= \left(\sum_{k=1}^{N} T(x_k) + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l} V(x_k, x_l) \right) \sum_{E'_1 \ldots E'_N} \partial_t\, C(E'_1, \ldots, E'_N, t)\, \phi_{E'_1}(x_1) \ldots \phi_{E'_N}(x_N) \end{aligned} \tag{۵.۲}$$

چون توابع موج تک ذره متعامد هستند به این معنی که

$$\langle E_۱|E'_۱\rangle = \delta_{E_۱,E'_۱}$$

عبارت زیر را در دو طرف رابطه‌ی بالا را ضرب می‌کنیم:

$$\int dx_۱ \ldots dx_n \ \ \phi^{\dagger}_{E_۱}(x_۱)\ldots\phi^{\dagger}_{E_N}(x_N)$$

انجام این عملیات برای سمت چپ معادله‌ی (۵.۲) به صورت زیر می‌باشد:

$$i\hbar \sum_{E'_۱\ldots E'_N} \partial_t\, C(E'_۱,\ldots,E'_N,t)\ \langle E_۱|E'_۱\rangle\ldots\langle E_N|E'_N\rangle = i\hbar\ \partial_t\, C(E_۱,\ldots,E_N,t)$$

اگر برای بخش انرژی جنبشیِ هامیلتونی نیز عملیات بالا را انجام دهیم، خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}
&\sum_{E'_۱\ldots E'_N} C(E'_۱,\ldots,E'_N,t)\int dx_۱\ldots dx_n\ \phi^{\dagger}_{E_۱}(x_۱)\ldots\phi^{\dagger}_{E_N}(x_N)\Big(\sum_{k=۱}^{N}T(x_k)\Big)\\
&\qquad\qquad\qquad\qquad \phi_{E'_۱}(x_۱)\ldots E'_N(x_N)\\
&=\sum_{E'_۱\ldots E'_N} C(E'_۱,\ldots,E'_N,t)\ \langle E_۱|T|E'_۱\rangle\langle E_۲|E'_۲\rangle\ldots\langle E_N|E'_N\rangle\\
&+\sum_{E'_۱\ldots E'_N} C(E'_۱,\ldots,E'_N,t)\ \langle E_۱|E'_۱\rangle\langle E_۲|T|E'_۲\rangle\langle E_۳|E'_۳\rangle\ldots\langle E_N|E'_N\rangle\\
&+\ldots\\
&+\sum_{E'_۱\ldots E'_N} C(E'_۱,\ldots,E'_N,t)\ \langle E_۱|E'_۱\rangle\langle E_۲|E'_۲\rangle\ldots\langle E_{N-۱}|E'_{N-۱}\rangle\langle E_N|T|E'_N\rangle\\
&=\sum_{E'_۱} C(E'_۱,E_۲,E_۳\ldots,E_N,t)\ \langle E_۱|T|E'_۱\rangle\\
&+\sum_{E'_۲} C(E_۱,E'_۲,E_۳\ldots,E_N,t)\ \langle E_۲|T|E'_۲\rangle\\
&+\ldots\\
&+\sum_{E'_N} C(E_۱,E_۲,E_۳\ldots,E'_N,t)\ \langle E_N|T|E'_N\rangle\\
&=\sum_{k=۱}^{N}\ \sum_{W}\langle E_k|T|W\rangle\ C(E_۱,E_۲,\ldots,E_{k-۱},W,E_{k+۱},\ldots,E_N,t)
\end{aligned}$$

بنابراین برای بخش انرژی جنبشی به رابطه‌ی بالا می‌رسیم که در آن عنصر ماتریسی $\langle E_k|T|W\rangle$ احتمال گذار از حالت E_k به W را بیان می‌کند.

اگر این عملیات را برای بخش انرژی پتانسیل تکرار کنیم، در نهایت خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}
& i\hbar\, \partial_t\, C(E_1,\ldots,E_N,t) \\
& = \sum_{k=1}^{N} \sum_{W} \langle E_k|T|W\rangle\, C(E_1,E_2,\ldots,E_{k-1},W,E_{k+1},\ldots,E_N,t) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k\neq l}^{N} \sum_{W,W'} \langle E_k E_l|V|WW'\rangle \\
& \qquad C(E_1,\ldots,E_{k-1},W,E_{k+1},\ldots,E_{l-1},W',E_{l+1},\ldots,E_N,t)
\end{aligned} \tag{۶.۲}$$

که در آن عنصر ماتریسی به صورت زیر است:

$$\langle E_k E_l|V|WW'\rangle = \int\int dx_k dx_l\, \phi^{\dagger}_{E_k}(x_k)\, \phi^{\dagger}_{E_l}(x_l)\, V(x_k,x_l)\, \phi_W(x_k)\, \phi_{W'}(x_l)$$

بنابراین تا اینجا به این نتیجه رسیدیم که می‌توانیم تابع موج بس ذره‌ای را به صورت بسطی از توابع موج تک ذره‌ای نوشت و سپس معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان را برای ضریب بسط بنویسیم که تمام مشخصات تابع تابع موج بس ذره‌ای را دارد.

۱.۲ بوزون‌ها

حال یک سیستم بوزونی در نظر می‌گیریم. بوزون‌ها ذراتی هستند که در معادله (۴.۲) دارای $\lambda = 1$ هستند. به دلیل این خاصیت تقارنی داریم:

$$C(1213145\ldots,t) = C(\underbrace{1\ldots1}_{n_1}\ \underbrace{2\ldots2}_{n_2}\ \ldots\ldots,t)$$

در این حالت می‌توانیم n_1 ذره در حالت ۱، n_2 ذره در حالت ۲ و ... داشته باشیم به طوری که $\sum_i n_i$ برابر با تعداد کل ذرات باشد. بنابراین می‌توانیم معادلی برای ضریب بسط بیابیم:

$$C(E_1, E_2, \ldots, t) \equiv \bar{C}(n_1, n_2, \ldots, n_\infty, t)$$

به شرط بهنجارش برای تابع موج بس ذره‌ای توجه می‌کنیم:

$$\int dx_1 \cdots dx_N \; \Psi^\dagger(x_1, \ldots, x_N, t)\; \Psi(x_1, \ldots, x_N, t) = 1 \tag{۲.۷}$$

$$\sum_{E'_1,\ldots,E'_N} \sum_{E_1,\ldots,E_N} C(E'_1, \ldots, E'_N, t)\; C(E_1, \ldots, E_N, t)\langle E'_1|E_1\rangle \ldots \langle E'_N|E_N\rangle = 1$$

با توجه به این که توابع موج تک ذره متعامد هستند، بدست می‌آوریم:

$$\sum_{E_1,\ldots,E_N} |C(E_1, \ldots, E_N, t)|^2 = 1$$

می‌توانیم شرط بالا را با $\bar{C}$ بازنویسی کنیم:

$$\sum_{n_1,\ldots,n_\infty} |\bar{C}(n_1, \ldots, n_\infty, t)|^2 \sum_{E_1,\ldots,E_N} (1) = 1$$

$$\sum_{n_1,\ldots,n_\infty} |\bar{C}(n_1, \ldots, n_\infty, t)|^2 \frac{N!}{n_1! \ldots n_\infty!} = 1$$

می‌توانیم کمیت دیگری تعریف کنیم تا بتوانیم رابطه‌ی بالا را ساده‌تر بنویسیم:

$$f = \left(\frac{N!}{n_1! \ldots n_\infty!}\right)^{\frac{1}{2}} \bar{C}$$

$$\sum_{n_1,\ldots,n_\infty} |f(n_1, \ldots, n_\infty, t)|^2 = 1$$

با این تعریف می‌توانیم معادله‌ی (۲.۶) را برای f بنویسیم که در ادامه به این کار می‌پردازیم. دلیل انجام این کار این است که از فضای مختصات ذرات به فضای عدد کوانتومی مناسب مسئله برویم

که هدف کوانتش دوم است. برای بخش انرژی جنبشی خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}
&\sum_{k=1}^{N} \sum_{W} \langle E_k|T|W\rangle \; C(E_1, E_2, \ldots, E_{k-1}, W, E_{k+1}, \ldots, E_N, t) \\
&= \sum_{k=1}^{N} \sum_{W} \langle E_k|T|W\rangle \; \bar{C}(n_1, \ldots, n_{E_k} - 1, \ldots, n_W + 1, \ldots, n_\infty, t) \qquad (۸.۲)\\
&= \sum_{E} \sum_{W} \langle E|T|W\rangle \; n_E \; \bar{C}(n_1, \ldots, n_E - 1, \ldots, n_W + 1, \ldots, n_\infty, t) \qquad (۹.۲)
\end{aligned}$$

همان گونه که در رابطه‌ی (۸.۲) مشخص شده، عدد کوانتومی E_k یک بار کمتر و عدد کوانتومی W یک بار بیشتر اتفاق می‌افتد. هم چنین در رابطه‌ی (۹.۲) جمع بندی روی ذرات که با k انجام می‌شود با جمع روی عدد کوانتومی E تعویض می‌گردد که با وارد کردن ژاکوبین مناسب آن که همان n_E است، صورت می‌گیرد.

بنابراین برای بخش انرژی جنبشی در یک نمادگذاری ساده بدست آوردیم:

$$\begin{aligned}
&\sum_{k=1}^{N} \sum_{W} \langle E_k|T|W\rangle \; C(E_1, E_2, \ldots, E_{k-1}, W, E_{k+1}, \ldots, E_N, t) \\
&= \sum_{i} \sum_{j} n_i \; \langle i|T|j\rangle \; \bar{C}(n_1, \ldots, n_i - 1, \ldots, n_j + 1, \ldots, n_\infty, t)
\end{aligned}$$

اکنون محاسبات را با بخش انرژی جنبشی ادامه می‌دهیم و در نهایت آن را برای کل هامیلتونی می‌نویسیم:

$$\begin{aligned}
&i\hbar\, \partial_t \, \bar{C}(n_1, n_2, \ldots, n_\infty, t) \\
&= \sum_{i} \sum_{j} n_i \; \langle i|T|j\rangle \; \bar{C}(n_1, \ldots, n_i - 1, \ldots, n_j + 1, \ldots, n_\infty, t) \\
&+\ldots \qquad (۱۰.۲)
\end{aligned}$$

برای این‌که تاکید شود معادله‌ی بالا شامل بخش پتانسیل هم می‌شود، از علامت ... استفاده شده است. اگر معادله‌ی بالا را برای f بنویسیم، خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} & i\hbar \sqrt{\frac{n_1!\dots n_\infty!}{N!}}\ \partial_t\ f(n_1,\dots,n_\infty,t) \\ & = \sum_{ij}\ \langle i|T|j\rangle\ n_i \sqrt{\frac{n_1!\dots(n_i-1)!\dots(n_j+1)!\dots n_\infty!}{N!}} \\ & \qquad\qquad f(n_1\dots n_i-1\dots n_j+1\dots n_\infty,t) \\ & +\dots \end{aligned} \tag{۱۱.۲}$$

$$\begin{aligned} & i\hbar\ \partial_t\ f(n_1,\dots,n_\infty,t) \\ & = \sum_{ij}\ \langle i|T|j\rangle \sqrt{(n_j+1)n_i}\ f(n_1\dots n_i-1\dots n_j+1\dots n_\infty,t) \\ & +\dots \end{aligned} \tag{۱۲.۲}$$

با در نظر گرفتن تابع موج سیستم به صورت زیر، خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle = \sum_{n_1,\dots,n_\infty} & f(n_1,\dots,n_\infty,t)\ |n_1\dots n_\infty\rangle \\ |n_1,\dots,n_\infty\rangle & = |n_1\rangle\otimes|n_2\rangle\otimes\dots|n_\infty\rangle \end{aligned} \tag{۱۳.۲}$$

$$\begin{aligned} i\hbar\ \partial_t|\Psi\rangle &= \sum_{n_1,\dots,n_\infty} i\hbar\ \partial_t f(n_1,\dots,n_\infty)|n_1\dots n_\infty\rangle \\ &= \sum_{n_1,\dots,n_\infty}\sum_{ij}\ \langle i|T|j\rangle\sqrt{(n_j+1)n_i}\ f(n_1\dots n_i-1\dots n_j+1\dots n_\infty,t) \\ &\qquad \times|n_1\dots n_i\dots n_j\dots n_\infty\rangle \\ &+\dots \end{aligned} \tag{۱۴.۲}$$

که در معادله‌ی بالا $i\hbar\,\partial_t f(n_1,\dots,n_\infty)$ را از (۱۲.۲) جایگذاری کرده‌ایم. حال از تغییر متغیر زیر استفاده می‌کنیم و معادله‌ی بالا را بازنویسی می‌کنیم:

$$\tilde{n}_i = n_i - 1, \tilde{n}_j = n_j + 1$$

$$\begin{aligned} i\hbar\,\partial_t|\Psi\rangle &= \sum_{n_1,\dots\tilde{n}_i\dots\tilde{n}_j\dots,n_\infty} \sum_{ij} \langle i|T|j\rangle \sqrt{\tilde{n}_j(\tilde{n}_i+1)} \\ &\quad \times f(n_1\dots\tilde{n}_i\dots\tilde{n}_j\dots n_\infty,t)|n_1\dots\tilde{n}_i+1\dots\tilde{n}_j-1\dots n_\infty\rangle \\ &\quad + \dots \end{aligned} \tag{۱۵.۲}$$

دوباره از $\tilde{n}$ به n تغییر متغیر می‌دهیم و به معادله‌ی زیر می‌رسیم:

$$\begin{aligned} i\hbar\,\partial_t|\Psi\rangle &= \sum_{n_1,\dots,n_i\dots,n_j\dots,n_\infty} \sum_{ij} \langle i|T|j\rangle \sqrt{n_j(n_i+1)} \\ &\quad \times f(n_1\dots n_i\dots n_j\dots n_\infty,t)|n_1\dots n_i+1\dots n_j-1\dots n_\infty\rangle \\ &\quad + \dots \end{aligned} \tag{۱۶.۲}$$

دو عملگر a و $a^\dagger$ را به صورت زیر تعریف می‌کنیم، همانند آن چه در کوانتوم برای نوسانگر هماهنگ ساده به کار می‌بردیم:

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^\dagger\,|n_i\rangle &= \sqrt{n_i+1}\,|n_i+1\rangle \\ \hat{a}_j\,|n_j\rangle &= \sqrt{n_j}\,|n_j-1\rangle \end{aligned} \tag{۱۷.۲}$$

و چون می‌دانیم

$$|n_1,\dots,n_i+1,\dots,n_j-1,\dots n_\infty\rangle = |n_1\rangle\otimes\dots|n_i+1\rangle\otimes\dots|n_j-1\rangle\otimes\dots|n_\infty\rangle$$

معادله‌ی (۱۶.۲) به صورت زیر درمی‌آید:

$$
\begin{aligned}
& i\hbar\, \partial_t \left|\Psi\right\rangle \\
&= \sum_{n_1 \dots n_\infty} \sum_{ij} \langle i|T|j\rangle\, f(n_1, \dots, n_\infty, t)\, \hat{a}_i{}^\dagger\, \hat{a}_j \left|n_1\right\rangle \otimes \dots \left|n_i\right\rangle \otimes \dots \left|n_j\right\rangle \otimes \dots \left|n_\infty\right\rangle \\
& + \dots \\
&= \sum_{ij} \langle i|T|j\rangle\, \hat{a}_i{}^\dagger\, \hat{a}_j \sum_{n_1 \dots n_\infty} f(n_1, \dots, n_\infty, t) \left|n_1, \dots, n_\infty\right\rangle + \dots \\
&= \sum_{ij} \langle i|T|j\rangle\, \hat{a}_i{}^\dagger\, \hat{a}_j \left|\Psi\right\rangle + \dots
\end{aligned}
\tag{۱۸.۲}
$$

لازم به ذکر است که همه‌ی معادلات بالا با فرض $i \neq j$ بدست آمدند. با انجام محاسباتی مشابه برای بخش پتانسیل خواهیم داشت:

$$
i\hbar\, \partial_t \left|\Psi\right\rangle = \left(\sum_{ij} \langle i|T|j\rangle\, \hat{a}_i{}^\dagger\, \hat{a}_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle ij|V|kl\rangle\, \hat{a}_i{}^\dagger\, \hat{a}_j{}^\dagger\, \hat{a}_l\, \hat{a}_k \right) \left|\Psi\right\rangle \tag{۱۹.۲}
$$

بنابراین براساس معادله‌ی شرودینگر نتیجه می‌گیریم که هامیلتونی در نمایش کوانتش دوم به صورت زیر در می‌آید:

$$
H = \sum_{ij} \langle i|T|j\rangle\, \hat{a}_i{}^\dagger\, \hat{a}_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle ij|V|kl\rangle\, \hat{a}_i{}^\dagger\, \hat{a}_j{}^\dagger\, \hat{a}_l\, \hat{a}_k \tag{۲۰.۲}
$$

۲.۲ فرمیون‌ها

در این قسمت به بررسی یک سیستم فرمیونی می‌پردازیم. برای فرمیون‌ها λ در رابطه‌ی (۴.۲) برابر با -1 است. به این معنی که یک سیستم فرمیونی پادمتقارن است.

$$
C(\dots E_i \dots E_j \dots, t) = -\, C(\dots E_j \dots E_i \dots, t)
$$

$$
C(E_1 \dots E_N, t) \equiv \bar{C}(n_1 \dots n_\infty, t)
$$

بنابراین شرط پادتقارن بیان می‌کند که باید عدد کوانتومی E_i با عدد کوانتومی E_j متفاوت باشد و در غیر این صورت ضریب C صفر می‌شود. این امر براساس رابطه‌ی بالا بیانگر این است که عدد اشغال n_i یا صفر است یا یک که همان اصل طرد پاؤلی می‌باشد.

برای فرمیون‌ها روابط جبری زیر برقرار است:

$$\begin{aligned} \{c_r^\dagger, c_s\} &= \delta_{r,s} \\ \{c_r^\dagger, c_s^\dagger\} &= \{c_r, c_s\} = 0 \end{aligned} \tag{۲۱.۲}$$

که $c^\dagger$ و c بیانگر همان عملگرهایی است که در (۱۷.۲) تعریف کردیم البته در اینجا برای فرمیون‌ها. بنابراین برای فرمیون‌ها روابط پادجابجایی برقرار است.

$$\{A, B\} = AB + BA$$

از روابط جبری فرمیون‌ها می‌توان به نتایج زیر دست یافت:

- $c_r\ c_r^\dagger = 1 - c_r^\dagger\ c_r$
- $c_r^\dagger\ c_r^\dagger = c_r\ c_r = 0$

هم‌چنین تعداد الکترون‌ها در حالت ϕ_r را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$n_r = c_r^\dagger\ c_r \tag{۲۲.۲}$$

$$n_r^2 = (c_r^\dagger c_r)(c_r^\dagger c_r) = c_r^\dagger\ (c_r\ c_r^\dagger)\ c_r = c_r^\dagger\ c_r = n_r$$

بنابراین از رابطه‌ی بالا نیز به اصل طرد پاؤلی می‌رسیم.

با استفاده از روابط پادجابجاگریِ بین فرمیون‌ها به روابط زیر دست می‌یابیم که نشان می‌دهد فضای

هیلبرت دارای دو پایه می‌باشد:

$$c^\dagger|0\rangle = |1\rangle$$
$$c^\dagger|1\rangle = 0$$
$$c\,|0\rangle = c\,c^\dagger|0\rangle = (1 - c^\dagger\,c)|0\rangle = |0\rangle$$

(۲.۲۳)

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n_1,\dots,n_\infty} f(n_1,\dots,n_\infty,t)|n_1\dots n_\infty\rangle$$
$$|n_i\rangle = (c_i^\dagger)^{n_i}\,|0\rangle \qquad (2.24)$$

$$\begin{aligned} c_s\,|n_1\dots n_s\dots n_\infty\rangle &= c_s\,(c_1^\dagger)^{n_1}\dots(c_s^\dagger)^{n_s}\dots(c_\infty^\dagger)^{n_\infty}|0\rangle \\ &= \begin{cases} (-1)^{n_1+\dots+n_{s-1}}\;|n_1\dots n_{s-1}\,0\,n_{s+1}\dots n_\infty\rangle & n_s = 1 \\ 0 & n_s = 0 \end{cases} \end{aligned}$$

هامیلتونی در نمایش کوانتش دوم برای فرمیون‌ها شبیه بوزون‌هاست که در (۲.۲۰) بیان شد.

۲.۳ عملگر میدان

با توجه به

$$c_i^\dagger|0\rangle = |\underbrace{0\dots0}_{i-1}\,1\,0\dots0\rangle$$

اوربیتال تک ذره به صورت $\phi_i(x) = \langle x|c_i^\dagger|0\rangle$ تعریف می‌شود. اکنون عملگر دیگری به نام عملگر میدان [1] تعریف می‌کنیم و در ادامه از آن استفاده می‌کنیم:

$$\hat{\psi}^\dagger(x) = \sum_\mu \phi_\mu^*(x)\,c_\mu^\dagger \qquad (2.25)$$
$$\hat{\psi}^\dagger(x)|0\rangle = |x\rangle$$

[1] field operator

$$\hat{\psi}^{\dagger}(x)|\circ\rangle = \sum_{\mu} \langle\mu|x\rangle\, c_{\mu}^{\dagger}\, |\circ\rangle = \sum_{\mu} |\mu\rangle\langle\mu|x\rangle = |x\rangle$$

اثر عملگر میدان ایجاد حالت تک ذره‌ای است که در x جایگزیده است. در این مرحله قصد داریم که هامیلتونی در نمایش کوانتش دوم را براساس عملگر میدان بنویسیم. در واقع کاری که حالا انجام می‌دهیم این است که نشان می‌دهیم اگر هامیلتونی را به صورت زیر برحسب عملگر میدان بنویسیم، به همان هامیلتونی (۲۰.۲) می‌رسیم.

$$H = \int d\mathbf{x}\, \hat{\psi}^{\dagger}(x)\, T(x)\, \hat{\psi}(x) + \frac{۱}{۲} \int\int d\mathbf{x}\, d\mathbf{x}'\, \hat{\psi}^{\dagger}(x)\, \hat{\psi}^{\dagger}(x')\, V(x-x')\, \hat{\psi}(x')\, \hat{\psi}(x) \tag{۲۶.۲}$$

$$\begin{aligned}
H &= \int d\mathbf{x} \left(\sum_{i} \phi_i^*(x)\, c_i^{\dagger}\right) T(x) \left(\sum_{j} \phi_j(x)\, c_j\right) \\
&+ \frac{۱}{۲} \int\int d\mathbf{x}\, d\mathbf{x}' \left(\sum_{i} \phi_i^*(x)\, c_i^{\dagger}\right)\left(\sum_{j} \phi_j^*(x')\, c_j^{\dagger}\right) V(x-x') \\
&\qquad \left(\sum_{l} \phi_l(x')\, c_l\right)\left(\sum_{k} \phi_k(x)\, c_k\right) \\
&= \sum_{ij} \left(\int d\mathbf{x} \phi_i^*(x)\, T(x)\, \phi_j(x)\right) c_i^{\dagger}\, c_j \\
&+ \frac{۱}{۲} \sum_{ijkl} \left(\int\int d\mathbf{x}\, d\mathbf{x}' \phi_i^*(x)\, \phi_j^*(x')\, V(x-x')\, \phi_k(x)\, \phi_l(x')\right) c_i^{\dagger}\, c_j^{\dagger}\, c_l\, c_k \\
&= \sum_{ij} \langle i|T|j\rangle\, c_i^{\dagger}\, c_j + \frac{۱}{۲} \sum_{ijkl} \langle ij|V|kl\rangle\, c_i^{\dagger}\, c_j^{\dagger}\, c_l\, c_k
\end{aligned}$$

اگر سیستم تقارن انتقالی داشته باشد، آن گاه عملگرهای میدان اوربیتال‌های بلاخ هستند:

$$\hat{\psi}^{\dagger}(x) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{۱}{\sqrt{v}}\, e^{i\mathbf{k}.\mathbf{x}}\, c_{\mathbf{k}}^{\dagger}$$

بنابراین برای بخش غیر برهم‌کنشی هامیلتونی داریم:

$$\begin{aligned}H_0 &= \int d\mathbf{x}\, \hat{\psi}^\dagger(x)\, (\frac{-\hbar^2}{2m}\, \nabla_x^2)\, \hat{\psi}(x) \\ &= \int d\mathbf{x} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{1}{\sqrt{v}}\, e^{i\mathbf{k}.\mathbf{x}}\, c_{\mathbf{k}}^\dagger\, (\frac{-\hbar^2}{2m}\, \nabla_x^2)\, \frac{1}{\sqrt{v}}\, e^{-i\mathbf{k}'.\mathbf{x}}\, c_{\mathbf{k}}' \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\, c_{\mathbf{k}}^\dagger\, c_{\mathbf{k}} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{k}}^\dagger\, c_{\mathbf{k}}\end{aligned}$$

$\varepsilon_{\mathbf{k}}$ در معادله‌ی بالا انرژی ساختار نواریِ ذره‌ی آزاد می‌باشد. اگر الکترون‌ها در سیستم با تقارن انتقالی، برهم‌کنش کولنی داشته باشند، خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}H_V &= \frac{1}{2}\int\int d\mathbf{x}\, d\mathbf{x}'\, \hat{\psi}^\dagger(x)\, \hat{\psi}^\dagger(x')\, V(x-x')\, \hat{\psi}(x')\, \hat{\psi}(x) \\ &= \frac{1}{2v^2}\int\int d\mathbf{x}\, d\mathbf{x}' \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} e^{i\mathbf{k}_1.\mathbf{x}}\, e^{i\mathbf{k}_2.\mathbf{x}'}\, \frac{e^2\, e^{-\mu|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}\, e^{-i\mathbf{k}_3.\mathbf{x}'}\, e^{-i\mathbf{k}_4.\mathbf{x}} \\ &\qquad \times c_{\mathbf{k}_1}^\dagger\, c_{\mathbf{k}_2}^\dagger\, c_{\mathbf{k}_3}\, c_{\mathbf{k}_4}\end{aligned}$$

برای جلوگیری از واگرایی انتگرال از $e^{-\mu|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$ استفاده می‌کنیم و در نهایت $\mu \to 0$. برای حل انتگرال بالا به دستگاه مرکز جرم و موقعیت نسبی ذرات می‌رویم.

$$\mathbf{x}-\mathbf{x}' = \mathbf{r}, \quad \frac{\mathbf{x}+\mathbf{x}'}{2} = \mathbf{R}$$

ژاکوبین این تغییر متغیر یک است، بنابراین انتگرال بالا به صورت زیر در می‌آید.

$$\begin{aligned}H_V &= \frac{e^2}{2v^2} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} \int\int d\mathbf{r}\, d\mathbf{R}\, e^{i(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_4).\mathbf{R}}\, e^{i(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_4).\mathbf{r}/2}\, \frac{e^{-\mu r}}{r} \\ &\qquad \times c_{\mathbf{k}_1}^\dagger\, c_{\mathbf{k}_2}^\dagger\, c_{\mathbf{k}_3}\, c_{\mathbf{k}_4}\end{aligned}$$

با دانستن انتگرال زیر و خاصیت تابع دلتای دیراک می‌توانیم یکی از متغیرهای $\mathbf{k}$ را حذف کنیم:

$$\frac{1}{v}\int d\mathbf{R}\, e^{i(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_4).\mathbf{R}} = \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}$$

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{p} - \mathbf{q}, \quad \mathbf{k}_2 = \mathbf{k} + \mathbf{q}$$

$$\mathbf{k}_3 = k, \quad \mathbf{k}_4 = \mathbf{p}$$

$$\begin{aligned} H_V &= \frac{1}{2v}\, e^2 \sum_{\mathbf{kpq}} V(q)\, c^\dagger_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}\, c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\, c_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{p}} \\ V(q) &= \int d\mathbf{r}\, \frac{e^{-i\mathbf{q}.\mathbf{r}}\, e^{-\mu r}}{r} = \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2} \\ \mu \to 0 \quad V(q) &= \frac{4\pi}{q^2} \end{aligned} \tag{۲۷.۲}$$

$$H_e = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}\, c^\dagger_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2v}\, e^2 \sum_{\mathbf{kpq}} V(q)\, c^\dagger_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}\, c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\, c_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{p}} \tag{۲۸.۲}$$

اکنون توجه خود را به بخش H_V معطوف می‌کنیم.

$$H_V = \frac{1}{2v}\, e^2 \sum_{\mathbf{kpq}}{}' \, V(q)\, c^\dagger_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}\, c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\, c_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2v}\, e^2 \sum_{\mathbf{kp}} \frac{4\pi}{\mu^2}\, c^\dagger_{\mathbf{p}}\, c^\dagger_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{p}}$$

در هامیلتونی بالا جمله‌ی $q = 0$ را جدا کرده‌ایم و برای تاکید بر این‌که جمله‌ی اول شامل $q = 0$ نمی‌باشد، بالای جمع علامت پریم قرار داده‌ایم.

$$\frac{1}{2v}\, e^2\, \frac{4\pi}{\mu^2} \sum_{\mathbf{kp}} c^\dagger_{\mathbf{p}}\, c^\dagger_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{p}} = \frac{1}{2v}\, e^2\, \frac{4\pi}{\mu^2} \sum_{\mathbf{kp}} c^\dagger_{\mathbf{p}}\, n_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{p}}$$

$$\begin{aligned} &[n_k, c_p] = [c^\dagger_k\, c_k, c_p] = c^\dagger_k \{c_k, c_p\} - \{c^\dagger_k, c_p\} c_k = -\delta_{k,p}\, c_k \\ &n_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{p}} = c_{\mathbf{p}}\, n_{\mathbf{k}} - \delta_{\mathbf{k},\mathbf{p}}\, c_{\mathbf{k}} \end{aligned}$$

با استفاده از رابطه‌ی جبری بالا، جمله‌ی $q=0$ به صورت زیر می‌شود:

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2v}\, e^2\, \frac{4\pi}{\mu^2} \sum_{\mathbf{kp}} c^\dagger_{\mathbf{p}}\, n_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{p}} \\
&= \frac{1}{2v}\, e^2\, \frac{4\pi}{\mu^2} \sum_{\mathbf{kp}} \left(c^\dagger_{\mathbf{p}}\, c_{\mathbf{p}}\, n_{\mathbf{k}} - \delta_{\mathbf{k},\mathbf{p}}\, c^\dagger_{\mathbf{p}}\, c_{\mathbf{k}} \right) \\
&= \frac{1}{2v}\, e^2\, \frac{4\pi}{\mu^2} \left(\sum_{\mathbf{kp}} n_{\mathbf{p}}\, n_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \right) \\
&= \frac{1}{2v}\, e^2\, \frac{4\pi}{\mu^2}\, (\hat{N}^2 - \hat{N}) \\
&= \frac{1}{2}\, e^2\, \frac{N^2}{v}\, \frac{4\pi}{\mu^2} - \frac{1}{2}\, e^2\, \frac{N}{v}\, \frac{4\pi}{\mu^2}
\end{aligned}$$

به دلیل این‌که ما با سیستم‌ها با تعداد ذرات ثابت کار می‌کنیم، پس می‌توانیم در رابطه‌ی بالا عملگر تعداد ذرات را با ویژه‌مقدارش جایگذاری کنیم.

چون خواص حجمی ماده‌ی خنثی مورد بررسی قرار می‌گیرد، در ابتدا $L \to \infty$ و سپس $\mu \to 0$، که بیانگر این است اگر $\xi = \frac{1}{L}$ یک طول مشخصه باشد، باید $L \gg \xi$ باشد. در این حد جمله‌ی دوم در عبارت بالا صفر می‌شود.

$$H_e = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}\, c^\dagger_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{k}} + \frac{e^2}{2v} \sum_{\mathbf{kpq}}{}^{'}\, \frac{4\pi}{q^2}\, c^\dagger_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}\, c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\, c_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2}\, \frac{N^2}{v}\, \frac{4\pi}{\mu^2} \tag{۲۹.۲}$$

۴.۲ مدل ژله‌ای

همه‌ی محاسبات بالا برای بخش جنبشی و برهم‌کنشی الکترون‌ها می‌باشد. اما برای این که سیستم از نظر الکتریکی خنثی باشد، یک توزیع بارِ یکنواخت زمینه نیز در نظر می‌گیریم. بنابراین جملات دیگری به هامیلتونی سیستم اضافه می‌شود.

$$H = H_e + H_b + H_{e-b}$$

بخش مربوط به الکترون‌ها را با H_e نمایش می‌دهیم که در (۲۹.۲) محاسبه کردیم.

$$H_b = \frac{1}{2}\, e^2 \int\int d\mathbf{x}\, d\mathbf{x}' \,\frac{n_b(\mathbf{x})\, n_b(\mathbf{x}')\, e^{-\mu\, |\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \tag{۳۰.۲}$$

H_b هامیلتونی توصیف کننده‌ی زمینه‌ی مثبت می‌باشد که چگالی ذرات آن را با $n_b(x)$ نمایش می‌دهند. با فرض یکنواخت بودن چگالی بار زمینه، از وابستگی مکانی $n_b(\mathbf{x})$ صرف‌نظر می‌کنیم. هم‌چنین برای جلوگیری از واگرایی انتگرال از عامل نمایی استفاده شده که در نهایت μ به صفر میل خواهد کرد.

$$H_b = \frac{1}{2}\, e^2\, (\frac{N}{v})^2 \int\int d\mathbf{x}\, d\mathbf{x}' \,\frac{e^{-\mu\, |\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$$

اگر از مختصه‌ی نسبی و مرکز جرم استفاده کنیم، خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} H_b &= \frac{1}{2}\, e^2\, (\frac{N}{v})^2 \int\int d\mathbf{R}\, d\mathbf{r}\, \frac{e^{-\mu\, r}}{r} \\ &= \frac{1}{2}\, e^2\, v\, (\frac{N}{v})^2 \int dr\, 4\pi\, r\, e^{-\mu\, r} \\ &= -\frac{1}{2}\, e^2\, \frac{N^2}{v}\, \partial_\mu \int_0^\infty dr\, e^{-\mu r} \\ &= \frac{1}{2}\, e^2\, \frac{N^2}{v}\, \frac{4\pi}{\mu^2} \end{aligned} \tag{۳۱.۲}$$

حال برهم‌کنش الکترون با بار زمینه را در نظر می‌گیریم و با توجه به یکنواخت بودن چگالی بار زمینه داریم:

$$\begin{aligned} H_{e-b} &= -e^2 \sum_{i=1}^{N} \int d\mathbf{x}\, \frac{n_b(\mathbf{x})\, e^{-\mu\, |\mathbf{x}-\mathbf{x}_i|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_i|} \\ &= -e^2 \frac{N}{v} \sum_{i=1}^{N} \int d\mathbf{x}\, \frac{e^{-\mu\, |\mathbf{x}-\mathbf{x}_i|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_i|} \end{aligned} \tag{۳۲.۲}$$

$$\mathbf{x}-\mathbf{x}_i = \mathbf{r}$$

$$\begin{aligned} H_{e-b} &= -e^2\, \frac{N^2}{v} \int d\mathbf{r}\, \frac{e^{-\mu r}}{r} \\ &= -e^2\, \frac{N^2}{v}\, \frac{4\pi}{\mu^2} \end{aligned}$$

با توجه به محاسبات بالا هامیلتونی کل سیستم به صورت زیر درمی‌آید:

$$
\begin{aligned}
H &= H_e + H_b + H_{e-b} \\
&= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}\, c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{e^{۲}}{۲v} \sideset{}{'}\sum_{\substack{\mathbf{kpq} \\ \sigma\sigma'}} \frac{۴\pi}{q^{۲}}\, c^{\dagger}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}\sigma}\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma'}\, c_{\mathbf{k}\sigma'}\, c_{\mathbf{p}\sigma}
\end{aligned}
\qquad (۳۳.۲)
$$

هامیلتونی کل سیستم الکترونی در بار زمینه‌ی مثبت با در نظر گرفتن اسپین به صورت بالا است که به آن هامیلتونی مدل ژله‌ای می‌گویند. باز هم تاکید می‌کنیم که علامت پریم روی جمع بیانگر این است که جمله‌ی $q = ۰$ در جمع وجود ندارد.

فرض می‌کنیم برهم‌کنش خاموش است، بنابراین هامیلتونی به صورت زیر درمی‌آید که آن را با $H_{۰}$ نمایش می‌دهیم:

$$
H_{۰} = \sum_{k\sigma} \frac{\hbar^{۲} k^{۲}}{۲m}\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}\, c_{\mathbf{k}\sigma}
$$

حالت پایه‌ی سیستم بدون برهم‌کنش در نمایش کوانتش دوم با fermi sea نمایش داده می‌شود:

$$
|FS\rangle = |\psi_o\rangle = \prod_{|\mathbf{k}| \leq k_F} c^{\dagger}_{\mathbf{k}} |۰\rangle \qquad (۳۴.۲)
$$

برای سیستم بدون برهم‌کنش هر k در نوار انرژی با الکترون‌ها اشغال می‌شود که به بزرگترین بردار موج اشغال شده، بردار موج فرمی گفته می‌شود و با k_F نمایش داده می‌شود. در این صورت تابع موج، کره‌ای به شعاع k_F است که همه نقاط داخل آن با الکترون‌ها اشغال شده است.

اکنون قصد داریم که مقدار انتظاری عملگر تعداد ذرات را با توجه به حالت پایه‌ی بالا محاسبه کنیم.

$$
\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}\, c_{\mathbf{k}\sigma}
$$

$$\begin{aligned}\langle \hat{N} \rangle &= \langle FS|\hat{N}|FS\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \langle FS|\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}|FS\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \theta(k_F - |\mathbf{k}|) \\ &= ۲\sum_{\mathbf{k}} \theta(k_F - |\mathbf{k}|)\end{aligned}$$

چون هر k با دو الکترون با اسپین مخالف اشغال شده، ضریب ۲ در محاسبات بالا وارد شده است.

حال با استفاده از رابطه‌ی زیر می‌توانیم جمع را به انتگرال تبدیل کنیم:

$$\sum_{\mathbf{k}} = \frac{\upsilon}{(۲\pi)^۳} \int d\mathbf{k}$$

$$\langle \hat{N} \rangle = N = ۲\frac{\upsilon}{(۲\pi)^۳} \int_۰^{k_F} d\mathbf{k}$$

$$\frac{N}{\upsilon} = \frac{۱}{۳\pi^۲} k_F^۳ \tag{۳۵.۲}$$

حجمی که به هر الکترون اختصاص داده می‌شود را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\frac{\upsilon}{N} = \frac{۴\pi}{۳}(r_s a_۰)^۳ \tag{۳۶.۲}$$

اگر $r_۰$ فاصله‌ی بین ذره‌ای و $a_۰ = \frac{\hbar^۲}{me^۲}$ شعاع بور باشد، آن‌گاه $r_s = \frac{r_۰}{a_۰}$ یک کمیت بدون بعد خواهد بود.

با توجه به این‌که $r_۰$ بعد طول دارد، کمیت‌های زیر را تعریف می‌کنیم:

$$\bar{\upsilon} = \frac{\upsilon}{r_۰^۳} \qquad \bar{\mathbf{k}} = r_۰\mathbf{k} \qquad \bar{\mathbf{p}} = r_۰\mathbf{p} \qquad \bar{\mathbf{q}} = r_۰\mathbf{q}$$

با استفاده از کمیت‌های بالا هامیلتونی (۳۳.۲) به شکل بدون بعد زیر درمی‌آید:

$$\begin{aligned}H &= H_۰ + H_۱ \\ &= \frac{e^۲}{a_۰ r_s^۲}\left(\sum_{\bar{\mathbf{k}}\sigma} \frac{۱}{۲}\,\bar{\mathbf{k}}^۲\, c^\dagger_{\bar{\mathbf{k}}\sigma}\, c_{\bar{\mathbf{k}}\sigma} + \frac{r_s}{۲\bar{\upsilon}} \sum_{\substack{\bar{\mathbf{k}}\bar{\mathbf{p}}\bar{\mathbf{q}}\\ \sigma\sigma'}}{}^{'} \frac{۴\pi}{\bar{q}^۲}\, c^\dagger_{\bar{\mathbf{p}}-\bar{\mathbf{q}}\sigma}\, c^\dagger_{\bar{\mathbf{k}}+\bar{\mathbf{q}}\sigma'}\, c_{\bar{\mathbf{k}}\sigma'}\, c_{\bar{\mathbf{p}}\sigma}\right)\end{aligned} \tag{۳۷.۲}$$

در حد $r_s \to ۰$ (معادل با $r_۰ \to ۰$ به معنی حد چگالی بالا) $H_۱ \gg H_۰$ است و بنابراین در این حد انرژی پتانسیل به صورت اختلال عمل می‌کند.

با استفاده از دو رابطه‌ی (۳۵.۲) و (۳۶.۲) بدست می‌آوریم که $k_F^{-۱}$ با فاصله‌ی بین ذره‌ای قابل مقایسه می‌باشد.

$$k_F = \left(\frac{۹\pi}{۴}\right)^{\frac{۱}{۳}} r_۰^{-۱} \approx ۱/۹۲\ r_۰^{-۱} \tag{۳۸.۲}$$

برای محاسبه‌ی مقدار انتظاری $H_۰$ به صورت زیر عمل می‌کنیم:

$$\begin{aligned} E^{(۰)} &= \langle FS|H_۰|FS\rangle = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\hbar^۲ k^۲}{۲m} \langle FS|\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}|FS\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\hbar^۲ k^۲}{۲m}\, \theta(k_F - |\mathbf{k}|) \\ &= \sum_{\sigma} \frac{\hbar^۲}{۲m} \frac{\upsilon}{(۲\pi)^۳} \int_۰^{k_F} d\mathbf{k}\, k^۲ \\ &= ۲\, \frac{\hbar^۲}{۲m} \frac{\upsilon}{(۲\pi)^۳} \frac{۱}{۵} k_F^۵ \\ &= \frac{۳}{۵} \frac{\hbar^۲ k_F^۲}{۲m} N \\ &= \frac{۳}{۵} \left(\frac{۹\pi}{۴}\right)^{\frac{۲}{۳}} \frac{e^۲}{۲a_۰} \frac{N}{r_s^۲} \end{aligned} \tag{۳۹.۲}$$

با تعریف $۱\ Ry = e^۲/۲a_۰ \approx ۱۳/۶\ eV$ که برابر با انرژی پیوند یک اتم هیدروژن است، داریم:

$$\frac{E^{(۰)}}{N} = \frac{۲/۲۱۱}{r_s^۲} Ry \tag{۴۰.۲}$$

حال انرژی برهم‌کنش را در مرتبه‌ی اول اختلال محاسبه می‌کنیم:

$$E^{(۱)} = \langle FS|H_۱|FS\rangle = \frac{e^۲}{۲\upsilon} \sum_{\substack{\mathbf{kpq}\\ \sigma\sigma'}}{}' \frac{۴\pi}{q^۲} \langle FS|c^\dagger_{\mathbf{p-q}\sigma}\, c^\dagger_{\mathbf{k+q}\sigma'}\, c_{\mathbf{k}\sigma'}\, c_{\mathbf{p}\sigma}|FS\rangle \tag{۴۱.۲}$$

برای این‌که عنصر ماتریسی بالا جواب غیر صفر داشته باشد، باید حالت‌های $\mathbf{k}\sigma'$ و $\mathbf{p}\sigma$ در کره‌ی فرمی قرار داشته باشند زیرا در غیر این صورت حالت‌های اشغال نشده هستند و در اثر اعمال عملگرهای

نابودی جواب صفر می‌دهند. بنابراین از اعمال عملگرهای نابودی دو حفره در کره‌ی فرمی ایجاد می‌شود و باید از اعمال عملگرهای خلق آن دو حفره دوباره اشغال شوند و حالت پایه را بازآرایی کنند تا عنصر ماتریسی بالا جواب داشته باشد. بنابراین تنها دو احتمال وجود دارد:

حالت اول:

$$\mathbf{k}+\mathbf{q}\,\sigma' = \mathbf{k}\sigma' \qquad \mathbf{p}-\mathbf{q}\,\sigma = \mathbf{p}\sigma$$

حالت دوم:

$$\mathbf{k}+\mathbf{q}\,\sigma' = \mathbf{p}\sigma \qquad \mathbf{p}-\mathbf{q}\,\sigma = \mathbf{k}\sigma'$$

حالت اول متناظر با $\mathbf{q} = ۰$ است که اصلا در جمع وجود ندارد و قابل قبول نیست. عنصر ماتریسی برای حالت دوم به شکل زیر درمی‌آید:

$$\begin{aligned}
&\langle FS|c^{\dagger}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}\sigma}\; c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma'}\; c_{\mathbf{k}\sigma'}\; c_{\mathbf{p}\sigma}|FS\rangle \\
&\quad = \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{p}}\;\delta_{\sigma\sigma'}\;\langle FS|c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}\; c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma'}\; c_{\mathbf{k}\sigma'}\; c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}|FS\rangle \\
&\quad = -\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{p}}\;\delta_{\sigma\sigma'}\;\langle FS|n_{\mathbf{k}\sigma}\; n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma'}|FS\rangle \\
&\quad = -\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{p}}\;\delta_{\sigma\sigma'}\;\theta(k_F-|\mathbf{k}|)\;\theta(k_F-|\mathbf{k}+\mathbf{q}|)
\end{aligned}$$

بنابراین $E^{(۱)}$ به صورت زیر درمی‌آید:

$$E^{(۱)} = -\frac{e^{۲}}{۲v}\sum_{\substack{\mathbf{kq}\\ \sigma}}{}' \;\frac{۴\pi}{q^{۲}}\;\theta(k_F-|\mathbf{k}|)\;\theta(k_F-|\mathbf{k}+\mathbf{q}|) \tag{۴۲.۲}$$

بعد از انجام عملیات جمع به رابطه‌ی زیر برای $E^{(۱)}$ می‌رسیم.

$$\frac{E^{(۱)}}{N} = -\frac{۰/۹۱۶}{r_s}\,Ry \tag{۴۳.۲}$$

تمرین:

رابطه‌ی (۴۳.۲) را بدست آورید.

تاکنون در حد چگالی بالا، انرژی بر ذره تا مرتبه‌ی اول اختلال به صورت زیر درآمد:

$$\frac{E}{N} = \left(\frac{۲/۲۱۱}{r_s^۲} - \frac{۰/۹۱۶}{r_s}\right) Ry \qquad (۴۴.۲)$$

جمله‌ی اول در رابطه‌ی بالا انرژی جنبشی الکترون‌های گاز فرمی می‌باشد. جمله‌ی دوم بیانگر انرژی تبادلی[۲] الکترون‌ها است و منفی می‌باشد. این انرژی تبادلی ناشی از انرژی برهم‌کنش الکترون‌ها با $\mathbf{q} \neq ۰$ می‌باشد. بخش $\mathbf{q} = ۰$ انرژی مستقیم[۳]نامیده می‌شود که با انرژی بار زمینه و برهم‌کنش الکترون با بار زمینه حذف شد.

علامت منفی در رابطه‌ی انرژی (۴۴.۲) تضمین می‌کند که یک فاصله‌ی بین ذره‌ای بهینه (r_s^*) وجود دارد که انرژی را کمینه می‌کند و به علاوه انرژی $E^* < ۰$ را می‌دهد. کمینه‌ی انرژی با محاسبه‌ی $\frac{\partial}{\partial r_s}(E^{(۰)} + E^{(۱)}) = ۰$ بدست می‌آید و نتایج بدست آمده با نتایج تجربی برای سدیم در زیر مقایسه شده است:

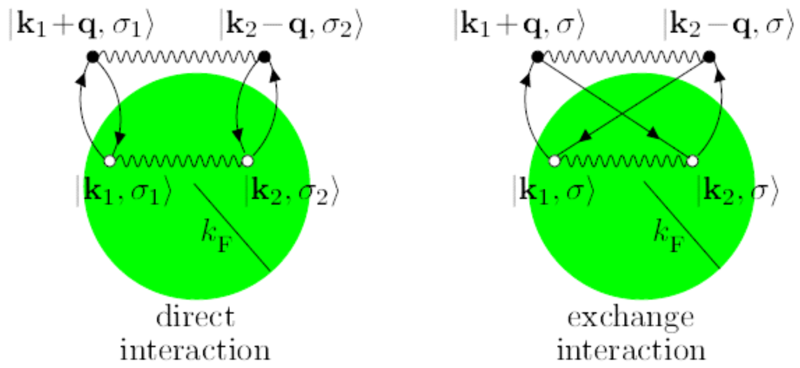
$$r_s^* = ۴/۸۳, \qquad \frac{E^*}{N} = -۰/۰۹۵\ Ry = -۱/۲۹\ eV$$
$$r_s = ۳/۹۶, \qquad \frac{E}{N} = -۰/۰۸۳\ Ry = -۱/۱۳\ eV$$

اکنون قصد داریم برهم‌کنش الکترون‌ها را در مرتبه‌ی دوم اختلال محاسبه کنیم. بنابراین طبق تئوری اختلال مرتبه دوم داریم:

$$\begin{aligned} E^{(۲)} &= \sum_{\nu} \frac{\langle FS|H_۱|\nu\rangle\langle\nu|H_۱|FS\rangle}{E^{(۰)} - E_\nu} \\ &= \sum_{\nu} \frac{|\langle\nu|H_۱|FS\rangle|^۲}{E^{(۰)} - E_\nu} \end{aligned} \qquad (۴۵.۲)$$

$H_۱$ فرایندی است که دو الکترون در کره‌ی فرمی نابود می‌کند و دو الکترون خلق می‌کند. اگر بخواهیم عنصر ماتریسی جواب غیر صفر داشته باشد، باید الکترون‌های نابود شده از کره‌ی فرمی باشد، یعنی دو حفره در کره‌ی فرمی ایجاد شود. هم‌چنین حالت‌های میانه‌ی $|\nu\rangle$ باید با $|FS\rangle$ متفاوت باشند که

[۲] Exchang energy
[۳] Direct energy



شکل ۲.۱: دو حالت ممکن در اختلال مرتبه ۲

با توجه به بقای مومنتومِ برهم‌کنش کولنی، حالت‌هایی هستند که دو الکترون در خارج از کره‌ی فرمی دارند. برای ایجاد $|FS\rangle$ از این حالت‌های میانه باید الکترون‌های برانگیخته به کره‌ی فرمی بازگردند و حفره‌ها را پر کنند. حالت میانه‌ی $|\nu\rangle$ را به صورت زیر داریم:

$$\begin{aligned}|\nu\rangle &= \theta(|\mathbf{k}_۱+\mathbf{q}|-k_f)\theta(|\mathbf{k}_۲-\mathbf{q}|-k_f)\theta(k_f-|\mathbf{k}_۱|)\theta(k_f-|\mathbf{k}_۲|)\\ &\qquad c^\dagger_{\mathbf{k}_۱+\mathbf{q}\sigma_۱}\ c^\dagger_{\mathbf{k}_۲-\mathbf{q}\sigma_۲}\ c_{\mathbf{k}_۲\sigma_۲}\ c_{\mathbf{k}_۱\sigma_۱}|FS\rangle\end{aligned}$$

حال $H_۱$ را روی این حالت اعمال می‌کنیم:

$$\frac{e^۲}{۲v}\sum_{\substack{\mathbf{kpq}'\\ \sigma\sigma'}}{}' V(\mathbf{q}')\ c^\dagger_{\mathbf{p}-\mathbf{q}'\sigma}\ c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'\sigma'}\ c_{\mathbf{k}\sigma'}\ c_{\mathbf{p}\sigma}\ c^\dagger_{\mathbf{k}_۱+\mathbf{q}\sigma_۱}\ c^\dagger_{\mathbf{k}_۲-\mathbf{q}\sigma_۲}\ c_{\mathbf{k}_۲\sigma_۲}\ c_{\mathbf{k}_۱\sigma_۱}|FS\rangle$$

اکنون برای برآورده شدن شرایط بالا دو حالت ۱ و ۲ (۲.۱) وجود دارد که در ادامه به بررسی آن‌ها می‌پردازیم: حالت ۱:

در این حالت تقاضا می‌کنیم که

$$\begin{cases}\mathbf{p}\sigma=\mathbf{k}_۱+\mathbf{q}\sigma_۱\\ \mathbf{p}-\mathbf{q}'\sigma=\mathbf{k}_۱\sigma_۱\end{cases}$$
$$\begin{cases}\mathbf{k}\sigma'=\mathbf{k}_۲-\mathbf{q}\sigma_۲\\ \mathbf{k}+\mathbf{q}'\sigma'=\mathbf{k}_۲\sigma_۲\end{cases}$$

براساس روابط بالا $\mathbf{q} = \mathbf{q}'$ است که همان بقای مومنتوم می‌باشد. براساس شرایط بالا انرژی در مرتبه‌ی دوم اختلال به صورت زیر خواهد بود:

$$E^{(2)} = \frac{e^4}{\upsilon^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{q} \\ \sigma}} \frac{(\frac{1}{2}V(q))^2}{E^{(0)} - E_\nu} \theta(|\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}| - k_F)\theta(|\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}| - k_F)\theta(k_F - |\mathbf{k}_1|)\theta(k_F - |\mathbf{k}_2|)$$

$$\begin{aligned}
&(V(q))^2 \propto \frac{1}{q^4} \\
&E^{(0)} - E_\nu = (\mathbf{k}_1 + \mathbf{q})^2 + (\mathbf{k}_2 - \mathbf{q})^2 - \mathbf{k}_1^2 - \mathbf{k}_2^2 \overset{q \to 0}{\propto} \; q \\
&\sum_{\mathbf{k}_1} ...\theta(|\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}| - k_f)\; \theta(k_f - |\mathbf{k}_1|) \overset{q \to 0}{\propto} \; q \\
&\sum_{\mathbf{k}_2} ...\theta(|\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}| - k_f)\; \theta(k_f - |\mathbf{k}_2|) \overset{q \to 0}{\propto} \; q
\end{aligned}$$

برای $\mathbf{q}$ های کوچک خواهیم داشت:

$$E^{(2)} \propto \int dq\; q^2 \;\frac{1}{q^4}\; \frac{1}{q}\; q\; q = \int \; dq \;\frac{1}{q} \tag{۴۶.۲}$$

که برای q های کوچک واگرا می‌شود. پس در کل به این نتیجه می‌رسیم که برای انتقال مومنتوم کوچک، انرژی در مرتبه‌ی دوم اختلال واگرا می‌شود. به این حالت برهم‌کنش مستقیم می‌گویند.

حالت دوم:

در این حالت روابط را به صورت زیر درنظر می‌گیریم:

$$\begin{cases} \mathbf{p}\sigma = \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}\sigma_2 \\ \mathbf{k}\sigma' = \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}\sigma_1 \\ \mathbf{p} - \mathbf{q}'\sigma = \mathbf{k}_1\sigma_1 \\ \mathbf{k} + \mathbf{q}'\sigma' = \mathbf{k}_2\sigma_2 \end{cases} \tag{۴۷.۲}$$

بنابراین خواهیم داشت:

$$\mathbf{q}' = \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{q}$$

$$V(\mathbf{q}') \propto \frac{۱}{|\mathbf{k}_۲ - \mathbf{k}_۱ - \mathbf{q}|^۲} \overset{q\to ۰}{\propto} \frac{۱}{|\mathbf{k}_۲ - \mathbf{k}_۱|}$$

پس در این حالت انرژی واگرا نمی‌شود.

تمرین:

برای یک جایگاه شبکه، عملگر اسپین به صورت زیر نشان داده می‌شود

$$\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{۲}\, \hat{c}^\dagger_\alpha\, \vec{\sigma}_{\alpha\beta}\, \hat{c}_\beta$$

که $\sigma_i, \quad i = x, y, z$ ماتریس‌های پاؤلی هستند. با استفاده از جبر فرمیونی نشان دهید که جبر اسپینی زیر برقرار است:

$$[S^k, S^l] = i\hbar\, \epsilon^{klm}\, S^m$$

فصل ۳

فونون‌ها، جفت شدگی با الکترون‌ها

۱.۳ مدل ژله‌ای

هامیلتونی الکترونی با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود:

$$H = H_\circ + H_{int} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}\, c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}\, c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{۱}{۲v} \sum'_{\mathbf{kpq}\sigma\sigma'} c^\dagger_{\mathbf{k+q}\sigma}\, c^\dagger_{\mathbf{p-q}\sigma'}\, c_{\mathbf{p}\sigma'}\, c_{\mathbf{k}\sigma}\, V_{\mathbf{q}}$$

حال الکترون ها را کنار گذاشته و سراغ مدل ژله ای می رویم. فرض می‌کنیم ژله کمی نوسان می‌کند، بنابراین چگالی یون‌ها به‌صورت حاصل جمع دو جمله است:

$$\rho_I = \rho_\circ + \rho_۱(\mathbf{r}, t) \qquad (۱.۳)$$

که در آن جمله‌ی اول $\rho_\circ$ ثابت است و جمله‌ی دوم (نوسان چگالی) باعث ایجاد میدان الکتریکی $\mathbf{E}$ می‌شود که از معادله پواسون بدست می‌آید:

$$\nabla.\mathbf{E} = \frac{\mathbf{Ze}}{\varepsilon_{\mathbf{0}}}\rho_{\mathbf{1}} \qquad (۲.۳)$$

چگالی نیروی متناسب با میدان الکتریکی فوق با رابطه زیر بیان می‌شود:

$$\mathbf{f} = \rho\, \mathbf{Ze}\, \mathbf{E} \qquad (۳.۳)$$

از روابط (۲.۳) و (۳.۳) بدست می‌آوریم:

$$\nabla.(\frac{1}{\rho Ze}\mathbf{f}) = \frac{\mathbf{Ze}}{\varepsilon_\mathbf{0}}\rho_\mathbf{1} \qquad (۴.۳)$$

از طرفی طبق قانون دوم نیوتن، این نیرو باعث تغییر سرعت یون با جرم M می‌شود و داریم:

$$\mathbf{f} = \mathbf{M}\rho\, \partial_\mathbf{t}\mathbf{v} \qquad (۵.۳)$$

که به معادله‌ی پیوستگی (که برای سیال برقرار است) می‌رسیم:

$$\partial_t\rho + \nabla.\,(\rho\,\mathbf{v}) = \mathbf{0} \qquad (۶.۳)$$

با جایگذاری ρ از معادله‌ی (۱.۳) در معادله‌ی فوق بدست می‌آوریم:

$$\partial_t\rho_1 + \nabla.\,(\rho_0\,\mathbf{v}) = \mathbf{0} \qquad (۷.۳)$$

در بدست آوردن این رابطه به این نکته توجه شده است که سرعت تنها ناشی از ρ_1 است نه ρ_0، زیرا ρ_1 وابستگی مکانی و زمانی دارد، بنابراین سرعت حاصله نیز کوچک است و می‌توان از حاصل ضرب $v\,\rho_1$ صرف نظر کرد. با مشتق‌گیری دوباره نسبت به زمان از رابطه‌ی (۷.۳) و سپس استفاده از رابطه‌ی (۵.۳) بدست می‌آوریم:

$$\partial_t^2\rho_1 + \rho_0\,\nabla.(\partial_t\,\mathbf{v}) = \mathbf{0}$$

$$\partial_t^2\rho_1 + \rho_0\,\nabla.(\frac{\mathbf{f}}{M\,\rho}) = 0 \qquad (۸.۳)$$

با جایگذاری $\nabla.(\frac{\mathbf{f}}{\rho})$ از رابطه‌ی (۴.۳) در رابطه‌ی فوق بدست می‌آوریم:

$$\partial_t^2\rho_1 + [\frac{\rho_0}{M}\,\frac{(Ze)^2}{\varepsilon_0}]\rho_1 = 0 \qquad (۹.۳)$$

$$(\partial_t^2 + \Omega^2)\,\rho_1(\mathbf{r},t) = 0 \qquad (۱۰.۳)$$

که در آن Ω فرکانس پلاسمونی یون‌ها است و با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود:

$$\Omega = \sqrt{\frac{\rho_۰ \, Z^۲ \, e^۲}{M \, \varepsilon_۰}} \qquad (۱۱.۳)$$

بخش فضایی $\rho_۱$ را با $\tilde{\rho}_۱(\mathbf{r})$ نشان می‌دهیم، بخش زمانی آن جواب معادله‌ی (۱۰.۳) است، بنابراین در مدل ژله‌ای داریم:

$$\rho_(\mathbf{r}, t)^{-i\Omega t} \, \tilde{\rho}_۱(\mathbf{r}) \qquad (۱۲.۳)$$

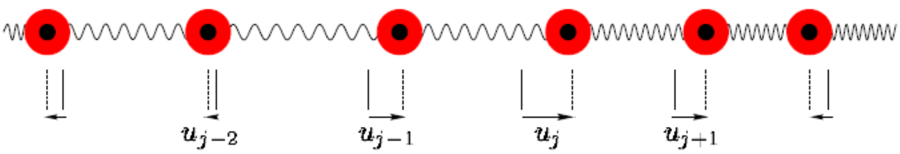
در مدل ژله‌ای فرکانس به ازای همه $\mathbf{q}$ ها مقداری ثابت است (طبق رابطه ۱۱.۳). در حالی‌که به‌طور کلی این نوع نگاه تنها برای مدهای اپتیکی در حد $\mathbf{q} \to ۰$ معتبر است و در این حد برای مدهای صوتی رابطه خطی بین $\mathbf{q}$ و Ω برقرار است. ثابت بودن فرکانس، فرض اصلی در مدل انشتین برای جامدات است. این مدل رفتار ظرفیت گرمایی را به‌صورت $C_v \propto (T^\alpha) e^{(\frac{\hbar\Omega}{kT})}$ پیش بینی می‌کند که بر خلاف نتیجه‌ی تجربی ($C_v \propto T^۳$) است. فرکانس ثابت به نوعی یک گاف در حد $\mathbf{q} \to ۰$ ایجاد می‌کند و معرف فرکانس مدهای اپتیکی در این حد است، بنابراین ضعف مدل ژله‌ای این است که شاخه صوتی را نمی‌بیند.

۲.۳ ارتعاشات شبکه و فونون‌ها در یک بعد

مجموعه‌ای از یون‌ها را در مکان‌های $\mathrm{x_j}$ و بر روی شبکه یک‌بعدی در نظر بگیرید. این یون‌ها حول مکان‌های تعادلی‌شان ($\mathrm{x_j^0}$) به اندازه‌ی بردار $\mathbf{u_j}$ نوسان می‌کنند (شکل۱.۳ را ببینید):

$$\mathrm{x_j} = \mathrm{x_j^0} + \mathbf{u_j} \qquad (۱۳.۳)$$

هامیلتونی این یون‌ها شامل دو بخش انرژی جنبشی و پتانسیل (جمله‌ی مرتبه‌ی اول پتانسیل در



شکل ۱.۳: بردار جابجایی یون‌ها $\mathbf{u_j}$ حول مکان‌های تعادلی‌شان

حالت تعادل صفر می‌باشد) است:

$$H_{Ion} = \sum_j \frac{p_j^{۲}}{۲M} + \frac{C}{۲} \sum_j (u_j - u_{j+۱})^{۲} \qquad (۱۴.۳)$$

که برای عملگرهای مکان و تکانه‌ی یون‌ها داریم:

$$[u_j \, , p_{j'}] = i\hbar \, \delta jj' \qquad (۱۵.۳)$$

$\mathbf{k}$ ها در ناحیه‌ی اول بریلوین هستند و شرایط مرزی تناوبی برای آن‌ها برقرار است. تبدیل فوریه عملگرهای مکان و تکانه عبارت است از:

$$p_j = \frac{۱}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in FBZ} p_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}.x_j} \qquad (۱۶.۳)$$

$$u_j = \frac{۱}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in FBZ} u_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}.x_j} \qquad (۱۷.۳)$$

با جایگذاری روابط (۱۶.۳) و (۱۷.۳) در رابطه‌ی (۱۴.۳) خواهیم داشت:

$$H = \sum_{j=۱}^{N} \frac{۱}{۲M} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{۱}{N} p_{\mathbf{k}} p_{\mathbf{k}'} \, e^{i\mathbf{k}.x_j^{\circ} \, + i\mathbf{k}'.x_j^{\circ}}$$
$$+ \frac{C}{۲} \sum_j \frac{۱}{N} [\sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} \, e^{i\mathbf{k}.x_j^{\circ}} - \, u_{\mathbf{k}} \, e^{i\mathbf{k}.(x_j^{\circ}+a)}]^{۲} \qquad (۱۸.۳)$$

و با توجه به تعریف تابع دلتا:

$$\frac{۱}{N} \sum_{j=۱}^{N} e^{i\mathbf{k}.x_j^{\circ} \, + i\mathbf{k}'.x_j^{\circ}} =_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'} \qquad (۱۹.۳)$$

و نیز با به توان رساندن جمله‌ی دوم، معادله‌ی (۱۸.۳) به شکل زیر می‌شود:

$$H = \frac{1}{2M} \sum_{\mathbf{k}} p_{\mathbf{k}} p_{-\mathbf{k}} + \frac{C}{2} \sum_{j} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{kk'}} u_{\mathbf{k}}\, e^{i\mathbf{k}.x_j^\circ}\, (1 - e^{i\mathbf{k}a}) \times u_{\mathbf{k'}}\, e^{i\mathbf{k'}.x_j^\circ}\, (1 - e^{i\mathbf{k'}a})$$

با استفاده‌ی دوباره از رابطه‌ی ۱۹.۳ و معادله‌ی $(1 - e^{i\mathbf{k}a})\,(1 - e^{-i\mathbf{k}a}) = 2(1 - Cos(ka))$ خواهیم داشت:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{1}{2M} p_{\mathbf{k}} p_{-\mathbf{k}} + \frac{1}{2} M\, \omega^2\, u_{\mathbf{k}} u_{-\mathbf{k}}\right] \tag{۲۰.۳}$$

که در آن ω به‌صورت زیر تعریف شده است:

$$\frac{1}{2} M\, \omega_k^2 = C\,(1 - Cos(ka)) = C\,(2\, Sin(\frac{ka}{2})^2)$$

$$\Longrightarrow \qquad \omega_k = \sqrt{\frac{4\, C\, Sin(\frac{ka}{2})}{M}} \tag{۲۱.۳}$$

طبق معادله‌ی (۲۰.۳) هامیلتونی به ازای هر k، همان هامیلتونی نوسانگر هماهنگ ساده است که جواب‌هایش را به زبان کوانتش دوم می‌دانیم. بنابراین عملگرهای زیر را پیشنهاد می‌کنیم:

$$\hat{b_{\mathbf{k}}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\frac{\hat{u_{\mathbf{k}}}}{l_{\mathbf{k}}} + i\frac{\hat{p_{\mathbf{k}}}}{\hbar/l_{\mathbf{k}}}) \qquad l_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{M\,\omega_{\mathbf{k}}}} \tag{۲۲.۳}$$

$$\hat{b}^\dagger_{-\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\frac{\hat{u_{\mathbf{k}}}}{l_{\mathbf{k}}} - i\frac{\hat{p_{\mathbf{k}}}}{\hbar/l_{\mathbf{k}}}) \tag{۲۳.۳}$$

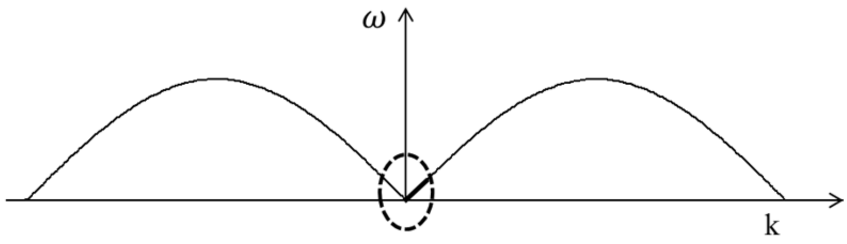
با استفاده از تعارف فوق و نیز روابط جابجایی زیر:

$$[u_{\mathbf{k}}\,, p_{\mathbf{k'}}] = i\hbar\, \delta_{\mathbf{k},-\mathbf{k'}} \tag{۲۴.۳}$$

$$[\hat{u}, \hat{H}] = i\hbar\, \dot{u}_{\mathbf{k}} \tag{۲۵.۳}$$

می‌توان هامیلتونی (۲۰.۳) را به‌صورت زیر بازنویسی کرد:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \left[\hat{b}^\dagger_{-\mathbf{k}} \hat{b_{\mathbf{k}}} + \frac{1}{2}\hbar\, \omega_{\mathbf{k}}\right] \tag{۲۶.۳}$$



شکل ۲.۳: بردار جابجایی یون‌ها $\mathbf{u_j}$ حول مکان‌های تعادلی‌شان

که در آن ω_{k} با رابطه‌ی ۲۱.۳ بیان می‌شود. رابطه‌ی فرکانس با عدد موج به‌صورت تابع سینوسی (شکل ۲.۳) بدست آمد که در حوالی $\mathbf{q} \to ۰$ خطی است و به آن مد نرم نیز می‌گویند (محدوده‌ی داخل خطچین در شکل ۲.۳). قبلاً دیدیم که مدل ژله‌ای قادر به پیش‌بینی این مد صوتی نرم نبود و تنها مد اپتیکی را نتیجه می‌داد. در واقع شاخه‌ی صوتی، مسئله‌ی ظرفیت گرمایی در حد دماهای کم را توصیف می‌کند.

اگر شبکه یک‌بعدی با دو اتم داشته باشیم، در هر $\mathbf{k}$، دو ω داریم که متعلق به شاخه‌های صوتی و اپتیکی هستند و با استدلال کافی می‌توان گفت که برای شبکه سه‌بعدی، سه مد صوتی وجود دارد و بقیه مدها اپتیکی هستند. در حد طول موج‌های بزرگ $(\mathbf{q} \to ۰)$ ، یا حد پیوستگی، همه‌ی اتم‌ها با هم حرکت می‌کنند و در نتیجه می‌توان روی حرکت مرکز جرم متمرکز شد، بنابراین تنها سه درجه‌ی آزادی داریم که متناظر با سه مد صوتی هستند. عموماً انرژی مدهای اپتیکی از مرتبه eV ۲۰۰ است و در آن حرکت اتم‌ها در فاز مخالف است که منجر به قطبش در شبکه می‌شود، بنابراین طیف فرو سرخ می‌تواند چنین مدهایی را برانگیخته کند. با در نظر گرفتن سه مولفه برای قطبش به‌صورت زیرنویس λ، عملگر مکان در سه بعد را می‌توان با رابطه‌ی زیر بیان کرد (توضیحات بیشتر در کتاب اشکرافت بیان شده است):

$$u_{\mathbf{k}\lambda} = l_{\mathbf{k}\lambda} \frac{۱}{\sqrt{۲}} (\hat{b}^{\dagger}_{-\mathbf{k}\lambda} + \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}) \, \varepsilon_{\mathbf{k}\lambda} \qquad (۲۷.۳)$$

که در آن:

$$l_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{M\ \omega_{\mathbf{k}\lambda}}} \tag{۲۸.۳}$$

و نیز رابطه‌ی جابجایی زیر برقرار است ($\hbar$ ها در تعریف $\hat{b}$ ها گنجانده شده‌اند):

$$[\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}\ , \hat{b}^{\dagger}_{\mathbf{k}'\lambda'}] = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\ \delta_{\lambda,\lambda'} \tag{۲۹.۳}$$

حال با این مقدمات می‌توان مدل دیبای را برای جامدات استخراج کرد که طبق آن در دماهای که $C_v \propto\ T^{۳}$ است که با تجربه هم‌خوانی دارد. برای دماهای بالا مدل کلاسیکی صادق است.

۳.۳ برهم‌کنش الکترون-فونون در مدل شبکه

پتانسیل برهم‌کنش الکترون با یون‌ها را به‌صورت زیر در نظر می‌گیریم:

$$V_{e-ion} = \int\ d\mathbf{r}\ (-e)\ \rho_r(\mathbf{r})\ \sum_{j=۱}^{N}\ \tilde{V}(\mathbf{r} - \mathbf{x_j}) \tag{۳۰.۳}$$

که در آن $\tilde{V}$ پتانسیل برهم‌کنش ناشی از تک یونی است که در مکان x_j (رابطه ۱۳.۳) قرار دارد. در ادامه نمایش کوانتش دوم پتانسیل برهم‌کنش را بدست خواهیم آورد. فرض می‌کنیم که جابجایی یون‌ها (u_j) از مکان تعادلی‌شان (x_j°) کوچک است، بنابراین بسط تیلور $\tilde{V}$ را در رابطه‌ی فوق قرار می‌دهیم، خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} V_{e-ion} = &\int\ d\mathbf{r}\ (-e)\ \rho_e(\mathbf{r})\ \sum_{j=۱}^{N}\ \tilde{V}(\mathbf{r} - \mathbf{x_j^0}) \\ &- (-e)\ \int\ d\mathbf{r}\ \rho_e(\mathbf{r})\ \sum_{j=۱}^{N}\ \mathbf{u_j}\ .\ \nabla\tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{r} - \mathbf{x_j^0}) \end{aligned} \tag{۳۱.۳}$$

در جمله‌ی اول معادله‌ی فوق دینامیک شبکه وجود ندارد و می‌تواند به نوعی همان پتانسیل بلوخ باشد که در بخش هامیلتونی الکترونی گنجانده شده است. بنابراین تنها بر روی جمله‌ی دوم تمرکز

می‌کنیم آن را پتانسیل برهم‌کنش الکترون-فونون می‌نامیم:

$$V_{e-ph} = \int d\mathbf{r}\ \rho_e(\mathbf{r}) \sum_{j=۱}^{N} e\mathbf{u_j}\ .\ \nabla\tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{r}-\mathbf{x_j^0}) \qquad (۳۲.۳)$$

معادله‌ی فوق در فضای مکان نوشته شده است، در ادامه می‌خواهیم آن را در فضای تکانه بنویسیم تا بسیار ساده‌تر شود. u_j را می‌توان با تبدیل فوریه از $u_{\mathbf{k}\lambda}$، رابطه‌ی (۲۴.۳) بدست آورد؛ یعنی داریم:

$$u_j = \frac{۱}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}',\lambda} e^{i\mathbf{k}'.\mathbf{x_j}}\ l_{\mathbf{k}\lambda}\ \frac{۱}{\sqrt{۲}}\ (\hat{b}^{\dagger}_{-\mathbf{k}'\lambda} + \hat{b}_{\mathbf{k}'\lambda})\ \varepsilon_{\mathbf{k}'\lambda} \qquad (۳۳.۳)$$

چگالی را نیز بر حسب عملگرهای میدان می‌نویسیم، خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_e(\mathbf{r}) &= \hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r})\ \hat{\psi}(\mathbf{r}) \\ &= \frac{۱}{\sqrt{v}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}\ \hat{c}^{\dagger}{}_{\mathbf{k}}\ \frac{۱}{\sqrt{v}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}'.\mathbf{r}}\ \hat{c}_{\mathbf{k}'} \\ &= \frac{۱}{v} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}').\mathbf{r}}\ \hat{c}^{\dagger}{}_{\mathbf{k}}\ \hat{c}_{\mathbf{k}'} \end{aligned} \qquad (۳۴.۳)$$

از طرفی رابطه‌ی تبدیل فوریه برای چگالی به‌صورت زیر است:

$$\hat{\rho}_e(\mathbf{r}) = \frac{۱}{v} \sum_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}\ e^{i\mathbf{q}.\mathbf{r}} \qquad (۳۵.۳)$$

با مقایسه روابط (۳۴.۳) و (۳۵.۳) خواهیم داشت:

$$\rho_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{q}} \hat{c}^{\dagger}{}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}\ \hat{c}_{\mathbf{k}'} \qquad \mathbf{k}-\mathbf{q}=\mathbf{k}' \qquad (۳۶.۳)$$

بنابراین رابطه‌ی چگالی در فضای تکانه به‌صورت زیر خواهد بود:

$$\hat{\rho}_e(\mathbf{r}) = \frac{۱}{v} \sum_{\tilde{\mathbf{q}}} [\sum_{\mathbf{k}} \hat{c}^{\dagger}{}_{\mathbf{k}+\tilde{\mathbf{q}}}\ \hat{c}_{\mathbf{k}}]\ e^{i\tilde{\mathbf{q}}.\mathbf{r}} \qquad (۳۷.۳)$$

حال بسط فوریه‌ی $\tilde{V}(\mathbf{r}-\mathbf{x_j})$ را می‌نویسیم، به‌طور کلی می‌دانیم:

$$\tilde{V}(\mathbf{r}) = \frac{۱}{v} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}.\mathbf{r}}\ \tilde{V}_{\mathbf{q}} \qquad (۳۸.۳)$$

این رابطه برای یک تک یون است و در آن تمام تکانه‌ها وجود دارد، قبلاً به علت خاصیت تناوبی $\hat{V}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = \hat{\mathbf{V}}(\mathbf{r})$، $\mathbf{k}$ های موجود در پتانسیل کل مربوط به ناحیه‌ی اول بریلوئن بودند، اما در این‌جا این قید بر روی تکانه‌های $\mathbf{p}$ وجود ندارد، یعنی در رابطه‌ی $\mathbf{p} = \mathbf{q} + \mathbf{G}$ صدق می‌کنند که در آن $\mathbf{q}$ مربوط به ناحیه‌ی اول بریلوئن است و $\mathbf{G}$ بردار شبکه وارون است. بنابراین برای پتانسیل خواهیم داشت:

$$\tilde{V}(\mathbf{r} - x_j^{\circ}) = \frac{۱}{v} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{G}).(\mathbf{r}-\mathbf{x_j^0})}\ \tilde{V}_{\mathbf{q}+\mathbf{G}} \tag{۳۹.۳}$$

با گرادیان گرفتن از پتانسیل فوق خواهیم داشت:

$$\nabla_{\mathbf{r}}\tilde{V}(\mathbf{r} - x_j^{\circ}) = \frac{۱}{v} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{G}} i(\mathbf{q}+\mathbf{G})\ \mathbf{e}^{\mathbf{i}(\mathbf{q}+\mathbf{G}).(\mathbf{r}-\mathbf{x_j^0})}\ \tilde{\mathbf{V}}_{\mathbf{q}+\mathbf{G}} \tag{۴۰.۳}$$

حال با جایگذاری روابط (۳۳.۳)، (۳۷.۳) و (۴۰.۳) در رابطه‌ی (۳۲.۳) خواهیم داشت:

$$V_{e-ph} = \frac{e}{v^۲} \sum_{j=۱}^{N} \frac{۱}{\sqrt{N}} \int d\mathbf{r} \sum_{\tilde{\mathbf{q}}\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i\tilde{\mathbf{q}}.\mathbf{r}+i\mathbf{k}'.\mathbf{r}+i(\mathbf{q}+\mathbf{G}).\mathbf{r}-\mathbf{i}(\mathbf{q}+\mathbf{G}).\mathbf{x_j^0}}\ \hat{c}^{\dagger}{}_{\mathbf{k}+\tilde{\mathbf{q}}}\ \hat{c}_{\mathbf{k}}\ (\hat{b}^{\dagger}_{-\mathbf{k}'\lambda} + \hat{b}_{\mathbf{k}'\lambda})$$
$$\times \frac{l_{\mathbf{k}'\lambda}}{\sqrt{۲}}\ \varepsilon_{\mathbf{k}'\lambda}.\mathbf{i}(\mathbf{q}+\mathbf{G})\ \tilde{\mathbf{V}}_{\mathbf{q}+\mathbf{G}} \tag{۴۱.۳}$$

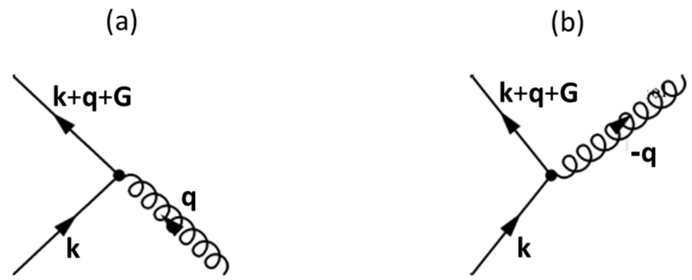
با محاسبه‌ی جمع و نیز انتگرال‌گیری از توابع نمایی، توابع دلتای زیر بدست می‌آیند:

$$\frac{۱}{N} \sum_{j} e^{i\mathbf{k}'.x_j^{\circ}-i(\mathbf{q}+\mathbf{G}).\mathbf{j}^{\mathbf{0}}} = \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{q}+\mathbf{G}} \tag{۴۲.۳}$$

$$\frac{۱}{v} \int d\mathbf{r}\ e^{i\tilde{\mathbf{q}}.\mathbf{r}+i(\mathbf{q}+\mathbf{G}).\mathbf{r}} = \delta_{\tilde{\mathbf{q}},\mathbf{q}+\mathbf{G}} \tag{۴۳.۳}$$

با قرار دادن این توابع دلتا در رابطه‌ی(۴۱.۳) خواهیم داشت:

$$V_{e-ph} = \frac{۱}{v} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{q}\lambda} \sum_{\mathbf{G}} g_{\mathbf{q},\mathbf{G},\lambda}\ \hat{c}^{\dagger}{}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{G},\sigma}\ \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}\ (\hat{b}^{\dagger}_{-\mathbf{q}\lambda} + \hat{b}_{\mathbf{q}\lambda}) \tag{۴۴.۳}$$



شکل ۳.۳: نمایش گرافیکی از جفت‌شدگی الکترون-فونون. (a) جذب فونون، (b) گسیل فونون

که در آن:

$$g_{\mathbf{q},\mathbf{G},\lambda} = ie\sqrt{\frac{N\hbar}{2M\omega_{\mathbf{q}\lambda}}}(\mathbf{q}+\mathbf{G})\,.\,\varepsilon_{\mathbf{k}'\lambda}\,\tilde{\mathbf{V}}_{\mathbf{q}+\mathbf{G}} \qquad (۴۵.۳)$$

از این روابط نتیجه می‌گیریم که دو نوع فرایند امکان پذیر است، شکل (۳.۳) را ببینید، در اولی یک الکترون $\mathbf{k}\sigma$، یک فونون با تکانه $\mathbf{q}$ جذب می‌کند و در دومی این الکترون، فوتونی با تکانه $-\mathbf{q}$ گسیل می‌کند. اگر در طی این فرایندها $\mathbf{G}=\mathbf{0}$ باشد، فرایند نرمال است و در عمل معمولاً چنین فرایندهایی سهم بزرگی دارند. هم‌چنین فرایندهایی با $\mathbf{G}\neq\mathbf{0}$ امکان‌پذیر بوده اما سطح مقطع کوچکی دارند و به‌ندرت اتفاق می‌افتند.

فصل ۴

نظریه میدان میانگین

۱.۴ مفاهیم پایه‌ی نظریه‌ی میدان میانگین

دو عملگر $\hat{A}$ و $\hat{B}$ را می‌توان بر حسب مقادیر میانگین نظیرشان (به ترتیب $\bar{A}$ و $\bar{B}$) به‌صورت زیر نوشت:

$$\hat{A} = \bar{A}I + \delta A$$
$$\hat{B} = \bar{B}I + \delta B \tag{۱.۴}$$

فرض مهم در نظریه میدان میانگین این است که شرط زیر برقرار باشت:

$$\delta\hat{A}.\delta\hat{B} \simeq ۰ \tag{۲.۴}$$

$$or \quad (\hat{A} - \bar{A}).(\hat{B} - \bar{B}) \simeq ۰ \tag{۳.۴}$$

بنابراین حاصل‌ضرب دو عملگر را می‌توان به‌صورت زیر نوشت:

$$\hat{A}\hat{B} \simeq \hat{A}\bar{B} + \bar{A}\hat{B} - \bar{A}\bar{B} \tag{۴.۴}$$

۲.۴ نظریه‌ی میدان میانگین برای مدل هایزنبرگ

حال هامیلتونی مدل هایزنبرگ برای برهم‌کنش بین اسپین‌ها در بلور در نظر می‌گیریم (این هامیلتونی دارای تقارن $SU۲$ است)؛ یعنی داریم:

$$H = J\sum_{ij} \mathbf{S_i}.\mathbf{S_j} \tag{۵.۴}$$

با استفاده از رابطه ۴.۴)) ، هامیلتونی فوق در نظریه‌ی میدان میانگین به‌صورت زیر خواهد شد:

$$H_{MF} = ۲J\sum_{ij} <\mathbf{S_i}>.\mathbf{S_j} - \sum_{\mathbf{ij}} <\mathbf{S_i}><\mathbf{S_j}> \tag{۶.۴}$$

ضریب ۲ در جمله اول به‌این خاطر ظاهر شده است که: $<\mathbf{S_i}>=<\mathbf{S_j}>$. حال جمع روی اندیس‌های i و j را بر روی جمع روی تک تک اتم‌ها و نزدیکترین همسایگانش تبدیل می‌کنیم:

$$H_{MF} = ۲J\sum_{j\delta} <\mathbf{S_{j+\delta}}>.\mathbf{S_j} - \sum_{\mathbf{j}\delta} <\mathbf{S_{j+\delta}}><\mathbf{S_j}> \tag{۷.۴}$$

فرض می‌کنیم مقدار میانگین اسپین هر سایت، برابر با مقدار ثابتی است:

$$<\mathbf{S_i}>=\mathbf{m} \quad \mathbf{or} \quad <\mathbf{S_{j+\delta}}>=\mathbf{m} \tag{۸.۴}$$

با جایگذاری روابط فوق در رابطه (۷.۴) اثر همسایگان به‌صورت یک ضریب ظاهر می‌شود، اگر تعداد نزدیک‌ترین همسایگان هر اسپین را با Z نشان دهیم، خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} H_{MF} &= ۲JZ\sum_{j} m\mathbf{S_j} - \mathbf{Z}\sum_{\mathbf{j}} \mathbf{m^2} \\ H_{MF} &= ۲JZ\sum_{j} (m\mathbf{S_j} - \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}\mathbf{m^2}) \end{aligned} \tag{۹.۴}$$

هامیلتونی کل فوق را می‌توان به‌صورت حاصل جمع هامیلتونی‌های تک ذره‌ای (h_j) مستقل نوشت:

$$H_{MF} = ۲JZ\sum_{j} h_j \tag{۱۰.۴}$$

که در آن:

$$h_j = m\mathbf{S_j} - \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}\mathbf{m^2} \tag{۱۱.۴}$$

برای یافتن میانگین‌هایی که در هامیلتونی فوق وجود دارد، دو روش وجود دارد. روش اول، روش میدان خودسازگار نامیده می‌شود که در آن تابع پارش هامیلتونی تک‌ذره‌ای را می‌یابیم:

$$Z_{MF} = e^{\beta H_{MF}}$$

$$Z_{MF} = \left(e^{-\beta m} + e^{\beta m}\right) e^{\beta \frac{m^۲}{۲}} \tag{۱۲.۴}$$

که برای بدست آوردن رابطه‌ی فوق $\frac{\hbar}{۲} = ۱$ فرض شده است، بنابراین اسپین می توان دو مقدار ۱ و ۱- را داشته باشد. حال اگر فرض کنیم ماده‌ی فرومغناطیس داشته باشیم که در آن اسپین‌ها جهت مرجحی دارند و $\mathbf{0} \neq \mathbf{m} =< \mathbf{S_j} >$، بنابراین تقارن $SU۲$ که قبلاً در هامیلتونی (۶.۴) برقرار بود شکسته خواهد شد. در صورت شکست تقارن باید پارامتر نظم دیگری تعریف کرد که در معادله‌ی خودسازگار صدق کند. پارامتر نظم در این‌جا همان مغناطش است که آن را در پایه‌ی هامیلتونی تک‌ذره‌ای (۱۱.۴) بدست می‌آوریم:

$$< \mathbf{S} >= \frac{\sum_{\mathbf{r}} \left(\mathbf{S_r}\ \mathbf{e}^{-\beta \mathbf{E_r}}\right)}{\mathbf{Z_{MF}}}$$

$$< \mathbf{S} >= \frac{\left((+\mathbf{1})\ \mathbf{e}^{-\beta \mathbf{m}} + (-\mathbf{1})\ \mathbf{e}^{\beta \mathbf{m}}\right)\ \mathbf{e}^{\beta \frac{\mathbf{m^2}}{\mathbf{2}}}}{\mathbf{e}^{-\beta \mathbf{m}} +\ \mathbf{e}^{\beta \mathbf{m}}\ \mathbf{e}^{\beta \frac{\mathbf{m^2}}{\mathbf{2}}}} \tag{۱۳.۴}$$

از طرفی طبق فرض میدان میانگین داریم:

$$< \mathbf{S} >= \mathbf{m} \tag{۱۴.۴}$$

با مقایسه‌ی روابط (۱۳.۴) و (۱۴.۴) بدست می‌آوریم:

$$m = \tanh(\beta m) \tag{۱۵.۴}$$

با حل خودسازگار معادله‌ی فوق، مغناطش بدست می‌آید. به‌علت اینکه هامیلتونی به مغناطش وابسته است، حالت پایه و نیز مقادیر چشمداشتی محاسبه شده در این پایه، به مغناطش وابسته خواهند بود. روش دوم، روش کمینه کردن انرژی آزاد است. در این روش، بعد از این‌که هامیلتونی را بر حسب پارامتر مسئله (در این‌جا مغناطش پارامتر نظم است) نوشتیم، انرژی را نسبت به این پارامتر کمینه می‌کنیم و پارامتر مناسب را می‌یابیم.

۳.۴ نظریه‌ی میدان میانگین برای سیستمی با دو نوع ذره (ذرات غیر یکسان)

حال یک سیستم دو ذره‌ای را در نظر می‌گیریم و عملگرهای نظیر دو ذره‌ی مختلف را با a_ν و b_μ نشان می‌دهیم. هامیلتونی الکترونی چنین سیستمی را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$H = H_\circ + H_{int} \tag{۱۶.۴}$$

فرض می‌کنیم تنها برهم‌کنش بین ذراتی از نوع مختلف مهم است، بنابراین هامیلتونی فوق را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$H = \sum_{\nu} \xi^a_\nu \, a^\dagger_\nu a_\nu \; + \; \xi^b_\nu \, b^\dagger_\nu b_\nu \; + \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} V_{\mu\mu'\nu\nu'} \, a^\dagger_\mu b^\dagger_{\mu'} b_{\nu'} a_\nu \tag{۱۷.۴}$$

در جامدات اندیس $\nu \equiv (\mathbf{k}\sigma)$ است. اگر تنها یک نوع ذره داشتیم، هامیلتونی درجه‌ی دوم بود و می‌توانستیم آن را حل کنیم ولی در این‌جا با یک هامیلتونی درجه‌ی چهارم سر و کار داریم. از نظریه‌ی میدان میانگین می‌توان برای تجزیه‌ی حاصل ضرب دو عملگر $\hat{A}\hat{B}$ استفاده کرد (رابطه‌ی ۴.۴) . بنابراین اگر بخواهیم برای جمله‌ی آخر هامیلتونی فوق از این نظریه استفاده کنیم، با انتخاب‌های مختلفی برای این دو عملگر مواجه هستیم که انتخاب‌های مختلف به شکستن تقارن‌های مختلف منجر می‌شوند. به عنوان مثال دو انتخاب زیر را در نظر می‌گیریم، انتخاب اول به شکل زیر است:

$$A = a^\dagger_\mu b^\dagger_{\mu'} \qquad\qquad B = b_{\nu'} a_\nu \tag{۱۸.۴}$$

این انتخاب تقارن U ۱ را می‌شکند، و اگر میانگین این عملگرها را در پایه‌ی گاز الکترونی محاسبه کنیم، حاصل صفر خواهد شد. اما اگر در پایه‌ی تابع موج در نظریه‌ی BSC حساب شوند، حاصل غیر صفر است. زیرا در ابررسانایی امکان ایجاد و یا خلق جفت کوپر وجود دارد. این نوع انتخاب موضوع بحث در این فصل نیست و ما انتخاب دیگری به شکل زیر را در نظر می‌گیریم:

$$A = a^{\dagger}_{\mu} a_{\nu} \qquad B = b^{\dagger}_{\mu'} b_{\nu'} \tag{۱۹.۴}$$

چنین انتخابی دارای تقارن U ۱ است، یعنی اگر هر یک از عملگرهای a یا b در فازی ضرب شوند، عملگرهای A و B ناوردا می‌مانند. با اعمال نظریه‌ی میدان میانگین (رابطه‌ی ۴.۴) برای جمله برهم‌کنشی هامیلتونی خواهیم داشت:

$$H_{MF} = H_{\circ} + \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} V\,(\hat{A}\bar{A} + \bar{A}\hat{B}) - \sum_{\mu\mu'\nu\nu'} V\,\bar{A}\bar{B} \tag{۲۰.۴}$$

با استفاده از انتخاب (۱۹.۴) ، می‌توان هامیلتونی کل فوق را بر حسب هامیلتونی دو ذره‌ای زیر نوشت:

$$h_{MF} = \xi^{a}\,\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \xi^{b}\,\hat{b}^{\dagger}\hat{b} + V\,\hat{a}^{\dagger}\hat{a}\,\bar{n}_{b} + V\,\hat{b}^{\dagger}\hat{b}\,\bar{n}_{a} - V\,\bar{n}_{a}\bar{n}_{b} \tag{۲۱.۴}$$

که در آن:

$$\bar{n}_{a} =< \hat{a}^{\dagger}\hat{a} >_{MF} \qquad \bar{n}_{b} =< \hat{b}^{\dagger}\hat{b} >_{MF} \tag{۲۲.۴}$$

پایه‌های میدان میانگین که میانگین‌های (یا مقادیر چشمداشتی) فوق در آن‌ها محاسبه می‌شوند، جواب‌های هامیلتونی (۲۱.۴) هستند. بنابراین دو معادله (۲۲.۴) را باید به‌طور خودسازگار حل کرد. از روش دوم (کمینه کردن انرژی آزاد) که قبلا بیان کردیم نیز می‌توان استفاده کرد و می‌بینیم که به نتیجه‌ای مشابه خواهیم رسید. تابع پارش به شکل زیر است:

$$Z_{MF} = e^{-\beta F_{MF}} = Tr(e^{-\beta H_{MF}}) \tag{۲۳.۴}$$

از طرفین رابطه‌ی فوق ln می‌گیریم:

$$-\beta F_{MF} = ln[Tr(e^{-\beta H_{MF}})]$$
$$F_{MF} = -\frac{1}{\beta}\, ln[Tr(e^{-\beta H_{MF}})] \tag{۲۴.۴}$$

حال انرژی آزاد فوق را نسبت به $\bar{n}_a$ کمینه می‌کنیم:

$$\frac{\partial}{\partial \bar{n}_a} F_{MF} = \frac{\partial}{\partial \bar{n}_a}[-\frac{1}{\beta}\, ln[Tr(e^{-\beta(\xi^a\ \hat{a}^\dagger \hat{a}\ +\ \xi^b\ \hat{b}^\dagger \hat{b}\ +\ V\ \hat{a}^\dagger \hat{a}\ \bar{n}_b\ \ +\ V\ \hat{b}^\dagger \hat{b}\ \bar{n}_a\ -\ V\ \bar{n}_a \bar{n}_b)})] \tag{۲۵.۴}$$

$$\frac{\partial}{\partial \bar{n}_a} F_{MF} = \ -\frac{1}{\beta}\,\frac{1}{Z_{MF}}\, Tr(-\beta V\ e^{-\beta \hat{H_{MF}}}\ \hat{b}^\dagger \hat{b} +\ \beta V \bar{n}_b\ e^{-\beta \hat{H_{MF}}} = 0 \tag{۲۶.۴}$$

با استفاده از تعریف میانگین‌گیری دمایی، رابطه‌ی فوق را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$< V\ \hat{b}^\dagger \hat{b} >_{MF}\ \ -\ V\ \bar{n}_b$$
$$\Longrightarrow \quad \bar{n}_b =< \hat{b}^\dagger \hat{b} >_{MF} \tag{۲۷.۴}$$

به‌طور مشابه با مشتق گیری از انرژی آزاد نسبت به $\bar{n}_b$ به رابطه‌ی زیر می‌رسیم:

$$\bar{n}_a =< \hat{a}^\dagger \hat{a} >_{MF} \tag{۲۸.۴}$$

که دو رابطه‌ی فوق همان روابط (۲۲.۴) برای کمیت‌های میدان میانگین هستند و این دو رهیافت با هم سازگار هستند.

۴.۴ تقریب هارتری فوک

هامیلتونی به شکل زیر را در نظر می‌گیریم:

$$H = H_\circ + H_{int} = \sum_{\mathbf{k}\sigma}\ \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}\ c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}\ c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2v}\ \sum'_{\mathbf{kpq}\sigma\sigma'}\ c^\dagger_{\mathbf{k+q}\sigma}\ c^\dagger_{\mathbf{p-q}\sigma'}\ c_{\mathbf{p}\sigma'}\ c_{\mathbf{k}\sigma}\ V_{\mathbf{q}} \tag{۲۹.۴}$$

که در آن:

$$V_{\mathbf{q}} = \frac{e^{۲}}{q^{۲} + \kappa^{۲}} \qquad (۳۰.۴)$$

که بخاطر وجود κ در مخرج، در حد $\mathbf{q} \to ۰$ واگرایی نداریم. بنابراین در این‌جا مشکلی که در مدل ژله‌ای وجود داشت را نداریم. حال هامیلتونی فوق را به زبان دیاگرام فاینمن می‌نویسیم:

نوشتن هامیلتونی در تقریب میدان میانگین با استفاده از دیاگرام فاینمن ساده است. اگر از رأس‌های یکسان حلقه درست کنیم (حلقه به معنای میانگین چگالی است)، به جمله هارتری می‌رسیم و به آن دیاگرام بچه قورباغه می‌گویند و اگر از رأس‌های مخالف حلقه درست کنیم، یک منفی بخاطر یک بار جا به جا شدن c از $c^\dagger$ حاصل می‌شود و به جمله تبادلی می‌رسیم که به آن دیاگرام صدفی می‌گویند. در دیاگرام‌های فاینمن، دیاگرام‌هایی را که به لحاظ توپولوژیکی شبیه به هم هستند را یک بار رسم کرده و تعداد تکرار شدنشان را به صورت ضریب (در این‌جا ضریب ۲) ظاهر می‌شود. اگر سیستم را غیر مغناطیسی در نظر بگیریم (یعنی $\bar{n}_\uparrow = \bar{n}_\downarrow$) جملات حاصل‌ضربی میانگین چگالی‌ها با یکدیگر ساده می‌شوند. با این توضیحات دیاگرام فاینمن هامیلتونی در تقریب میدان میانگین به شکل زیر خواهد شد:

حال می‌توان دیاگرام فوق را به زبان کوانتش دوم نوشت، داریم:

$$\begin{aligned} H_{MF} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}\, c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}\, c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{۱}{v} {\sum_{\mathbf{kpq}\sigma\sigma'}}' \Big(& c^\dagger_{\mathbf{k+q}\sigma} < c^\dagger_{\mathbf{p-q}\sigma'}\, c_{\mathbf{p}\sigma'} > c_{\mathbf{k}\sigma}\, V_{\mathbf{q}} \\ & - < c^\dagger_{\mathbf{k+q}\sigma}\, c_{\mathbf{p}\sigma'} > c^\dagger_{\mathbf{p-q}\sigma'}\, c_{\mathbf{k}\sigma}\, V_{\mathbf{q}} \Big) \end{aligned} \qquad (۳۱.۴)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow\ H_{MF} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}\, c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}\, c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{۱}{v} {\sum_{\mathbf{kpq}\sigma\sigma'}}' \Big(& \delta_{\mathbf{p}-bq,\mathbf{p}}\, \bar{n}_{\mathbf{p}\sigma'}\, c^\dagger_{\mathbf{k+q}\sigma}\, c_{\mathbf{k}\sigma}\, V_{\mathbf{q}} \\ & - \delta_{\sigma,\sigma'}\, \delta_{\mathbf{q},\mathbf{p-k}}\, \bar{n}_{\mathbf{p}\sigma} < c^\dagger_{\mathbf{k+q}\sigma}\, c_{\mathbf{p}\sigma'} > c^\dagger_{\mathbf{p-q}\sigma'}\, c_{\mathbf{k}\sigma}\, V_{\mathbf{q}} \Big) \end{aligned} \qquad (۳۲.۴)$$

در بدست آمدن رابطه‌ی فوق از روابط زیر استفاده شده است:

$$\sum_{\sigma'} \bar{n}_{\sigma'} = \bar{n}_{\mathbf{p}} \qquad (۳۳.۴)$$

$$\frac{1}{v} \sum_{\mathbf{p}} \bar{n} = \bar{n} \qquad (۳۴.۴)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow\ H_{MF} &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} + \bar{n}\, V(0) - \frac{1}{v} \sum_{\mathbf{p}\sigma} \bar{n}_{\mathbf{p}\sigma}\, V(\mathbf{p}-\mathbf{k})\right) c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}\, c_{\mathbf{k}\sigma} \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi^{MF}_{\mathbf{k}\sigma}\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}\, c_{\mathbf{k}\sigma} \end{aligned} \qquad (۳۵.۴)$$

می‌بینیم که در این تقریب هامیلتونی قطری شده است، و در آن داریم:

$$\xi^{MF}_{\mathbf{k}\sigma} = \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} + \bar{n}\, V(0) - \frac{1}{v} \sum_{\mathbf{p}\sigma} \bar{n}_{\mathbf{p}\sigma}\, V(\mathbf{p}-\mathbf{k}) \qquad (۳۶.۴)$$

در این‌جا پارامتر میدان میانگین که باید به‌طور خودسازگار حل شود، $\bar{n}_{\mathbf{p}}$ است که برابر با تابع توزیع فرمی دیراک است؛ یعنی داریم:

$$\bar{n}_{\mathbf{p}\sigma} = < c^{\dagger}_{\mathbf{p}\sigma} c_{\mathbf{p}\sigma} >_{MF} = f(\xi^{MF}_{\mathbf{k}\sigma}) \qquad (۳۷.۴)$$

۵.۴ مدل $Stoner$ برای فرومغناطیس‌های فلزی

مدل هایزنبرگ نمی‌تواند مغناطش را توضیح بدهد، بدین خاطر که در این مدل اسپین‌ها جایگزیده نیستند. نوار رسانش در فلزات واسطه شامل اوربیتال‌های جایگزیده یا نازک d یا f است و چنین فلزاتی دارای مغناطش فلزی هستند. برای توصیف چنین موادی از مدل هابارد استفاده می‌کنیم و آن را در تقریب میدان میانگین می‌نویسیم. معمولاً در این مدل فرض می‌شود که اوربیتال‌های یکسان در همه‌ی سایت‌ها وجود دارد و وقتی الکترونی از یک سایت به سایت دیگر پرش می‌کند، نوع اوربیتالش

عوض نمی‌شود. در این حالت باید هامیلتونی تک نواری را در نظر می‌گیریم که در آن تنها زیرنویس مربوط به شماره‌ی سایت مهم است، بنابراین هامیلتونی هابارد در فضای مکان به شکل زیر است:

$$H = (-t) \sum_{<ij>\sigma} c^{\dagger}_{i\sigma} c_{j\sigma} \; + \; \frac{۱}{۲v} U \sum_{i} c^{\dagger}_{i\downarrow} c^{\dagger}_{i\uparrow} c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}$$

$$H = (-t) \sum_{<ij>\sigma} c^{\dagger}_{i\sigma} c_{j\sigma} \; + \; \frac{۱}{۲v} U \sum_{i} n_{i\downarrow} \, n_{i\uparrow} \qquad (۳۸.۴)$$

که در آن:

$$U = \int \int d\mathbf{x_1} \, d\mathbf{x_2} \; \phi^{\star}_i(x_۱) \; \phi^{\star}_i(x_۲) \; u(x_۱ - x_۲) \; \phi_i(x_۱) \; \phi_i(x_۱) \qquad (۳۹.۴)$$

در این مدل تنها پرش به همسایگان اول در نظر گرفته شده است و برای فلزات از پرش‌های مرتبه‌ی دوم صرف نظر می‌کنند. حل دقیق مدل هابارد در یک بعد امکان‌پذیر است و در بعدهای بالاتر نیز به روش نظریه میدان میانگین دینامیکی قابل حل است. در سیستم‌های همبسته‌ی قوی از روش مونت کارلوی کوانتومی برای حل انتگرال‌ها در این مدل استفاده می‌کنند، مشکل این روش داشتن خطای آماری بالاست که برای کم کردن این خطا باید میانگین‌گیری‌های زیادی انجام دهیم که از نظر زمانی مقرون به صرفه نیست. روش دیگر حل، روش اختلال است که قسمتی از آن را به‌صورت تحلیلی و بقیه را عددی حل می‌کنند. روش تقریباً مناسب دیگر نظریه‌ی میدان میانگین است که این روش فاز فرومغناطیس و نیز آنتی فرومغناطیس را پیش‌بینی می‌کند. فرض مهم در مدل هابارد این است که برهم‌کنش الکترون‌ها در فضای مکان نقطه‌گونه است و بنابراین در فضای تکانه ثابت است و آن را U می‌نامیم. در این صورت رابطه‌ی ۲۹.۴ به شکل زیر می‌شود:

$$H = H_{\circ} + H_{int} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \; \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} \; c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} \; c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{U}{۲v} \sum_{\mathbf{kpq}\sigma\sigma'}^{\prime} \; c^{\dagger}_{\mathbf{k+q}\sigma} \; c^{\dagger}_{\mathbf{p-q}\sigma'} \; c_{\mathbf{p}\sigma'} \; c_{\mathbf{k}\sigma} \qquad (۴۰.۴)$$

در این‌جا چگالی اسپین های بالا و پایین برابر نیست و روابط زیر برقرار است:

$$\bar{n}_{\uparrow} = \frac{1}{v} \sum_{\mathbf{p}} \bar{n}_{\mathbf{p}\uparrow} \tag{۴۱.۴}$$

$$\bar{n}_{\downarrow} = \frac{1}{v} \sum_{\mathbf{p}} \bar{n}_{\mathbf{p}\downarrow} \tag{۴۲.۴}$$

$$\bar{n} = \bar{n}_{\uparrow} + \bar{n}_{\downarrow} \tag{۴۳.۴}$$

حال می‌خواهیم نظریه میدان میانگین را برای جمله دوم هامیلتونی به کار ببریم، در این جا تمام ذرات یکسان و از نوع فرمیونی هستند، بنابراین دو نوع انتخاب برای عملگرهای میدان میانگین داریم، انتخاب اول به شکل زیر است:

$$\begin{aligned} \hat{A} &= c^{\dagger}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}\sigma'}\, c_{\mathbf{p}\sigma'} \\ \hat{B} &= c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}\, c_{\mathbf{k}\sigma} \end{aligned} \tag{۴۴.۴}$$

این انتخاب به جمله‌ی هارتری یا بر هم‌کنش مستقیم (معادل با دیاگرام فاینمن بچه قورباغه) منجر می‌شود و انتخاب دوم به شکل زیر است:

$$\begin{aligned} \hat{A}' &= c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}\, c_{\mathbf{p}\sigma'} \\ \hat{B}' &= c^{\dagger}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}\sigma'}\, c_{\mathbf{k}\sigma} \end{aligned} \tag{۴۵.۴}$$

و این انتخاب به جمله‌ی فوک یا بر هم‌کنش تبادلی (معادل با دیاگرام فاینمن صدفی) منجر می‌شود. حال با این انتخاب‌ها نظریه‌ی میدان میانگین را بر چهار عملگر در H_{int} اعمال می‌کنیم، خواهیم داشت:

$$c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}\, c^{\dagger}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}\sigma'}\, c_{\mathbf{p}\sigma'}\, c_{\mathbf{k}\sigma} \;\approx\; \hat{A}\bar{B} + \bar{A}\hat{B} - \bar{A}\bar{B} \;-\; (\hat{A}'\bar{B}' + \bar{A}'\hat{B}' - \bar{A}'\bar{B}') \tag{۴۶.۴}$$

ضریب منفی در پشت پرانتز در رابطه‌ی بالا بخاطر جابه‌جا شدن عملگر فرمیونی $c_{\mathbf{p}\sigma'}$ از عملگر $c_{\mathbf{p}-\mathbf{q}\sigma'}$ ظاهر شده است. توجه کنید که دو جمله $\hat{A}\bar{B}$ و $\bar{A}\hat{B}$ یا $\hat{A}'\bar{B}'$ و $\bar{A}'\hat{B}'$ با معادل هم هستند

و یک بار نوشته می شوند و در ۲ ضرب میشوند. با این توضییحات، هامیلتونی بر هم‌کنشی میدان میانگین به شکل زیر خواهد شد:

$$\begin{aligned} H_{int}^{MF} = & \frac{۲ \times U}{۲ v} \sum_{\mathbf{kpq}\sigma\sigma'}^{\prime} c^{\dagger}_{\mathbf{k+q}\sigma} < c^{\dagger}_{\mathbf{p-q}\sigma'} c_{\mathbf{p}\sigma'} > c_{\mathbf{k}\sigma} \\ & - \frac{U}{۲ v} \sum_{\mathbf{kpq}\sigma\sigma'}^{\prime} < c^{\dagger}_{\mathbf{p-q}\sigma'} c_{\mathbf{p}\sigma'} > < c^{\dagger}_{\mathbf{k+q}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} > \\ & - \frac{۲ \times U}{۲ v} \sum_{\mathbf{kpq}\sigma\sigma'}^{\prime} c^{\dagger}_{\mathbf{k+q}\sigma} c_{\mathbf{p}\sigma'} < c^{\dagger}_{\mathbf{p-q}\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma} > \\ & + \frac{U}{۲ v} \sum_{\mathbf{kpq}\sigma\sigma'}^{\prime} < c^{\dagger}_{\mathbf{k+q}\sigma} c_{\mathbf{p}\sigma'} > < c^{\dagger}_{\mathbf{p-q}\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma} > \end{aligned} \qquad (۴۷.۴)$$

$$\begin{aligned} \Longrightarrow H_{int}^{MF} = & \frac{۲ \times U}{۲ v} \sum_{\mathbf{kpq}\sigma\sigma'}^{\prime} \delta_{\mathbf{q},\circ} < c^{\dagger}_{\mathbf{p}\sigma'} c_{\mathbf{p}\sigma'} > c^{\dagger}_{\mathbf{k+q}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} \\ & - \frac{U}{۲ v} \sum_{\mathbf{kpq}\sigma\sigma'}^{\prime} \delta_{\mathbf{q},\circ} < c^{\dagger}_{\mathbf{p}\sigma'} c_{\mathbf{p}\sigma'} > \delta_{\mathbf{q}.\circ} < c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} > \\ & - \frac{۲ \times U}{۲ v} \sum_{\mathbf{kpq}\sigma\sigma'}^{\prime} c^{\dagger}_{\mathbf{k+q}\sigma} c_{\mathbf{p}\sigma'} \delta_{\mathbf{p-q},\mathbf{k}} \delta\sigma,\sigma' < c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma} > \\ & + \frac{U}{۲ v} \sum_{\mathbf{kpq}\sigma\sigma'}^{\prime} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{p-q}} \delta\sigma,\sigma' < c^{\dagger}_{\mathbf{p}\sigma} c_{\mathbf{p}\sigma'} > \delta_{\mathbf{k},\mathbf{p-q}} \delta\sigma,\sigma' < c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma} > \end{aligned} \qquad (۴۸.۴)$$

$$\begin{aligned} \Longrightarrow H_{int}^{MF} = & \frac{U}{v} \sum_{\mathbf{kp}\sigma} (\bar{n}_{\mathbf{p}\uparrow} + \bar{n}_{\mathbf{p}\downarrow}) c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} \\ & - \frac{U}{۲ v} \sum_{\mathbf{p}} (\bar{n}_{\mathbf{p}\uparrow} + \bar{n}_{\mathbf{p}\downarrow}) \sum_{\mathbf{k}} (\bar{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \bar{n}_{\mathbf{k}\downarrow}) \\ & - \frac{U}{v} \sum_{\mathbf{kp}\sigma} c^{\dagger}_{\mathbf{p}\sigma} c_{\mathbf{p}\sigma} \bar{n}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{U}{۲ v} \sum_{\mathbf{kp}\sigma} \bar{n}_{\mathbf{p}\sigma} \bar{n}_{\mathbf{k}\sigma} \end{aligned} \qquad (۴۹.۴)$$

با استفاده از رابطه‌ی $\bar{n}_\sigma = \frac{۱}{v} \sum_{\mathbf{p}} \bar{n}_{\mathbf{p}\sigma}$ خواهیم داشت:

$$H_{int}^{MF} = U \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\bar{n} - \bar{n}_\sigma) c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{Uv}{۲} [\bar{n}\bar{n} - \sum_{\sigma} \bar{n}_\sigma \bar{n}_\sigma] \qquad (۵۰.۴)$$

عبارت داخل کروشه در جمله‌ی دوم رابطه‌ی فوق را می‌توان به شکل زیر ساده کرد:

$$\bar{n}\bar{n} - \sum_{\sigma} \bar{n}_{\sigma}\bar{n}_{\sigma} \;=\; (\bar{n}_{\uparrow} + \bar{n}_{\downarrow})\,(\bar{n}_{\uparrow} + \bar{n}_{\downarrow}) \;-\; \bar{n}_{\uparrow}\,\bar{n}_{\uparrow} \;-\; \bar{n}_{\downarrow}\,\bar{n}_{\downarrow} = ۲\,\bar{n}_{\uparrow}\,\bar{n}_{\downarrow} \qquad (۵۱.۴)$$

$$\Longrightarrow\; H_{int}^{MF} = U \sum_{\mathbf{k}\sigma} \bar{n}_{\bar{\sigma}}\, c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}\, c_{\mathbf{k}\sigma} \;-\; Uv\,\bar{n}_{\uparrow}\,\bar{n}_{\downarrow} \qquad (۵۲.۴)$$

بنابراین هامیلتونی هابارد در تقریب میدان میانگین قطری می‌شود و به شکل زیر است:

$$H^{MF} = H_{\circ} + H_{int}^{MF} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\xi_{\mathbf{k}\sigma}^{MF}\; c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}\, c_{\mathbf{k}\sigma}\right) \;-\; Uv\,\bar{n}_{\uparrow}\,\bar{n}_{\downarrow} \qquad (۵۳.۴)$$

که در آن:

$$\xi_{\mathbf{k}\sigma}^{MF} = \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} \;+\; U\,\bar{n}_{\bar{\sigma}} \qquad (۵۴.۴)$$

طبق رابطه‌ی فوق پاشندگی الکترون‌هایی با اسپین σ به چگالی الکترون‌ها با اسپین مخالف $\bar{\sigma}$ مرتبط است. رابطه‌ی فوق را می‌توان به شکل صریح زیر نوشت:

$$\xi_{\mathbf{k}\uparrow}^{MF} = \varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow} \;+\; U\,\bar{n}_{\downarrow} \qquad (۵۵.۴)$$

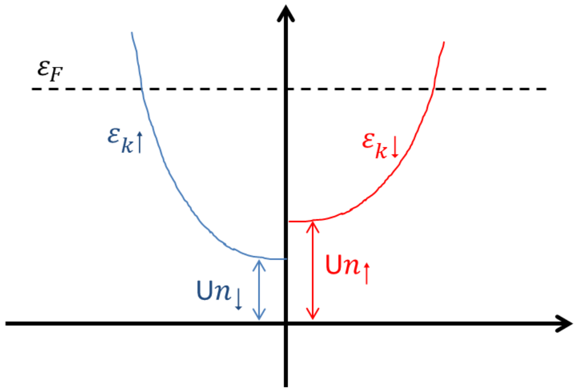
$$\xi_{\mathbf{k}\downarrow}^{MF} = \varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow} \;+\; U\,\bar{n}_{\uparrow} \qquad (۵۶.۴)$$

که در شکل زیر هم نشان داده شده‌اند: چگالی اسپینی از تابع توزیع فرمی دیراک بدست می‌آید که در دمای صفر می‌توان آن را به‌صورت تابع پله‌ای در نظر گرفت، بنابراین خواهیم داشت:

$$\bar{n}_{\sigma} = \frac{۱}{v} \sum_{\mathbf{k}} f(\xi_{\mathbf{k}\sigma}^{MF}) = \frac{۱}{v} \sum_{\mathbf{k}} \theta(\mu - \xi_{\mathbf{k}\sigma}^{MF}) \qquad (۵۷.۴)$$

می‌دانیم:

$$\frac{۱}{v} \sum_{\mathbf{k}} = \frac{۱}{(۲\pi)^{۳}} \int d^{۳}\mathbf{k} \qquad (۵۸.۴)$$



شکل ۱.۴: نمودار وابستگی پاشندگی الکترون‌هایی با اسپین معین به چگالی الکترون‌ها با اسپین مخالف

با جایگذاری رابطه‌ی (۵۸.۴) در رابطه‌ی (۵۷.۴) و در نیز نظر گرفتن اثر تابع پله‌ای داریم:

$$\Longrightarrow \ \bar{n}_\sigma = \frac{۱}{(۲\pi)^۳}\ \frac{۴\pi}{۳}\ \mathbf{k}^۳_{\mathbf{F}\sigma} = \frac{۱}{۶\pi^۲}\ \mathbf{k}^۳_{\mathbf{F}\sigma} \tag{۵۹.۴}$$

رابطه‌ی فوق ، رابطه‌ای بین چگالی اسپینی و شعاع کره‌ی فرمی است. از طرفی دیگر با صفر قرار دادن عبارت جلوی تابع پله‌ی ($\mu - \xi^{MF}_{\mathbf{k}\sigma} = ۰$) و با استفاده از رابطه‌ی (۵۴.۴)، به رابطه‌ای دیگر برای این دو کمیت دست می‌یابیم:

$$\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}\ + U\ \bar{n}_{\bar{\sigma}} = ۰$$

$$mu - \frac{\hbar^۲}{۲m}\ \mathbf{k}^۲_{\mathbf{F}\sigma}\ + U\ \bar{n}_{\bar{\sigma}} = ۰$$

$$\Longrightarrow\ \frac{\hbar^۲}{۲m}\ \mathbf{k}^۲_{\mathbf{F}\sigma} = mu -\ U\ \bar{n}_{\bar{\sigma}} \tag{۶۰.۴}$$

روابط (۵۹.۴) و (۶۰.۴) را می‌توان حل کرد، با نوشتن این معادلات به فرم صریح خواهیم داشت:

$$\begin{cases} \bar{n}_\uparrow = \frac{۱}{۶\pi^۲}\ \mathbf{k}^۳_{\mathbf{F}\uparrow} \\ \frac{\hbar^۲}{۲m}\ \mathbf{k}^۲_{\mathbf{F}\uparrow} = mu -\ U\ \bar{n}_\downarrow \end{cases} \tag{۶۱.۴}$$

$$\begin{cases} \bar{n}_{\downarrow} = \frac{۱}{۶\pi^۲}\, \mathbf{k}^۳_{\mathbf{F}\downarrow} \\ \frac{\hbar^۲}{۲m}\, \mathbf{k}^۲_{\mathbf{F}\downarrow} = mu - \ U\, \bar{n}_{\uparrow} \end{cases} \tag{۶۲.۴}$$

با حذف $\mathbf{k}_F$ ها از روابط فوق به دو رابطه‌ی زیر برای چگالی‌های اسپینی می‌رسیم:

$$\bar{n}_{\uparrow} = \frac{۱}{۶\pi^۲}\, [\frac{۲m}{\hbar^۲}(mu - \ U\, \bar{n}_{\downarrow})]^{۳/۲} \tag{۶۳.۴}$$

$$\bar{n}_{\downarrow} = \frac{۱}{۶\pi^۲}\, [\frac{۲m}{\hbar^۲}(mu - \ U\, \bar{n}_{\uparrow})]^{۳/۲} \tag{۶۴.۴}$$

با حل دو معادله‌ی فوق چگالی‌ها بدست می‌آیند. معمولاً به اختلاف چگالی‌ها علاقه‌مند هستیم و کمیتی به نام قطبش نسبی را تعریف می‌کنیم که از رابطه‌ی زیر بدست می‌آید:

$$\xi = \frac{\bar{n}_{\uparrow}\ -\ \bar{n}_{\downarrow}}{\bar{n}} \tag{۶۵.۴}$$

و نیز داریم:

$$\bar{n} = \bar{n}_{\uparrow}\ +\ \bar{n}_{\downarrow} \tag{۶۶.۴}$$

با استفاده از روابط (۶۵.۴) و (۶۶.۴) خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \bar{n}_{\uparrow} &= \frac{\bar{n}\,(۱+\xi)}{۲} \\ \bar{n}_{\downarrow} &= \frac{\bar{n}\,(۱-\xi)}{۲} \end{aligned} \tag{۶۷.۴}$$

طرفین معادلات (۶۳.۴) و (۶۴.۴) را به توان ۲/۳ رسانده و با کم کردن از یکدیگر خواهیم داشت:

$$(۶\pi^۲)^{۲/۳}\,(\frac{\bar{n}}{۲})\,[(۱+\xi)^{۲/۳}\ -\ (۱-\xi)^{۲/۳}] = \frac{۲mU}{\hbar^۲}\bar{n}\xi \tag{۶۸.۴}$$

کمیت بدون γ را می‌توان تعریف کرد که معیاری از شدت برهم‌کنش است:

$$\gamma = \frac{(1+\xi)^{2/3} - (1-\xi)^{2/3}}{\xi} = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{U}{(3\pi^2)^{2/3}}n^{1/3} \tag{۶۹.۴}$$

گفتیم ξ قطبش نسبی است که مقدارش بین صفر (حالت غیر مغناطیسی) و یک (مغناطش کامل) است، بنابراین برای سیستم مغناطیسی می‌توان دو مقدار حدی برای γ یافت. برای ξ کوچک می‌توان از بسط نیوتن استفاده کرد $(1\pm\xi)^{(2/3)} \simeq 1 \pm \frac{2}{3}\xi$، بنابراین خواهیم داشت:

$$\gamma = \frac{(1+\frac{2}{3}\xi) - (1-\frac{2}{3}\xi)}{\xi} = \frac{4}{3} = 1/33 \tag{۷۰.۴}$$

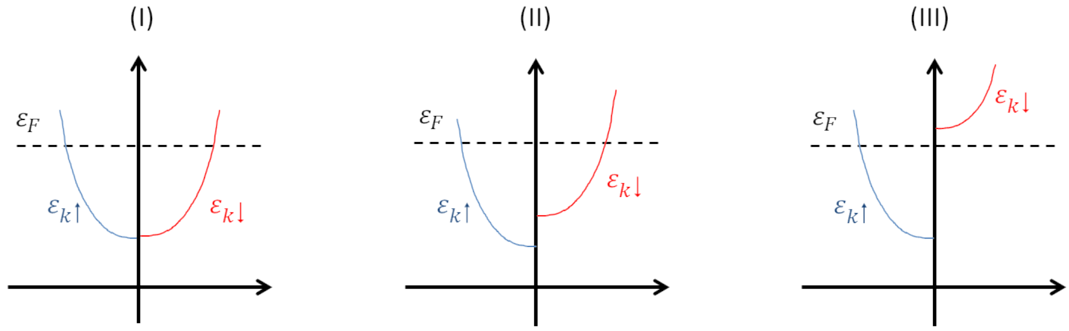
و برای حالت مغناطش کامل ($\xi = 1$) خواهیم داشت:

$$\gamma = \frac{(1+1)^{2/3} - (1-1)^{2/3}}{1} = 2^{2/3} = 1/57 \tag{۷۱.۴}$$

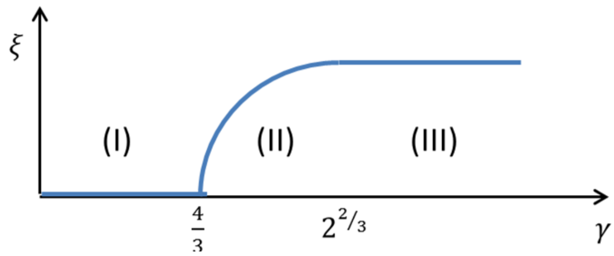
نتایج فوق را می‌توان به‌صورت زیر خلاصه کرد:

$$\begin{cases} \xi = 0 & \Rightarrow \quad \gamma < \frac{4}{3} \quad (I) \\ 0 < \xi < 1 & \Rightarrow \quad \frac{4}{3} < \gamma < 2^{2/3} \quad (II) \\ \xi = 1 & \Rightarrow \quad \gamma > 2^{2/3} \quad (III) \end{cases} \tag{۷۲.۴}$$

سه حالت (I) ، (II) و (III) به ترتیب متناظر با حالت نرمال (جواب همسانگرد)، قطبش نسبی (فرومغناطیس ضعیف) و قطبش کامل (فرومغناطیس قوی) هستند و نمودار مربوط به پاشندگی الکترون‌ها در هر حالت در شکل(۲.۴) نشان داده شده است. منحنی قطبش در مدل هابارد برای چگالی‌های فلزی نیز در شکل(۳.۴) نشان داده شده است. با توجه به نمودارها و روابط بدست آمده نتیجه می‌گیریم که یک مقدار بحرانی برای کمیت γ وجود دارد که برابر با $\frac{4}{3}$ است و مرز بین حالت مفناطیسی و غیر مغناطیسی را بیان می‌کند، به عبارت دیگر می‌توان کمینه‌ای برای پتانسیل در نظر گرفت، یعنی داریم:



شکل ۲.۴: سه جواب ممکن برای مدل هابارد



شکل ۳.۴: منحنی قطبش در مدل هابارد برای چگالی‌های فلزی.

$$\frac{۲m}{\hbar^۲}\,\frac{U}{(۳\pi^۲)^{۲/۳}}\,n^{۱/۳} > \frac{۴}{۳} \tag{۷۳.۴}$$

$$\Longrightarrow U > U_c \tag{۷۴.۴}$$

فلزی که برهم‌کنش‌هایش استتار شده باشد، اگر U آن در رابطه‌ی فوق صدق کند، می‌تواند از خود مغناطش نشان بدهد. به عبارت دیگر در چنین سیستم‌هایی انرژی کل زمانی کمینه می‌شود که اختلافی بین چگالی الکترون‌های با اسپین بالا و پایین وجود داشته باشد.

تمرین: مدل هابارد را برای شبکه مربعی به‌کار ببرید و کلیه نتایج مربوطه را بیان کنید.

فصل ۵

وابستگی زمانی در نظریه‌ی کوانتومی

تا کنون مسائلی را مطالعه کردیم که در آن‌ها هامیلتونی مستقل از زمان بود و نظریه‌ی میدان میانگین مستقل از زمان را مطرح کردیم، حال می‌خواهیم تحول زمانی را در سیستم‌ها در نظر بگیریم. تحول زمانی را می‌توان با سه تصویر شرودینگر، هایزنبرگ و برهمکنشی (یا دیراک) مطالعه کرد که در ادامه به بیان آن‌ها می‌پردازیم:

۱.۵ تصویر شرودینگر

در این تصویر تابع موج به زمان وابسته است و عملگرها ممکن هست مستقل از زمان باشند یا نه.
معادله‌ی شرودینگر در این تصویر به صورت زیر است:

$$i\hbar\,\partial_t\,|\psi(t)>= H\,|\psi(0)> \quad (\hbar = 1) \tag{۱.۵}$$

و به‌طور کلی می‌توان گفت:

$$\begin{cases} |\psi(t)>= e^{-iHt}\,|\psi(t)> \\ \quad A : is\ a\ operator \\ \quad H : \quad \partial_t H = 0 \end{cases} \tag{۲.۵}$$

۲.۵ تصویر هایزنبرگ

ایده اصلی در این تصویر این است که تابع موج مستقل از زمان باشد و تمام تحولات زمانی را در عملگرها قرار دهیم. به‌طور خلاصه داریم:

$$\begin{cases} |\psi(t) >= |\psi(0) > \\ A(t) = e^{iHt}\, A(0)\, e^{-iHt} \\ H : \quad \partial_t H = 0 \end{cases} \qquad (۳.۵)$$

در این تصویر با مشتق‌گیری زمانی از عملگرها به معادله‌ی حرکت هایزنبرگ خواهیم رسید؛ یعنی داریم:

$$\frac{\partial\, A(t)}{\partial t} = iH\, e^{iHt}\, A(0)\, e^{-iHt} - e^{iHt}\, A(0)\, iH\, e^{-iHt} = i[H, e^{iHt}\, A(0)\, e^{-iHt}]$$

$$\Rightarrow \quad \partial_t A(t) = \dot{A(t)} = i[H, A(t)] \qquad (۴.۵)$$

۳.۵ تصویر برهمکنشی

هرگاه هامیلتونی وابسته به زمان باشد از این تصویر استفاده می‌کنیم. در این صورت هامیلتونی کل را می‌توان به‌صورت حاصل جمع یک بخش مستقل از زمان H_0 و وابسته به زمان نوشت، داریم:

$$H = H_0 + V(t) \qquad (۵.۵)$$

که در آن:

$$H_0\, |n_0 >= \varepsilon_{n_0}\, |n_0 > \qquad (۶.۵)$$

به‌طور خلاصه برای تابع موج و عملگرها در این تصویر داریم:

$$\begin{cases} |\hat{\psi}(t) >= e^{-iH_0 t}\, |\psi(t) > \\ A(t) = e^{iH_0 t}\, A(0)\, e^{-iH_0 t} \\ H_0 : \quad \partial_t H_0 = 0 \qquad \partial_t H = \partial_t V \neq 0 \end{cases} \qquad (۷.۵)$$

عملگر $A(\circ)$ در رابطه‌ی فوق، همان عملگر در تصویر شرودینگر است. هرگاه $V(t) = \circ$ باشد آنگاه تصویر برهمکنشی معادل با تصویر هایزنبرگ خواهد شد. با مشتق‌گیری از تابع موج داریم:

$$
\begin{aligned}
i\,\partial_t\,|\hat{\psi}(t)> &= i\,\partial_t\,(e^{iH_\circ t}\,|\psi(t)>) \\
&= -\,H_\circ\,e^{iH_\circ t}\,|\psi(t)> \;+\; e^{iH_\circ t}\,i\partial_t\,|\psi(t)> \\
&= -\,e^{iH_\circ t}\,H_\circ\,|\psi(t)> \;+\; e^{iH_\circ t}\,H|\psi(t)> \\
&= e^{iHt}\,(-H_\circ + H)\,e^{-iHt}\,e^{iHt}\,|\psi(t)> \\
&= \hat{V}(t)\,|\psi(t)> \qquad (۸.۵)
\end{aligned}
$$

(۹.۵)

رابطه‌ی فوق به این معناست که تحول زمانی در تصویر برهمکنش تنها به بخش وابسته به زمان هامیلتونی بستگی دارد. در ادامه می‌خواهیم عملگر یکانی مناسبی برای تحول زمانی بیابیم. ابتدا تصویر شرودینگر را در نظر می‌گیریم. تابع موج رابطه‌ی ۱.۵ را می‌توان به‌صورت زیر در نظر گرفت:

$$
|\psi(t)> \;=\; U(t,t_\circ)\,|\psi(t_\circ)> \qquad (۱۰.۵)
$$

با مشتق‌گیری زمانی از آن داریم:

$$
\begin{aligned}
i\,\partial_t\,|\psi(t)> \;&=\; (i\,\partial_t\,U(t,t_\circ)\,|\psi(t_\circ)> \\
\Rightarrow\; H\,|\psi(t)> \;&=\; i\,\partial_t\,U(t,t_\circ)\,|\psi(t_\circ)> \\
\Rightarrow\; H\,U(t,t_\circ)\,|\psi(t_\circ)> \;&=\; i\,\partial_t\,U(t,t_\circ)\,|\psi(t_\circ)> \\
\Rightarrow\; H\,U(t,t_\circ) \;&=\; i\,\partial_t\,U(t,t_\circ) \\
\Rightarrow\; \int_{t_\circ}^{t} \frac{dU(t,t_\circ)}{U(t,t_\circ)} \;&=\; -\,iH\,\int_{t_\circ}^{t} dt \\
\Rightarrow\; U(t,t_\circ) \;&=\; e^{-iH(t-t_\circ)} \qquad (۱۱.۵)
\end{aligned}
$$

با جایگذاری رابطه‌ی ۱۱.۵ در رابطه‌ی ۱۰.۵ خواهیم داشت:

$$|\psi(t)> \;=\; e^{-iH(t-t_\circ)}\,|\psi(t_\circ)> \qquad (۱۲.۵)$$

حال محاسبات مشابهی را برای تابع موج تصویر برهمکنشی انجام می‌دهیم. فرض می‌کنیم تابع موج در تصویر برهمکنشی به‌صورت زیر باشد:

$$|\hat{\psi}(t) \;=\; \hat{U}(t,t_\circ)\,|\hat{\psi}(t)> \qquad (۱۳.۵)$$

با جایگذاری رابطه‌ی ۷.۵ و سپس جایگذاری رابطه‌ی ۱۲.۵ در رابطه‌ی فوق خواهیم داشت:

$$e^{iH_\circ t}\,e^{iH(t-t_\circ)}\,|\psi(t_\circ)> \;=\; \hat{U}(t,t_\circ)\,e^{iH_\circ t}\,|\psi(t)> \Rightarrow\; e^{iH_\circ t}\,e^{iH(t-t_\circ)}\,e^{-iH_\circ t} \;=\; \hat{U}(t,t_\circ)$$

با استفاده از رابطه‌ی ۱۱.۵ و رابطه‌ی فوق نتیجه می‌گیریم:

$$\hat{U}(t,t_\circ) \;=\; e^{iH_\circ t}\,U(t,t_\circ)\,e^{-iH_\circ t} \qquad (۱۴.۵)$$

حال از رابطه‌ی ۱۳.۵ نسبت به زمان مشتق می‌گیریم:

$$i\partial_t\,|\hat{\psi}(t) \;=\; (i\partial_t\,\hat{U}(t,t_\circ))\,|\hat{\psi}(t_\circ) \qquad (۱۵.۵)$$

با استفاده از رابطه‌ی ۷.۵ و سپس رابطه‌ی ۱۳.۵ برای سمت چپ رابطه‌ی فوق خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \hat{V}(t)\,\hat{U}(t,t_\circ)\,|\hat{\psi}(t) \;&=\; (i\partial_t\,\hat{U}(t,t_\circ))\,|\hat{\psi}(t_\circ) \\ \Rightarrow\; i\partial_t\,\hat{U}(t,t_\circ) \;&=\; \hat{V}(t)\,\hat{U}(t,t_\circ) \qquad (۱۶.۵) \end{aligned}$$

با استفاده از شرط بدیهی $\hat{U}(t_\circ,t_\circ) = ۱$ از رابطه‌ی فوق نسبت به زمان $t_۱$ انتگرال می‌گیریم:

$$\begin{aligned} \int_{t_\circ}^{t} dt_۱\,\partial_{t_۱}\,\hat{U}(t_۱,t_\circ) \;&=\; \frac{۱}{i}\int_{t_\circ}^{t} dt_۱\,\hat{V}(t_۱)\,\hat{U}(t_۱,t_\circ) \\ \Rightarrow\; \hat{U}(t,t_\circ) - \hat{U}(t_\circ,t_\circ) \;&=\; \frac{۱}{i}\int_{t_\circ}^{t} dt_۱\,\hat{V}(t_۱)\,\hat{U}(t_۱,t_\circ) \\ \Rightarrow\; \hat{U}(t,t_\circ) \;&=\; ۱ + \frac{۱}{i}\int_{t_\circ}^{t} dt_۱\,\hat{V}(t_۱)\,\hat{U}(t_۱,t_\circ) \qquad (۱۷.۵) \end{aligned}$$

حال اگر به‌طور بازگشتی تحول زمانی را جایگذاری کنیم، خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}\hat{U}(t,t_0) \;=\; 1 \;+\; \frac{1}{i}\int_{t_0}^{t} dt_1\,\hat{V}(t_1)\,\{1 \;+\; \frac{1}{i}\int_{t_0}^{t_1} dt_2\,\hat{V}(t_2)\\ [1 \;+\; \frac{1}{i}\int_{t_0}^{t_2} dt_3\,\hat{V}(t_3)\,\hat{U}(t_3,t_0)]\}\end{aligned} \qquad (۱۸.۵)$$

$$\begin{aligned}\hat{U}(t,t_0) \;=&\; 1 \;+\; (\frac{1}{i})^1\int_{t_0}^{t} dt_1\,\hat{V}(t_1)\\ &+\;(\frac{1}{i})^2\int_{t_0}^{t} dt_1\,\hat{V}(t_1)\int_{t_0}^{t_1} dt_2\,\hat{V}(t_2) \;+\; \ldots\end{aligned} \qquad (۱۹.۵)$$

حال به حل انتگرال جمله‌ی سوم رابطه‌ی فوق می‌پردازیم، با تغییر انتگرال ها می‌توان انتگرال را به‌صورت مجموع دو انتگرال در فضای مثلثی در صفحه‌ی مختصات $(t_1 \;-\; t_2)$ نوشت، یعنی داریم:

$$\begin{aligned}&(\frac{1}{i})^2\int_{t_0}^{t} dt_1\,\hat{V}(t_1)\int_{t_0}^{t_1} dt_2\,\hat{V}(t_2) \;=\\ &\frac{1}{2}(\frac{1}{i})^2\int_{t_0}^{t} dt_1\,\hat{V}(t_1)\int_{t_0}^{t_1} dt_2\,\hat{V}(t_2) \;+\; \frac{1}{2}(\frac{1}{i})^2\int_{t_0}^{t} dt_2\,\hat{V}(t_2)\int_{t_0}^{t_2} dt_1\,\hat{V}(t_1)\end{aligned} \qquad (۲۰.۵)$$

حال با ضرب کردن توابع پله‌ای می‌توان کران دو انتگرال را مشابه هم کرد و بنابراین انتگرال را در فضایی مربعی انجام داد:

$$\begin{aligned}\Rightarrow\;&(\frac{1}{i})^2\int_{t_0}^{t} dt_1\,\hat{V}(t_1)\int_{t_0}^{t_1} dt_2\,\hat{V}(t_2) \;=\\ &\frac{1}{2}(\frac{1}{i})^2\int_{t_0}^{t} dt_1\int_{t_0}^{t} dt_2\{\,\theta(t_1-t_2)\hat{V}(t_1)\;\hat{V}(t_2)\\ &+\;\theta(t_2-t_1)\,\hat{V}(t_2)\,\hat{V}(t_1)\}\end{aligned} \qquad (۲۱.۵)$$

با توجه به تعریف کلی ترتیب زمانی:

$$T_t\, \hat{A}(t_۱)\, \hat{B}(t_۲) \;=\; \theta(t_۱ - t_۲)\, \hat{A}(t_۱)\, \hat{B}(t_۲) \;\pm\; \theta(t_۲ - t_۱)\, \hat{B}(t_۲)\, \hat{A}(t_۱) \qquad (۲۲.۵)$$

که در آن علامت‌های مثبت و منفی به ترتیب براب بوزون‌ها و فرمیون‌هاست. با در نظر گرفتن حالت فرمیونی رابطه‌ی ۳.۵ به شکل زیر در می‌آید:

$$\frac{۱}{۲!}\,(\frac{۱}{i})^{۲}\; \int_{t_۰}^{t} dt_۱\; \int_{t_۰}^{t} dt_۲\; T_t\, \hat{V}(t_۱)\, \hat{V}(t_۲) \qquad (۲۳.۵)$$

بنابراین رابطه‌ی تحول زمانی به شکل زیر است:

$$\begin{aligned} \hat{U}(t,t_۰) \;=\; & ۱ \;+\; (\frac{۱}{i})^{۱}\; \int_{t_۰}^{t} dt_۱\; \hat{V}(t_۱) \\ & +\; \frac{۱}{۲!}\,(\frac{۱}{i})^{۲}\; \int_{t_۰}^{t} dt_۱\; \int_{t_۰}^{t} dt_۲\; T_t\, \hat{V}(t_۱)\, \hat{V}(t_۲) \\ & +\; \frac{۱}{۳!}\,(\frac{۱}{i})^{۳}\; \int_{t_۰}^{t} dt_۱\; \int_{t_۰}^{t} dt_۲\; \int_{t_۰}^{t} dt_۳\; T_t\, \hat{V}(t_۱)\, \hat{V}(t_۲)\, \hat{V}(t_۳) \;+\; \ldots \end{aligned} \qquad (۲۴.۵)$$

و به‌طور کلی داریم:

$$\hat{U}(t,t_۰) \;= \sum_{n=۰}^{\infty}\; \frac{۱}{n!}(\frac{۱}{i}\int_{t_۰}^{t} dt'\; T_t\; (\hat{V}(t')))^{n} \;=\; T_t(exp\{\frac{۱}{i}\; \int_{t_۰}^{t} dt'\; \hat{V}(t')\}) \qquad (۲۵.۵)$$

رابطه‌ی فوق برای تحول زمانی نقطه‌ی شروع نظریه‌ی اختلال مرتبه‌ی نامتناهی و مفهوم دیاگرام‌های فاینمن است. در مبحث پاسخ خطی که برای پتانسیل اختلالی بسیار کوچک برقرار است، تنها تا مرتبه‌ی اول تحول زمانی را در نظر می‌گیریم.

۴.۵ عملگرهای خلق و فنای وابسته به زمان

ابتدا ساده‌ترین هامیلتونی غیربرهمکنشی را در نظر می‌گیریم، که برای آن تصویر هایزنبرگ و برهمکنشی معادل با هم هستند. هامیلتونی زیر را در نظر می‌گیریم:

$$H_\circ = \sum_\nu \varepsilon_\nu \, a_\nu^\dagger a_\nu \tag{۲۶.۵}$$

با استفاده از معادله‌ی حرکت هایزنبرگ (رابطه‌ی ۴.۵) می‌توان گفت:

$$i\,\partial_t a_\nu^\dagger = [a_\nu^\dagger, H_\circ] = \sum_\mu \varepsilon_\mu \, [a_\nu^\dagger, a_\mu^\dagger a_\mu] \tag{۲۷.۵}$$

برای ادامه‌ی محاسبات از روابط جابجاگری زیر استفاده می‌کنیم:

$$\begin{aligned} [A\,,\ BC] &= [A,B]C \, + \, B[A,C] \\ &\{A,B\}C \, - \, B\{A,C\} \end{aligned} \tag{۲۸.۵}$$

$$\begin{aligned} [AB\,,\ C] &= A[B,C] \, + \, [A,C]B \\ &A\{B,C\}C \, - \, \{A,C\}B \end{aligned} \tag{۲۹.۵}$$

روابط فوق کلی است ولی با توجه به اینکه جبر جابجایی و پادجابجایی به ترتیب برای عملگرهای خلق و فنای بوزونی و فرمیونی برقرار است، در هر مورد از روابط مناسب استفاده خواهیم کرد. در ادامه تنها با عملگرهای فرمیونی کار می‌کنیم. با استفاده از رابطه‌ی دوم ۲۸.۵ ، رابطه‌ی ۲۷.۵ به شکل زیر خواهد شد:

$$\begin{aligned} i\,\partial_t a_\nu^\dagger &= \sum_\mu \varepsilon_\mu \, \{a_\nu^\dagger, a_\mu^\dagger\}a_\mu \, - \, a_\mu^\dagger\{a_\nu^\dagger, a_\mu\} \, = \, - \, a_\mu^\dagger \, \delta_{\mu\nu} \\ &\Rightarrow \frac{a_\nu^\dagger(t)}{a_\nu^\dagger(t)} = i\varepsilon_\nu \, \partial t \\ a_\nu^\dagger(t) &= e^{i\varepsilon_\nu t} \, a_\nu^\dagger \end{aligned} \tag{۳۰.۵}$$

با انجام محاسبات مشابه برای تحول زمانی عملگر فنای فرمیونی سیستم بدون برهمکنشی نیز خواهیم داشت:

$$a_\nu(t) \;=\; e^{-i\varepsilon_\nu t}\, a_\nu \qquad (۳۱.۵)$$

حال فرض می‌کنیم که یک برهمکنش ضعیف به شکل زیر به سیستم اضافه کرده‌ایم، یعنی هامیلتونی کل به شکل زیر است:

$$H \;=\; H_{۰} \;+\; \gamma H_{۰} \qquad\qquad \gamma \ll ۱ \qquad (۳۲.۵)$$

چون هامیلتونی $H_{۰}$ را قطری کرده‌ایم پس ویژه مقادیر سیستم به شکل زیر خواهند بود:

$$< H > \;=\; (۱ + \gamma)\,\varepsilon \qquad\qquad \varepsilon \;=\; < H_{۰} > \qquad (۳۳.۵)$$

حال تحول زمانی یک حالت دلخواه از هامیلتونی کل را در تصویر برهمکنشی بررسی می‌کنیم:

$$|\hat{\nu}(t) > \;=\; e^{iH_{۰}t}\, |\hat{\nu}(t) > \qquad (۳۴.۵)$$

و از تصویر شرودینگر نیز می‌دانیم:

$$|\nu(t) > \;=\; e^{-iHt}\, |\nu(t) > \;=\; e^{-i\varepsilon_\nu (۱+\gamma) t} |\nu > \qquad (۳۵.۵)$$

و با تلفیق دو رابطه‌ی فوق داریم:

$$|\hat{\nu}(t) > \;=\; e^{i\varepsilon_\nu t} |\nu > \; e^{-i\varepsilon_\nu (۱+\gamma) t} |\nu > \;=\; e^{-i\gamma\,\varepsilon_\nu t} |\nu > \qquad (۳۶.۵)$$

از رابطه‌ی فوق نتیجه می‌شود که در حضور برهمکنش، عبارت توان فاز فوق بسیار کوچک است و این فاز به کندی به سمت صفر می‌رود، در غیاب برهمکنش، ضریب $e^{i\varepsilon_\nu t}$ را داشتیم که فرکانس بالایی دارد. بنابراین هامیلتونی کل را می‌توان به چهار بخش تقسیم کرد:

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} H_{LL} & H_{LH} \\ H_{HL} & H_{HH} \end{pmatrix} \qquad (۳۷.۵)$$

و ایده این است که در صورت قطری بودن هامیلتونی مختل نشده (H_0) و نیز در حضور برهمکنش ضعیف می‌توان هامیلتونی بخش فرکانس بالا را حذف کنیم و تنها بخش فرکانس پایین (H_{LL}) را می‌یابیم، به این عمل بازبهنجارش می‌گویند که باعث ساده‌تر شدن محاسبات می‌شود. حال یک برهمکنش کلی را به هامیلتونی اضافه می‌کنیم، همانطور که قبلا هم دیدیم، هامیلتونی کل به شکل زیر خواهد بود:

$$H \;=\; H_0 \;+\; H_1 \;=\; \sum_{\mu} \varepsilon_\mu\, a_\mu^\dagger\, a_\mu \;+\; \sum_{\mu_1 \mu_2 q} V_q\, a_{\nu_2+q}^\dagger\, a_{\nu_1-q}^\dagger\, a_{\nu_1}\, a_{\nu_2} \qquad (۳۸.۵)$$

برای یافتن تحول زمانی عملگرها، مشابه قبل از معادله‌ی حرکت هایزنبرگ (رابطه‌ی ۴.۵) استفاده می‌کنیم:

$$\begin{aligned}
\partial_t a_\nu \;&=\; -i\,[a_\nu, H_0] \;-i\,[a_\nu, H_1] \\
&=\; -i \sum_{\mu} \varepsilon_\mu\,[a_\nu, a_\mu^\dagger\, a_\mu] \;-i \sum_{\mu_1\mu_2 q} V_q\,[a_\nu\;,\; a_{\nu_2+q}^\dagger\, a_{\nu_1-q}^\dagger\, a_{\nu_1}\, a_{\nu_2}] \\
&= -i \sum_{\mu} \varepsilon_\mu\, a_\mu\, \delta_{\mu\nu} \\
&\quad -i \sum_{\mu_1\mu_2 q} V_q\,\big(\,[a_\nu\;,\; a_{\nu_2+q}^\dagger\, a_{\nu_1-q}^\dagger]\, a_{\nu_1}\, a_{\nu_2} \;+\; a_{\nu_2+q}^\dagger\, a_{\nu_1-q}^\dagger\,[a_\nu\;,\; a_{\nu_1}\, a_{\nu_2}]\,\big) \\
&=\; -i\,\varepsilon_\nu\, a_\nu \;-i \sum_{\mu_1\mu_2 q} \big(V_q\,\delta_{\nu,\nu_2+q}\, a_{\nu_1-q}^\dagger\, a_{\nu_1}\, a_{\nu_2} \;-\; V_q\,\delta_{\nu,\nu_1-q}\, a_{\nu_2+q}^\dagger\, a_{\nu_1}\, a_{\nu_2}\,\big) \\
&=\; -i\,\varepsilon_\nu\, a_\nu \;-i \sum_{\mu_1\mu_2} \big(V_{\nu-\nu_2}\, a_{\nu_1+\nu_2-\nu}^\dagger \;-\; V_{\nu_1-\nu}\, a_{\nu_2+\nu_1-\nu}^\dagger\,\big)\, a_{\nu_1}\, a_{\nu_2}
\end{aligned}$$

$$\dot{a}_\nu \;=\; -i\,\varepsilon_\nu\, a_\nu \;-i \sum_{\mu_1\mu_2} \big(V_{\nu-\nu_2} \;-\; V_{\nu_1-\nu}\,\big)\, a_{\nu_1+\nu_2-\nu}^\dagger\;\; a_{\nu_1}\, a_{\nu_2} \qquad (۳۹.۵)$$

هر سه عملگری که در جمله‌ی دوم رابطه‌ی فوق ظاهر شده‌اند به زمان وابسته هستند و محاسبه‌ی دینامیک آن‌ها پیچیده است، زیرا با نوشتن معادله‌ی حرکت هایزنبرگ برای این سه به یک حاصل ضرب پنج‌تایی از عملگرها می‌رسیم و مسئله پیچیده‌تر می‌شود. در فصل بعد راجع به تقریب‌هایی

حرف می‌زنیم که بتوان این‌ها را ساده کرد. تابع پله‌ای را می‌توان بصورت زیر نشان داد:

$$\alpha(t)_{\eta\to 0^+} \;=\; \frac{i}{2\pi}\int d\omega\,\frac{e^{-i\omega t}}{\omega+i\eta-\nu} \tag{۴۰.۵}$$

این انتگرال را با استفاده از حساب مانده‌ها می‌توان محاسبه کرد. قطب با ریشه‌ی مخرج برابر با $\omega=\nu-i\eta$ است و بنابراین در پایین محور حقیقی قرار دارد. برای زمان های $t<0$ باید پربند را در بالای محور حقیقی در نظر گرفت که شامل قطب نیست و در نتیجه حاصل انتگرال صفر می‌شود. برای $t>0$، باید پربند را در پایین محور حقیقی در نظر گرفت که به جواب غیر صفر منجر می‌شود، بنابراین به‌طور کلی داریم:

$$\alpha(t) \;=\; \begin{cases} 0 & t<0 \\ -\frac{i}{2\pi}\,(2\pi i)\,e^{-it(\nu-i\eta)} & t>0 \end{cases}$$

$$\alpha(t) \;=\; \begin{cases} 0 & t<0 \\ e^{-it(\nu-i\eta)} & t>0 \end{cases} \tag{۴۱.۵}$$

در این درس معمولاً باید توابعی به شکل $C(t) \;=\; \theta(t)\,g(t)$ را محاسبه کنیم که وجود تابع پله‌ای باعث می‌شود در زمان‌های منفی صفر باشد و برای اینکه در زمان‌های بینهایت بزرگ نیز صفر شود به عامل $e^{-\eta t}$ نیاز داریم. به‌طور کلی می‌توان گفت که قطبی که در زیر محور حقیقی است به معنای علیت است. بنابراین ایده‌ی کلی این است که هرگاه خواستیم در سیستم‌های بس‌ذره‌ای تبدیل فوریه بزنیم باید عامل فوق را نیز اضافه کنیم تا در زمان‌های بزرگ میرایی صورت گیرد و علیت با تأخیری بودن لحاظ شده باشد و در انتها η را به سمت صفر میل می‌دهیم. رابطه‌ی تبدیل فوریه به شکل زیر خواد شد:

$$C(\omega) \;=\; \int \; e^{i(\omega+i\eta)t}\,C(t) \tag{۴۲.۵}$$

فصل ۶
تئوری پاسخ خطی

۱.۶ فرمول کوبو

تئوری پاسخ خطی [۱] بیان می‌کند که پاسخ یک سیستم به یک اختلال ضعیف خارجی متناسب با اختلال است. اکنون یک سیستم کوانتومی را در نظر می‌گیریم که با هامیلتونیِ مستقل از زمان $H_{\circ}$ توصیف می‌شود. در این صورت مقدار انتظاری عملگر A به صورت زیر خواهد بود:

$$
\begin{aligned}
\langle A\rangle_{\circ} &= \frac{۱}{Z_{\circ}}\, Tr(\rho_{\circ}\, A) \\
&= \frac{۱}{Z_{\circ}}\, Tr(e^{-\beta H_{\circ}}\, A) \\
&= \frac{۱}{Z_{\circ}} \sum_{n} \langle n|e^{-\beta H_{\circ}} A|n\rangle \\
&= \frac{۱}{Z_{\circ}} \sum_{n} e^{-\beta E_{n}} \langle n|A|n\rangle
\end{aligned}
\tag{۱.۶}
$$

اندیس "$\circ$" تاکید می‌کند که روابط بالا نسبت به حالت پایه‌ی هامیلتونی $H_{\circ}$ محاسبه می‌شوند. هم‌چنین $Z_{\circ} = Tr(\rho_{\circ})$ تابع پارش است و $\{|n\rangle\}$ مجموعه‌ای کامل از ویژه‌حالت‌های هامیلتونی هستند.

حال فرض می‌کنیم در زمان $t = t_{\circ}$ یک اختلال خارجی به سیستم اعمال می‌شود. این اختلال

[۱] Linear response theory

خارجی را که باعث می‌شود سیستم از حالت تعادل خارج شود با $H'(t)$ نمایش می‌دهیم.

$$H = H_\circ + H'(t)\,\theta(t - t_\circ) \qquad (۲.۶)$$

اکنون قصد داریم که مقدار انتظاری عملگر A را در زمان t بزرگ‌تر از $t_\circ$ (در حضور اختلال) بیابیم.

$$\langle A\rangle = \frac{۱}{Z_\circ}\sum_n \langle n(t)|e^{-\beta H}A|n(t)\rangle = \frac{۱}{Z_\circ}\sum_n e^{-\beta E_n}\,\langle n(t)|A|n(t)\rangle \qquad (۳.۶)$$

به دلیل این‌که H' اختلال کوچکی می‌باشد از تصویر برهم‌کنش برای توصیف تحول زمانی ویژه‌حالت هامیلتونی استفاده می‌کنیم.

$$\begin{aligned}|n(t)\rangle &= e^{-iH_\circ t}\,|\hat{n}(t)\rangle\\ &= e^{-iH_\circ t}\,\hat{U}(t,t_\circ)\,|\hat{n}(t_\circ)\rangle\\ &= e^{-iH_\circ t}\Big(۱ - i\int_{t_\circ}^{t} dt'\,\hat{H}'(t')\Big)|\hat{n}(t_\circ)\rangle \qquad (۴.۶)\end{aligned}$$

هم‌چنین توجه می‌کنیم که

$$|\hat{n}(t_\circ)\rangle = e^{iH_\circ t_\circ}\,|n(t_\circ)\rangle = |n\rangle \qquad (۵.۶)$$

بنابراین بدست می‌آوریم:

$$\begin{aligned}\langle A\rangle = \frac{۱}{Z_\circ}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n| &\Big(۱ + i\textstyle\int_{t_\circ}^{t} dt'\,\hat{H}'(t')\Big)e^{iH_\circ t}\,A\,e^{-iH_\circ t}\\ &\times\Big(۱ - i\textstyle\int_{t_\circ}^{t} dt'\,\hat{H}'(t')\Big)|n\rangle\end{aligned} \qquad (۶.۶)$$

مقدار انتظاری بالا تا مرتبه‌ی اول اختلال به صورت زیر درمی‌آید:

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \frac{۱}{Z_\circ}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|e^{iH_\circ t}\,A\,e^{-iH_\circ t}|n\rangle\\ &+ \frac{۱}{Z_\circ}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\,i\int_{t_\circ}^{t} dt'\,\hat{H}'(t')\,e^{iH_\circ t}\,A\,e^{-iH_\circ t}|n\rangle\\ &- \frac{۱}{Z_\circ}\sum_n e^{-\beta E_n}\langle n|\,e^{iH_\circ t}\,A\,e^{-iH_\circ t}\,i\int_{t_\circ}^{t} dt'\,\hat{H}'(t')|n\rangle\end{aligned}$$

با توجه به این‌که تحول زمانی عملگر A در تصویر برهم‌کنش بصورت زیر است، برای مقدار انتظاری خواهیم داشت:

$$\hat{A}(t) = e^{iH_\circ t}\, A\, e^{-iH_\circ t}$$

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle A \rangle_\circ - i \int_{t_\circ}^{t} dt' \, \frac{1}{Z_\circ} \sum_n e^{-\beta E_n} \, \langle n | [\hat{A}(t), \hat{H}'(t')] | n \rangle \\ &= \langle A \rangle_\circ - i \int_{t_\circ}^{t} dt' \, \left\langle [\hat{A}(t), \hat{H}'(t')] \right\rangle_\circ \end{aligned} \tag{۷.۶}$$

اکنون کمیتی به نام تابع همبستگی تاخیری [۲] به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$C^R_{AH'}(t,t') = -i\theta(t-t') \left\langle [\hat{A}(t), \hat{H}'(t')] \right\rangle_\circ \tag{۸.۶}$$

که در آن میانگین‌گیری نسبت به هامیلتونی غیراختلالی محاسبه می‌شود.

$$\langle \delta A \rangle = \langle A \rangle - \langle A \rangle_\circ = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \, C^R_{AH'}(t,t') \, e^{-\eta(t-t')} \tag{۹.۶}$$

رابطه‌ی بالا فرمول کوبو [۳] است که پاسخ خطی به یک اختلال را بیان می‌کند. فاکتور $e^{-\eta(t-t')}$ با پارامتر بی‌نهایت کوچک و مثبت η بیانگر این است که پاسخ سیستم در زمان t ناشی از اختلال در زمان t' برای $t \gg t'$ افت می‌کند.

۲.۶ فرمول کوبو در فضای فرکانس

فرض می‌کنیم اختلال به صورت زیر باشد:

$$\hat{H}'_B(t) = \hat{B} f(t) \tag{۱۰.۶}$$

[۲] Retarded correlation function
[۳] Kubo formula

B عملگری مستقل از زمان می‌باشد و $f(t)$ تابعی وابسته به زمان. در نتیجه خواهیم داشت:

$$C^R_{AH'_B}(t,t') = C^R_{AB}(t-t')f(t') \tag{۱۱.۶}$$

نشان دادن این‌که تابع همبستگی تابعی از $t-t'$ است را به عهده‌ی خواننده می‌گذاریم. اکنون تابع پاسخ خطی به صورت زیر در می‌آید:

$$\langle \delta A \rangle = \int dt' C^R_{AB}(t-t')f(t') \tag{۱۲.۶}$$

عبارت بالا convolution دو تابع f و C^R_{AB} است. بنابراین تبدیل فوریه‌ی آن به صورت زیر خواهد بود:

$$\delta\langle A(\omega)\rangle = C^R_{AB}(\omega)f(\omega) \tag{۱۳.۶}$$

اگر اختلال وارد شده به سیستم هم به مکان و هم به جهت بستگی داشته باشد، روابط بالا به صورت زیر در می‌آید:

$$H'_B(t) = \sum_\alpha \int d\mathbf{r}\ B^\alpha(\mathbf{r})\ f_\alpha(\mathbf{r},t) \tag{۱۴.۶}$$

$$\delta\langle A(\omega)\rangle = \sum_\alpha \int d\mathbf{r}\ C^R_{AB^\alpha(\mathbf{r})}(\omega)\ f_\alpha(\mathbf{r},t) \tag{۱۵.۶}$$

۳.۶ فرمول کوبو برای رسانش

اگر به یک سیستم الکترونی میدان الکترومغناطیسی اعمال شود، میدان در سیستم جریان القا می‌کند و رسانش ضریب پاسخ خطی سیستم به اختلال اعمال شده است. در حالت کلی رسانش در زمان و مکان غیر موضعی است یعنی جریان J_e در مکان $\mathbf{r}$ و زمان r به میدان الکتریکی در مکان $\mathbf{r}'$ و زمان t' وابسته است.

$$J_e(\mathbf{r},t) = \int dt' \int d\mathbf{r}' \sum_\beta\ \sigma^{\alpha\beta}(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t')\ E^\beta(\mathbf{r}',t') \tag{۱۶.۶}$$

در رابطه‌ی بالا $\sigma^{\alpha\beta}$ تانسور رسانش است که پاسخ جریان در جهت $\hat{e}_\alpha$ به میدان الکتریکی در جهت $\hat{e}_\beta$ است.

در پیمانه‌ای که در آن پتانسیل الکتریکی صفر است، میدان الکتریکی با رابطه‌ی زیر داده می‌شود.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = -\partial_t \mathbf{A}_{\text{ext}}(\mathbf{r},t) \tag{۶.۱۷}$$

که در آن A_{ext} پتانسیل برداری است. برای سیستمی از الکترون‌ها جریان به صورت زیر است:

$$J_e(\mathbf{r}) = \sum_i q_i \; J_i(\mathbf{r}) = -e\langle J\rangle \tag{۶.۱۸}$$

جمله‌ی اختلالی هامیلتونی ناشی از میدان الکترومغناطیسی خارجی با جفت‌شدگی الکترون‌ها به پتانسیل برداری داده می‌شود:

$$H'(t) = e\int d\mathbf{r}\; J(\mathbf{r}).A_{\text{ext}}(\mathbf{r},t) \tag{۶.۱۹}$$

نکته‌ی قابل توجه این است که اگر چه در پیمانه‌ی خاصی هستیم ولی نتیجه نباید به پیمانه بستگی داشته باشد.

از طرفین عبارت (۶.۱۷) تبدیل فوریه می‌گیریم:

$$\begin{aligned}\int \frac{d\omega}{۲\pi}\, e^{-i\omega t} E^{\alpha}(\omega) &= -\partial_t \int \frac{d\omega}{۲\pi}\, e^{-i\omega t} A_\alpha(\omega) \\ &= \int \frac{d\omega}{۲\pi}\,(i\omega t) A_\alpha(\omega)\end{aligned} \tag{۶.۲۰}$$

بنابراین بدست می‌آوریم:

$$E^{\alpha}_{\omega} = (i\omega t) A_\alpha(\omega) \tag{۶.۲۱}$$

در نتیجه هامیلتونی اختلال به صورت زیر در می‌آید:

$$H'(\omega) = \frac{e}{i\omega}\int d\mathbf{r} J(\mathbf{r}).E_{\text{ext}}(\mathbf{r},\omega) \tag{۶.۲۲}$$

با توجه به رابطه‌ی بالا برای پاسخ خطی سیستم داریم:

$$\delta\langle J(\mathbf{r},\omega)\rangle = \frac{e}{i\omega}\int d\mathbf{r}'\sum_{\beta} C^{R}_{J_\alpha(\mathbf{r})J_\beta(\mathbf{r}')}(\omega)\; E^{\beta}_{\text{ext}}(\mathbf{r}',\omega) \tag{۲۳.۶}$$

اکنون به رابطه‌ی (۱۶.۶) بازمی‌گردیم. در این رابطه $\sigma^{\alpha\beta}$ دارای وابستگی زمانی به صورت $t-t'$ می‌باشد. بنابراین این رابطه convolution دو تابع است و تبدیل فوریه‌ی آن به صورت زیر خواهد بود.

$$J^{\alpha}_{e}(\mathbf{r},\omega) = eJ^{\alpha}(\mathbf{r},\omega) = \int d\mathbf{r}'\sum_{\beta}\; \sigma^{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega)\; E^{\beta}(\mathbf{r}',\omega) \tag{۲۴.۶}$$

از مقایسه‌ی دو رابطه‌ی (۲۳.۶) و (۲۴.۶) بدست می‌آوریم:

$$\sigma^{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{r}',\omega) = \frac{۱}{i\omega}\; C^{R}_{J_\alpha(\mathbf{r})J_\beta(\mathbf{r}')}(\omega) \tag{۲۵.۶}$$

که در آن $C^{R}_{J_\alpha(\mathbf{r})J_\beta(\mathbf{r}')}(\omega)$ تابع همبستگی جریان-جریان می‌باشد.

$$\Pi^{R}_{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{r}',t-t') = C^{R}_{J_\alpha(\mathbf{r})J_\beta(\mathbf{r}')}(\omega) = -i\;\theta(t-t')\langle[J^{\alpha}(\mathbf{r},t),J^{\beta}(\mathbf{r}',t')]\rangle_{\circ} \tag{۲۶.۶}$$

۴.۶ فرمول کوبو برای تابع دی‌الکتریک

وقتی سیستمی تحت یک اختلال الکترومغناطیسی قرار بگیرد، توزیع بار تغییر می‌کند و سیستم قطبیده می‌شود. در آزمایش به سیستم یک پتانسیل خارجی ϕ_{ext} اعمال می‌کنند و پتانسیل کلی ϕ_{tot} را اندازه می‌گیرند. پتانسیل کل از جمع پتانسیل خارجی و پتانسیل ایجاد شده توسط قطبش القا شده بدست می‌آید.

$$\phi_{tot} = \phi_{ext} + \phi_{ind} \tag{۲۷.۶}$$

به جای کار کردن با پتانسیل می‌توانیم با بار کار کنیم که از طریق معادله‌ی پواسون به‌هم مرتبط می‌شوند:

$$\nabla^2 \phi_{tot} = -\frac{1}{\varepsilon_0}\rho_{e,tot} \quad (۲۸.۶)$$

$$\nabla^2 \phi_{ext} = -\frac{1}{\varepsilon_0}\rho_{e,ext} \quad (۲۹.۶)$$

$$\nabla^2 \phi_{ind} = -\frac{1}{\varepsilon_0}\rho_{e,ind} \quad (۳۰.۶)$$

در عبارت‌های بالا ρ_e چگالی بار می‌باشد.

نسبت پتانسل خارجی به پتانسیل کل، تابع پاسخ دی‌الکتریک است و پذیرفتاری نسبی نامیده می‌شود.

$$\phi_{tot} = \varepsilon^{-1}\phi_{ext} \quad (۳۱.۶)$$

پذیرفتاری در فضا و مکان غیر موضعی است، بنابراین داریم:

$$\phi_{tot}(\mathbf{r},t) = \int d\mathbf{r}' \int dt'\ \varepsilon^{-1}(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t')\ \phi_{ext}(\mathbf{r}',t') \quad (۳۲.۶)$$

پتانسیل الکتریکی خارجی با چگالی بار جفت می‌شود. بنابراین اختلال به صورت زیر خواهد بود:

$$H' = \int d\mathbf{r}\ \rho_e(\mathbf{r})\ \phi_{ext}(\mathbf{r},t) \quad (۳۳.۶)$$

چگالی بار القایی از تئوری پاسخ خطی پیروی می‌کند:

$$\begin{aligned}\rho_{e,ind}(\mathbf{r},t) &= \langle\rho_e\rangle - \langle\rho_e\rangle_0 \\ &= \int d\mathbf{r}' \int dt'\ C^R_{\rho_e(\mathbf{r}),\rho_e(\mathbf{r}')}(t,t')\ \phi_{ext}(\mathbf{r}',t') \quad (۳۴.۶)\end{aligned}$$

در رابطه‌ی بالا $\langle\rho_e\rangle$ چگالی کل در حضور اختلال است و $\langle\rho_e\rangle_0$ چگالی در غیاب اختلال. هم‌چنین $C^R_{\rho_e(\mathbf{r}),\rho_e(\mathbf{r}')}(t,t')$ تابع همبستگی بار-بار می‌باشد که به آن تابع قطبش‌پذیری[۴] هم می‌گویند.

$$C^R_{\rho_e(\mathbf{r}),\rho_e(\mathbf{r}')}(t,t') = \chi^R_e(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t') = -i\theta(t-t')\langle[\rho_e(\mathbf{r},t),\rho_e(\mathbf{r}',t')]\rangle_0 \quad (۳۵.۶)$$

[۴] Polarizability function

با درنظر گرفتن برهم‌کنش کولنی V_c خواهیم داشت:

$$V_c(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{1}{\epsilon_\circ|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

$$\phi_{ind}(\mathbf{r},t) = \int d\mathbf{r}' V_c(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\rho_{e,ind}(\mathbf{r}') \qquad (۳۶.۶)$$

با جایگذاری رابطه‌ی (۳۴.۶) در (۳۶.۶) ϕ_{ind} را بدست می‌آوریم و برای پتانسیل کل خواهیم داشت:

$$\phi_{tot}(\mathbf{r},t) = \phi_{ext}(\mathbf{r},t) + \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r}'' \int dt' V_c(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\chi^R(\mathbf{r}'t,\mathbf{r}''t')\phi_{ext}(\mathbf{r}'',t') \qquad (۳۷.۶)$$

اکنون از مقایسه‌ی دو رابطه‌ی (۳۲.۶) و (۳۷.۶) می‌توانیم پذیرفتاری مغناطیسی را بدست آوریم:

$$\varepsilon^{-1}(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,\delta(t-t') + \int d\mathbf{r}''\, V_c(\mathbf{r}-\mathbf{r}'')\,\chi^R(\mathbf{r}t,\mathbf{r}''t') \qquad (۳۸.۶)$$

۱.۴.۶ تابع دی‌الکتریک در سیستم ناوردا تحت انتقال

در یک سیستم ناوردا تحت انتقال وابستگی مکانی χ به صورت $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$ است. وابستگی زمانی هم که به صورت $t-t'$ می‌باشد. بنابراین می‌توانیم با تبدیل فوریه از رابطه‌ی (۳۲.۶) به فضای تکانه و فرکانس برویم:

$$\phi_{tot}(\mathbf{q},\omega) = \varepsilon^{-1}(\mathbf{q},\omega)\,\phi_{ext}(\mathbf{q},\omega) \qquad (۳۹.۶)$$

و با تبدیل فوریه‌ی رابطه‌ی (۳۷.۶) بدست می‌آوریم:

$$\varepsilon^{-1}(\mathbf{q},\omega) = 1 + V_c(\mathbf{q})\,\chi_e^R(\mathbf{q},\omega) \qquad (۴۰.۶)$$

۲.۴.۶ رابطه‌ی بین تابع دی‌الکتریک و رسانش

تابع دی‌الکتریک و رسانش هر دو پاسخ سیستم به میدان الکترومغناطیسی هستند. بنابراین انتظار داریم به‌هم مرتبط باشند. با در نظر گرفتن سیستمی که تحت انتقال ناوردا است، خواهیم داشت:

$$J_e(\mathbf{q},\omega) = \sigma(\mathbf{q},\omega)\,E_{ext}(\mathbf{q},\omega) \qquad (۴۱.۶)$$

از طرف دیگر داریم:

$$E_{ext}(\mathbf{r},t) = -\nabla_r \ \phi_{ext}(\mathbf{r},t) \tag{۴۲.۶}$$

$$\int d\mathbf{q}e^{i\mathbf{q}.\mathbf{r}} \ E_{ext}(\mathbf{q},\omega) = -\nabla_r \ \int d\mathbf{q}e^{i\mathbf{q}.\mathbf{r}} \ \phi_{ext}(\mathbf{q},\omega)$$

$$E_{ext}(\mathbf{q},\omega) = -i\mathbf{q} \ \phi_{ext}(\mathbf{q},\omega) \tag{۴۳.۶}$$

در نتیجه بدست می‌آوریم:

$$J_e(\mathbf{q},\omega) = -i\sigma(\mathbf{q},\omega) \ \mathbf{q} \ \phi_{ext}(\mathbf{q},\omega)$$

$$\mathbf{q}.J_e(\mathbf{q},\omega) = -i\sigma(\mathbf{q},\omega) \ q^۲ \ \phi_{ext}(\mathbf{q},\omega) \tag{۴۴.۶}$$

اگر رابطه‌ی پیوستگی

$$\nabla.J + \partial_t\rho = ۰ \tag{۴۵.۶}$$

را به فضای تکانه و فرکانس ببریم، داریم:

$$-i\omega \ \rho_e(\mathbf{q},\omega) + i\mathbf{q}.J_e(\mathbf{q},\omega) = ۰$$

$$\begin{aligned} \mathbf{q}.J_e(\mathbf{q},\omega) &= \omega \ \rho_e(\mathbf{q},\omega) \\ &= \omega \ \chi_e^R(\mathbf{q},\omega) \ \phi_{ext}(\mathbf{q},\omega) \end{aligned} \tag{۴۶.۶}$$

برای رابطه‌ی آخر از (۳۴.۶) استفاده کرده‌ایم. بنابراین از دو رابطه‌ی (۴۴.۶) و (۴۶.۶) بدست می‌آوریم:

$$-i\sigma(\mathbf{q},\omega) \ q^۲ = \omega \ \chi_e^R(\mathbf{q},\omega) \tag{۴۷.۶}$$

و اکنون اگر از رابطه‌ی (۴۰.۶) χ_e^R را در رابطه‌ی بالا جایگذاری کنیم:

$$\varepsilon^{-۱}(\mathbf{q},\omega) = ۱ - i\frac{q^۲}{\omega} \ V_c(\mathbf{q}) \ \sigma(\mathbf{q},\omega) \tag{۴۸.۶}$$

بنابراین با داشتن رسانش می‌توانیم پذیرفتاری را بیابیم و به عکس.

فصل ۷
توابع گرین

توابع گرین برای حل معادلات دیفرانسیل به‌کار می‌روند. به طور مثال فرض می‌کنیم معادله‌ی دیفرانسیلی زیر را داریم:

$$(E - H(\mathbf{r}))\ \psi_E(\mathbf{r}) = 0 \tag{۱.۷}$$

در این صورت به جای این که معادله‌ی بالا را حل کنیم، معادله‌ی کمکی زیر را حل می‌کنیم:

$$(E - H(\mathbf{r}))\ G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tag{۲.۷}$$

که در آن $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ تابع گرین نامیده می‌شود. بنابراین با حل معادله‌ی بالا و داشتن تابع گرین می‌توانیم جواب معادله‌ی (۱.۷) را بیابیم. برای درک ایده‌ی روش تابع گرین به مسئله‌ی آشنایِ یافتن پتانسیل الکتریکی ناشی از یک توزیع بار ثابت می‌پردازیم:

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\epsilon_0}\ \rho(\mathbf{r}) \tag{۳.۷}$$

بنابراین حل معادله‌ی بالا منوط به حل معادله‌ی زیر است.

$$\nabla^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tag{۴.۷}$$

از طرفی می‌دانیم که جواب $G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi}\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$ است، در نتیجه پتانسیل الکتریکی به صورت زیر درمی‌آید:

$$\phi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\epsilon_0}\int d\mathbf{r}'\, G(\mathbf{r},\mathbf{r}')\,\rho(\mathbf{r}') \quad (5.7)$$

$$= \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\int d\mathbf{r}'\,\frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (6.7)$$

حال معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان را در نظر می‌گیریم. اگر هامیلتونی شامل دو بخش غیربرهم‌کنشی و برهم‌کنشی $H = H_0 + V$ باشد، دو تابع گرین تعریف می‌کنیم:

$$(i\partial_t - H(\mathbf{r}))\Psi(\mathbf{r},t) = 0 \quad (7.7)$$

$$(i\partial_t - H_0(\mathbf{r}))\, G_0(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,\delta(t-t') \quad (8.7)$$

$$(i\partial_t - H(\mathbf{r}))\, G(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,\delta(t-t') \quad (9.7)$$

G بیانگر اثر یک منبع در زمان t' و مکان $\mathbf{r}'$ در زمان t و مکان $\mathbf{r}$ است.

برای معادله‌ی (۹.۷) دو جواب به صورت زیر وجود دارد:

$$G^R(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t') = -i\theta(t-t')\,\langle\mathbf{r}|e^{-iH(t-t')}|\mathbf{r}'\rangle \quad (10.7)$$

$$G^A(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t') = i\theta(t'-t)\,\langle\mathbf{r}|e^{-iH(t-t')}|\mathbf{r}'\rangle \quad (11.7)$$

نماد R بیانگر این است که حضور ذرات در مکان $\mathbf{r}$ در زمان t بستگی به موقعیت ذرات در $\mathbf{r}'$ در زمان‌های قبل‌تر دارد در حالی‌که نماد A بیانگر وابستگی به موقعیت ذرات در $\mathbf{r}'$ در زمان‌های بعدتر است.

هم‌چنین روابط بالا بیان می‌کنند که تابع گرین چیزی جز انتشارگر نیست. حال بررسی می‌کنیم که

آیا G^R در معادله‌ی (۹.۷) صدق می‌کند؟

$$\begin{aligned}(i\partial_t - H(\mathbf{r}))\, G(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t') &= (i\partial_t - H(\mathbf{r}))\, (-i)\theta(t-t')\, \langle \mathbf{r}|e^{-iH(t-t')}|\mathbf{r}'\rangle \\ &= \delta(t-t')\, \langle \mathbf{r}|e^{-iH(t-t')}|\mathbf{r}'\rangle \\ &+ \theta(t-t')\, \langle \mathbf{r}|(-i)H\, e^{-iH(t-t')}|\mathbf{r}'\rangle \\ &+ i\theta(t-t')\, H(\mathbf{r})\, \langle \mathbf{r}|e^{-iH(t-t')}|\mathbf{r}'\rangle \\ &= \delta(t-t')\, \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\end{aligned}$$

که با توجه به $\langle \mathbf{r}|\hat{H} = H(\mathbf{r})\langle \mathbf{r}|$ می‌بینیم که رابطه‌ی (۹.۷) برقرار شد.

حال می‌توانیم تابع گرین را در پایه‌ای متفاوت از $\mathbf{r}$ بنویسیم.

$$G^R(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t') = -i\theta(t-t') \sum_{\nu\nu'} \langle \mathbf{r}|\nu\rangle\, \langle \nu|e^{-iH(t-t')}|\nu'\rangle\, \langle \nu'|\mathbf{r}'\rangle \tag{۱۲.۷}$$

$$= -i\theta(t-t') \sum_{\nu\nu'} \phi_\nu(\mathbf{r})\, \langle \nu|e^{-iH(t-t')}|\nu'\rangle\, \phi^*_{\nu'}(\mathbf{r}') \tag{۱۳.۷}$$

$$= \sum_{\nu\nu'} \phi_\nu(\mathbf{r})\, G^R_{\nu\nu'}(t,t')\, \phi^*_{\nu'}(\mathbf{r}') \tag{۱۴.۷}$$

بنابراین تابع گرین در پایه‌ی ν به صورت زیر درآمد:

$$G^R_{\nu\nu'}(t,t') = -i\theta(t-t')\, \langle \nu|e^{-iH(t-t')}|\nu'\rangle \tag{۱۵.۷}$$

اگر ν و ν' ویژه حالت‌های هامیلتونی باشند، خواهیم داشت:

$$G_{\nu\nu'}(t,t') = -i\theta(t-t')\, \langle\, |\, a_\nu\, e^{-iH(t-t')}\, a^\dagger_{\nu'}\, |\, \rangle \tag{۱۶.۷}$$

$$= -i\theta(t-t')\, \langle\, |\, e^{iHt}\, a_\nu\, e^{-iHt}\, e^{iHt'}\, a^\dagger_{\nu'}\, e^{-iHt'}\, |\, \rangle \tag{۱۷.۷}$$

$$\approx -i\theta(t-t')\, \langle\, |\, a_\nu(t)\, a^\dagger_{\nu'}(t')\, |\, \rangle \tag{۱۸.۷}$$

$\langle\, |\, e^{iHt}$ و $e^{-iHt'}\, |\, \rangle$ تنها باعث جابجایی انرژی می‌شوند و قابل صرف نظر کردن هستند.

توابع گرین تک ذره انواع مختلفی دارند که با روابط زیر تعریف می‌شوند:

تابع گرین بزرگ‌تر [۱]

$$G^{>}_{\nu\nu'}(t,t') = -i \, \langle \, a_{\nu}(t) \; a^{\dagger}_{\nu'}(t') \, \rangle \tag{۱۹.۷}$$

$$G^{>}(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t') = -i \, \langle \, \Psi(\mathbf{r}t) \; \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}'t') \, \rangle \tag{۲۰.۷}$$

تابع گرین کوچک‌تر [۲]

$$G^{<}_{\nu\nu'}(t,t') = (\pm)(-i) \, \langle \, a^{\dagger}_{\nu'}(t') \; a_{\nu}(t) \, \rangle \tag{۲۱.۷}$$

$$G^{<}(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t') = (\pm)(-i) \, \langle \, \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}'t') \; \Psi(\mathbf{r}t) \, \rangle \tag{۲۲.۷}$$

تابع گرین تاخیری [۳]

$$G^{R}_{\nu\nu'}(t,t') = -i \; \theta(t-t') \, \langle \, [a_{\nu}(t), a^{\dagger}_{\nu'}(t')]_{\pm} \, \rangle \tag{۲۳.۷}$$

$$G^{R}(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t') = -i \; \theta(t-t') \, \langle \, [\Psi(\mathbf{r}t), \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}'t')]_{\pm} \, \rangle \tag{۲۴.۷}$$

تابع گرین تقدمی [۴]

$$G^{A}_{\nu\nu'}(t,t') = i \; \theta(t'-t) \, \langle \, [a_{\nu}(t), a^{\dagger}_{\nu'}(t')]_{\pm} \, \rangle \tag{۲۵.۷}$$

$$G^{A}(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t') = i \; \theta(t'-t) \, \langle \, [\Psi(\mathbf{r}t), \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}'t')]_{\pm} \, \rangle \tag{۲۶.۷}$$

تابع گرین فاینمن

$$G^{F}_{\nu\nu'}(t,t') = -i \; T_t \, \langle \, a_{\nu}(t) \; a^{\dagger}_{\nu'}(t') \, \rangle \tag{۲۷.۷}$$

$$G^{F}(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t') = -i \; T_t \, \langle \, \Psi(\mathbf{r}t) \; \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}'t') \, \rangle \tag{۲۸.۷}$$

---

[۱] Greater Green’s function
[۲] Lesser Green’s function
[۳] Retarded Green’s function
[۴] Advanced Green’s function

۱.۷ تابع گرین الکترون‌های آزاد

هامیلتونی الکترون‌های آزاد به صورت زیر است:

$$H = \sum_{k} \xi_{\mathbf{k}} \, c_{\mathbf{k}}^{\dagger} \, c_{\mathbf{k}} \tag{۲۹.۷}$$

همان گونه که قبلا بیان کرده‌ایم، برای این سیستم حالت پایه به صورت زیر است:

$$|FS\rangle = \prod_{\substack{k \\ \xi_k < 0}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} \, |0\rangle \tag{۳۰.۷}$$

و تابع گرین سیستم به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{>}(t, t') = -i\langle \, c_{\mathbf{k}}(t) \; c_{\mathbf{k}'}^{\dagger}(t') \, \rangle \tag{۳۱.۷}$$

با توجه به هامیلتونی سیستم، وابستگی زمانی عملگرها به صورت زیر هستند:

$$c_{\mathbf{k}'}^{\dagger}(t') = e^{i\xi_{\mathbf{k}'}t'} \, c_{\mathbf{k}'}^{\dagger}$$

$$c_{\mathbf{k}}(t) = e^{-i\xi_{\mathbf{k}}t} \, c_{\mathbf{k}}$$

در نتیجه رابطه (۳۱.۷) به شکل زیر درمی‌آید:

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{>}(t, t') = -i \, \langle \, c_{\mathbf{k}} \; c_{\mathbf{k}'}^{\dagger} \, \rangle \, e^{-i\xi_{\mathbf{k}}t + i\xi_{\mathbf{k}'}t'} \tag{۳۲.۷}$$

هنگامی که سیستم ناوردایی تحت انتقال دارد آن‌گاه هامیلتونی در پایه‌ی اندیس بلاخ (k) قطری است. بنابراین رابطه بالا به صورت زیر درمی‌آید:

$$G_{\mathbf{k}}^{>}(t, t') = -i(1 - n_F(\xi_{\mathbf{k}})) \, e^{-i\xi_{\mathbf{k}}(t-t')} \tag{۳۳.۷}$$

به طور مشابه برای تابع گرین کوچک‌تر داریم:

$$G_{\mathbf{k}}^{<}(t, t') = i n_F(\xi_{\mathbf{k}}) \, e^{-i\xi_{\mathbf{k}}(t-t')} \tag{۳۴.۷}$$

رابطه‌ی $G^{>}_{\mathbf{k}}$ بیانگر انتشار الکترون‌ها است زیرا حالت‌های خالی را درنظر می‌گیرد و رابطه‌ی $G^{<}_{\mathbf{k}}$ چون متناسب با تعداد الکترون‌ها است، انتشار حفره‌ها را بیان می‌کند.

اکنون می‌توانیم تبدیل فوریه‌ی $G^{>}_{\mathbf{k}}(t,t')$ را بگیریم.

$$\begin{aligned} G^{>}_{\mathbf{k}}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt\ e^{i\omega(t-t')}\ G^{>}_{\mathbf{k}}(t,t') \\ &= -i(1-n_F(\xi_{\mathbf{k}}))\int_{-\infty}^{\infty} dt\ e^{i(\omega-\xi_{\mathbf{k}})(t-t')} \\ &= -2\pi i(1-n_F(\xi_{\mathbf{k}}))\ \delta(\omega-\xi_{\mathbf{k}}) \end{aligned} \tag{۳۵.۷}$$

اکنون با فرض $t'=0$ به دلیل سهولت، تابع گرین تاخیری را بدست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} G^{R}_{\mathbf{k}}(t) &= i\theta(t)\ \langle\ \{c_{\mathbf{k}}(t), c^{\dagger}_{\mathbf{k}}(0)\}\ \rangle \\ &= i\theta(t)\ \langle\ (e^{-i\xi_{\mathbf{k}}t}\ c_{\mathbf{k}}\ c^{\dagger}_{\mathbf{k}} + c^{\dagger}_{\mathbf{k}}\ e^{-i\xi_{\mathbf{k}}t}\ c_{\mathbf{k}})\ \rangle \\ &= i\theta(t)\ e^{-i\xi_{\mathbf{k}}t}\ \langle\ \{\ c_{\mathbf{k}}, c^{\dagger}_{\mathbf{k}}\}\ \rangle \\ &= i\theta(t)\ e^{-i\xi_{\mathbf{k}}t} \end{aligned} \tag{۳۶.۷}$$

اکنون تبدیل فوریه‌ی تابع گرین بالا را در نظر می‌گیریم:

$$\begin{aligned} G^{R}_{\mathbf{k}}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt\ e^{i\omega t}\ G^{R}_{\mathbf{k}}(t) \\ &= -i\int_{-\infty}^{\infty} dt\ \theta(t)\ e^{i(\omega+i\eta-\xi_{\mathbf{k}})t} \\ &= -i\int_{0}^{\infty} dt\ e^{i(\omega+i\eta-\xi_{\mathbf{k}})t} \\ &= \frac{1}{\omega+i\eta-\xi_{\mathbf{k}}} \end{aligned} \tag{۳۷.۷}$$

در پایان این بخش تابع گرین فاینمن را برای الکترون‌های آزاد محاسبه می‌کنیم:

$$
\begin{aligned}
G^F_{\mathbf{k}}(t) &= -i\, T_t\, \langle\, c_{\mathbf{k}}(t)\, c^\dagger_{\mathbf{k}}(\circ)\, \rangle \\
&= -i\theta(t)\, \langle\, c_{\mathbf{k}}(t)\, c^\dagger_{\mathbf{k}}(\circ)\, \rangle + i\theta(-t)\, \langle\, c^\dagger_{\mathbf{k}}(\circ)\, c_{\mathbf{k}}(t)\, \rangle \\
&= -i\, e^{-i\xi_{\mathbf{k}} t} \left(\, \theta(t)\, \langle\, c_{\mathbf{k}}\, c^\dagger_{\mathbf{k}}\, \rangle - \theta(-t)\, \langle\, c^\dagger_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{k}}\, \rangle \,\right) \\
&= -i\theta(t)\, e^{-i\xi_{\mathbf{k}} t} \Big(\theta(t)\, \theta(\xi_{\mathbf{k}}) - \theta(-t)\, \theta(-\xi_{\mathbf{k}})\Big)
\end{aligned}
\qquad (۳۸.۷)
$$

حال تبدیل فوریه‌ی تابع گرین فاینمن را بدست می‌آوریم:

$$
\begin{aligned}
G^F_{\mathbf{k}}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t}\, G^F_{\mathbf{k}}(t) \\
&= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i(\omega-\xi_{\mathbf{k}})t} \Big(\theta(t)\, \theta(\xi_{\mathbf{k}}) - \theta(-t)\, \theta(-\xi_{\mathbf{k}})\Big) \\
&= -i\theta(\xi_{\mathbf{k}}) \int_{\circ}^{\infty} dt\, e^{i(\omega+i\eta-\xi_{\mathbf{k}})t} + i\theta(-\xi_{\mathbf{k}}) \int_{-\infty}^{\circ} dt\, e^{i(\omega-i\eta-\xi_{\mathbf{k}})t} \\
&= \frac{\theta(\xi_{\mathbf{k}})}{\omega + i\eta - \xi_{\mathbf{k}}} + \frac{\theta(-\xi_{\mathbf{k}})}{\omega - i\eta - \xi_{\mathbf{k}}}
\end{aligned}
\qquad (۳۹.۷)
$$

۲.۷ نمایش لهمن

در این بخش با استفاده از نمایش لهمن [۵] رابطه‌ی بین توابع گرین مختلف را بدست می‌آوریم.
اگر مجموعه ویژه حالت‌های هامیلتونی را با $\{|n\rangle\}$ نمایش دهیم، برای تابع گرین داریم:

$$\begin{aligned} G^{>}_{\nu\nu'}(t,t') &= -i\,\langle\, c_\nu(t)\; c^\dagger_{\nu'}(t')\,\rangle \\ &= -i\frac{۱}{Z}\sum_n \langle\, n|\; e^{-\beta H}\; c_\nu(t)\; c^\dagger_{\nu'}(t')\; |n\,\rangle \\ &= -i\frac{۱}{Z}\sum_n e^{-\beta E_n}\;\langle\, n|\; e^{iHt}\; c_\nu\; e^{-iHt}\; e^{iHt'}\; c^\dagger_{\nu'}\; e^{-iHt'}\; |n\,\rangle \\ &= -i\frac{۱}{Z}\sum_{nn'} e^{-\beta E_n}\;\langle\, n|\; e^{iHt}\; c_\nu\; e^{-iHt}\; |n'\rangle\;\langle n'|e^{iHt'}\; c^\dagger_{\nu'}\; e^{-iHt'}\; |n\,\rangle \\ &= -i\frac{۱}{Z}\sum_{nn'} e^{-\beta E_n}\; e^{i(E_n-E_{n'})(t-t')}\;\langle\, n|\; c_\nu\; |n'\rangle\;\langle n'|c^\dagger_{\nu'}\; |n\,\rangle \qquad (۴۰.۷) \end{aligned}$$

که در روابط بالا از $\sum_{n'}\; |n'\rangle\;\langle n'| = ۱$ استفاده کرده‌ایم.
اگر تابع گرین قطری باشد، بدست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} G^{>}_{\nu}(t,t') &= -i\frac{۱}{Z}\sum_{nn'} e^{-\beta E_n}\; e^{i(E_n-E_{n'})(t-t')}\;\langle\, n|\; c_\nu\; |n'\rangle\;\langle n'|c^\dagger_{\nu}\; |n\,\rangle \\ &= -i\frac{۱}{Z}\sum_{nn'} e^{-\beta E_n}\; e^{i(E_n-E_{n'})(t-t')}\;|\langle\, n|\; c_\nu\; |n'\rangle|^{۲} \qquad (۴۱.۷) \end{aligned}$$

اکنون روی تابع گرین بالا تبدیل فوریه می‌زنیم و به فضای فرکانس می‌رویم. به دلیل این که تابع گرین تابعی از $(t-t')$ است، تغییر متغیر $t-t'=\tilde{t}$ را در نظر می‌گیریم.

$$\begin{aligned} G^{>}_{\nu}(\omega) &= \int d\tilde{t}\; e^{i\omega\tilde{t}}\; G^{>}_{\nu}(\tilde{t}) \\ &= \frac{-i}{Z}\sum_{nn'} e^{-\beta E_n}\;|\langle\, n|\; c_\nu\; |n'\rangle|^{۲}\int d\tilde{t}\; e^{i(\omega+E_n-E_{n'})\tilde{t}} \\ &= \frac{-۲\pi i}{Z}\sum_{nn'} e^{-\beta E_n}\;\delta(\omega+E_n-E_{n'})\;|\langle\, n|\; c_\nu\; |n'\rangle|^{۲} \qquad (۴۲.۷) \end{aligned}$$

[۵] Lehman representation

اگر محاسبات بالا را برای $G_\nu^<$ با در نظر گرفتن دو شرط قطری بودن تابع گرین و فرمیونی بودن ذرات انجام دهیم، خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} G_\nu^<(t,t') &= i \langle\, c_\nu^\dagger(t')\, c_\nu(t)\, \rangle \\ &= i\frac{۱}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n} \langle\, n|\, e^{iHt'}\, c_\nu^\dagger\, e^{-iHt'}\, |n'\rangle\, \langle n'|e^{iHt}\, c_\nu\, e^{-iHt}\, |n\,\rangle \\ &= i\frac{۱}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n}\, e^{-i(E_n-E_{n'})(t-t')} \langle\, n|\, c_\nu^\dagger\, |n'\rangle\, \langle n'|c_\nu\, |n\,\rangle \qquad (۴۳.۷) \\ &= i\frac{۱}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n}\, e^{i(E_n-E_{n'})(t-t')}\, |\langle\, n'|\, c_\nu\, |n\rangle|^۲ \qquad (۴۴.۷) \end{aligned}$$

اکنون با تغییر متغیر $t-t'=\tilde{t}$ تبدیل فوریه می‌زنیم:

$$\begin{aligned} G_\nu^<(\omega) &= \int d\tilde{t}\, e^{i\omega\tilde{t}}\, G_\nu^<(\tilde{t}) \\ &= \frac{۲\pi i}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n}\, \delta(\omega - E_n + E_{n'})\, |\langle\, n'|\, c_\nu\, |n\rangle|^۲ \qquad (۴۵.۷) \\ &= \frac{۲\pi i}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_{n'}}\, \delta(\omega + E_n - E_{n'})\, |\langle\, n|\, c_\nu\, |n'\rangle|^۲ \qquad (۴۶.۷) \end{aligned}$$

اندیس‌های n و n' در رابطه‌ی (۴۵.۷) را تعویض می‌کنیم تا به رابطه‌ی (۴۶.۷) برسیم که تقریباً با تابع گرین $G_\nu^>$ هم شکل است. با توجه به تابع دلتا در رابطه‌ی (۴۶.۷) داریم:

$$e^{-\beta E_{n'}} = e^{-\beta(\omega+E_n)}$$

در نتیجه بدست می‌آوریم:

$$G_\nu^<(\omega) = \frac{۲\pi i}{Z}\, e^{-\beta\omega} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n}\, \delta(\omega + E_n - E_{n'})\, |\langle\, n|\, c_\nu\, |n'\rangle|^۲ \qquad (۴۷.۷)$$

از مقایسه دو رابطه (۴۲.۷) و (۴۷.۷) نتیجه می‌گیریم:

$$G_\nu^<(\omega) = -e^{-\beta\omega}\, G_\nu^>(\omega) \qquad (۴۸.۷)$$

بنابراین نمایش لهمن توابع گرین را به هم مرتبط ساخت.

می‌توانیم تابع گرین تاخیری را هم با در نظر گرفتن ذرات به صورت فرمیون و قطری بودن تابع گرین بدست آوریم. با توجه به این‌که تابع گرین تابعی از $(t-t')$ است، t' را صفر در نظر می‌گیریم.

$$\begin{aligned}
G^R_\nu(t) &= -i\,\theta(t)\,\langle\,\{c_\nu(t), c^\dagger_\nu(0)\}\,\rangle \\
&= \frac{-i}{Z}\,\theta(t)\,\sum_n\; e^{-\beta E_n}\left(\langle n|c_\nu(t)\,c^\dagger_\nu(0)|n\rangle + \langle n|c^\dagger_\nu(0)\,c_\nu(t)|n\rangle\right) \\
&= \frac{-i}{Z}\,\theta(t)\,\sum_{nn'}\; e^{-\beta E_n}\Big(\langle n|e^{iHt}\,c_\nu\,e^{-iHt}|n'\rangle\,\langle n'|\,c^\dagger_\nu|n\rangle \\
&\qquad + \langle n|c^\dagger_\nu|n'\rangle\,\langle n'|e^{iHt}\,c_\nu\,e^{-iHt}|n\rangle\Big) \\
&= \frac{-i}{Z}\,\theta(t)\,\sum_{nn'}\; e^{-\beta E_n}\left(e^{i(E_n-E_{n'})t}\,|\langle n|c_\nu|n'\rangle|^2 + e^{-i(E_n-E_{n'})t}|\langle n'|c_\nu|n\rangle|^2\right)
\end{aligned} \tag{۴۹.۷}$$

تبدیل فوریه‌ی تابع گرین بالا به صورت زیر است:

$$\begin{aligned}
G^R_\nu(\omega) &= \int dt\; e^{i(\omega+i\eta)t}\,G^R_\nu(t) \\
&= \frac{-i}{Z}\,\sum_{nn'}\; e^{-\beta E_n}\int_0^\infty dt\,\Big(e^{i(\omega+i\eta+E_n-E_{n'})t}\,|\langle n|c_\nu|n'\rangle|^2 \\
&\qquad + e^{i(\omega+i\eta-E_n+E_{n'})t}\,|\langle n'|c_\nu|n\rangle|^2\Big) \\
&= \frac{1}{Z}\,\sum_{nn'}\; e^{-\beta E_n}\left(\frac{|\langle n|c_\nu|n'\rangle|^2}{\omega+i\eta+E_n-E_{n'}} + \frac{|\langle n'|c_\nu|n\rangle|^2}{\omega+i\eta-E_n+E_{n'}}\right)
\end{aligned} \tag{۵۰.۷}$$

اکنون با توجه به رابطه‌ی زیر می‌توانیم بخش حقیقی و موهومی تابع گرین را بدست آوریم:

$$\frac{1}{X\pm i\eta} = P\frac{1}{X} \mp i\pi\delta(X) \tag{۵۱.۷}$$

$$\frac{-1}{\pi}\,\mathrm{Im}G^R_\nu(\omega) = \frac{1}{Z}\sum_{nn'} e^{-\beta E_n}\Big(|\langle n|c_\nu|n'\rangle|^2\ \delta(\omega+E_n-E_{n'}) + |\langle n'|c_\nu|n\rangle|^2\ \delta(\omega-E_n+E_{n'})\Big)$$

در جمله‌ی دوم جای n و n' را عوض می‌کنیم و با توجه به تابع دلتا در جمله $e^{-\beta E_{n'}} = e^{-\beta(\omega+E_n)}$ را داریم:

$$\frac{-1}{\pi}\,\mathrm{Im}\ G^R_\nu(\omega) = \frac{1}{Z}\,(1+e^{-\beta\omega})\sum_{nn'} e^{-\beta E_n}\ |\langle n|c_\nu|n'\rangle|^2\ \delta(\omega+E_n-E_{n'}) \quad (۵۲.۷)$$

تابعی به نام تابع طیفی [۶] به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$A_\nu(\omega) = \frac{-1}{\pi}\,\mathrm{Im}\ G^R_\nu(\omega) \quad (۵۳.۷)$$

مزیتی که تابع طیفی دارد این است که با داشتن آن می‌توانیم توابع گرین دیگر را بدست آوریم. با توجه به روابط (۴۲.۷) و (۴۷.۷)خواهیم داشت:

$$iG^>_\nu = 2\pi(1-n_F(\omega))\ A_\nu(\omega) \quad (۵۴.۷)$$

$$-iG^<_\nu = 2\pi n_F(\omega)\ A_\nu(\omega) \quad (۵۵.۷)$$

که $n_F(\omega)$ تابع توزیع فرمی-دیراک است.

$$n_F(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega}+1} \quad (۵۶.۷)$$

۳.۷ تابع طیفی

برای الکترون‌های آزاد در رابطه‌ی (۳۷.۷) تابع گرین به صورت زیر درآمد:

$$G^R_{\mathbf{k}}(\omega) = \frac{1}{\omega+i\eta-\xi_{\mathbf{k}}}$$

[۶] Spectral function

تابع طیفی متناظر با آن به صورت زیر خواهد بود:

$$A_\nu(\omega) = \delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}}) \qquad (۵۷.۷)$$

بنابراین تابع طیفی یک تابع دلتا است که بیان می‌کند برانگیختگی با انرژی ω تنها زمانی رخ می‌دهد که یک الکترون با انرژی $\omega = \xi_{\mathbf{k}}$ به حالت $\mathbf{k}$ اضافه شود.

وقتی برهم‌کنش به سیستم اضافه شود، تابع طیفی با تابع دلتا فرق دارد ولی باز هم تابعی دارای پیک است که برانگیختگی سیستم را مشخص می‌کند. در واقع برهم‌کنش باعث پهن شدن تابع طیفی می‌شود. پهن شدگی تابع طیفی را می‌توانیم این گونه توجیه کنیم که اگر فرض کنیم تابع گرین به دلیل فرآیندهایی که ذره را از حالت ν پراکنده می‌کنند، با زمان افت کند، در این صورت برای تابع گرین داریم:

$$G^R_\nu(t) \approx i\theta(t)\, e^{-i\xi_\nu t}\, e^{-t/\tau} \qquad (۵۸.۷)$$

که τ زمان مشخصه‌ی افت می‌باشد. بنابراین تابع طیفی به صورت زیر در می‌آید:

$$\begin{aligned} A_\nu(\omega) &= \frac{-1}{\pi}\,\mathrm{Im}\int dt\, e^{i\omega t}\, G^R_\nu(t) \\ &\approx \mathrm{Im}\, i\int dt\, e^{i\omega t}\, e^{-i\xi_\nu t}\, e^{-t/\tau} \\ &\approx \frac{1/\tau}{(\omega-\xi_\nu)^2 + (1/\tau)^2} \end{aligned} \qquad (۵۹.۷)$$

که نشان می‌دهد عرض تابع طیفی $1/\tau$ است.

تابع طیفی دارای دو ویژگی مهم است:

- همیشه مثبت است. این خصوصیت با توجه به رابطه‌ی (۵۲.۷) کاملاً مشهود است.

- از قاعده‌ی جمع زیر پیروی می‌کند:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, A_\nu(\omega) = 1 \qquad (۶۰.۷)$$

حال قصد داریم که خاصیت دومِ تابع طیفی را اثبات کنیم.

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\ A_\nu(\omega) &= \frac{-1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\ \mathrm{Im}\ G_\nu^R(\omega) \\
&= \frac{-1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{Z}\sum_{nn'} \mathrm{Im}\ \frac{|\langle n|c_\nu|n'\rangle|^2}{\omega+i\eta+E_n-E_{n'}}\ (e^{-\beta E_n}+e^{-\beta E_{n'}}) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{Z}\sum_{nn'} |\langle n|c_\nu|n'\rangle|^2\ \delta(\omega+E_n-E_{n'})\ (e^{-\beta E_n}+e^{-\beta E_{n'}}) \\
&= \frac{1}{Z}\sum_{nn'} |\langle n|c_\nu|n'\rangle|^2\ (e^{-\beta E_n}+e^{-\beta E_{n'}}) \\
&= \frac{1}{Z}\sum_{nn'} e^{-\beta E_n}\left(\langle n|c_\nu|n'\rangle\ \langle n'|c_\nu^\dagger|n\rangle + \langle n'|c_\nu|n\rangle\ \langle n|c_\nu^\dagger|n'\rangle\right) \\
&= \frac{1}{Z}\sum_{nn'} e^{-\beta E_n}\left(\langle n|c_\nu|n'\rangle\ \langle n'|c_\nu^\dagger|n\rangle + \langle n|c_\nu^\dagger|n'\rangle\ \langle n'|c_\nu|n\rangle\right) \\
&= \frac{1}{Z}\sum_{n} e^{-\beta E_n}\left(\langle n|c_\nu\ c_\nu^\dagger|n\rangle + \langle n|c_\nu^\dagger\ c_\nu|n\rangle\right) \\
&= \frac{1}{Z}\sum_{n} e^{-\beta E_n}\ \langle n|\{c_\nu, c_\nu^\dagger\}|n\rangle = 1
\end{aligned}$$

در روابط بالا تابع گرین را از رابطه‌ی (۵۰.۷) جایگذاری کردیم در حالی‌که در جمله‌ی دوم آن n و n' را تعویض کردیم.

می‌توانیم این خصوصیت را به روش زیر نیز نشان داد:

$$\begin{aligned}
G_\nu^R(t=0) &= -i\ \theta(0)\ \langle\ \{c_\nu, c_\nu^\dagger\}\ \rangle \\
&= \int d\omega\ \frac{1}{2\pi}\ G_\nu^R(\omega)
\end{aligned}$$

در روابط بالا ($G_\nu^R(t=0$ از (۲۳.۷) جایگذاری شده است. همچنین با قرار دادن $\theta(0)=\frac{1}{2}$ بدست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} \int d\omega \, \frac{-1}{\pi} \, G_\nu^R(\omega) &= i \\ \int d\omega \, \frac{-1}{\pi} \, \mathrm{Im} \, G_\nu^R(\omega) &= 1 \\ \int d\omega \, A_\nu(\omega) &= 1 \end{aligned}$$

برای عدد اشغال فرمیونی در حالت ν داریم:

$$\begin{aligned} \bar{n}_\nu = \langle c_\nu^\dagger \, c_\nu \rangle &= -i \, G_\nu^<(t=0) \\ &= -i \int \frac{d\omega}{2\pi} \, e^{-i\omega(t=0)} \, G_\nu^<(\omega) \\ &= \int d\omega \, n_F(\omega) \, A_\nu(\omega) \end{aligned} \tag{۶۱.۷}$$

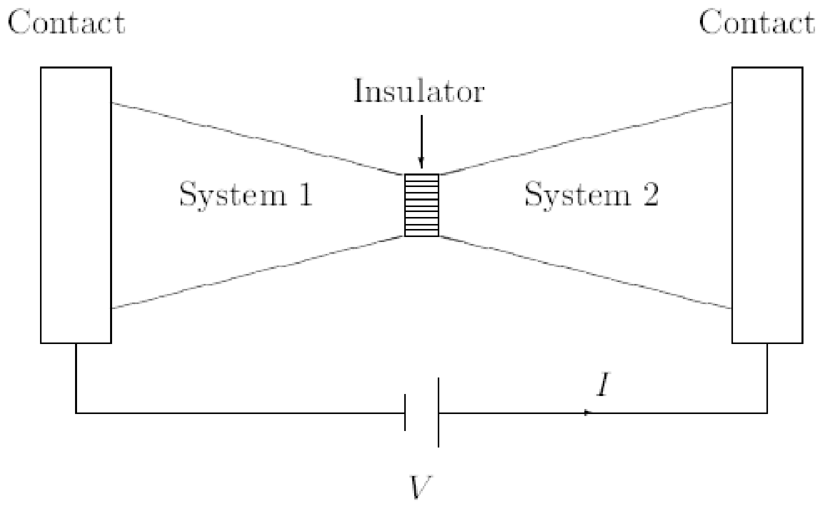
رابطه بالا نشان می‌دهد که تابع طیفی مانند چگالی حالت‌ها برای حالت ν عمل می‌کند. به همین دلیل آن را چگالی حالت جزئی [۷] می‌نامند. اگر تعداد کل حالت‌ها N_ν باشد، چگالی حالت با رابطه‌ی زیر داده می‌شود:

$$\rho(\omega) = \frac{1}{N_\nu} \sum_\nu A_\nu(\omega) \tag{۶۲.۷}$$

۴.۷ اندازه‌گیری تابع طیفی

در این بخش قصد داریم جریان تونل زنی الکترون از یک ماده به ماده‌ی دیگر را محاسبه کنیم. سیستم تونل زنی از دو ماده‌ی رسانا که با یک عایق با ضخامت کم به هم متصل شده‌اند، تشکیل شده است. در شکل (۱.۷) رساناها به عنوان سیستم ۱ و ۲ که با هامیلتونی H_1 و H_2 به ترتیب توصیف می‌شوند، نشان داده شده‌اند. هامیلتونی کل سیستم به صورت زیر خواهد بود:

[۷] Partial density of state



شکل ۱.۷: سیستم اندازه‌گیری جریان تونل‌زنی

$$H = \sum_{i=۱}^{۲} H_i + H_T \qquad (۶۳.۷)$$

$$H_i = \sum_{\nu} \xi_{i\nu}\, c_{i\nu}^{\dagger}\, c_{i\nu} \qquad (۶۴.۷)$$

$$H_T = \sum_{\nu\mu} \left(T_{\mu\nu}\, c_{۱\nu}^{\dagger}\, c_{۲\mu} + T_{\mu\nu}^{*}\, c_{۲\mu}^{\dagger}\, c_{۱\nu} \right) \qquad (۶۵.۷)$$

جفت شدگی دو رسانا به دلیل همپوشانی توابع موج با جمله‌ی H_T داده می‌شود که در آن $T_{\mu\nu}$ عنصر ماتریسی تونل زنی می‌باشد. به این معنی که با دامنه‌ی $T_{\mu\nu}$ یک الکترون در رسانای ۲ نابود می‌شود و در رسانای ۱ خلق می‌شود.

برای سادگی در نوشتن هامیلتونی H_T را به صورت زیر درنظر می‌گیریم:

$$H_T = L + L^{\dagger}, \qquad L = \sum_{\nu\mu} T_{\mu\nu}\, c_{۱\nu}^{\dagger}\, c_{۲\mu} \qquad (۶۶.۷)$$

جریان در سیستم با نرخ تغییرات ذرات به صورت $\langle I\rangle$ داده می‌شود که در آن عملگر I به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$\begin{aligned} I &= \partial_t\, N_۱ = i[H, N_۱] = i[H_T, N_۱] \\ &= i\sum_{\nu\mu}\ \sum_{\nu'}\ \left[\left(T_{\mu\nu}\, c^\dagger_{۱\nu}\, c_{۲\mu} + T^*_{\mu\nu}\, c^\dagger_{۲\mu}\, c_{۱\nu}\right), c^\dagger_{۱\nu'}\, c_{۱\nu'}\right] \\ &= -i\sum_{\nu\mu}\ \left(T_{\mu\nu}\, c^\dagger_{۱\nu}\, c_{۲\mu} - T^*_{\mu\nu}\, c^\dagger_{۲\mu}\, c_{۱\nu}\right) \\ &= -i(L - L^\dagger) \end{aligned} \tag{۶۷.۷}$$

با توجه به این که جفت شدگی بین دو رسانا ضعیف فرض می‌شود، برای محاسبه‌ی $\langle I\rangle$ از نظریه‌ی پاسخ خطی استفاده می‌کنیم.

$$\langle I\rangle(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt'\ C^R_{IH_T}(t,t') \tag{۶۸.۷}$$

$$C^R_{IH_T}(t,t') = -i\theta(t-t')\ \langle[\hat{I}(t), \hat{H}_T(t')]\rangle_۰ \tag{۶۹.۷}$$

یادآوری می‌کنیم که اندیس "۰" به این معنی است که میانگین‌گیری نسبت به حالت پایه‌ی $H_۱ + H_۲$ محاسبه می‌شود و به دلیل این که دو سیستم ۱و۲ از هم جدا هستند، داریم:

$$\langle\psi_۱\otimes\psi_۲|O_۱\ O_۲|\psi_۱\otimes\psi_۲\rangle = \langle\psi_۱|O_۱|\psi_۱\rangle \times \langle\psi_۲|O_۲|\psi_۲\rangle \tag{۷۰.۷}$$

اکنون به محاسبه‌ی تابع همبستگی می‌پردازیم:

$$\begin{aligned} C^R_{IH_T}(t,t') &= -\theta(t-t')\left\langle\left[\hat{L}(t) - \hat{L}^\dagger(t), \hat{L}(t') + \hat{L}^\dagger(t')\right]\right\rangle_۰ \\ &= -\theta(t-t')\Big(\left\langle\left[\hat{L}(t), \hat{L}(t')\right]\right\rangle_۰ + \left\langle\left[\hat{L}(t), \hat{L}^\dagger(t')\right]\right\rangle_۰ \\ &\qquad -\left\langle\left[\hat{L}^\dagger(t), \hat{L}(t')\right]\right\rangle_۰ - \left\langle\left[\hat{L}^\dagger(t), \hat{L}^\dagger(t')\right]\right\rangle_۰\Big) \end{aligned}$$

جمله‌ی $\left\langle\left[\hat{L}(t), \hat{L}(t')\right]\right\rangle_۰$ شامل جملاتی به صورت زیر است:

$$\left\langle\left(c^\dagger_{۱\nu}\, c_{۲\mu}\right)(t)\ \left(c^\dagger_{۱\nu}\, c_{۲\mu}\right)(t')\right\rangle_۰ = \left\langle c^\dagger_{۱\nu}(t)\ c^\dagger_{۱\nu}(t')\right\rangle_۰ \left\langle c_{۲\mu}(t)\ c_{۲\mu}(t')\right\rangle_۰$$

در نوشتن تساوی بالا از رابطه‌ی (۷۰.۷) استفاده کرده‌ایم. رابطه‌ی بالا بیانگر خلق دو الکترون در سیستم ۱ و نابودی دو الکترون در سیستم ۲ می‌باشد که منجر به از دست رفتن بقای تعداد ذرات در هر کدام از سیستم‌ها می‌شود. در نتیجه عناصر ماتریسی از این نوع صفر خواهند شد. اما قابل توجه است که این جملات برای یک ابررسانا سهم غیرصفر دارند.

به طور مشابه جمله‌ی $\left\langle\left[\hat{L}^\dagger(t),\hat{L}^\dagger(t')\right]\right\rangle_\circ$ صفر است. بنابراین تابع همبستگی به صورت زیر در می‌آید:

$$\begin{aligned}
C^R_{IH_T}(t,t') &= \theta(t-t')\left(\left\langle\left[\hat{L}^\dagger(t),\hat{L}(t')\right]\right\rangle_\circ - \left\langle\left[\hat{L}(t),\hat{L}^\dagger(t')\right]\right\rangle_\circ\right)\\
&= \theta(t-t')\left(\left\langle\left[\hat{L}^\dagger(t),\hat{L}(t')\right]\right\rangle_\circ + \left\langle\left[\hat{L}^\dagger(t),\hat{L}(t')\right]\right\rangle^\dagger_\circ\right)\\
&= ۲\theta(t-t')\ \mathrm{Re}\left\langle\left[\hat{L}^\dagger(t),\hat{L}(t')\right]\right\rangle_\circ
\end{aligned} \tag{۷۱.۷}$$

اکنون می‌توانیم جریان را محاسبه کنیم:

$$\begin{aligned}
\langle I\rangle(t) &= ۲\mathrm{Re}\int_{-\infty}^{\infty} dt'\ \theta(t-t')\left\langle\left[\hat{L}^\dagger(t),\hat{L}(t')\right]\right\rangle_\circ\\
&= ۲\mathrm{Re}\int_{-\infty}^{\infty} dt'\ \theta(t-t')\sum_{\nu\mu}\sum_{\nu'\mu'} T^*_{\mu\nu}\,T_{\mu'\nu'}\left\langle\left[\hat{c}^\dagger_{۲\mu}(t)\ \hat{c}_{۱\nu}(t),\hat{c}^\dagger_{۱\nu'}(t')\ \hat{c}_{۲\mu'}(t')\right]\right\rangle_\circ\\
&= ۲\mathrm{Re}\int_{-\infty}^{\infty} dt'\ \theta(t-t')\sum_{\nu\mu}\sum_{\nu'\mu'} T^*_{\mu\nu}\,T_{\mu'\nu'}\times\\
&\left(\left\langle\hat{c}_{۱\nu}(t)\hat{c}^\dagger_{۱\nu'}(t')\right\rangle_\circ\left\langle\hat{c}^\dagger_{۲\mu}(t)\ \hat{c}_{۲\mu'}(t')\right\rangle_\circ - \left\langle\hat{c}^\dagger_{۱\nu'}(t')\ \hat{c}_{۱\nu}(t)\right\rangle_\circ\left\langle\hat{c}_{۲\mu'}(t')\hat{c}^\dagger_{۲\mu}(t)\right\rangle_\circ\right)
\end{aligned} \tag{۷۲.۷}$$

وابستگی زمانی عملگرها به دلیل جابجایی انرژی در اثر ولتاژهای اعمالی به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\hat{c}_۱(t) = \tilde{c}_۱(t)\ e^{-i(-e)V_۱t} \tag{۷۳.۷}$$

$$\hat{c}_۲(t) = \tilde{c}_۲(t)\ e^{-i(-e)V_۲t} \tag{۷۴.۷}$$

اکنون پایه‌هایی را درنظر می‌گیریم که در آن توابع گرین سیستم ۱و۲ قطری باشند.

$$\begin{aligned}\langle I\rangle(t) &= 2\,\mathrm{Re}\int_{-\infty}^{\infty} dt'\ \theta(t-t')\ \sum_{\nu\mu} |T_{\mu\nu}|^2\ e^{ieV_1(t-t')}\ e^{-ieV_2(t-t')}\ \times \\ &\quad \Big(\Big\langle \tilde{c}_{1\nu}(t)\tilde{c}^{\dagger}_{1\nu}(t')\Big\rangle_0 \Big\langle \tilde{c}^{\dagger}_{2\mu}(t)\ \tilde{c}_{2\mu}(t')\Big\rangle_0 - \Big\langle \tilde{c}^{\dagger}_{1\nu}(t')\ \tilde{c}_{1\nu}(t)\Big\rangle_0 \Big\langle \tilde{c}_{2\mu}(t')\tilde{c}^{\dagger}_{2\mu}(t)\Big\rangle_0\Big) \\ &= 2\,\mathrm{Re}\int_{-\infty}^{\infty} dt'\ \theta(t-t')\ \sum_{\nu\mu} |T_{\mu\nu}|^2\ e^{ie(V_1-V_2)(t-t')}\ \times \\ &\quad \Big(G^{>}_{1\nu}(t-t')\ G^{<}_{2\mu}(t'-t) - G^{>}_{2\mu}(t'-t)\ G^{<}_{1\nu}(t-t')\Big)\end{aligned}$$

اگر در رابطه‌ی بالا تغییر متغیر $t-t' = -\tau$ را اعمال کنیم و اختلاف پتانسیل را به صورت $V = V_1 - V_2$ بگیریم، بدست می‌آوریم:

$$\langle I\rangle = 2\,\mathrm{Re}\int_{-\infty}^{0} d\tau\ \sum_{\nu\mu}\ |T_{\mu\nu}|^2\ e^{-ieV\tau}\Big(G^{>}_{1\nu}(-\tau)\ G^{<}_{2\mu}(\tau) - G^{>}_{2\mu}(\tau)\ G^{<}_{1\nu}(-\tau)\Big) \tag{۷۵.۷}$$

اکنون تبدیل فوریه‌ی توابع گرین را می‌نویسیم:

$$\begin{aligned}\langle I\rangle &= 2\,\mathrm{Re}\int_{-\infty}^{0} d\tau\ \sum_{\nu\mu} |T_{\mu\nu}|^2\ e^{-ieV\tau}\ \times \\ &\quad \Big(\int \frac{d\omega_1}{2\pi}\ e^{-i\omega_1\tau}\ G^{>}_{1\nu}(\omega_1)\ \int \frac{d\omega_2}{2\pi}\ e^{i\omega_2\tau}\ G^{<}_{2\mu}(\omega_2) \\ &\quad -\int \frac{d\omega_2}{2\pi}\ e^{i\omega_2\tau}\ G^{>}_{2\mu}(\omega_2)\ \int \frac{d\omega_1}{2\pi}\ e^{-i\omega_1\tau}\ G^{<}_{1\nu}(\omega_1)\Big) \\ &= 2\,\mathrm{Re}\sum_{\nu\mu} |T_{\mu\nu}|^2\ \int \frac{d\omega_1}{2\pi}\int \frac{d\omega_2}{2\pi}\ \frac{i}{(eV+\omega_1-\omega_2-i\eta)}\ \times \\ &\quad \Big(G^{>}_{1\nu}(\omega_1)\ G^{<}_{2\mu}(\omega_2) - G^{>}_{2\mu}(\omega_2)\ G^{<}_{1\nu}(\omega_1)\Big) \\ &= 2\pi \sum_{\nu\mu} |T_{\mu\nu}|^2\ \int \frac{d\omega_1}{2\pi}\int \frac{d\omega_2}{2\pi}\ \delta(eV+\omega_1-\omega_2)\ \times \\ &\quad \Big(G^{>}_{1\nu}(\omega_1)\ G^{<}_{2\mu}(\omega_2) - G^{>}_{2\mu}(\omega_2)\ G^{<}_{1\nu}(\omega_1)\Big)\end{aligned} \tag{۷۶.۷}$$

که برای رسیدن به رابطه‌ی آخر این گونه عمل کرده‌ایم:

$$\mathrm{Re}\,\frac{i}{(eV+\omega_۱-\omega_۲-i\eta)}=\pi\delta(eV+\omega_۱-\omega_۲)$$

اکنون از روابط (۵۴.۷) و (۵۵.۷) استفاده می‌کنیم و در $\langle I\rangle$ جایگذاری می‌کنیم.

$$G^{>}_{۱\nu}(\omega_۱)\;G^{<}_{۲\mu}(\omega_۲)-G^{>}_{۲\mu}(\omega_۲)\;G^{<}_{۱\nu}(\omega_۱)$$
$$=(۲\pi)^۲\;A_{۱\nu}(\omega_۱)\;A_{۲\mu}(\omega_۲)\;(۱-n_F(\omega_۱))\;n_F(\omega_۲)$$
$$-(۲\pi)^۲\;A_{۱\nu}(\omega_۱)\;A_{۲\mu}(\omega_۲)\;(۱-n_F(\omega_۲))\;n_F(\omega_۱)$$
$$=(۲\pi)^۲\;A_{۱\nu}(\omega_۱)\;A_{۲\mu}(\omega_۲)(n_F(\omega_۲)-n_F(\omega_۱))$$

$$\begin{aligned}\langle I\rangle &= ۲\pi\sum_{\nu\mu}|T_{\mu\nu}|^۲\int d\omega_۱\int d\omega_۲\;\delta(eV+\omega_۱-\omega_۲)\;A_{۱\nu}(\omega_۱)\;A_{۲\mu}(\omega_۲)\\ &\qquad\times\Big(n_F(\omega_۲)-n_F(\omega_۱)\Big)\end{aligned}$$

اگر انتگرال روی $\omega_۲$ را انجام دهیم و سپس تغییر متغیر $\omega\to\omega_۱$ بدهیم، خواهیم داشت:

$$\langle I\rangle(\omega)=۲\pi\sum_{\nu\mu}|T_{\mu\nu}|^۲\int d\omega\;A_{۱\nu}(\omega)\;A_{۲\mu}(\omega+eV)\;(n_F(\omega+eV)-n_F(\omega))\tag{۷۷.۷}$$

معادله‌ی بالا بیان می‌کند که جریان ایجاد شده در سیستم با دو فاکتور تعیین می‌شود: وجود حالت‌ها که با اختلاف توابع اشغال داده می‌شود و چگالی حالت‌ها در یک انرژی مشخص.
اگر فرض کنیم که سیستم ۲ یک فلز باشد، که در این صورت چگالی حالت‌ها برای آن تقریباً ثابت است و داریم:

$$\sum_{\mu}\;|T_{\mu\nu}|^۲\;A_{۲\mu}(\omega+eV)\approx Const.\tag{۷۸.۷}$$

هم چنین برای دماهای پایین تابع زیر را بسط می‌دهیم:

$$(n_F(\omega + eV) - n_F(\omega)) \approx e\ dV\ (\frac{\partial n_F}{\partial \omega}) \tag{۷۹.۷}$$

در دماهای پایین مشتق تابع فرمی، تابع دلتا است:

$$\begin{aligned} d\bar{I} &\approx \int d\omega\ A_{۱\nu}(\omega)\ \delta(\omega + eV)\ dV \\ \frac{d\bar{I}}{dV} &\approx \int d\omega\ A_{۱\nu}(\omega)\ \delta(\omega + eV) = A_{۱\nu}(-eV) \end{aligned} \tag{۸۰.۷}$$

از رابطه‌ی بدست آمده نتیجه می‌گیریم که با داشتن یک سیستم فلزی و با تغییر جریانِ ایجاد شده در دو ماده نسبت به تغییر ولتاژ، می‌توان تابع طیفیِ ماده‌ی دیگر را اندازه بگیریم.

۵.۷ توابع همبستگی سیستم‌های بس ذره‌ای

تا کنون توابع گرین تک ذره را بررسی کردیم که خصوصیات ذرات منفرد را محاسبه می‌کرد. توابع گرینِ مراتب بالاتر، بیانگر پاسخ سیستم کوانتومی به فرایندهای شامل چندین ذره است. یکی از انواع توابع گرینِ مرتبه بالا تابع همبستگی تاخیری است که در تئوری پاسخ خطی ارائه شد. اکنون قصد داریم به عنوان یک مورد خاص به تابع پاسخ بار-بار بپردازیم که به صورت زیر تعریف شد:

$$\chi^R(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = -i\ \theta(t - t')\ \left\langle [\rho(\mathbf{r}, t), \rho(\mathbf{r}', t')] \right\rangle \tag{۸۱.۷}$$

فرض می‌کنیم سیستم ناوردایی تحت انتقال دارد. در این حالت وابستگی χ^R به $\mathbf{r}$ و $\mathbf{r}'$ به صورت $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$ درمی‌آید. برای رفتن به فضای مومنتوم از $\chi^R(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ تبدیل فوریه می‌گیریم.

$$\begin{aligned}
\chi^R(\mathbf{q},t-t') &= \int d\mathbf{r}\ \chi^R(\mathbf{r}-\mathbf{r}',t-t')\ e^{-i\mathbf{q}.(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \\
&= -i\,\theta(t-t') \int d\mathbf{r}\ \Big\langle [\rho(\mathbf{r},t),\rho(\mathbf{r}',t')] \Big\rangle\ e^{-i\mathbf{q}.(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \\
&= -i\,\theta(t-t') \int d\mathbf{r}\ \frac{۱}{v^۲} \sum_{\mathbf{q}_۱\mathbf{q}_۲} \Big\langle [\rho_{\mathbf{q}_۱}(t),\rho_{\mathbf{q}_۲}(t')] \Big\rangle\ e^{i\mathbf{q}_۱.\mathbf{r}+i\mathbf{q}_۲.\mathbf{r}'}\ e^{-i\mathbf{q}.(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \\
&= -i\,\theta(t-t')\ \frac{۱}{v} \sum_{\mathbf{q}_۲} \Big\langle [\rho_{\mathbf{q}}(t),\rho_{\mathbf{q}_۲}(t')] \Big\rangle\ e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{q}_۲).\mathbf{r}'}
\end{aligned} \tag{۸۲.۷}$$

که از رابطه‌ی زیر استفاده کردیم:

$$\frac{۱}{v}\int d\mathbf{r}\ e^{i(\mathbf{q}_۱-\mathbf{q}).\mathbf{r}} = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}_۱}$$

به دلیل این که تبدیل فوریه گرفتیم، تابع نباید به $\mathbf{r}'$ وابسته باشد و تنها زمانی وابستگی از بین می‌رود که $\mathbf{q}_۲=-\mathbf{q}$ انتخاب کنیم. بنابراین تابع پاسخ به صورت زیر در می‌آید:

$$\chi^R(\mathbf{q},t-t') = -i\,\theta(t-t')\ \frac{۱}{v}\ \Big\langle [\rho_{\mathbf{q}}(t),\rho_{-\mathbf{q}}(t')] \Big\rangle \tag{۸۳.۷}$$

وابستگی زمانی عملگر بار برای سیستم الکترون‌های آزاد با توجه به هامیلتونی آن به صورت زیر است:

$$H_\circ = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}\ c^\dagger_{\mathbf{k}}\ c_{\mathbf{k}} \tag{۸۴.۷}$$

$$\rho_{\mathbf{q}}(t) = \sum_{\mathbf{k}}\ e^{i(\xi_{\mathbf{k}}-\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})t}\ c^\dagger_{\mathbf{k}}\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \tag{۸۵.۷}$$

$$\rho_{-\mathbf{q}}(t') = \sum_{\mathbf{k}}\ e^{i(\xi_{\mathbf{k}}-\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})t'}\ c^\dagger_{\mathbf{k}}\ c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \tag{۸۶.۷}$$

حالا روابط وابستگی زمانی را در (۸۳.۷) جایگذاری می‌کنیم. هم چنین از اندیس "۰" استفاده می‌کنیم تا نشان دهیم محاسبات برای سیستم بدون برهم‌کنش انجام می‌شود.

$$\chi^R_\circ(\mathbf{q},t-t') = -i\,\theta(t-t')\ \frac{۱}{v} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \Big\langle [c^\dagger_{\mathbf{k}}\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}, c^\dagger_{\mathbf{k}'}\ c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}] \Big\rangle\ e^{i(\xi_{\mathbf{k}}-\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})t}\ e^{i(\xi_{\mathbf{k}'}-\xi_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}})t'} \tag{۸۷.۷}$$

چون تابع وابستگی به $t-t'$ دارد، بدون از دست دادن کلیت مسئله $t'=0$ قرار می‌دهیم.

$$\begin{aligned}
\chi_0^R(\mathbf{q},t) &= -i\,\theta(t)\,\frac{1}{v}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\left\langle [c_{\mathbf{k}}^{\dagger}\,c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}},c_{\mathbf{k}'}^{\dagger}\,c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}]\right\rangle e^{i(\xi_{\mathbf{k}}-\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})t}\\
&= -i\,\theta(t)\,\frac{1}{v}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\left(\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{q}}\left\langle c_{\mathbf{k}}^{\dagger}\,c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}\right\rangle-\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'-\mathbf{q}}\left\langle c_{\mathbf{k}'}^{\dagger}\,c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\right\rangle\right) e^{i(\xi_{\mathbf{k}}-\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})t}\\
&= -i\,\theta(t)\,\frac{1}{v}\sum_{\mathbf{k}}\left(\left\langle c_{\mathbf{k}}^{\dagger}\,c_{\mathbf{k}}\right\rangle-\left\langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger}\,c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\right\rangle\right) e^{i(\xi_{\mathbf{k}}-\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})t}\\
&= -i\,\theta(t)\,\frac{1}{v}\sum_{\mathbf{k}}\left(n_F(\xi_{\mathbf{k}})-n_F(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})\right) e^{i(\xi_{\mathbf{k}}-\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})t}
\end{aligned}\tag{۸۸.۷}$$

اکنون با تبدیل فوریه به فضای فرکانس می‌رویم:

$$\begin{aligned}
\chi_0^R(\mathbf{q},\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt\; e^{i(\omega+i\eta)t}\,\chi_0^R(\mathbf{q},t)\\
&= -i\int_{0}^{\infty} dt\; e^{i(\omega+i\eta)t}\,\frac{1}{v}\sum_{\mathbf{k}}\left(n_F(\xi_{\mathbf{k}})-n_F(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})\right) e^{i(\xi_{\mathbf{k}}-\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})t}\\
&= \frac{1}{v}\sum_{\mathbf{k}}\frac{n_F(\xi_{\mathbf{k}})-n_F(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{\xi_{\mathbf{k}}-\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}+\omega+i\eta}
\end{aligned}\tag{۸۹.۷}$$

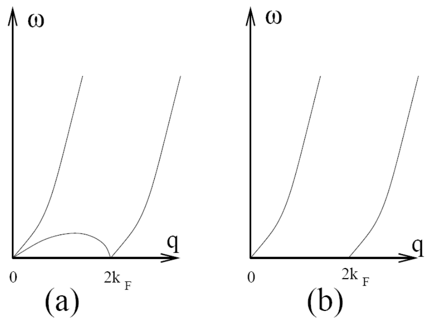
این تابع، تابع لینهارد [۸] نامیده می‌شود.

$$\mathrm{Im}\,\chi_0^R(\mathbf{q},\omega)=\frac{-\pi}{v}\sum_{\mathbf{k}}\left(n_F(\xi_{\mathbf{k}})-n_F(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})\right)\delta(\xi_{\mathbf{k}}-\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}+\omega)\tag{۹۰.۷}$$

با داشتن $\mathrm{Im}\,\chi_0^R(\mathbf{q},\omega)$ می‌توانیم رسانندگی را با رابطه‌ی زیر که در فصل قبل ارائه کردیم، بدست آوریم:

$$\mathrm{Re}\,\sigma(\mathbf{q},\omega)=-\frac{\omega\,e^2}{q^2}\,\mathrm{Im}\,\chi^R(\mathbf{q},\omega)\tag{۹۱.۷}$$

حال باید بررسی کنیم که برای چه مقادیری از $(\mathbf{q},\omega)$ رابطه‌ی (۹۰.۷) غیرصفر است. یعنی این رابطه، برانگیختگی‌های ممکن الکترون–حفره را نشان می‌دهد و به بازه‌ی برانگیختگی‌های ممکن در فضای $(\mathbf{q},\omega)$، پیوستار الکترون–حفره می‌گویند که در شکل (۲.۷) نمایش داده شده‌اند.



شکل ۲.۷: پیوستار الکترون-حفره (a) یک بعد (b) دو بعد و سه بعد

تمرین:

معادله سطح‌ها را در شکل‌های بالا بیابید.

تمرین:

با تعریف انرژی گرافین به صورت زیر، پیوستار الکترون-حفره را برای آن بیابید.

$$\xi_{\mathbf{k}} = v_F \, |\mathbf{k}| - \varepsilon_F \qquad (۹۲.۷)$$

Lindhard function[۸]

فصل ۸
تئوری معادله‌ی حرکت

در فصل قبل آموختیم که چگونه هر مشاهده‌پذیر فیزیکی را براساس توابع گرین بیان کنیم. هم‌چنین روش حل توابع گرین را برای سیستم‌های بدون برهم‌کنش یاد گرفتیم. اما اگر سیستم دارای برهم‌کنش باشد روند حل مسئله چگونه خواهد بود. در این فصل تکنیک معادله‌ی حرکت [۱] را برای سیستم‌ها با برهم‌کنش معرفی می‌کنیم.

۱.۸ تابع گرین تک ذره

یک سیستم فرمیونیِ بدون برهم‌کنش با هامیلتونی زیر توصیف می‌شود:

$$H_\circ = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}\, c^\dagger_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{k}} \tag{۱.۸}$$

که تابع گرین برای آن به صورت زیر است:

$$G^R_{\mathbf{k}}(t) = -i\theta(t) \left\langle \{c_{\mathbf{k}}(t), c^\dagger_{\mathbf{k}}(\circ)\} \right\rangle \tag{۲.۸}$$

در فضای فرکانس تابع گرین را به صورت زیر نمایش می‌دهیم.

$$\begin{aligned} G^R_{\mathbf{k}}(\omega) &= \left\langle\left\langle c_{\mathbf{k}} \mid c^\dagger_{\mathbf{k}} \right\rangle\right\rangle &(۳.۸)\\ &= -i\int_\circ^\infty dt\, e^{i(\omega+i\eta)t} \left\langle \{c_{\mathbf{k}}(t), c^\dagger_{\mathbf{k}}(\circ)\}\right\rangle &(۴.۸)\end{aligned}$$

---
[۱] Equation of motion

در روابط بالا تابع گرین را به صورت $\left\langle\left\langle c_{\mathbf{k}} | c^{\dagger}_{\mathbf{k}} \right\rangle\right\rangle$ نمایش داده‌ایم که بیان می‌کند تابع گرین یک تابع همبستگی است. $\left\langle\left\langle ... \right\rangle\right\rangle$ بیانگر دو میانگین‌گیری است. در حالتی که دما پایین باشد کافی است تنها یک بار نسبت به حالت پایه میانگین گیری کنیم. اما برای دماهای بالا هم باید نسبت به حالت پایه و حالت‌های برانگیخته با وزن $e^{-\beta\varepsilon}$ میانگین گیری کنیم و هم میانگین گیری دمایی انجام دهیم. مشتق زمانی رابطه‌ی (۲.۸) به صورت زیر در می‌آید.

$$
\begin{aligned}
i\partial_t \, G^R_{\mathbf{k}}(t) &= (\partial_t \, \theta(t)) \left\langle \{ c_{\mathbf{k}}(t), c^{\dagger}_{\mathbf{k}}(\circ) \} \right\rangle + \theta(t) \left\langle \{ \partial_t c_{\mathbf{k}}(t), c^{\dagger}_{\mathbf{k}}(\circ) \} \right\rangle \\
&= \delta(t) - i\theta(t) \left\langle \{ [c_{\mathbf{k}}, H](t), c^{\dagger}_{\mathbf{k}}(\circ) \} \right\rangle
\end{aligned} \tag{۵.۸}
$$

اما می‌دانیم که

$$
[c_{\mathbf{k}}, H] = \sum_{\mathbf{k}'} \xi_{\mathbf{k}'} \, [c_{\mathbf{k}}, c^{\dagger}_{\mathbf{k}'} \, c_{\mathbf{k}'}] = \xi_{\mathbf{k}} \, c_{\mathbf{k}} \tag{۶.۸}
$$

بنابراین داریم:

$$
\begin{aligned}
i\partial_t \, G^R_{\mathbf{k}}(t) &= \delta(t) - i \, \xi_{\mathbf{k}} \, \theta(t) \left\langle \{ c_{\mathbf{k}}(t), c^{\dagger}_{\mathbf{k}}(\circ) \} \right\rangle \\
&= \delta(t) + \xi_{\mathbf{k}} \, G^R_{\mathbf{k}}(t) \\
&= \delta(t) + \xi_{\mathbf{k}} \int \frac{d\omega}{۲\pi} \, e^{-i(\omega + i\eta)t} \, G^R_{\mathbf{k}}(\omega)
\end{aligned} \tag{۷.۸}
$$

اما می‌توانیم مشتق بالا را نیز این گونه بگیریم:

$$
\begin{aligned}
i\partial_t \, G^R_{\mathbf{k}}(t) &= i\partial_t \int \frac{d\omega}{۲\pi} \, e^{-i(\omega + i\eta)t} \, G^R_{\mathbf{k}}(\omega) \\
&= \int \frac{d\omega}{۲\pi} \, e^{-i(\omega + i\eta)t} \, (\omega + i\eta) \, G^R_{\mathbf{k}}(\omega)
\end{aligned} \tag{۸.۸}
$$

طرفین روابط (۷.۸) و (۸.۸) را مساوی قرار می‌دهیم.

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i(\omega+i\eta)t} (\omega-\xi_{\mathbf{k}}+i\eta)\, G^R_{\mathbf{k}}(\omega) = \delta(t)$$
$$(\omega-\xi_{\mathbf{k}}+i\eta)\, G^R_{\mathbf{k}}(\omega) = \int dt\, e^{i(\omega+i\eta)t}\, \delta(t)$$
$$(\omega-\xi_{\mathbf{k}}+i\eta)\, G^R_{\mathbf{k}}(\omega) = 1$$
$$G^R_{\mathbf{k}}(\omega) = \frac{1}{(\omega-\xi_{\mathbf{k}}+i\eta)} \tag{۹.۸}$$

که به نتیجه‌ی مشابه با (۳۷.۷) دست یافتیم.

بنابراین هرگاه بخواهیم معادله‌ی حرکت را برای تابع همبستگی بنویسیم، این گونه عمل می‌کنیم:

$$(\omega+i\eta)\left\langle\left\langle c_{\mathbf{k}} \mid c^\dagger_{\mathbf{k}}\right\rangle\right\rangle = 1 + \left\langle\left\langle [c_{\mathbf{k}}, H] \mid c^\dagger_{\mathbf{k}}\right\rangle\right\rangle \tag{۱۰.۸}$$

و در حالت کلی داریم:

$$(\omega+i\eta)\left\langle\left\langle c_{\mathbf{k}} \mid c^\dagger_{\mathbf{k}'}\right\rangle\right\rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \left\langle\left\langle [c_{\mathbf{k}}, H] \mid c^\dagger_{\mathbf{k}'}\right\rangle\right\rangle \tag{۱۱.۸}$$

۲.۸ معادله‌ی دایسون

هنگامی که هامیلتونی از دو بخش تشکیل شده باشد، معادله‌ی دایسون[۲] عمل می‌کند.

$$H = H_0 + V \tag{۱۲.۸}$$

اگر تابع گرین را به صورت زیر در نظر بگیریم، داریم:

$$G(z) = \frac{1}{z-H}, \qquad z = \omega + i\eta \tag{۱۳.۸}$$

$$G(z)\,(z-H) = 1 \tag{۱۴.۸}$$

$$G_0(z)\,(z-H_0) = 1 \tag{۱۵.۸}$$

[۲] Dyson equation

که تابع گرین مربوط به H را با $G(z)$ نمایش داده‌ایم و برای $H_\circ$ را با $G_\circ(z)$. حالا از دو رابطه‌ی بالا بدست می‌آوریم:

$$G^{-1}(z) = (z - H_\circ - V) = (G_\circ^{-1}(z) - V) \tag{۱۶.۸}$$

اگر عبارت بالا از طرف چپ در $G_\circ$ و از راست در G ضرب کنیم، خواهیم داشت:

$$G = G_\circ + G_\circ\, V\, G \tag{۱۷.۸}$$

به رابطه‌ی بالا معادله‌ی دایسون می‌گویند. حال می‌توانیم G را در سمت راست معادله دوباره جایگذاری کنیم:

$$\begin{aligned} G &= G_\circ + G_\circ\, V\, (G_\circ + G_\circ\, V\, G) \\ &= G_\circ + G_\circ\, V\, G_\circ + G_\circ\, V\, G_\circ\, V\, G \end{aligned} \tag{۱۸.۸}$$

و می‌توانیم این کار را بارها و بارها تکرار کنیم.

اگر $H_\circ$ با رابطه‌ی (۱.۸) داده شود، $|\mathbf{k}\rangle = c^\dagger_{\mathbf{k}}\,|\circ\rangle$ به عنوان پایه‌های هامیلتونی هستند. به این معنی که هامیلتونی در این پایه‌ها قطری است.

$$\begin{aligned} \langle\mathbf{k}|G_\circ(z)|\mathbf{k}\rangle &= \langle\mathbf{k}|\frac{۱}{z - H_\circ}|\mathbf{k}\rangle = \frac{۱}{z - \xi_{\mathbf{k}}} \\ G^\circ_{\mathbf{k}}(z) &= \frac{۱}{z - \xi_{\mathbf{k}}} \end{aligned} \tag{۱۹.۸}$$

اگر هامیلتونی دارای دو بخش باشد (رابطه‌ی ۱۲.۸)، آن گاه داریم:

$$G_{\mathbf{k}}(z) = \frac{۱}{z - \xi_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, z)} \tag{۲۰.۸}$$

تمام اثرات ناشی از جمله‌ی V در هامیلتونی در $\Sigma(\mathbf{k}, z)$ قرار گرفته است. به Σ خود انرژی [۳] گفته می‌شود.

[۳] Self energy

۳.۸ مدل اندرسون برای ناخالصی‌های مغناطیسی

برای بیان کاربرد معادله‌ی حرکت، مدل اندرسون را بررسی می‌کنیم. در این مدل فرض می‌کنیم که یک ناخالصی مغناطیسی در یک فلز غیرمغناطیسیِ میزبان قرار گرفته است. فلز میزبان با هامیلتونی غیر برهم‌کنشی توصیف می‌شود:

$$H_\circ = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}}\, c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}\, c_{\mathbf{k}\sigma} \qquad (۲۱.۸)$$

فرض می‌کنیم که یون ناخالصی تنها دارای یک حالت جایگزیده است که مربوط به اوربیتال d است. بنابراین انرژی الکترون‌ها در اوربیتال d را با هامیلتونی H_d بیان می‌کنیم.

$$H_d = \sum_{\sigma} \xi_d\, d^\dagger_\sigma\, d_\sigma \qquad (۲۲.۸)$$

برای ناخالصی انرژی برهم‌کنشی الکترون‌ها را نیز در نظر می‌گیریم که وقتی غیر صفر است که حالت با دو الکترون با اسپین‌های بالا و پایین پر شده باشد.

$$H_U = U\, n_{d\uparrow}\, n_{d\downarrow}, \qquad n_{d\sigma} = d^\dagger_\sigma\, d_\sigma \qquad (۲۳.۸)$$

الکترون‌های نوار رسانشِ فلز میزبان با الکترون‌های اوربیتال d ناخالصی نیز با هم برهم کنش می‌کنند که این برهم کنش را با هامیلتونی زیر بیان می‌کنیم:

$$H_{hyb} = \sum_{\mathbf{k}\sigma'} \left(V_{\mathbf{k}}\, c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}\, d_\sigma + V^*_{\mathbf{k}}\, d^\dagger_\sigma\, c_{\mathbf{k}\sigma} \right) \qquad (۲۴.۸)$$

بنابراین مدل اندرسون با هامیلتونی زیر داده می‌شود:

$$H = H_\circ + H_d + H_U + H_{hyb} \qquad (۲۵.۸)$$

عرض نواری مربوط به ناخالصی را با Γ نمایش می‌دهیم. فاکتور Γ/U در این مسئله بیان می‌کند که اثرات بس ذره‌ای مهم هستند یا نه؟

مسئله‌ی فیزیکی که قصد داریم با استفاده از معادله‌ی حرکت پاسخی برای آن بیابیم این است که تحت چه شرایطی ناخالصی مغناطیسی است؟

در ابتدا فرض می‌کنیم که H_U صفر است. با استفاده از رابطه‌ی (۱۰.۸) معادله‌ی حرکت را به صورت زیر می‌نویسیم:

$$(\omega + i\eta) \left\langle\left\langle d_\sigma | d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle = 1 + \left\langle\left\langle [d_\sigma, H] \mid d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle \tag{۲۶.۸}$$

$$\begin{aligned} [d_\sigma, H] &= \left[d_\sigma \ , \ \sum_{\sigma'} \xi_d \, d_{\sigma'}^\dagger \, d_{\sigma'} + \sum_{\mathbf{k}\sigma'} \left(V_\mathbf{k} \, c_{\mathbf{k}\sigma'}^\dagger \, d_{\sigma'} + V_\mathbf{k}^* \, d_{\sigma'}^\dagger \, c_{\mathbf{k}\sigma'} \right) \right] \\ &= \xi_d \, d_\sigma + \sum_\mathbf{k} V_\mathbf{k}^* \, c_{\mathbf{k}\sigma} \end{aligned} \tag{۲۷.۸}$$

بنابراین بدست می‌آوریم:

$$(\omega + i\eta) \left\langle\left\langle d_\sigma | d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle = 1 + \xi_d \left\langle\left\langle d_\sigma | d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle + \sum_\mathbf{k} V_\mathbf{k}^* \left\langle\left\langle c_{\mathbf{k}\sigma} | d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle \tag{۲۸.۸}$$

اکنون بار دیگر معادله‌ی حرکت را برای تابع همبستگی زیر می‌نویسیم:

$$(\omega + i\eta) \left\langle\left\langle c_{\mathbf{k}\sigma} | d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle = 0 + \left\langle\left\langle [c_{\mathbf{k}\sigma}, H] \mid d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle \tag{۲۹.۸}$$

$$\begin{aligned} [c_{\mathbf{k}\sigma}, H] &= \left[c_{\mathbf{k}\sigma} \ , \ \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \xi_{\mathbf{k}'} \, c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger \, c_{\mathbf{k}'\sigma'} + \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \left(V_{\mathbf{k}'} \, c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger \, d_{\sigma'} + V_{\mathbf{k}'}^* \, d_{\sigma'}^\dagger \, c_{\mathbf{k}'\sigma'} \right) \right] \\ &= \xi_\mathbf{k} \, c_{\mathbf{k}\sigma} + V_\mathbf{k} \, d_\sigma \end{aligned} \tag{۳۰.۸}$$

$$(\omega + i\eta) \left\langle\left\langle c_{\mathbf{k}\sigma} | d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle = \xi_\mathbf{k} \left\langle\left\langle c_{\mathbf{k}\sigma} | d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle + V_\mathbf{k} \left\langle\left\langle d_\sigma | d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle \tag{۳۱.۸}$$

از رابطه بالا بدست می‌آوریم:

$$\left\langle\left\langle c_{\mathbf{k}\sigma} | d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle = \frac{V_\mathbf{k}}{\omega + i\eta - \xi_\mathbf{k}} \left\langle\left\langle d_\sigma | d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle \tag{۳۲.۸}$$

اکنون این رابطه را در (۲۸.۸) جایگذاری می‌کنیم:

$$(\omega + i\eta) \left\langle\left\langle d_\sigma | d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle = ۱ + \xi_d \left\langle\left\langle d_\sigma | d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle + \sum_{\mathbf{k}} \frac{V_{\mathbf{k}}\, V_{\mathbf{k}}^*}{\omega + i\eta - \xi_{\mathbf{k}}} \left\langle\left\langle d_\sigma | d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle \quad (۳۳.۸)$$

$$\left\langle\left\langle d_\sigma | d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle = \frac{۱}{\omega + i\eta - \xi_d - \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^۲}{\omega + i\eta - \xi_{\mathbf{k}}}} \quad (۳۴.۸)$$

می‌توانیم از رابطه‌ی بالا خود انرژی را که در مدل اندرسون با Δ نمایش داده می‌شود، بخوانیم.

$$\Delta(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^۲}{\omega + i\eta - \xi_{\mathbf{k}}} \quad (۳۵.۸)$$

بخش موهومی خود انرژی متناسب با عرض نواری اوربیتال d است.

$$\pi \sum_{\mathbf{k}} |V_{\mathbf{k}}|^۲\, \delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}}) = \Gamma \quad (۳۶.۸)$$

همه‌ی محاسبات بالا به صورت دقیق بدست آمدند.

اکنون جمله‌ی H_U را در نظر می‌گیریم. در حضور H_U در هامیلتونی روابط جابجاگری که در بالا بدست آوردیم، این گونه خواهند شد:

$$[d_\sigma, H] = \xi_d\, d_\sigma + U\, d_\sigma\, n_{d\bar{\sigma}} + \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}}^*\, c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (۳۷.۸)$$

$$[c_{\mathbf{k}\sigma}, H] = \xi_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{k}\sigma} + V_{\mathbf{k}}\, d_\sigma \quad (۳۸.۸)$$

که $\bar{\sigma}$ بیان کننده‌ی اسپین مخالف با σ است. بنابراین معادلات حرکت به صورت زیر در می‌آیند:

$$(\omega + i\eta) \left\langle\left\langle c_{\mathbf{k}\sigma} | d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle = \xi_{\mathbf{k}} \left\langle\left\langle c_{\mathbf{k}\sigma} | d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle + V_{\mathbf{k}} \left\langle\left\langle d_\sigma | d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle \quad (۳۹.۸)$$

$$(\omega + i\eta) \left\langle\left\langle d_\sigma | d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle = ۱ + \xi_d \left\langle\left\langle d_\sigma | d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle + \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}}^* \left\langle\left\langle c_{\mathbf{k}\sigma} | d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle + U \left\langle\left\langle d_\sigma\, n_{d\bar{\sigma}} | d_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle \quad (۴۰.۸)$$

در رابطه بالا $\left\langle\left\langle d_\sigma\, n_{d\bar\sigma}|d_\sigma^\dagger\right\rangle\right\rangle$ تابع همبستگیِ تک ذره نیست. برای رفع این مشکل دو کار می‌توانیم انجام دهیم. اول این که چندین بار از عبارت مشتق بگیریم تا به تابع همبستگیِ تک ذره برسد. کار دیگر این است که به صورت زیر تقریب بزنیم .

$$U\left\langle\left\langle d_\sigma\, n_{d\bar\sigma}|d_\sigma^\dagger\right\rangle\right\rangle = U\left\langle n_{d\bar\sigma}\right\rangle\left\langle\left\langle d_\sigma|d_\sigma^\dagger\right\rangle\right\rangle \quad (۴۱.۸)$$

تقریب بالا چیزی جز تقریب مقدار میانگین نیست. یعنی اگر از ابتدا روی H_U در هامیلتونی تقریب مقدار میانگین می‌زدیم، رابطه‌ی بالا دقیقاً بدست می‌آمد.

$$H_U \approx U\left\langle n_{d\uparrow}\right\rangle n_{d\downarrow} + U\, n_{d\uparrow}\left\langle n_{d\downarrow}\right\rangle \quad (۴۲.۸)$$

$$[d_\sigma, H] = \xi_d\, d_\sigma + U\, d_\sigma\left\langle n_{d\bar\sigma}\right\rangle + \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}}^*\, c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (۴۳.۸)$$

$$(\omega+i\eta)\left\langle\left\langle d_\sigma|d_\sigma^\dagger\right\rangle\right\rangle = ۱ + \xi_d\left\langle\left\langle d_\sigma|d_\sigma^\dagger\right\rangle\right\rangle + \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}}^*\left\langle\left\langle c_{\mathbf{k}\sigma}|d_\sigma^\dagger\right\rangle\right\rangle + U\left\langle n_{d\bar\sigma}\right\rangle\left\langle\left\langle d_\sigma|d_\sigma^\dagger\right\rangle\right\rangle \quad (۴۴.۸)$$

با استفاده از روابط (۳۹.۸) و (۴۴.۸) بدست می‌آوریم:

$$\left\langle\left\langle d_\sigma|d_\sigma^\dagger\right\rangle\right\rangle = \frac{۱}{\omega+i\eta-\xi_d-U\left\langle n_{d\bar\sigma}\right\rangle-\Delta(\omega)} \quad (۴۵.۸)$$

$$\Delta(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^{۲}}{\omega+i\eta-\xi_{\mathbf{k}}}, \qquad \Delta(\omega) = \Delta_R(\omega) - i\Gamma \quad (۴۶.۸)$$

بخش حقیقیِ خود انرژی تنها باعث جابجایی انرژی می‌شود، در نتیجه سهم این جابجایی انرژی را به ξ_d می‌دهیم و انرژی جدید $\tilde\xi_d = \xi_d + \Delta_R$ را تعریف می‌کنیم. هم‌چنین از η در برابر Γ صرفنظر می‌کنیم.

$$\begin{aligned}\left\langle\left\langle d_\sigma|d_\sigma^\dagger\right\rangle\right\rangle &= \frac{۱}{\omega-\tilde\xi_d-U\left\langle n_{d\bar\sigma}\right\rangle+i\Gamma}\\ &= \frac{\omega-\tilde\xi_d-U\left\langle n_{d\bar\sigma}\right\rangle-i\Gamma}{(\omega-\tilde\xi_d-U\left\langle n_{d\bar\sigma}\right\rangle)^{۲}+\Gamma^{۲}}\end{aligned}$$

اکنون با داشتن تابع گرین می‌توانیم تابع طیفی را بدست آوریم:

$$\begin{aligned} A_{d\sigma}(\omega) &= -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,G_d^R(\omega) \\ &= \frac{1}{\pi}\,\frac{\Gamma}{(\omega-\tilde{\xi}_d-U\,\langle n_{d\bar{\sigma}}\rangle)^2+\Gamma^2} \end{aligned} \tag{۴۷.۸}$$

اکنون می‌توانیم خواسته‌ی این بخش را برآورده کنیم. هدف از این محاسبات این بود که ببینیم آیا می‌توانیم در حضور ناخالصی در سیستم مغناطش داشته باشیم یا نه؟ مغناطش که با m نشان داده می‌شود، از رابطه‌ی زیر بدست می‌آید:

$$m = \langle n_{d\uparrow}\rangle - \langle n_{d\downarrow}\rangle \tag{۴۸.۸}$$

بنابراین با استفاده از تابع طیفی $\langle n_{d\sigma}\rangle$ و از رابطه‌ی (۶۱.۷) را محاسبه می‌کنیم.

$$\begin{aligned} \langle n_{d\sigma}\rangle &= \int d\omega\; n_F(\omega)\; A_{d\sigma} \\ &= \int \frac{d\omega}{\pi}\; n_F(\omega)\; \frac{\Gamma}{(\omega-\tilde{\xi}_d-U\,\langle n_{d\bar{\sigma}}\rangle)^2+\Gamma^2} \end{aligned} \tag{۴۹.۸}$$

دما را پایین، $T = 0$،در نظر می‌گیریم. بنابراین در این دما $n_F(\omega)$ با تابع پله توصیف می‌شود و حدود انتگرال بالا را مشخص می‌کند.

$$\begin{aligned} \langle n_{d\sigma}\rangle &= \int_{-\infty}^{0} \frac{d\omega}{\pi}\; \frac{\Gamma}{(\omega-\tilde{\xi}_d-U\,\langle n_{d\bar{\sigma}}\rangle)^2+\Gamma^2} \\ &= \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi}\,\tan^{-1}\left(\frac{\tilde{\xi}_d+U\,\langle n_{d\bar{\sigma}}\rangle}{\Gamma}\right) && (۵۰.۸) \\ &= \frac{1}{\pi}\,\cot^{-1}\left(\frac{\tilde{\xi}_d+U\,\langle n_{d\bar{\sigma}}\rangle}{\Gamma}\right) && (۵۱.۸) \end{aligned}$$

همان گونه که از رابطه‌ی بالا مشخص است، $\langle n_{d\sigma}\rangle$ به $\langle n_{d\bar{\sigma}}\rangle$ وابسته است. بنابراین باید معادلات برای اسپین بالا و پایین را به روش خودسازگار حل کنیم.

با در نظر گرفتن متغیرهای جدید x و y معادلات خودسازگار به صورت زیر درمی‌آیند.

$$\cot(\pi n_\uparrow) = (n_\downarrow - x)\,y, \qquad x = -\tilde{\xi}_d/U \tag{۵۲.۸}$$

$$\cot(\pi n_\downarrow) = (n_\uparrow - x)\,y, \qquad y = U/\Gamma \tag{۵۳.۸}$$

تمرین:

با حل معادلات خودسازگار بالا ناحیه‌ای که دارای مغناطش است، بیابید.

۴.۸ تابع همبستگی دو ذره‌ای

در این بخش قصد داریم معادله‌ی حرکت را برای توابع همبستگیِ مرتبه ۲ بنویسیم. یکی از این توابع، تابع همبستگی بار-بار است که با رابطه‌ی زیر داده می‌شود:

$$\chi^R(\mathbf{q},t) = \frac{-i}{v}\,\theta(t)\,\Big\langle\big[\rho(\mathbf{q},t),\rho(-\mathbf{q},۰)\big]\Big\rangle \qquad (۵۴.۸)$$

محاسبات را برای گاز الکترونی ناوردا تحت انتقال در بار زمینه‌ی مثبت انجام می‌دهیم. بنابراین هامیلتونی سیستم به صورت زیر خواهد بود که جمله‌ی $q=۰$ به دلیل وجود بار زمینه از جمع حذف شده است.

$$\begin{aligned} H &= H_{۰}+V \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}\, c^\dagger_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{k}} + \frac{۱}{۲v} \sum_{\substack{\mathbf{kpq}\\ \mathbf{q}\neq ۰}} V(q)\, c^\dagger_{\mathbf{k+q}}\, c^\dagger_{\mathbf{p-q}}\, c_{\mathbf{p}}\, c_{\mathbf{k}} \end{aligned} \qquad (۵۵.۸)$$

با توجه به عملگر چگالی ذره به صورت زیر

$$\rho_{\mathbf{q}} =\sim_{\mathbf{k}}\ c^\dagger_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{k+q}} \qquad (۵۶.۸)$$

برای تابع همبستگی بار-بار داریم:

$$\chi^R(\mathbf{q},t) = -\frac{i}{v}\theta(t)\ \sum_{\mathbf{k}}\ \Big\langle\big[(c^\dagger_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{k+q}})(t),\rho(-\mathbf{q},۰)\big]\Big\rangle \qquad (۵۷.۸)$$

برای سادگی محاسبات از یک کمیت کمکی استفاده می‌کنیم:

$$\chi^R(\mathbf{q},t) = \frac{۱}{v}\sum_{\mathbf{k}}\ \tilde{\chi}_{\mathbf{kq}} \qquad (۵۸.۸)$$

$$\tilde{\chi}_{\mathbf{kq}} = -i\theta(t)\,\Big\langle\big[(c^\dagger_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{k+q}})(t),\rho(-\mathbf{q},۰)\big]\Big\rangle \qquad (۵۹.۸)$$

اکنون معادله‌ی حرکت را برای کمیت کمکی می‌نویسیم:

$$\begin{aligned} i\partial_t\,\tilde{\chi}_{\mathbf{kq}} &= \delta(t)\,\Big\langle\Big[(c^\dagger_{\mathbf{k}}\,c_{\mathbf{k+q}}),\rho(-\mathbf{q})\Big]\Big\rangle - i\theta(t)\,\Big\langle\Big[i\partial_t(c^\dagger_{\mathbf{k}}\,c_{\mathbf{k+q}})(t),\rho(-\mathbf{q})\Big]\Big\rangle \\ &= \delta(t)\,\Big\langle\Big[(c^\dagger_{\mathbf{k}}\,c_{\mathbf{k+q}}),\rho(-\mathbf{q})\Big]\Big\rangle - i\theta(t)\,\Big\langle\Big[[c^\dagger_{\mathbf{k}}\,c_{\mathbf{k+q}},H](t),\rho(-\mathbf{q})\Big]\Big\rangle \end{aligned} \tag{۶۰.۸}$$

جمله‌ی اول در طرف راست معادله‌ی بالا به صورت زیر است:

$$\begin{aligned} \Big\langle\Big[(c^\dagger_{\mathbf{k}}\,c_{\mathbf{k+q}}),\rho(-\mathbf{q})\Big]\Big\rangle &= \Big\langle\Big[c^\dagger_{\mathbf{k}}\,c_{\mathbf{k+q}},\sum_{\mathbf{p}}c^\dagger_{\mathbf{p}}\,c_{\mathbf{p-q}}\Big]\Big\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{p}}\Big(\delta_{\mathbf{p},\mathbf{k+q}}\,\langle c^\dagger_{\mathbf{k}}\,c_{\mathbf{p-q}}\rangle - \delta_{\mathbf{k},\mathbf{p-q}}\,\langle c^\dagger_{\mathbf{p}}\,c_{\mathbf{k+q}}\rangle\Big) \\ &= n_F(\xi_{\mathbf{k}}) - n_F(\xi_{\mathbf{k+q}}) \end{aligned} \tag{۶۱.۸}$$

برای محاسبه‌ی جمله‌ی دوم در ابتدا باید $[c^\dagger_{\mathbf{k}}\,c_{\mathbf{k+q}},H_\circ+V]$ را بدست آوریم:

$$\begin{aligned} [c^\dagger_{\mathbf{k}}\,c_{\mathbf{k+q}},H_\circ] &= \sum_{\mathbf{k}'}\xi_{\mathbf{k}'}\,(\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k+q}}\,c^\dagger_{\mathbf{k}}\,c_{\mathbf{k}'} - \delta_{\mathbf{kk}'}\,c^\dagger_{\mathbf{k}'}\,c_{\mathbf{k+q}}) \\ &= (\xi_{\mathbf{k+q}}-\xi_{\mathbf{k}})\,c^\dagger_{\mathbf{k}}\,c_{\mathbf{k+q}} \end{aligned} \tag{۶۲.۸}$$

$$\begin{aligned} [c^\dagger_{\mathbf{k}}\,c_{\mathbf{k+q}},V] = \frac{۱}{۲v}\sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}'\neq\circ}V(\mathbf{q}')\,\Big(&c^\dagger_{\mathbf{k+q}'}c^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}'}c_{\mathbf{k}'}c_{\mathbf{k+q}} + c^\dagger_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}c^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'}c_{\mathbf{k+q}}c_{\mathbf{k}'} \\ &- c^\dagger_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}c^\dagger_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k+q}}c_{\mathbf{k}'} - c^\dagger_{\mathbf{k}}c^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}'}c_{\mathbf{k}'}c_{\mathbf{k+q-q}'}\Big) \end{aligned} \tag{۶۳.۸}$$

اگر عبارت بالا را در (۶۰.۸) قرار دهیم، توابع گرین ۶ ذره‌ای ایجاد می‌شود. به همین دلیل از تقریب فاز تصادفی [۴] استفاده می‌کنیم که تقریب میدان میانگین عبارت بالا را به‌کار می‌گیرید.

$$[c_{\mathbf{k}}^{\dagger}\, c_{\mathbf{k+q}}, V] \approx \frac{۱}{۲v} \sum_{\mathbf{k'q'}\neq ۰} V(\mathbf{q'}) \Big(\langle c_{\mathbf{k+q'}}^{\dagger} c_{\mathbf{k+q}}\rangle c_{\mathbf{k'-q'}}^{\dagger} c_{\mathbf{k'}} + c_{\mathbf{k+q'}}^{\dagger} c_{\mathbf{k+q}} \langle c_{\mathbf{k'-q'}}^{\dagger} c_{\mathbf{k'}}\rangle$$
$$+\langle c_{\mathbf{k-q'}}^{\dagger} c_{\mathbf{k+q}}\rangle c_{\mathbf{k'+q'}}^{\dagger} c_{\mathbf{k'}} + c_{\mathbf{k-q'}}^{\dagger} c_{\mathbf{k+q}} \langle c_{\mathbf{k'+q'}}^{\dagger} c_{\mathbf{k'}}\rangle$$
$$-\langle c_{\mathbf{k'+q'}}^{\dagger} c_{\mathbf{k'}}\rangle c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k+q+q'}} - c_{\mathbf{k'+q'}}^{\dagger} c_{\mathbf{k'}} \langle c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k+q+q'}}\rangle$$
$$-\langle c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k+q-q'}}\rangle c_{\mathbf{k'-q'}}^{\dagger} c_{\mathbf{k'}} - c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k+q-q'}} \langle c_{\mathbf{k'-q'}}^{\dagger} c_{\mathbf{k'}}\rangle + \ldots \Big) \quad (۶۴.۸)$$

قابل توجه است که جمله‌های ثابت و تبادلی که در تقریب هارتری-فوک به‌کار برده شد را در این‌جا وارد نکرده‌ایم.

$$[c_{\mathbf{k}}^{\dagger}\, c_{\mathbf{k+q}}, V] \approx \frac{۱}{v} V(\mathbf{q}) \Big(n_F(\xi_{\mathbf{k+q}}) - n_F(\xi_{\mathbf{k}}) \Big) \sum_{\mathbf{k'}} c_{\mathbf{k'-q}}^{\dagger} c_{\mathbf{k'}} \quad (۶۵.۸)$$

با توجه به محاسبات بالا، رابطه‌ی (۶۰.۸) را بازنویسی می‌کنیم.

$$\begin{aligned} i\partial_t\, \tilde{\chi}_{\mathbf{kq}} &= \delta(t) \Big(n_F(\xi_{\mathbf{k}}) - n_F(\xi_{\mathbf{k+q}})\Big) - i\theta(t) \Big(\xi_{\mathbf{k+q}} - \xi_{\mathbf{k}}\Big) \Big\langle \Big[(c_{\mathbf{k}}^{\dagger}\, c_{\mathbf{k+q}})(t), \rho(-\mathbf{q}) \Big] \Big\rangle \\ &\quad -i\theta(t) \Big(n_F(\xi_{\mathbf{k}}) - n_F(\xi_{\mathbf{k+q}})\Big) V(\mathbf{q}) \frac{۱}{v} \sum_{\mathbf{k'}} \Big\langle \Big[(c_{\mathbf{k'}}^{\dagger}\, c_{\mathbf{k'+q}})(t), \rho(-\mathbf{q}) \Big] \Big\rangle \\ &= \delta(t) \Big(n_F(\xi_{\mathbf{k}}) - n_F(\xi_{\mathbf{k+q}})\Big) \Big(\xi_{\mathbf{k+q}} - \xi_{\mathbf{k}}\Big) + \Big(\xi_{\mathbf{k+q}} - \xi_{\mathbf{k}}\Big) \tilde{\chi}_{\mathbf{kq}} \\ &\quad + \Big(n_F(\xi_{\mathbf{k}}) - n_F(\xi_{\mathbf{k+q}})\Big) V(\mathbf{q})\, \chi^R(\mathbf{q}, t) \end{aligned} \quad (۶۶.۸)$$

اکنون از عبارت بالا تبدیل فوریه می‌گیریم:

$$\Big(\omega - \xi_{\mathbf{k+q}} + \xi_{\mathbf{k}}\Big)\, \tilde{\chi}_{\mathbf{kq}}(\omega) = \Big(n_F(\xi_{\mathbf{k}}) - n_F(\xi_{\mathbf{k+q}})\Big) (۱ + V(\mathbf{q})\, \chi^R(\mathbf{q}, \omega))$$

$$\tilde{\chi}_{\mathbf{kq}}(\omega) = \frac{n_F(\xi_{\mathbf{k}}) - n_F(\xi_{\mathbf{k+q}})}{\omega - \xi_{\mathbf{k+q}} + \xi_{\mathbf{k}}} \Big(۱ + V(\mathbf{q})\, \chi^R(\mathbf{q}, \omega)\Big) \quad (۶۷.۸)$$

[۴] Random phase approximation

قابل توجه است که چون تابع همبستگی تاخیری را محاسبه می‌کنیم، منظور از ω همان $\omega + i\eta$ می‌باشد.

$$\begin{aligned}
\chi^{R,RPA}(\mathbf{q},\omega) &= \frac{1}{v}\sum_{\mathbf{k}} \tilde{\chi}_{\mathbf{kq}}(\omega) \\
&= \left(\frac{1}{v}\sum_{\mathbf{k}} \frac{n_F(\xi_{\mathbf{k}}) - n_F(\xi_{\mathbf{k+q}})}{\omega + i\eta - \xi_{\mathbf{k+q}} + \xi_{\mathbf{k}}}\right)\Big(1 + V(\mathbf{q})\,\chi^{R,RPA}(\mathbf{q},\omega)\Big) \\
&= \chi^R_\circ(\mathbf{q},\omega)\,\Big(1 + V(\mathbf{q})\,\chi^{R,RPA}(\mathbf{q},\omega)\Big) \qquad (۶۸.۸)
\end{aligned}$$

که $\chi^R_\circ(\mathbf{q},\omega)$ همان تابع لینهارد (تابع همبستگی بار-بار در غیاب برهم‌کنش) است.

$$\chi^{R,RPA}(\mathbf{q},\omega) = \frac{\chi^R_\circ(\mathbf{q},\omega)}{1 - V(\mathbf{q})\,\chi^R_\circ(\mathbf{q},\omega)} \qquad (۶۹.۸)$$

فصل ۹
توابع گرین زمان موهومی

مشاهده‌پذیرهای فیزیکی اغلب شکل توابع گرین را دارند و یا می‌توانند به روشی ساده از توابع گرین بدست بیایند. در این فصل تکنیک ریاضی را بیان خواهیم کرد که هیچ معنی فیزیکی ندارد، در این روش فرکانس و زمان را موهومی در نظر می‌گیریم. تابع همبستگی را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$C_{AB}(t,t') \;=\; - < A(t)\; B(t') > \tag{۱.۹}$$

که تعریف ابتدا به ساکن آن به شکل زیر است:

$$C_{AB} \;=\; -\frac{۱}{Z}\, Tr(e^{-\beta H}\; A(t)\; B(t')) \tag{۲.۹}$$

فرض می‌کنیم که $H \,=\, H_\circ + V$ است، پس می‌توان از تصویر برهمکنشی استفاده کرد و عبارت حاصل‌ضرب دو عملگر را به‌صورت زیر نوشت:

$$A(t)\; B(t') \;=\; \hat{U}(\circ,t)\; \hat{A}(t)\; \hat{U}(t,t')\; \hat{B}(t')\; \hat{U}(t',\circ) \tag{۳.۹}$$

از طرفی عملگر تحول زمانی و عملگر وابسته به زمان را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$\hat{U}(t,t') \;=\; e^{iH_\circ t}\; e^{-iH(t-t')}\; e^{-iH_\circ t} \tag{۴.۹}$$

$$\hat{A}(t) \;=\; e^{iH_\circ t}\; A\; e^{-iH_\circ t} \tag{۵.۹}$$

با جایگذاری دو رابطه‌ی فوق در رابطه‌ی ۳.۹ می‌توان آن را اثبات کرد، یعنی داریم:

$$A(t)\ B(t') = (e^{iH_\circ \circ}\ e^{-iH(\circ - t)}\ e^{-iH_\circ t})\ (e^{iH_\circ t}\ A\ e^{-iH_\circ t})$$

$$(e^{iH_\circ t}\ e^{-iH(t-t')}\ e^{-iH_\circ t'})\ (e^{iH_\circ t'}\ B\ e^{-iH_\circ t'})\ (e^{iH_\circ t'}\ e^{-iH(t'-\circ)}\ e^{-iH_\circ \circ})$$

$$= e^{iHt}\ A\ e^{-iHt}\ e^{iHt'}\ B\ e^{-iHt'} = A(t)\ B(t') \quad (۶.۹)$$

حال با جایگذاری رابطه‌ی (۳.۹) در رابطه‌ی (۲.۹) خواهیم داشت:

$$C_{AB}(t,t') = -\frac{۱}{Z}\, Tr(e^{-\beta H}\ \hat{U}(\circ, t)\ \hat{A}(t)\ \hat{U}(t,t')\ \hat{B}(t')\ \hat{U}(t', \circ)) \quad (۷.۹)$$

حال لم ریاضی زیر را بکار می‌بریم:

$$\tau = it = te^{i\frac{\pi}{۲}} \quad \Rightarrow \quad \tau \text{ is } it \quad (۸.۹)$$

یعنی محور زمان را به اندازه‌ی ۹۰ درجه چرخانده‌ایم و زمان‌ها موهومی شده‌اند. با این کار تمام توان‌ها در رابطه‌ی (۷.۹) شبیه $e^{-\beta H}$ می‌شوند و دیگر نوسانی نیستند بلکه میرا می‌شوند و بنابراین کار با آن‌ها ساده‌تر است. با این تبدیل روابط (۴.۹) و (۵.۹) و نیز (۳.۹) به شکل زیر خواهند شد:

$$\hat{U}(t,t') = e^{H_\circ \tau}\ e^{-H(\tau - \tau')}\ e^{-H_\circ \tau} \quad (۹.۹)$$

$$\hat{A}(t) = e^{H_\circ \tau}\ A\ e^{-H_\circ \tau} \quad (۱۰.۹)$$

$$A(\tau)\ B(\tau') = \hat{U}(\circ, \tau)\ \hat{A}(\tau)\ \hat{U}(\tau, \tau')\ \hat{B}(\tau')\ \hat{U}(\tau', \circ) \quad (۱۱.۹)$$

حال $\hat{U}(\beta, \circ)$ را حساب می‌کنیم، داریم:

$$\hat{U}(\beta, \circ) = e^{H_\circ \beta}\ e^{-H(\beta - \circ)}\ e^{-H_\circ \circ} = e^{H_\circ \beta}\ e^{-H\beta}$$

$$\rightarrow \ e^{-\beta H} = e^{-\beta H_\circ}\ \hat{U}(\beta, \circ) \quad (۱۲.۹)$$

با جایگذاری رابطه‌ی فوق در رابطه‌ی (۷.۹) و سپس استفاده ار تبدیل زمان موهومی خواهیم داشت:

$$C_{AB}(\tau,\tau') \;=\; -\frac{1}{Z}\,Tr(e^{-\beta H_\circ}\;\hat{U}(\beta,\tau)\;\hat{A}(\tau)\;\hat{U}(\tau,\tau')\;\hat{B}(\tau')\;\hat{U}(\tau',\circ)) \qquad (۱۳.۹)$$

که در آن $\hat{U}(\beta,\tau)=\hat{U}(\beta,\circ)\hat{U}(\circ,\tau)$ است. می‌بینیم که دما $(\beta=\frac{1}{k_BT})$ یک زمان است که روی محور موهومی تعریف می‌شود. دمای صفر متناظر با $\beta\to\infty$ است و دمای غیر صفر متناظر با β متناهی است. از طرفی با استفاده از رابطه‌ی (۱۲.۹) برای تابع پارش می‌توان گفت:

$$Z=Tr(e^{-\beta H})=Tr(e^{-\beta H_\circ}\;\hat{U}(\beta,\circ)) \qquad (۱۴.۹)$$

و نیز متوسط هر عملگر دلخواه O در پایه ویژه توابع هامیلتونی $H_\circ$ به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$<O>_\circ=\frac{1}{Z_\circ}Tr(e^{-\beta H_\circ}\;O)$$

$$Z_\circ\;<O>_\circ=Tr(e^{-\beta H_\circ}O) \qquad (۱۵.۹)$$

با مقایسه‌ی روابط (۱۴.۹) و (۱۵.۹) می‌توان گفت:

$$Z=Z_\circ\;<\hat{U}(\beta,\circ)>_\circ \qquad (۱۶.۹)$$

بنابراین رابطه‌ی (۱۳.۹) به شکل زیر خواهد شد:

$$\begin{aligned} C_{AB}(\tau,\tau') &= -\frac{Z_\circ\;<\hat{U}(\beta,\tau)\;\hat{A}(\tau)\;\hat{U}(\tau,\tau')\;\hat{B}(\tau')\;\hat{U}(\tau',\circ)>_\circ}{Z_\circ\;<\hat{U}(\beta,\circ)>_\circ} \\ \to\quad <A(\tau)\;B(\tau')> &= -\frac{<\hat{U}(\beta,\tau)\;\hat{A}(\tau)\;\hat{U}(\tau,\tau')\;\hat{B}(\tau')\;\hat{U}(\tau',\circ)>_\circ}{<\hat{U}(\beta,\circ)>_\circ} \end{aligned} \qquad (۱۷.۹)$$

می‌بینیم که متوسط گیری‌ها در پایه‌ی ویژه توابع $H_\circ$ محاسبه می‌شوند، البته به شرطی که عبارت‌های پیچیده‌تری نسبت به حاصل ضرب تنها دو عملگر، محاسبه شوند.

۱.۹ تعریف تابع گرین ماتسوبارا

حال نشان می‌دهیم که $C_{AB}(\tau,\tau')$، تنها به تفاضل $(\tau-\tau')$ وابسته است:

$$\begin{aligned} C_{AB}(\tau,\tau') &= -\frac{۱}{Z}\, Tr(e^{-\beta H}\ A(\tau)\ B(\tau')) \\ &= -\frac{۱}{Z}\, Tr(e^{-\beta H}\ e^{\tau H}\ A\, e^{-\tau H}\ e^{\tau' H}\ B\, e^{-\tau' H}) \end{aligned} \qquad (۱۸.۹)$$

بنا به خاصیت دوره‌ای بودن تریس، عملگر آخری $(e^{\tau' H})$ می‌تواند به ابتدای تریس بیاید و سپس با $e^{-\beta H}$ جابجا شود، بنابراین داریم:

$$\begin{aligned} C_{AB}(\tau,\tau') &= -\frac{۱}{Z}\, Tr(e^{-\beta H}\ e^{(\tau-\tau')H}\ A\, e^{-(\tau-\tau')H}\ B) \\ &= -\frac{۱}{Z}\, Tr(e^{-\beta H}\ A(\tau-\tau')\ B(۰)) = C_{AB}(\tau-\tau', ۰) \end{aligned} \qquad (۱۹.۹)$$

بنابراین در ادامه $\tau-\tau' \ \rightarrow \tau$ می‌نویسیم.

تابع همبستگی ماتسوبارا را معمولاً به استفاده از عملگر ترتیب زمانی می‌نویسند و بالانویس F را به معنای تابع گرینی از نوع فاینمن نیز اضافه می‌کنند، یعنی داریم:

$$C^{F}_{AB}(\tau) = -T_\tau\ < A(\tau)\ B(۰) > \qquad (۲۰.۹)$$

و با فرض اینکه $۰ < \tau$ باشد و در نظر گرفتن حالت بوزونی یا فرمیونی با علامت‌های مثبت و منفی داریم:

$$C^{F}_{AB}(\tau) = -(\pm)\ < B\ A(\tau) > \qquad (۲۱.۹)$$

حال تابع گرین ماتسوبارا را در زمان $\tau+\beta$ محاسبه می‌کنیم، داریم:

$$C^{F}_{AB}(\tau+\beta) \ = -T_\tau\ < A(\tau+\beta)\ B(۰) > \qquad (۲۲.۹)$$

برای $-\beta < \tau < 0$ همواره $\tau + \beta > 0$ است، پس می‌توان علامت ترتیب زمانی را ننوشت، با نوشتن تعریف ابتدا به ساکن متوسط‌گیری خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} C^F_{AB}(\tau+\beta) &= - < A(\tau+\beta)\ B(0) > \\ &= -\frac{1}{Z}\ Tr(e^{-\beta H}\ e^{(\tau+\beta)H}\ A\ e^{-(\tau+\beta)H}\ B) \\ &= -\frac{1}{Z}\ Tr(B\ e^{\tau H}\ A\ e^{-\tau H}\ e^{-\beta)H}) \\ &= -\frac{1}{Z}\ Tr(e^{-\beta)H}\ B\ e^{\tau H}\ A\ e^{-\tau H}) \\ &= - < B(0)\ A(\tau) > \end{aligned} \tag{۲۳.۹}$$

که در بدست آوردن رابطه‌ی فوق از خاصیت دوره‌ای بودن تریس و نیز جابجاگری استفاده شده است. با مقایسه‌ی روابط (۲۱.۹) و (۲۳.۹) نتیجه می‌گیریم:

$$C^F_{AB}(\tau+\beta) = \pm\ C^F_{AB}(\tau) \tag{۲۴.۹}$$

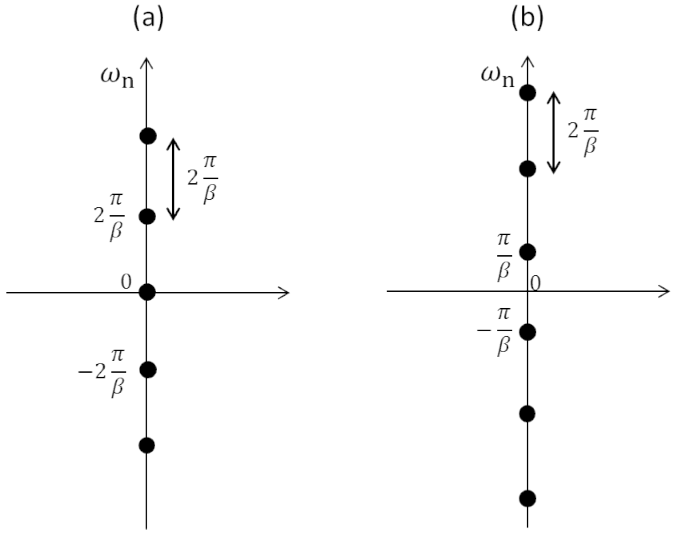
رابطه‌ی فوق خاصیت تناوبی یا پادتناوبی بودن تابع گرین ماتسوبارا را به ترتیب برتی فرمیون‌ها و بوزون‌ها را در بازه‌ی $\beta > \tau > 0$ را بیان می‌کند. البته اگر محاسبات را در بازه‌ی $-\beta < \tau < \beta$ انجام دهیم، تابع گرین ماتسوبارا چه برای بوزون‌ها و چه فرمیون‌ها تناوبی (با دوره‌ی تناوب 2β) است.

حال زمان موهومی را به‌صورت در نظر $\beta > \tau > 0$ می‌گیریم و با استفاده از رابطه‌ی تبدیل فوریه‌ی گسسته تابع $C_{AB}(\tau)$ را به‌صورت زیر بسط می‌دهیم:

$$C_{AB}(\tau) = \frac{1}{\beta}\sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n\tau}\ C_{AB}(n) \tag{۲۵.۹}$$

رابطه‌ی (۲۴.۹) را با استفاده از رابطه (۲۵.۹) می‌توان به‌صورت زیر نوشت:

$$\frac{1}{\beta}\sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n(\tau+\beta)}\ C_{AB}(n) = \pm\frac{1}{\beta}\sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n\tau}\ C_{AB}(n) \tag{۲۶.۹}$$



شکل ۱.۹: نمایش مش‌بندی فرکانس‌های ماتسوبارای a بوزونی و b فرمیونی

بنابراین برای برقراری تساوی فوق خواهیم داشت:

$$\begin{cases} \text{Fermions:} \quad e^{-i\omega_n\beta} = -۱ \quad \Rightarrow \quad \omega_n = \frac{(۲n+۱)\pi}{\beta} \\ \text{Bosons:} \quad e^{-i\omega_n\beta} = +۱ \quad \Rightarrow \quad \omega_n = \frac{(۲n)\pi}{\beta} \end{cases} \tag{۲۷.۹}$$

به فرکانس‌هایی که در رابطه‌ی فوق صدق کنند فرکانس‌های ماتسوبارا می‌گویند که یک سری فرکانس‌های گسسته روی محور موهومی هستند. برای فرمیون‌ها فرکانس صفر نداریم ولی برای بوزون‌ها داریم، شکل (۱.۹) را ببینید. به عبارت دیگر دما به‌صورت فاصله‌ی بین مش‌بندی برای فرکانس‌ها ($\frac{۲\pi}{\beta} =$ $۲\pi k_B T$) ظاهر شده است. در دمای صفر فاصله‌ی بین مش‌بندی‌ها صفر می‌شود و پیوسته می‌شوند. معکوس رابطه‌ی (۲۵.۹) را می‌توان به‌صورت زیر در نظر گرفت:

$$C_{AB}(n) = \frac{۱}{۲} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau \, e^{i\omega_n\tau} \, C_{AB}(\tau) \tag{۲۸.۹}$$

در رابطه‌ی فوق حدود انتگرال طوری است که در آن هر دو حالت فرمیونی و بوزونی تناوبی هستند. حال می‌توان به شکلی دیگر بوزونی و فرمیونی بودن را لحاظ کرد، یعنی رابطه‌ی فوق را به شکل زیر می‌نویسیم:

$$C_{AB}(n) = \frac{۱}{۲} \int_{-\beta}^{\circ} d\tau\, e^{i\omega_n \tau}\, C_{AB}(\tau) \;+\; \frac{۱}{۲} \int_{\circ}^{\beta} d\tau\, e^{i\omega_n \tau}\, C_{AB}(\tau) \qquad (۲۹.۹)$$

در انتگرال اول تغییر متغیر $\tilde{\tau} = \tau + \beta$ را انجام می‌دهیم که طی آن اگر $\tau \in [-\beta, \circ]$ باشد، آنگاه $\tilde{\tau} \in [\circ, \beta]$ است و بنابراین داریم:

$$C_{AB}(n) = \frac{۱}{۲} \int_{\circ}^{\beta} d\tilde{\tau}\, e^{i\omega_n \tilde{\tau}}\, e^{-i\omega_n \beta}\, C_{AB}(\tilde{\tau} - \beta) \;+\; \frac{۱}{۲} \int_{\circ}^{\beta} d\tau\, e^{i\omega_n \tau}\, C_{AB}(\tau) \qquad (۳۰.۹)$$

برای فرمیون‌ها $C_{AB}(\tilde{\tau} - \beta) = -C_{AB}(\tilde{\tau})$ است و با تبدیل $\tilde{\tau}$ به τ خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} C_{AB}(n) &= -\frac{۱}{۲} \int_{\circ}^{\beta} d\tau\, e^{i\omega_n \tau}\, e^{-i\omega_n \beta}\, C_{AB}(\tau) \;+\; \frac{۱}{۲} \int_{\circ}^{\beta} d\tau\, e^{i\omega_n \tau}\, C_{AB}(\tau) \\ &= \frac{۱}{۲} \int_{\circ}^{\beta} d\tau\, e^{i\omega_n \tau}\, (۱ - e^{-i\omega_n \beta})\, C_{AB}(\tau) \qquad (۳۱.۹) \end{aligned}$$

که عبارت $(۱ - e^{-i\omega_n \beta})$ برای فرمیون‌ها همواره برابر با ۲ است، بنابراین داریم:

$$C_{AB}(n) = \int_{\circ}^{\beta} d\tau\, e^{i\omega_n \tau}\, C_{AB}(\tau) \qquad (۳۲.۹)$$

با انجام محاسبات مشابه برای بوزن‌ها نیز به نتیجه‌ی فوق دست می‌یابیم، تنها باید این نکته را در ذهن داشته باشیم که ω_n ها در رابطه‌ی فوق همان فرکانس‌های ماتسوبارای بوزونی و فرمیونی هستند. یعنی داریم:

۲.۹ رابطه‌ی بین تابع گرین ماتسوبارا و تابع گرین تأخیری

قبلاً در فرمولبندی دمای صفر به رابطه‌ی زیر برای تابع گرین تأخیری در فضای فرکانس رسیدیم:

$$C^R_{AB}(\omega) = \frac{۱}{Z} \sum_{nn'} \frac{< n|A|n' >< n'|B|n >}{\omega + E_n - E_{n'} + i\eta}\, (e^{-\beta E_n} - (\pm) e^{-\beta E_{n'}}) \qquad (۳۳.۹)$$

در ادامه بسط لهمان تابع گرین ماتسوبارا را می‌نویسیم و نتیجه را با رابطه‌ی فوق مقایسه می‌کنیم:

$$C_{AB}(\tau) = - < A(\tau)\ B >= -\frac{۱}{Z}\ Tr(e^{-\beta H}\ e^{\tau H}\ A\ e^{-\tau H}\ B)$$
$$= -\frac{۱}{Z} \sum_{n}\ < n|e^{-\beta H}\ e^{\tau H}\ A\ e^{-\tau H}\ B|n >$$
$$= -\frac{۱}{Z} \sum_{nn'}\ < n|e^{-\beta H}\ e^{\tau H}\ A\ e^{-\tau H}|n' >< n'|B|n >$$
$$= -\frac{۱}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n}\ e^{\tau(E_n - E_{n'})}\ A_{nn'}\ B_{n'n} \quad (۳۴.۹)$$

در محاسبه‌ی رابطه‌ی فوق از این حقیقت که پایه‌های n و n' ویژه‌توابع هامیلتونی H با ویژه مقادیر به ترتیب E_n و $E_{n'}$ هستند و نیز روابط $A_{nn'} =< n|A|n >$ و $B_{n'n} =< n'|B|n >$ استفاده شده است. حال با استفاده از رابطه‌ی (۳۲.۹) تبدیل فوریه رابطه‌ی فوق را بدست می‌آوریم:

$$C_{AB}(i\omega_l) = \int_{\circ}^{\beta} d\tau\ e^{i\omega_l \tau}\ C_{AB}(\tau)$$
$$= \int_{\circ}^{\beta} d\tau \frac{-۱}{Z} \sum_{nn'} e^{\tau(i\omega_l + E_n - E_{n'})}\ e^{-\beta E_n}\ A_{nn'}\ B_{n'n}$$
$$= \frac{-۱}{Z} \sum_{nn'} \frac{e^{i\omega_l \beta} e^{(E_n - E_{n'})\beta} - ۱}{i\omega_l + E_n - E'_n}\ e^{-\beta E_n}\ A_{nn'}\ B_{n'n} \quad (۳۵.۹)$$

در رابطه‌ی فوق برای اینکه زیرنویس فرکانس‌های ماتسوبارا از زیرنویس ویژه مقادیر انرژی متمایز شوند، در این‌جا از زیر نویس l برای فرکانس استفاده شده است. در ادامه بر روی فرمیون‌ها متمرکز می‌شویم که برای آن‌ها $e^{i\omega_l \beta} = -۱$ است، بنابراین داریم:

$$C_{AB}(i\omega_l) = \frac{۱}{Z} \sum_{nn'} \frac{e^{(E_n - E_{n'})\beta} + ۱}{i\omega_l + E_n - E'_n}\ e^{-\beta E_n}\ A_{nn'}\ B_{n'n}$$
$$= \frac{۱}{Z} \sum_{nn'} \frac{e^{-\beta E_{n'}} + e^{-\beta E_n}}{i\omega_l + E_n - E'_n}\ A_{nn'}\ B_{n'n} \quad (۳۶.۹)$$

با مقایسه روابط (۳۳.۹) و (۳۶.۹) درمی‌یابیم که اگر تبدیل $i\omega_l \rightarrow\ \omega + i\eta$ را انجام دهیم این دو با یکریگر معادل می‌شوند. اگر $\mathcal{Z}$ یک عدد مختلط باشد، آنگاه رابطه‌ی فوق را می‌توان به شکل

کلی زیر نوشت:

$$C_{AB}(\mathcal{Z}) = \frac{1}{Z} \sum_{nn'} \frac{e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_{n'}}}{\mathcal{Z} + E_n - E'_n} A_{nn'} B_{n'n} \qquad (۳۷.۹)$$

اگر $\mathcal{Z}$ را کمی بالاتر از محور حقیقی در نظر بگیریم (یعنی $\mathcal{Z} = \omega + i\eta$) به همان رابطه‌ی تابع گرین تأخیری می‌رسیم. پس چه دینامیک زمان حقیقی و چه زمان موهومی را انجام دهیم هر دو به یک تابع تحلیلی منجر می‌شوند، فقط محاسبات روی دو محور مختلف انجام می‌شوند. همان‌طور که قبلاً نیز بیان کردیم مزیت محاسبات با زمان موهومی، کار با توابع میرا است. اما مشکل این روش این است که چندین تابع کاملاً مختلف را می‌توان بدست آورد و باید انتخاب نتیجه‌ی نهایی دقیق بود. به عبارت دیگر هرگاه مجموعه‌ای از $\mathcal{Z}_n$ ها داشته باشیم که به $f(\mathcal{Z})$ هایی منجر شوند، امکان فیت کردن این داده‌ها با چند نوع تابع تحلیلی امکان‌پذیر است. معمولاً از روش $pade$ برای یافتن تابع تحلیلی استفاده می‌کنند.

۳.۹ تابع گرین ماتسوبارای تک ذره‌ای فرمیونی

حال یک سیستم فرمیونی بدون برهمکنش را در نظر می‌گیریم، هامیلتونی آن به شکل زیر است:

$$H_\circ = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}\, c^\dagger_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \qquad (۳۸.۹)$$

تابع گرین هامیلتونی فوق برابر است با:

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{k}}(\tau) &= -T_\tau < c_{\mathbf{k}}(\tau) c^\dagger_{\mathbf{k}} > \\ &= -\theta(\tau) < c_{\mathbf{k}}(\tau) c^\dagger_{\mathbf{k}} > + \theta(-\tau) < c^\dagger_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}(\tau) > \end{aligned} \qquad (۳۹.۹)$$

برای ادامه‌ی محاسبات باید $c_{\mathbf{k}}(\tau)$ را بیابیم. مشابه فصل پنجم از معادله‌ی حرکت هایزنبرگ اما در

این‌جا برای زمان‌های موهومی استفاده می‌کنیم، داریم:

$$\begin{aligned}\partial_\tau c_{\mathbf{k}}(\tau) &= \partial_\tau (e^{\tau H}\ c_{\mathbf{k}}\ e^{-\tau H}) = [H, c_{\mathbf{k}}](\tau) \\ &= \sum_{\mathbf{p}}\ \xi_{\mathbf{p}}\ [c^\dagger_{\mathbf{p}}(\tau) c_{\mathbf{p}}(\tau), c_{\mathbf{k}}(\tau)] \\ &= \sum_{\mathbf{p}}\ \xi_{\mathbf{p}}\ (-\ \delta_{\mathbf{kp}}) c_{\mathbf{p}}(\tau) = -\xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}(\tau)\end{aligned} \tag{۴۰.۹}$$

با انتگرال‌گیری خواهیم داشت:

$$c_{\mathbf{k}}(\tau) = e^{-\xi_{\mathbf{k}}\tau}\ c_{\mathbf{k}}(\circ) \tag{۴۱.۹}$$

و بهطور مشابه داریم:

$$c^\dagger_{\mathbf{k}}(\tau) = e^{\xi_{\mathbf{k}}\tau}\ c^\dagger_{\mathbf{k}}(\circ) \tag{۴۲.۹}$$

با جایگذاری رابطه‌ی (۴۱.۹) در رابطه‌ی (۳۹.۹) خواهیم داشت:

$$G_{\mathbf{k}}(\tau) = -\theta(\tau) < c_{\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}} >\ \ e^{-\xi_{\mathbf{k}}\tau} + \theta(-\tau) < c^\dagger_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} >\ \ e^{-\xi_{\mathbf{k}}\tau} \tag{۴۳.۹}$$

از طرفی چون متوسط‌گیری‌ها نسبت به تابع پایه‌ی هامیلتونی بدون برهمکنشی محاسبه می‌شوند که تابع توزیعشان تابع فرمی دیراک است، داریم :

$$< c_{\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}} >= ۱ - n_F(\xi_{\mathbf{k}}) \qquad\qquad < c^\dagger_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} >= n_F(\xi_{\mathbf{k}}) \tag{۴۴.۹}$$

با جایگذاری روابط (۴۴.۹) در رابطه‌ی (۴۳.۹) خواهیم داشت:

$$G_{\mathbf{k}}(\tau) = \big(-\ \theta(\tau)\ (۱ - n_F(\xi_{\mathbf{k}})) + \theta(-\tau)\ n_F(\xi_{\mathbf{k}})\big)\ e^{-\xi_{\mathbf{k}}\tau} \tag{۴۵.۹}$$

حال با استفاده از رابطه‌ی (۳۲.۹)، از رابطه‌ی فوق تبدیل فوریه می‌گیریم، خواهیم داشت:

$$
\begin{aligned}
G_{\mathbf{k}}(i\omega_l) &= \int_0^{\beta} d\tau\, e^{i\omega_l\tau}\, G_{\mathbf{k}}(\tau) \\
&= (n_F(\xi_{\mathbf{k}}) - 1) \int_0^{\beta} d\tau\, e^{i\omega_l\tau}\, e^{-\xi\tau} \\
&= (n_F(\xi_{\mathbf{k}}) - 1) \frac{[e^{(i\omega_l-\xi)\beta} - 1]}{i\omega_l - \xi_{\mathbf{k}}} \\
&= \frac{1}{i\omega_l - \xi_{\mathbf{k}}} \left(\frac{1}{e^{\beta\xi_{\mathbf{k}}} + 1} - 1\right) \left(-e^{-\beta\xi_{\mathbf{k}}} - 1\right) \\
&= \frac{1}{i\omega_l - \xi_{\mathbf{k}}} \left(\frac{e^{-\beta\xi_{\mathbf{k}}}}{e^{-\beta\xi_{\mathbf{k}}} + 1} - 1\right) \left(-e^{-\beta\xi_{\mathbf{k}}} - 1\right) \\
&= \frac{1}{i\omega_l - \xi_{\mathbf{k}}} \left(\frac{-1}{e^{-\beta\xi_{\mathbf{k}}} + 1}\right) \left(-e^{-\beta\xi_{\mathbf{k}}} - 1\right) \\
&= \frac{1}{i\omega_l - \xi_{\mathbf{k}}}
\end{aligned}
\tag{۴۶.۹}
$$

حال با تبدیل $i\omega_l \ \rightarrow\ \omega + i\eta$ به رابطه‌ی آشنای تابع گرین تأخیری می‌رسیم:

$$
G_{\mathbf{k}}(i\omega_l) = \frac{1}{\omega + i\eta - \xi_{\mathbf{k}}} \tag{۴۷.۹}
$$

۴.۹ نکاتی راجع به محاسبه‌ی جمع‌های ماتسوبارا

قبلاً در رابطه‌ی (۲۷.۹) اثبات کردیم که فرکانس‌های ماتسوبارای فونونی و بوزونی در شرایط زیر صدق می‌کنند:

$$
\begin{cases}
\text{Fermions:} & i\omega_l = i(2l + 1)\frac{\pi}{\beta} \\[2ex]
\text{Bosons:} & i\nu_n = i(2n)\frac{\pi}{\beta}
\end{cases}
\tag{۴۸.۹}
$$

تابع توزیع فرمی دیراک برای فرمیون‌ها به شکل زیر است:

$$
n_F(\mathcal{Z}) = \frac{1}{e^{\beta\mathcal{Z}} + 1} \tag{۴۹.۹}
$$

حال قطب‌های آن را حساب می‌کنیم:

$$e^{\beta \mathcal{Z}_l} = -۱ = e^{i(۲l+۱)\pi}$$
$$\rightarrow \quad \mathcal{Z}_l = i(۲l+۱)\frac{\pi}{\beta} = i\omega_l \tag{۵۰.۹}$$

می‌بینیم که به همان فرکانس‌های ماتسوبارا برای فرمیون‌ها رسیدیم، اگر تابع توزیع بوزون‌ها را نیز در نظر بگیریم، داریم:

$$n_B(\mathcal{Z}) = \frac{۱}{e^{\beta \mathcal{Z}} - ۱} \tag{۵۱.۹}$$

و قطب‌های آن برابر است با:

$$e^{\beta \mathcal{Z}_n} = ۱ = e^{i(۲n)\pi}$$
$$\rightarrow \quad \mathcal{Z}_n = i(۲n)\frac{\pi}{\beta} = i\nu_n \tag{۵۲.۹}$$

می‌بینیم که به فرکانس ماتسوبارای بوزونی رسیدیم. حال اگر بخواهیم کمیت زیر را ، که جمع بر روی فرکانس‌های ماتسوبارا از حاصل ضرب دو تابع گرین غیربرهمکنشی است، محاسبه کنیم:

$$\frac{۱}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{۱}{i\nu + i\omega_n - \xi_{\mathbf{k+q}}} \frac{۱}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}}} \tag{۵۳.۹}$$

حاصل ضرب دو تابع گرین را می‌توان به‌صورت زیر نوشت:

$$\frac{۱}{\mathcal{Z} - \xi_{\mathbf{k+q}} + i\nu} \frac{۱}{\mathcal{Z} - \xi_{\mathbf{k}}} \tag{۵۴.۹}$$

حال برای محاسبه رابطه‌ی (۵۳.۹) کافی است که انتگرال زیر را از روش حساب مانده‌ها حساب کنیم:

$$\oint d\mathcal{Z} \frac{۱}{\mathcal{Z} - \xi_{\mathbf{k+q}} + i\nu} \frac{۱}{\mathcal{Z} - \xi_{\mathbf{k}}} n_F(\mathcal{Z}) \tag{۵۵.۹}$$

قطب‌های انتگرالده فوق عبارتند از: $\xi_{\mathbf{k}}$ (قطب کسر اول)، $\xi_{\mathbf{k+q}}-i\nu$ (قطب کسر دوم) و فرکانس‌های ماتسوبارای فرمیونی (بخاطر وجود تابع فرمی دیراک). در کارهای محاسباتی عملاً تعداد محدودی از فرکان‌های ماتسوبارا را در نظر می‌گیریم، بنابراین می‌توان کنتوری دایره‌ای با شعاع بینهایت را در نظر گرفت که تمامی قطب‌ها را شامل می‌شود. رفتار انتگرالده را بر روی این کنتور بررسی می‌کنیم. تابع توزیع فرمی دیراک به شکل زیر است:

$$n_F(\mathcal{Z}) = \frac{۱}{e^{\beta \mathcal{Z}} + ۱} = \frac{۱}{e^{\beta(x+iy)} + ۱}$$

رفتار تابع فوق در نیمه بالایی سمت چپ ($x < ۰$) به سمت یک میل می‌کند، بنابراین انتگرال (۵۵.۹) به‌صورت $\int \frac{d\mathcal{Z}}{\mathcal{Z}^۲} = \frac{۱}{\mathcal{Z}}$ می‌شود که در بر روی کنتور ($\mathcal{Z} \to ۰$) صفر می‌شود. در نیمه‌ی بالایی سمت راست ($x > ۰$) تابع فوق به‌صورت $n_f(\mathcal{Z}) = e^{-\beta x}$ می‌شود و بنابراین انتگرال به‌صورت $\int \frac{e^{-\beta \mathcal{Z}} d\mathcal{Z}}{\mathcal{Z}^۲}$ می‌شود که سریع‌تر از قبلی به سمت صفر میل می‌کند، پس حاصل انتگرال فوق صفر می‌شود. از طرفی از حساب مانده ها می‌دانیم انتگرال فوق برابر است با جمع بر روی ماندههای آن که در این‌جا باید با صفر برابر شود. قبل از آن بهتر است که حاصل مانده تابع توزیع فرمی دیراک را در قطب‌های فرکانس ماتسوبارا بیابیم:

$$\begin{aligned}
Res[n_F(\mathcal{Z})]_{\mathcal{Z} \approx i\omega_l} &= (\mathcal{Z} - i\omega_l)\frac{۱}{e^{\beta(\mathcal{Z}-i\omega_l)}\ e^{i\omega_l \beta} + ۱} \\
&= (\mathcal{Z} - i\omega_l)\frac{۱}{-e^{\beta(\mathcal{Z}-i\omega_l)} + ۱} \\
&= (\mathcal{Z} - i\omega_l)\frac{۱}{-۱ - \beta(\mathcal{Z} - i\omega_l) + ۱} \\
&= -\frac{۱}{\beta}
\end{aligned} \tag{۵۶.۹}$$

بنابراین خواهیم داشت:

$$(-\frac{۱}{\beta})\sum_{i\omega_l} \frac{۱}{i\omega_l - \xi_{\mathbf{k}}} \frac{۱}{i\omega_l - \xi_{\mathbf{k+q}} + i\nu} + \frac{n_F(\xi_{\mathbf{k}})}{\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k+q}} + i\nu} + \frac{n_F(\xi_{\mathbf{k+q}} - i\nu)}{\xi_{\mathbf{k+q}} - i\nu - \xi_{\mathbf{k}}} = ۰ \tag{۵۷.۹}$$

$$\Longrightarrow\ (-\frac{1}{\beta})\sum_{i\omega_l}\ \frac{1}{i\omega_l-\xi_{\mathbf{k}}}\ \frac{1}{i\omega_l-\xi_{\mathbf{k+q}}+i\nu}=\frac{n_F(\xi_{\mathbf{k}})-n_F(\xi_{\mathbf{k+q}}-i\nu)}{\xi_{\mathbf{k}}-\xi_{\mathbf{k+q}}+i\nu}$$
$$=\frac{n_F(\xi_{\mathbf{k}})-n_F(\xi_{\mathbf{k+q}})}{\xi_{\mathbf{k}}-\xi_{\mathbf{k+q}}+i\nu} \qquad (۵۸.۹)$$

رابطه‌ی فوق همان تابع لیندهارد است که قبلا نیز به شیوه‌ای دیگر محاسبه شده است. در محاسبه‌ی خط آخر، به‌خاطر فرکانس‌های ماتسوبارای بوزونی برای ν ها از رابطه‌ی زیر استفاده شده است:

$$n_F(\xi_{\mathbf{k+q}}-i\nu)=\frac{1}{e^{\beta(\xi_{\mathbf{k+q}}-i\nu)}+1}=\frac{1}{e^{\beta\xi_{\mathbf{k+q}}}+1}=n_F(\xi_{\mathbf{k+q}}) \qquad (۵۹.۹)$$

۵.۹ تابع گرین ماتسوبارای تک ذره‌ای بوزونی

حال یک سیستم بوزونی بدون برهمکنش را در نظر می‌گیریم، هامیلتونی آن به شکل زیر است:

$$H_\circ=\sum_{\mathbf{q}}\ \omega_{\mathbf{q}}\, b^\dagger_{\mathbf{q}}b_{\mathbf{q}} \qquad (۶۰.۹)$$

محاسبات کاملاً مشابه با بخش فرمیونی است. تابع گرین ماتسوبارا در فضای زمان موهومی برابر است با:

$$G_{\mathbf{q}}(\tau)=-T_\tau<b_{\mathbf{q}}(\tau)b^\dagger_{\mathbf{q}}>$$
$$=-\theta(\tau)<b_{\mathbf{q}}(\tau)b^\dagger_{\mathbf{q}}>-\theta(-\tau)<b^\dagger_{\mathbf{q}}b_{\mathbf{q}}(\tau)> \qquad (۶۱.۹)$$

حال باید $b_{\mathbf{q}}(\tau)$ را بیابیم:

$$\partial_\tau b_{\mathbf{q}}(\tau)=\partial_\tau(e^{\tau H}\ b_{\mathbf{q}}\ e^{-\tau H})=[H,b_{\mathbf{q}}](\tau)$$
$$=\sum_{\mathbf{p}}\ \omega_{\mathbf{p}}\ [b^\dagger_{\mathbf{p}}(\tau)b_{\mathbf{p}}(\tau),b_{\mathbf{q}}(\tau)]$$
$$=\sum_{\mathbf{p}}\ \omega_{\mathbf{p}}\ (-\ \delta_{\mathbf{qp}})b_{\mathbf{p}}(\tau)=-\omega_{\mathbf{q}}b_{\mathbf{q}}(\tau) \qquad (۶۲.۹)$$

با انتگرال‌گیری خواهیم داشت:

$$b_{\mathbf{q}}(\tau) = e^{-\omega_{\mathbf{q}}\tau}\, b_{\mathbf{q}}(0) \tag{۶۳.۹}$$

و بهطور مشابه داریم:

$$b^{\dagger}_{\mathbf{q}}(\tau) = e^{\omega_{\mathbf{q}}\tau}\, b^{\dagger}_{\mathbf{q}}(0) \tag{۶۴.۹}$$

با جایگذاری رابطه‌ی (۶۳.۹) در رابطه‌ی (۶۱.۹) خواهیم داشت:

$$G_{\mathbf{q}}(\tau) = -\theta(\tau) < b_{\mathbf{q}} b^{\dagger}_{\mathbf{q}} > \ e^{-\omega_{\mathbf{q}}\tau} - \theta(-\tau) < b^{\dagger}_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} > \ e^{-\omega_{\mathbf{q}}\tau} \tag{۶۵.۹}$$

از طرفی می‌دانیم :

$$< b_{\mathbf{q}} b^{\dagger}_{\mathbf{q}} >= n_B(\omega_{\mathbf{q}}) + 1 \qquad\qquad < b^{\dagger}_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} >= n_B(\omega_{\mathbf{q}}) \tag{۶۶.۹}$$

با جایگذاری روابط (؟؟) در رابطه‌ی (۶۵.۹) خواهیم داشت:

$$G_{\mathbf{q}}(\tau) = \big(-\theta(\tau)\, (n_B(\omega_{\mathbf{q}}) + 1) - \theta(-\tau)\, n_B(\omega_{\mathbf{q}})\big)\, e^{-\omega_{\mathbf{q}}\tau} \tag{۶۷.۹}$$

حال با استفاده از رابطه‌ی (۳۲.۹)، از رابطه‌ی فوق تبدیل فوریه می‌گیریم، خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}
G_{\mathbf{q}}(i\nu) &= \int_0^{\beta} d\tau\, e^{i\nu\tau}\, G_{\mathbf{q}}(\tau) \\
&= -(n_B(\omega_{\mathbf{q}}) + 1) \int_0^{\beta} d\tau\, e^{i\nu\tau}\, e^{-\omega_{\mathbf{q}}\tau} \\
&= -(n_B(\omega_{\mathbf{q}}) + 1) \frac{[e^{(i\nu-\omega_{\mathbf{q}})\beta} - 1]}{i\nu - \omega_{\mathbf{q}}} \\
&= -\frac{1}{i\nu - \omega_{\mathbf{q}}} \Big(\frac{1}{e^{\beta\omega_{\mathbf{q}}} - 1} + 1\Big)\, (e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}}} - 1) \\
&= -\frac{1}{i\nu - \omega_{\mathbf{q}}} \Big(\frac{e^{\beta\omega_{\mathbf{q}}}}{e^{\beta\omega_{\mathbf{q}}} - 1}\Big)\, (e^{-\beta\xi_{\mathbf{k}}} - 1) \\
&= \frac{1}{i\nu - \omega_{\mathbf{q}}} \Big(\frac{1}{e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}}} - 1}\Big)\, (e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}}} - 1) \\
&= \frac{1}{i\nu - \omega_{\mathbf{q}}}
\end{aligned} \tag{۶۸.۹}$$

حال با تبدیل $i\nu \;\to\; \nu + i\eta$ به رابطه‌ی آشنای تابع گرین تأخیری می‌رسیم:

$$G_{\mathbf{q}}(i\nu) = \frac{1}{\nu + i\eta - \omega_{\mathbf{q}}} \tag{۶۹.۹}$$

فصل ۱۰

حالت‌های همدوس و انتگرال‌های مسیر

۱.۱۰ حالت‌های همدوس برای بوزون‌ها

هامیلتونی کوچک زیر را در نظر می‌گیریم:

$$H = \varepsilon b^\dagger b \tag{۱.۱۰}$$

که در آن $b^\dagger$ و b به ترتیب عملگرهای خلق و فنای بوزونی هستند و در جبر زیر صدق می‌کنند:

$$[b, \dagger] = ۱ \tag{۲.۱۰}$$

اثراین عملگرها بر روی حالتی دارای n بوزون به‌صورت زیر است:

$$b|n >= \sqrt{n}|n - ۱ > \tag{۳.۱۰}$$

$$b^\dagger = \sqrt{n + ۱}|n + ۱ > \tag{۴.۱۰}$$

حالت بوزونی $|n >$ را می‌توان طبق رابطه‌ی زیر با اثر عملگر خلق بر حالت خلأ بدست آورد:

$$|n >= \frac{(b^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|۰ > \tag{۵.۱۰}$$

با استفاده از روابط (۳.۱۰) و (۴.۱۰) اثر هامیلتونی (۱.۱۰) بر روی حالت (۵.۱۰) به شکل زیر خواهد بود:

$$\begin{aligned} H|n> &= \varepsilon b^\dagger b|n> \\ &= \varepsilon b^\dagger \sqrt{n}|n-1> \\ &= \varepsilon \sqrt{n}\sqrt{n-1+1}|n-1+1> \\ &= \varepsilon n|n> \end{aligned} \tag{6.10}$$

حال می‌خواهیم حالت همدوس $|\lambda>$ برای بوزن‌ها را بیابیم که در رابطه‌ی زیر صدق می‌کند:

$$b|\lambda>=\lambda|\lambda> \tag{7.10}$$

این حالت همدوس را بر حسب توابع پایه‌ی بوزونی بسط می‌دهیم:

$$|\lambda>=\sum_{n=0}\lambda_n|n> \tag{8.10}$$

حال کافی است ضرایب بسط را بیابیم:

$$\begin{aligned} b|\lambda> &= \sum_{n=0} \lambda_n\, b|n> \\ &= \sum_{n=1} \lambda_n\, \sqrt{n}|n-1> \qquad (n\to\ n+1) \\ &= \sum_{n=0} \lambda_{n+1}\, \sqrt{n+1}|n> \\ &\equiv \lambda \sum_{n=0} \lambda_n|n> \end{aligned} \tag{9.10}$$

با مقایسه‌ی دو خط آخر رابطه‌ی فوق، به رابطه‌ی بازگشتی زیر می‌رسیم:

$$\begin{aligned} \lambda\,\lambda_n &= \sqrt{n+1}\,\lambda_{n+1} \\ \Rightarrow \quad \lambda_{n+1} &= \frac{\lambda_n}{\sqrt{n+1}}\lambda \end{aligned} \tag{10.10}$$

یعنی داریم:

$$
\begin{aligned}
&\lambda_0 = 1\\
&\lambda_1 = \frac{1}{\sqrt{1}}\,\lambda\\
&\lambda_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\frac{1}{\sqrt{1}}\,\lambda)\,\lambda\\
&\lambda_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}\,(\frac{1}{\sqrt{2}}\,\frac{1}{\sqrt{1}}\,\lambda^2)\,\lambda = \frac{1}{\sqrt{3!}}\,\lambda^3\\
&\Rightarrow\quad \lambda_n = \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}
\end{aligned}
\tag{11.10}
$$

بنابراین با جایگذاری رابطه‌ی (۸.۱۰) خواهیم داشت:

$$
\begin{aligned}
|\lambda> &= \sum_n \lambda_n |n> = \sum_n \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}|n>\\
&= \sum_n \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}\,\frac{(b^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0>\\
&= \sum_n \frac{(\lambda b^\dagger)^n}{n!}|0>\\
&= e^{\lambda b^\dagger}|0>
\end{aligned}
\tag{12.10}
$$

حال اگر بسط حالت همدوس را بنویسیم، خواهیم داشت:

$$
\begin{aligned}
|\lambda> &= |0> + \frac{\lambda}{\sqrt{1!}}b^\dagger|0> + \frac{\lambda^2}{\sqrt{2!}}(b^\dagger)^2|0> + \cdots\\
&= |0> + \frac{\lambda}{\sqrt{1!}}|1> + \frac{\lambda^2}{\sqrt{2!}}|2> + \cdots
\end{aligned}
\tag{13.10}
$$

که نشان‌دهنده‌ی این است که حالت همدوس n مشخصی ندارد و برهم‌نهی از n های مختلف است. ویژگی جالب حالت همدوس این است که اگر مقدار چشمداشتی عملگر مکان در پایه‌ی آن محاسبه شود، به‌صورت تابع کسینوسی خواهد بود، $< x(t) >_\lambda = \cos(\omega t + \phi)$ ، یعنی مشابه نوسانگر هارمونیک می‌شود و مثل متغیر کلاسیکی رفتار می‌کند. می‌توان ضریب بهنجارش را نیز برای حالت

همدوس یافت، خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}
&<\lambda|\lambda>=۱\\
&\Rightarrow\ \sum_{n,m}<n|\frac{(\lambda^*)^n}{\sqrt{n!}}\ \frac{(\lambda)^m}{\sqrt{m!}}|m>|N|^۲=۱\\
&\Rightarrow\ |N|^۲\sum_{n,m}\frac{(\lambda^*)^n}{\sqrt{n!}}\ \frac{(\lambda)^m}{\sqrt{m!}}\delta_{mn}=۱\\
&\Rightarrow\ |N|^۲\sum_{n}\frac{(\lambda^*\lambda))^n}{n!}=۱\\
&\Rightarrow\ |N|^۲\sum_{n}\frac{(|\lambda|^۲)^n}{n!}=۱\\
&\Rightarrow\ |N|^۲\exp(|\lambda|^۲)=۱\\
&\Rightarrow\ |N|=\exp(-\frac{۱}{۲}|\lambda|^۲)
\end{aligned} \tag{۱۴.۱۰}$$

بنابراین حالت همدوس بهنجار شده را می‌توان به‌صورت زیر نوشت:

$$|\lambda>=Ne^{\lambda b^\dagger}\ |\circ>=e^{-\frac{۱}{۲}|\lambda|^۲}\ e^{\lambda b^\dagger}|\circ> \tag{۱۵.۱۰}$$

همپوشانی دو حالت همدوس مختلف را نیز می‌توان محاسبه کرد:

$$\begin{aligned}
<\lambda|\lambda'>&=<\circ|e^{-\frac{۱}{۲}|\lambda|^۲}\ e^{\lambda^* b^\dagger}\ e^{-\frac{۱}{۲}|\lambda'|^۲}\ e^{\lambda' b^\dagger}|\circ>\\
&=e^{-\frac{۱}{۲}(|\lambda|^۲+|\lambda'|^۲)}\ \sum_{n,m}\ <n|\frac{(\lambda^*)^n}{\sqrt{n!}}\ \frac{(\lambda')^m}{\sqrt{m!}}|m>\\
&=e^{-\frac{۱}{۲}(|\lambda|^۲+|\lambda'|^۲)}\ \sum_{n}\ \frac{(\lambda^*\lambda')^n}{\sqrt{n!}}\\
&=e^{-\frac{۱}{۲}|\lambda|^۲}e^{-\frac{۱}{۲}|\lambda'|^۲}\ e^{\lambda^*\lambda'}
\end{aligned} \tag{۱۶.۱۰}$$

اگر حالت‌های همدوس را غیر بهنجار در نظر می‌گرفتیم ($|\lambda>=\exp(\lambda b^\dagger)|\circ>$)، همپوشانی دو حالت همدوس مختلف به شکل زیر خواهد شد:

$$<\lambda|\lambda'>=e^{\lambda^*\lambda'} \tag{۱۷.۱۰}$$

رابطه‌ی کامل بودن برای حالت‌های همدوس به شکل زیر است:

$$A=\int \frac{d\lambda^* d\lambda}{۲\pi i}|\lambda><\lambda|\; e^{-|\lambda|^۲} \tag{۱۸.۱۰}$$

اثبات رابطه‌ی فوق به شکل زیر است:

$$\begin{aligned} A &= \int \frac{d\lambda^* d\lambda}{۲\pi i}\sum_{n,m}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}\,\frac{\lambda^{*m}}{\sqrt{m!}}\;|n><m|\; e^{-|\lambda|^۲} \\ &= \sum_{n,m}\frac{|n><m|}{\sqrt{n!}\sqrt{m!}}\;\int \frac{d\lambda^* d\lambda}{۲\pi i}\;\lambda^n\lambda^{*m}\; e^{-|\lambda|^۲} \end{aligned} \tag{۱۹.۱۰}$$

برای محاسبه‌ی انتگرال فوق به دستگاه مختصات قطبی می‌رویم:

$$\lambda = re^{i\theta} \qquad \lambda^* = re^{-i\theta} \tag{۲۰.۱۰}$$

ژاکوبین این تبدیل مختصات به شکل زیر است:

$$d\lambda^* d\lambda = \begin{Vmatrix} \frac{\delta\lambda^*}{\delta r} & \frac{\delta\lambda^*}{\delta\phi} \\ \frac{\delta\lambda}{\delta r} & \frac{\delta\lambda}{\delta\phi} \end{Vmatrix} dr d\phi = \begin{Vmatrix} e^{-i\phi} & -ire^{-i\phi} \\ e^{i\phi} & ire^{i\phi} \end{Vmatrix} dr d\phi = ۲\, irdrd\phi \tag{۲۱.۱۰}$$

انتگرال فوق به شکل زیر می‌شود:

$$\begin{aligned} \int \frac{d\lambda^* d\lambda}{۲\pi i}\;\lambda^n\lambda^{*m}\; e^{-|\lambda|^۲} &= \frac{۱}{۲\pi i}\int\int ۲\, irdrd\theta\; e^{-r^۲}\; r^{n+m}\; e^{in\theta-im\theta} \\ &= \frac{۱}{۲\pi i}\;\int (۲\, irdr)e^{-r^۲}\;(r^۲)^n\; ۲\pi\;\delta_{nm} \end{aligned}$$

حال از تغییر متغیر $u=r^۲ \;\rightarrow\; du = ۲rdr$ استفاده می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \delta_{nm}\;\int du\; e^{-u}\; u^n \;&= \delta_{nm}(-\partial_\alpha)^n\;\int due^{-\alpha u}\Big|_{\alpha=۱} \\ &= \delta_{nm}(-\partial_\alpha)^n\;(\frac{۱}{\alpha}) = \delta_{nm}\; n! \end{aligned} \tag{۲۲.۱۰}$$

بنابراین رابطه‌ی (۱۹.۱۰) به شکل زیر خواهد شد:

$$A=\sum_{n,m}\frac{|n><m|}{\sqrt{n!}\sqrt{m!}}\;\delta_{nm}\; n! = \sum_n |n><n| = ۱ \tag{۲۳.۱۰}$$

بنابراین حالت همدوس برای بوزن‌ها را بدست آوردیم که ویژگی‌هایش به‌طور خلاصه عبارتست از:

$$\begin{cases} |\lambda >= e^{\lambda b^\dagger}|0 > \\ < \lambda|\lambda' >= e^{\lambda^*\lambda'} \\ \sum_{\lambda\lambda^*} = \int \frac{d\lambda^* d\lambda}{2\pi i}\, e^{-\lambda^*\lambda} \\ \sum_{\lambda\lambda^*} |\lambda >< \lambda| \end{cases}$$

۲.۱۰ حالت‌های همدوس برای فرمیون‌ها

جبر زیر بر عملگرهای خلق و فنای فرمیونی حاکم است:

$$\{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij} \quad (۲۴.۱۰)$$

در این بخش می‌خواهیم حالت همدوس $|\psi>$ برای فرمیون‌ها را بیابیم که باید رابطه‌ی زیر برای آن برقرار باشد:

$$c|\psi >= \psi|\psi > \quad (۲۵.۱۰)$$

فرض می‌کنیم دو حالت همدوس $|\psi_1>$ و $|\psi_2>$ را داریم:

$$c_1|\psi_1 >= \psi_1|\psi_1 > \quad (۲۶.۱۰)$$

$$c_2|\psi_2 >= \psi_2|\psi_2 > \quad (۲۷.۱۰)$$

و حالت همدوس $|\psi>$ را به‌صورت زیر در نظر می‌گیریم:

$$|\psi >= |\psi_1 > \otimes |\psi_2 > \quad (۲۸.۱۰)$$

حال عملگر c_1 را بر رابطه‌ی (۲۷.۱۰) و عملگر c_2 را بر رابطه‌ی (۲۶.۱۰) اثر می‌دهیم، فعلاً فرض می‌کنیم که عملگر c_1 (یا c_2) از ψ_2 (یا ψ_1) بدون ایجاد علامت منفی عبور می‌کند:

$$c_1\ c_2|\psi_2 >= c_1\ \psi_2|\psi_2 >= \psi_2\psi_1|\psi > \quad (۲۹.۱۰)$$

$$c_2\ c_1|\psi_1>= c_2\ \psi_1|\psi_1>=\psi_1\psi_2|\psi> \qquad (۳۰.۱۰)$$

از رابطه‌ی (۲۴.۱۰) می‌دانیم که $c_1c_2=-c_2c_1$ است، بنابراین با مقایسه‌ی دو رابطه‌ی فوق برای دو عدد ψ_1 و ψ_2 خواهیم داشت (اگر فرض کنیم که در اثر عبور علامت منفی ایجاد می‌شود باز نتیجه کلی زیر درست خواهد بود):

$$\psi_1\psi_2=-\psi_2\psi_1 \qquad (۳۱.۱۰)$$

پس می‌بینیم که این ها اعداد معمولی نیستند و به آن‌ها متغیرهای گرسمن می‌گویند که ریاضیات مخصوص به خود را دارند و محاسبه‌ی حالت همدوس برای فرمیون‌ها را ساده می‌کنند. برای فرمیون‌ها این شرط را اعمال می‌کنیم که در اثر عبور ψ از عملگرهای c یا $c^\dagger$، یک علامت منفی ظاهر می‌شود. از رابطه‌ی فوق می‌توان نتیجه گرفت: $\psi\psi=-\psi\psi \Rightarrow \psi^2=0$ اگر بخواهیم تابعی از متغیرهای گرسمن را بسط دهیم، خواهیم داشت:

$$f(\psi)=f_0+f_1\psi \qquad (۳۲.۱۰)$$

می‌خواهیم ψ مثل مختصه‌ی x عمل کند، یعنی رابطه‌ی $c|\psi>=\psi|\psi>$ معادل با رابطه‌ی $\hat{x}|x>=x|x>$ است. پس مشابه با تابع موج در فضای مکان می‌توان گفت:

$$<\psi|f>\equiv f(\psi^*) \qquad (۳۳.۱۰)$$

توابع موج باید در $x\to\pm\infty$ صفر شوند، به عبارت دیگر انتگرال روی یک دیفرانسیل کامل صفر می‌شود. از رابطه‌ی هم می‌بینیم که دو پایه داریم ($\{1,\psi\}$)، و برای مشتق‌گیری و انتگرال گیری روابط زیر برای این پایه‌ها برقرار است:

$$\begin{cases}\partial_\psi\ 1=0\\ \partial_\psi\ \psi=1\end{cases} \qquad (۳۴.۱۰)$$

$$\begin{cases}\int d\psi\ \psi=1\\ \int d\psi\ 1=0\end{cases} \qquad (۳۵.۱۰)$$

حال حالت همدوس را به شکل زیر در نظر می‌گیریم:

$$|\psi >= e^{-\psi c^\dagger}\ |0\ >= (1 - \psi\ c^\dagger)|0\ >$$
$$\Rightarrow\ |\psi >= |0\ > -\psi\ |1\ > \tag{۳۶.۱۰}$$

و بررسی می‌کنیم که برای آن نیز خواص حالت همدوس که برای بوزونها بدست آوردیم (رابطه‌ی ۲۴.۱۰) برقرار است.

$$< \psi|\psi' > = (< 0|- < 1|\ \psi^*)(|0\ > -\psi'\ |1\ >)$$
$$=< 0|0\ > + < 1|\psi^*\psi'|1\ >$$
$$= 1 + \psi^*\psi' = e^{\psi^*\psi'} \tag{۳۷.۱۰}$$

به‌طور مشابه با بوزون‌ها می‌خواهیم رابطه‌ی کامل بودن زیر برای حالت همدوس برقرار باشد:

$$\sum_{\psi\psi^*} |\psi >< \psi| = 1 \tag{۳۸.۱۰}$$

بنابراین رابطه‌ی زیر باید برای تبدیل جمع به انتگرال برقرار باشد:

$$\sum_{\psi\psi^*} \equiv \int d\psi^* d\psi\ e^{-\psi^*\psi} \tag{۳۹.۱۰}$$

اثبات درستی رابطه‌ی فوق به شرح زیر است:

$$\int d\psi^* d\psi\ e^{-\psi^*\psi}\ |\psi >< \psi| = \int d\psi^* d\psi\ (1 - \psi^*\psi)\ (|0\ > -\psi\ |1\ >)\ (< 0|- < 1|\ \psi^*)$$
$$= \int d\psi^* d\psi\ (1 - \psi^*\psi)\ (|0\ >< 0| + \psi\ |1\ >< 1|\ \psi^* - \psi\ |1\ >< 0| - |0\ >< 1|\ \psi^*)$$
$$= \int d\psi^* d\psi\ \psi\ |1\ >< 1|\ \psi^* - \int d\psi^* d\psi\ \psi^*\psi\ |0\ >< 0|$$
$$= |1\ >< 1| + |0\ >< 0| = 1 \tag{۴۰.۱۰}$$

که در بدست آوردن رابطه‌ی فوق، شش جمله‌ای که حاصل انتگرالشان صفر شده است و تنها دو جمله باقی مانده است. بنابراین ویژگی‌های حالت همدوس برای فرمیون‌ها با استفاده از متغیرهای گرسمن مشابه با بوزون‌ها شد و به‌طور خلاصه داریم:

$$\begin{cases} |\psi >= e^{-\psi c^\dagger}|0> \\ <\psi|\psi'>= e^{\psi^*\psi'} \\ \sum_{\psi^*\psi} = \int d\psi^* d\psi \; e^{-\psi^*\psi} \\ \sum_{\psi^*\psi} |\psi><\psi| = 1 \\ Tr[A] = \sum_{\psi^*\psi} <-\psi^*|A|\psi> \end{cases}$$

اثبات ویژگی آخر به شکل زیر است:

$$\begin{aligned} Tr[A] &= \sum_{\psi^*\psi} <-\psi^*|A|\psi> \\ &= \int d\psi^* d\psi \; e^{-\psi^*\psi} <-\psi^*|A|\psi> \\ &= \int d\psi^* d\psi \; (1-\psi^*\psi)(<0|+<1|\,\psi^*)A(|0>-\psi\,|1>) \\ &= \int d\psi^* d\psi \; (1-\psi^*\psi)(A_{00}-\psi^*\psi\, A_{11}+(-)A_{10}\psi^*+A_{01}\psi) \\ &= \int d\psi^* d\psi \; A_{00} - \int d\psi^* d\psi \; \psi^*\psi A_{11} \\ &= \int d\psi^*(1)A_{00} - \int d\psi^*(-1)A_{11} \\ &= A_{00}+A_{11} = Tr[A] \end{aligned} \tag{۴۱.۱۰}$$

۳.۱۰ انتگرال مسیر برای تابع پارش سیستم فرمیونی

هامیلتونی ساده‌ی زیر را در نظر بگیرید:

$$H = H_0 = \xi\hat{\psi}^\dagger\hat{\psi} \qquad (\textit{that:}\, \xi = \varepsilon - \mu) \tag{۴۲.۱۰}$$

در ادامه به محاسبه‌ی تابع پارش این هامیلتونی در پایه‌ی حالت‌های همدوس فرمیونی می‌پردازیم (این نکته قابل ذکر است که در ادامه به‌جای ψ^* از $\bar{\psi}$ استفاده شده است):

$$\begin{aligned} Z &= Tr(e^{-\beta H}) \\ &= Tr(e^{-\beta\xi\hat{\psi}^\dagger\hat{\psi}}) \\ &= Tr(1 - \beta\xi\hat{\psi}^\dagger\hat{\psi}) \\ &= Tr(1 + (e^{-\beta\xi} - 1)\hat{\psi}^\dagger\hat{\psi}) \\ &= \sum_{\bar{\psi}\psi} < -\bar{\psi}|(1 + (e^{-\beta\xi} - 1)\hat{\psi}^\dagger\hat{\psi})|\psi > \end{aligned} \tag{۴۳.۱۰}$$

از طرفی می‌دانیم:

$$\begin{aligned} &\hat{\psi}|\psi >= \psi|\psi > \\ &< -\bar{\psi}|\psi^\dagger =< -\bar{\psi}|\ (-\bar{\psi}) \end{aligned} \tag{۴۴.۱۰}$$

با استفاده از روابط فوق، رابطه‌ی (۴۳.۱۰) به شکل زیر خواهد شد:

$$\begin{aligned} Z &= \int d\bar{\psi}d\psi\ e^{-\bar{\psi}\psi}(< -\bar{\psi}|\psi > -(e^{-\beta\xi} - 1)\bar{\psi}\psi < -\bar{\psi}|\psi >) \\ &= \int d\bar{\psi}d\psi\ e^{-\bar{\psi}\psi}(e^{-\bar{\psi}\psi} - (e^{-\beta\xi} - 1)\bar{\psi}\psi\ e^{-\bar{\psi}\psi}) \\ &= \int d\bar{\psi}d\psi\ e^{-2\bar{\psi}\psi}(1 - (e^{-\beta\xi} - 1)\bar{\psi}\psi) \\ &= \int d\bar{\psi}d\psi\ (1 - 2\bar{\psi}\psi)(1 - (e^{-\beta\xi} - 1)\bar{\psi}\psi) \\ &= \int d\bar{\psi}d\psi\ (1 - (e^{-\beta\xi} - 1)\bar{\psi}\psi) - 2\int d\bar{\psi}d\psi\ \bar{\psi}\psi(1 - (e^{-\beta\xi} - 1)\bar{\psi}\psi) \\ &= -\int d\bar{\psi}d\psi\ (e^{-\beta\xi} - 1)\bar{\psi}\psi - 2\int d\bar{\psi}d\psi\ \bar{\psi}\psi(1) \\ &= \int d\bar{\psi}d\psi\ (e^{-\beta\xi} - 1)\psi\bar{\psi} + 2\int d\bar{\psi}d\psi\ \psi\bar{\psi}(1) \\ &= (e^{-\beta\xi} - 1) + 2 = 1 + e^{-\beta\xi} \equiv e^{-\beta F} \end{aligned} \tag{۴۵.۱۰}$$

حال دوباره تابع پارش را بر حسب حالت همدوس می‌نویسیم و انتگرال مسیر فرمیونی را بدست می‌آوریم:

$$Z = Tr(e^{-\beta H}) = \int d\bar{\psi}_1 d\psi_1 \; e^{-\bar{\psi}_1\psi_1} \; < -\bar{\psi}_1|e^{-\beta H}|\psi_1 > \qquad (۴۶.۱۰)$$

با تعریف $\bar{\psi} \equiv -\bar{\psi}_1$ تابع پارش را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$Z = -\int d\bar{\psi}_N d\psi_1 \; e^{\bar{\psi}_N\psi_1} \; < \bar{\psi}_N|e^{-\beta H}|\psi_1 > \qquad (۴۷.۱۰)$$

حال توان تابع نمایی را به‌صورت مجموعی از بازه‌های زمانی کوچک می‌نویسیم:

$$e^{-\beta H} = (e^{-\Delta\tau \; H})^N \qquad \textit{that:} \qquad \Delta\tau = \frac{\beta}{N} \qquad (۴۸.۱۰)$$

و بین هر بازه‌ی زمانی کوچک، رابطه‌ی کامل بودن حالت‌های همدوس را قرار می‌دهیم، یعنی رابطه‌ی زیر را:

$$\int d\bar{\psi}_j d\psi_{j+1} \; |\psi_{j+1} >< \bar{\psi}_j| \; e^{-\bar{\psi}_j\psi_{j+1}} = 1 \qquad (۴۹.۱۰)$$

با جایگذاری روابط (۴۸.۱۰) و (۴۹.۱۰) تابع پارش به شکل زیر خواهد شد:

$$\begin{aligned} Z &= -\int d\bar{\psi}_N d\psi_1 \; e^{\bar{\psi}_N\psi_1} \; \prod_{j=1}^{N-1} d\bar{psi}_j d\psi_{j+1} \; e^{-\bar{\psi}_j\psi_{j+1}} \; \prod_{j=1}^{N} < \bar{\psi}_j|e^{-H\Delta\tau}|\psi_j > \\ &= \int \prod_{j=1}^{N} d\bar{\psi}_j d\psi_j \; e^{\Delta\tau\xi\bar{\psi}_j\psi_j} \; \prod_{j=2}^{N} \; e^{\Delta\tau(\frac{\psi_j-\psi_{j-1}}{\Delta\tau})\bar{\psi}_j} \end{aligned} \qquad (۵۰.۱۰)$$

این محاسبات به جزئیات هامیلتونی وابسته نیست و مادامی که هامیلتونی از مرتبه‌ی نرمال باشد، صحیح است. در ادامه از نمادگذاری‌های زیر استفاده می‌کنیم:

$$\prod_{j=1}^{N} d\bar{\psi}_j d\psi_j = D[\bar{\psi}]D[\psi]$$

$$\sum_J \Delta\tau \;\rightarrow\; \int_0^\beta d\tau$$

$$(\frac{\psi_j - \psi_{j-1}}{\Delta\tau})\bar{\psi}_j \;\rightarrow\; \bar{\psi}\;\partial_\tau\psi \qquad (۵۱.۱۰)$$

$$\Rightarrow \quad Z = \int D[\bar{\psi}]D[\psi]e^{-S} \tag{۵۲.۱۰}$$

که در آن کنش (S) به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$-S = \int_{0}^{\beta} d\tau\ \bar{\psi}(\tau)\ (\partial_\tau + \xi)\psi(\tau) \tag{۵۳.۱۰}$$

حال $\psi(\tau)$ و $\bar{\psi}(\tau)$را بر حسب فرکانس‌های ماتسوبارا بسط می‌دهیم:

$$\begin{aligned} \psi(\tau) &= \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{i\omega_n} e^{-i\omega_n \tau}\ \psi_n \\ \bar{\psi}(\tau) &= \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{i\nu_m} e^{-i\nu_m \tau}\ \bar{\psi}_m \end{aligned} \tag{۵۴.۱۰}$$

و با مشتق گیری خواهیم داشت:

$$\partial_\tau \psi(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{i\omega_n} (-i\omega_n)\ e^{-i\omega_n \tau}\ \psi_n \tag{۵۵.۱۰}$$

آنگاه حاصل انتگرال کنش به شکل زیر خواهد شد:

$$\begin{aligned} S &= \int_{0}^{\beta} d\tau\ \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n, i\nu_m} e^{i\nu_m \tau}\ \bar{\psi}_m\ (-i\omega_n + \xi)e^{-i\omega_n \tau}\ \psi_n \\ &= \sum_{i\omega_n, i\nu_m} \bar{\psi}_m\ (-i\omega_n + \xi)\ \psi_n\ \frac{1}{\beta} \int_{0}^{\beta} d\tau e^{i(\nu_m - \omega_n)\tau} \\ &= \sum_{i\omega_n, i\nu_m} \bar{\psi}_m\ (-i\omega_n + \xi)\ \psi_n\ \delta_{mn} \\ &= \sum_{i\omega_n} \bar{\psi}_n\ (-i\omega_n + \xi)\ \psi_n \end{aligned} \tag{۵۶.۱۰}$$

بنابراین تابع پارش برابر خواهد بود با:

$$Z = \int D[\bar{\psi}]D[\psi]\ e^{-(\sum_{i\omega_n} \bar{\psi}_n\ (-i\omega_n + \xi)\ \psi_n)} \tag{۵۷.۱۰}$$

انتگرال‌های n های مختلف از هم جدا می‌شوند، بنابراین با انتگرال‌های گوسین ساده‌ای به شکل زیر سروکار داریم:

$$\int d\bar{\psi} d\psi\ e^{-\bar{\psi} a \psi} = \int d\bar{\psi} d\psi (1 - a\bar{\psi}\psi) = a \tag{۵۸.۱۰}$$

در اینجا $a = -i\omega_n + \xi$ است، بنابراین تابع پارش برابر خواهد بود با:

$$Z = \prod_n (-i\omega_n + \xi) \equiv e^{\beta F} \tag{۵۹.۱۰}$$

در نتیجه با لگاریتم گرفتن از رابطه‌ی فوق، انرژی آزاد را می‌توان بدست آورد:

$$F = -\frac{1}{\beta} \sum_n ln(\xi - i\omega_n) \tag{۶۰.۱۰}$$

حال به محاسبه‌ی انتگرال گوسین زیر برای متغیرهای گرسمن می‌پردازیم:

$$\begin{aligned}
\int D[\bar{\psi}]D[\psi]e^{-\bar{\psi}A\psi} &= \int D[\bar{\psi}]D[\psi]e^{-\sum_{ij}\bar{\psi}_i A_{ij}\psi_j} \\
&= \int d\bar{\psi}_1 d\psi_1\ d\bar{\psi}_2 d\psi_2\ ...\ d\bar{\psi}_N d\psi_N \prod_{ij}\ e^{-\sum_{ij}\bar{\psi}_i A_{ij}\psi_j} \\
&= \int d\bar{\psi}_1 d\psi_1\ d\bar{\psi}_2 d\psi_2\ ...\ d\bar{\psi}_N d\psi_N \times \\
&(-\bar{\psi}_{i_1} A_{i_1 j_1}\psi_{j_1})\ (-\bar{\psi}_{i_2} A_{i_2 j_2}\psi_{j_2})\ ...\ (-\bar{\psi}_{i_N} A_{i_N j_N}\psi_{j_N}) \\
&= \int d\psi_N\ ...\ d\psi_1\ d\bar{\psi}_1\ ...\ d\bar{\psi}_N\ (\bar{\psi}_{i_1}\psi_{j_1}\bar{\psi}_{i_2}\psi_{j_2}\ ...\ \bar{\psi}_{i_N}\psi_{j_N}) \times \\
&A_{i_1 j_1} A_{i_2 j_2}\ ...\ A_{i_N j_N} \\
&= \int d\psi_1\ ...\ d\psi_N\ d\bar{\psi}_N\ ...\ d\bar{\psi}_1\ \bar{\psi}_{i_1}\bar{\psi}_{i_2}\ ...\ \bar{\psi}_{i_N}\ \psi_{j_N}\ ...\ \psi_{j_1} \times \\
&A_{i_1 j_1} A_{i_2 j_2}\ ...\ A_{i_N j_N} \\
&= \varepsilon^{1\ ...\ N}_{i_1\ ...\ i_N}\ \varepsilon^{1\ ...\ N}_{j_1\ ...\ j_N}\ A_{i_1 j_1} A_{i_2 j_2}\ ...\ A_{i_N j_N} \\
&= \varepsilon^{i_1\ ...\ i_N}_{j_1\ ...\ j_N}\ A_{i_1 j_1} A_{i_2 j_2}\ ...\ A_{i_N j_N} \\
&= det(A)
\end{aligned} \tag{۶۱.۱۰}$$

انتگرال گوسین مهم دیگر به‌صورت زیر است:

$$\int D[\bar{\psi}]D[\psi]e^{-\bar{\psi}A\psi + \bar{J}\psi + \bar{\psi}J} = det(A)\ e^{\bar{J}A^{-1}J} \tag{۶۲.۱۰}$$

برای اثبات رابطه‌ی فوق از تغییر متغیر زیر استفاده می‌کنیم:

$$x = \psi - A^{-1}J \qquad \bar{x} = \bar{\psi} - A^{-1}\bar{J} \tag{۶۳.۱۰}$$

بنابراین داریم:

$$\begin{aligned}
-\bar{x}Ax &= -(\bar{\psi} - A^{-1}\bar{J})A(\psi - A^{-1}J) \\
&= -(\bar{\psi} - A^{-1}\bar{J})(A\psi - AA^{-1}J) \\
&= (-\bar{\psi} + A^{-1}\bar{J})(A\psi - J) \\
&= -\bar{\psi}A\psi + \bar{\psi}J + A^{-1}\bar{J}A\psi - A^{-1}\bar{J}J \\
&= -\bar{\psi}A\psi + \bar{\psi}J + \bar{J}A\psi - \bar{J}A^{-1}J
\end{aligned} \tag{۶۴.۱۰}$$

با استفاده از رابطه‌ی فوق، رابطه‌ی (۶۲.۱۰) به شکل زیر خواهد شد:

$$\begin{aligned}
\int D[\bar{\psi}]D[\psi]e^{-\bar{\psi}A\psi + \bar{J}\psi + \bar{\psi}J} &= \int D[\bar{\psi}]D[\psi]e^{-\bar{x}Ax + \bar{J}A^{-1}J} \\
&= e^{\bar{J}A^{-1}J} \int D[\bar{\psi}]D[\psi]e^{-\bar{x}Ax} \\
&= e^{\bar{J}A^{-1}J}\, det(A)
\end{aligned} \tag{۶۵.۱۰}$$

هامیلتونی سیستم بدون برهمکنشی به شکل زیر است:

$$H_{0} = \sum_{k} \varepsilon_k \hat{\psi}_k^{\dagger}\hat{\psi}_k \tag{۶۶.۱۰}$$

به‌طور مشابه با قبل برای انتگرال مسیر تابع پارش خواهیم داشت:

$$Z_{0} = \int D[\bar{\psi}]D[\psi]\, e^{-S} \tag{۶۷.۱۰}$$

که در آن کنش به شکل زیر است:

$$-S = \sum_k \int_{\circ}^{\beta} d\tau \bar{\psi}_k(\tau)(\partial_\tau + \varepsilon_k)\psi_k(\tau)$$
$$= \sum_k \int_{\circ}^{\beta} d\tau \bar{\psi}_k(\tau) A \psi_k(\tau) \qquad (۶۸.۱۰)$$

که در آن $A = \partial_\tau + \varepsilon_k$ قرار داده شده است. حال می‌خواهیم متوسط $< \bar{\psi}(\tau_۱)\psi(\tau_۲) >_\circ$ را حساب کنیم، که در آن $\tau_۱ > \tau_۲$ است و ترتیب زمانی رعایت شده است. محاسبه را بر روی محور زمان موهومی انجام می‌دهیم و $\tau_۱$ و $\tau_۲$ را به ترتیب متناسب با اندیس i ام و j ام در نظر می‌گیریم و متوسط را بر حسب چنین اندیس‌هایی می‌نویسیم (در محاسبات زیر از انتگرال گوسین ۶۲.۱۰ استفاده شده است):

$$< \bar{\psi}(\tau_۱)\psi(\tau_۲) >_\circ = \frac{۱}{Z_\circ} \int D[\bar{\psi}]D[\psi]\ \bar{\psi}(\tau_۱)\psi(\tau_۲)\ e^{-S}$$
$$= \frac{۱}{Z_\circ} \int D[\bar{\psi}]D[\psi]\ \bar{\psi}_i\psi_j\ e^{-\bar{\psi}A\psi + \sum_\alpha \bar{J}_\alpha\psi_\alpha + \sum_\alpha \bar{\psi}_\alpha J_\alpha}$$
$$= \frac{۱}{Z_\circ} \int D[\bar{\psi}]D[\psi]\ \frac{\partial}{\partial J_i}\ \frac{\partial}{\partial \bar{J}_j}\ e^{-\bar{\psi}A\psi + \sum_\alpha \bar{\psi}_\alpha\psi_\alpha + \sum_\alpha \bar{\psi}_\alpha J_\alpha}$$
$$= \frac{۱}{Z_\circ} \int D[\bar{\psi}]D[\psi]\ \frac{\partial}{\partial J_i}\ \frac{\partial}{\partial \bar{J}_j}\ e^{-S[\bar{J},J,\bar{\psi},\psi]}$$
$$= \frac{۱}{detA}\ \frac{\partial}{\partial J_i}\ \frac{\partial}{\partial \bar{J}_j}\ (detA) e^{\bar{J}A^{-۱}J}$$
$$= \frac{\partial}{\partial J_i}\ \frac{\partial}{\partial \bar{J}_j}\ e^{\sum_{\alpha\alpha'} \bar{J}_\alpha (A^{-۱})_{\alpha\alpha'} J_{\alpha'}}$$
$$= (A^{-۱})_{ji} \qquad (۶۹.۱۰)$$

بنابراین تنها کافی است که وارون ماتریس A را بیابیم. با در نظر گرفتن رابطه‌ی (۶۸.۱۰) برای کنش، متوسط $< \bar{\psi}(\tau_۱)\psi(\tau_۲) >_\circ$ برابر است با :

$$- < \bar{\psi}_n\psi_{n'} >_\circ = - < \psi_{n'}\bar{\psi}_n >_\circ = \delta_{nn'} \frac{۱}{-i\omega_n - \varepsilon_k} \qquad (۷۰.۱۰)$$

گاهی اوقات A را همان وارون تابع گرین ($G^{-۱}$) در نظر می‌گیرند، یعنی خواهیم داشت: $(\partial_\tau +$

$H) = G^{-1}$. که با ضرب طرفین این رابطه در G داریم: $(\partial_\tau + H)G = G^{-1}G = 1$ و قبلا در معادلات دیفرانسیل هم دیدیم که تابع گرین در چنین معادله‌ای صدق می‌کند.

حال برهمکنش را نیز در نظر می‌گیریم، یعنی هامیلتونی سیستم به شکل زیر خواهد شد:

$$H = H_0 + H_1 = H_0 + \frac{1}{2\upsilon}\sum_{\mathbf{kpq}} \bar\psi_{\mathbf{k+q}}\bar\psi_{\mathbf{p-q}}\psi_{\mathbf{p}}\psi_{\mathbf{k}} \qquad (۷۱.۱۰)$$

در ادامه به محاسبه متوسط زیر می‌پردازیم:

$$\begin{aligned} <\psi(\tau)\psi^\dagger(\tau')> &= \frac{<\hat U(\beta,\tau)\psi(\tau)\hat U(\tau,\tau')\psi^\dagger(\tau')\hat U(\tau',0)>_0}{Z_0 = <\hat U(\beta,0)>_0} \\ &= \frac{\int D[\bar\psi]D[\psi]\ \psi(\tau)\bar\psi(\tau')\ e^{-S}}{\int D[\bar\psi]D[\psi]\ e^{-S}} \end{aligned} \qquad (۷۲.۱۰)$$

که در آن کنش به شکل زیر است:

$$S = \bar\psi(\tau)(\partial_\tau + H_0)\psi(\tau) + H_1(\bar\psi,\psi) = S_0 + H_1\bar\psi,\psi \qquad (۷۳.۱۰)$$

با جایگذاری رابطه‌ی فوق در رابطه‌ی (۷۲.۱۰) خواهیم داشت:

$$<\psi(\tau)\psi^\dagger(\tau')> \ = \frac{<\psi(\tau)\bar\psi(\tau')e^{-\beta H_1}>_0}{<e^{-\beta H_1}>_0} \qquad (۷۴.۱۰)$$

که بسط تابع نمایی در رابطه‌ی فوق به شکل زیر است:

$$e^{-\beta H_1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(\beta H_1)^n \qquad (۷۵.۱۰)$$

بنابراین با جایگذاری این بسط در رابطه‌ی (۷۴.۱۰) می‌بینیم که باید متوسط هایی به شکل $<\bar\psi\bar\psi\bar\psi\psi\psi\psi>_0$ را محاسبه کنیم.

حال ψ را به‌صورت زیر در نظر می‌گیریم:

$$\psi = \begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} \ \Rightarrow\ \bar\psi = (\bar\psi_1 \quad \bar\psi_2) \qquad (۷۶.۱۰)$$

بنابراین داریم:

$$-S_\circ = -(\bar{\psi}_1 a_1 \psi_1 + \bar{\psi}_2 a_2 \psi_2) \qquad (۷۷.۱۰)$$

a ها مثل فرکانس‌های ماتسوبارا هستند و قطری هستند.

بنابراین در مرتبه‌ی صفرم بسط تابع نمایی باید متوسط زیر را حساب کنیم:

$$\begin{aligned} < \bar{\psi}_i \psi_j > &= \frac{\int d\bar{\psi}_1 d\psi_1 d\bar{\psi}_2 d\psi_2 \; e^{-(\bar{\psi}_1 a_1 \psi_1 + \bar{\psi}_2 a_2 \psi_2)} \; \bar{\psi}_i \psi_j}{\int d\bar{\psi}_1 d\psi_1 d\bar{\psi}_2 d\psi_2 \; e^{-(\bar{\psi}_1 a_1 \psi_1 + \bar{\psi}_2 a_2 \psi_2)}} \\ &= \frac{-a_{\bar{i}} \delta_{ij}}{a_1 a_2} = -\frac{1}{a_i} \delta_{ij} = G_{ij} \end{aligned} \qquad (۷۸.۱۰)$$

که در محاسبات فوق ابتدا تابع نمایی بسط داده شده است و سپس انتگرال‌ها روی متغیرهای گرسمن محاسبه شده اند. به عنوان مثال برای محاسبه‌ی صورت کسر، حاصل انتگرال جمله‌ی اول بسط صفر می‌شود. محاسبه به شکل زیر است:

$$\begin{aligned} \int d\bar{\psi}_1 d\psi_1 d\bar{\psi}_2 d\psi_2 \;\; & (1 - \bar{\psi}_1 a_1 \psi_1 + \bar{\psi}_2 a_2 \psi_2) \, \bar{\psi}_i \psi_j \\ &= \int d\bar{\psi}_1 d\psi_1 d\bar{\psi}_2 d\psi_2 \;\; -(\bar{\psi}_1 a_1 \psi_1 + \bar{\psi}_2 a_2 \psi_2) \, \bar{\psi}_i \psi_i \delta_{ij} \\ &= \int d\bar{\psi}_1 d\psi_1 d\bar{\psi}_2 d\psi_2 \;\; -(\bar{\psi}_2 a_2 \psi_2) \, \bar{\psi}_1 \psi_1 \delta_{ij} = -a_2 \\ & (Or) \\ &= \int d\bar{\psi}_1 d\psi_1 d\bar{\psi}_2 d\psi_2 \;\; -(\bar{\psi}_1 a_1 \psi_1) \, \bar{\psi}_2 \psi_2 \delta_{ij} = -a_1 \end{aligned} \qquad (۷۹.۱۰)$$

محاسبات مشابهی نیز برای مخرج کسر انجام می‌شود که شامل بسط مراتب بالاتر است.

حال یک مرتبه بالاتر، یعنی متوسط $< \psi_i \psi_j \bar{\psi}_k \bar{\psi}_l >$ را محاسبه می‌کنیم:

$$< \psi_i \psi_j \bar{\psi}_k \bar{\psi}_l >= \frac{\int d\bar{\psi}_1 d\psi_1 d\bar{\psi}_2 d\psi_2 \; e^{-(\bar{\psi}_1 a_1 \psi_1 + \bar{\psi}_2 a_2 \psi_2)} \; \psi_i \psi_j \bar{\psi}_k \bar{\psi}_l}{\int d\bar{\psi}_1 d\psi_1 d\bar{\psi}_2 d\psi_2 \; e^{-(\bar{\psi}_1 a_1 \psi_1 + \bar{\psi}_2 a_2 \psi_2)}} \qquad (۸۰.۱۰)$$

جواب مخرج که مشابه با قبل است، پس تنها کافی است صورت کسر را محاسبه کنیم:

$$\begin{aligned}
\int d\bar{\psi}_1 d\psi_1 d\bar{\psi}_2 d\psi_2 \; e^{-(\bar{\psi}_1 a_1 \psi_1 + \bar{\psi}_2 a_2 \psi_2)} \; \psi_i \psi_j \bar{\psi}_k \bar{\psi}_l & \\
&= \int d\bar{\psi}_1 d\psi_1 d\bar{\psi}_2 d\psi_2 \; (1 - (\bar{\psi}_1 a_1 \psi_1 + \bar{\psi}_2 a_2 \psi_2)) \; \psi_i \psi_j \bar{\psi}_k \bar{\psi}_l \\
&= \int d\bar{\psi}_1 d\psi_1 d\bar{\psi}_2 d\psi_2 \; (1) \; \psi_i \psi_j \bar{\psi}_k \bar{\psi}_l \\
&= \int d\bar{\psi}_1 d\psi_1 d\bar{\psi}_2 d\psi_2 \; \psi_i \psi_j \bar{\psi}_k \bar{\psi}_l \\
&+ \int d\bar{\psi}_1 d\psi_1 d\bar{\psi}_2 d\psi_2 \; (-) \psi_i \psi_j \bar{\psi}_l \bar{\psi}_k \\
&= (+)\delta_{jk} \; \delta_{il} + (-)\delta_{jl} \; \delta_{ik}
\end{aligned} \tag{۸۱.۱۰}$$

با استفاده از رابطه‌ی فوق رابطه‌ی (۸۰.۱۰) به شکل زیر خواهد شد که همان قضیه‌ی ویک[۱] نام دارد:

$$\begin{aligned}
< \psi_i \psi_j \bar{\psi}_k \bar{\psi}_l > &= \frac{\delta_{jk} \; \delta_{il}}{a_j a_i} - \frac{\delta_{jl} \; \delta_{ik}}{a_j a_i} \\
&= \frac{\delta_{il}}{a_i} \frac{\delta_{jk}}{a_j} - \frac{\delta_{jl}}{a_j} \frac{\delta_{ik}}{a_i} \\
&= < \psi_i \bar{\psi}_l > \quad < \psi_j \bar{\psi}_k > - < \psi_j \bar{\psi}_l > \quad < \psi_i \bar{\psi}_k >
\end{aligned} \tag{۸۲.۱۰}$$

قضیه‌ی ویک برای بوزون‌ها نیز به شکل رابطه‌ی فوق است، تنها علامت منفی وجود ندارد. نکته‌ی نهایی این است که اگر متوسط ها در پایه‌ی دریای فرمی انجام شوند، عبارت‌هایی مثل $< \psi_i \psi_j >_{FS}$ و $< \bar{\psi}_i \bar{\psi}_j >_{FS}$ صفر خواهند شد و برای فرمیون‌ها حتما باید تعداد زوجی از هر یک عملگرهای خلق و فنا داشته باشیم. ولی در نظریه‌ی BCS برای ابررسانایی که هامیلتونی مدل را می‌توان به شکل زیر در نظر گرفت:

$$H = \epsilon \hat{c}^\dagger \hat{c} + \Delta \hat{c}^\dagger \hat{c}^\dagger + \Delta^* \hat{c} \hat{c} \tag{۸۳.۱۰}$$

عبارت‌های $< \psi_i \psi_j >_{BCS}$ و $< \bar{\psi}_i \bar{\psi}_j >_{BCS}$ ناصفر هستند.

[۱] Wick