

بِسْمِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

باسمه تعالی



دانشگاه تربیت مدرس شهید رجایی

مدیریت تحصیلات تکمیلی

تعهدنامه اصالت اثر

اینجانب نادیه لطفی زاد متعهد می شوم که مطالب مندرج در این پایان نامه / رساله حاصل کار پژوهشی اینجانب است و دستاوردهای پژوهشی دیگران که در این پژوهش از آنها استفاده شده است، مطابق مقررات ارجاع و در فهرست منابع و مأخذ ذکر گردیده است. این پایان نامه / رساله قبلاً برای احراز هیچ مدرک هم سطح یا بالاتر ارائه نشده است. در صورت اثبات تخلف (در هر زمان) مدرک تحصیلی صادر شده توسط دانشگاه از اعتبار ساقط خواهد شد.

کلیه حقوق مادی و معنوی این اثر متعلق به دانشگاه تربیت مدرس شهید رجایی¹ می باشد.

نادیه لطفی زاد

امضاء

1- آدرس: تهران - لویزان - کدپستی 16788 - صندوق پستی 163-16785 - تلفن 9-22970060 (داخلی 2347) -
نمابر 22970011 - پست الکترونیکی sru@sru.ac.ir



دانشگاه تربیت مدرس

دانشکده علوم پایه

پتانسیل تک ذره مایع نرمال هلیم - 3

نگارش

نادیه لطفی زاد

استاد راهنما: جناب آقای دکتر احمد رجبی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته فیزیک

شهریورماه 1390

تأییدیه هیأت داوران

تقدیم

اگرزومات من دراین مجموعه به سرانجامی رسیده باشد، حاصل کاررابایک

دنیا عشق تقدیم می کنم

به فورشیدآسمان دلم پدره.

به مونس لفظه های دلتنگیم مادره.

به عطوفت پاک ودریایی همسره.

به صداقت بی ریایی فرزنده

تقدیر و تشکر

اینک که به لطف خداوند متعال تهیه و تدوین این پایان نامه به انجام رسیده است برفود وظیفه می دانم که از زحمات استاد ممتزم جناب آقای دکتر ربیبی که در نگارش و تدوین این رساله مرایاری و مساعدت نموده اند سپاسگزاری کنم. و همچنین از همه ی اساتید بزرگوار گروه فیزیک که در طول این دوره فوشه چین فرمن فضل و دانش آنها بوده ام تقدیر و تشکر می کنم.

چکیده

در این رساله به محاسبه ی پتانسیل تک ذره¹، جرم موثر² و انرژی تک ذره مایع نرمال هلیوم³ با استفاده از پتانسیل لنارد-جونز³ پرداخته شده است. روش استفاده شده، روش وردشی با پایین ترین مرتبه ی قید⁴(LOCV) و همچنین روش وردشی توسعه یافته با پایین ترین مرتبه ی قید⁵(ELOCV) می باشد. نشان داده شده که انرژی تک ذره در تکانه های مختلف با افزایش تکانه افزایش می یابد و نتایج مربوط به آن با نتایج روش های دیگر مانند روش پایه های همبسته اختلالی، در توافق خوبی است. همچنین نشان داده شده است که جرم موثر در سطح فرمی بر حسب چگالی، کاهش می یابد.

کلمات کلیدی: بسط خوشه ای - انرژی تک ذره - روش وردشی - مایع نرمال هلیوم³ - روش وردشی با پایین ترین مرتبه ی قید⁴(L.O.C.V) - جرم موثر

¹Single Particle Potential

²Effective Mas

³Lennard-Jones interaction

⁴Lowest Order Constrained variational Method

⁵Extended Lowest Order Constrained variational Method

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
أ	تأییدیه هیات داوران-----
ب	تقدیم به-----
ج	تقدیر و تشکر-----
د	چکیده-----
ه	فهرست مطالب-----
و	فهرست جدول‌ها-----
و	فهرست شکل‌ها-----
1	فصل اول: مروری بر مطالعات مربوط به مایع هلیم-3 و روش های بس ذره ای-----
2	1-1 مقدمه-----
4	2-1 مروری بر روش های بس ذره ای-----
4	1-2-1 بسط بروکنر-بت گلدستون (BBG)-----
6	2-2-1 روش مونت کارلوتابع گرین (GFMC)-----
7	3-2-1 روش اختلالی پایه های همبسته (CBF)-----
8	1-3-2-1 روش پایه های همبسته-----
10	2-3-2-1 روش عملگر همبستگی-----
11	4-2-1 روش هارتری-فوک (Hartree – Fock)-----
12	3-3-1 نتایج حاصل از اعمال روشهای فوق برای مایع هلیم-----
15	فصل دوم: نظریه ی عمومی بسط خوشه ای-----
16	1-2 مقدمه-----
17	2-2 خواص توابع موج و عملگر همبستگی-----
19	3-2 محاسبه ی مقدار چشم داشتنی انرژی-----
25	4-2 تابع همبستگی جسترو(شعاعی)-----
33	فصل سوم: فرمول بندی روش LOCW-----
34	1-3 مقدمه-----
34	2-3 فرمول بندی روش LOCW-----
43	فصل چهارم: فرمولبندی پتانسیل تک ذره در روش LOCW-----
44	1-4 انرژی پتانسیل تک ذره ^3He در دمای $T=0$ -----

49	-----	2-4 جرم موثر
50	-----	فصل پنجم: نتیجه گیری
51	-----	1-5 مقدمه
51	-----	2-5 نتایج محاسبات انرژی وپتانسیل تک ذره ی مایع هلیوم3 در چگالیهای مختلف --
52	-----	3- 5 نتایج محاسبات جرم موثر مایع هلیوم3 در چگالیهای مختلف
70	-----	منابع

فهرست جداول

14	-----	جدول 1-1 نتایج حاصل از روشهای مختلف ومقایسه آنها با نتایج تجربی در چگالیهای مختلف
----	-------	---

فهرست شکل ها

39	-----	شکل 1-3 تابع همبستگی در چگالی $\rho = 0.01 A^{-3}$
40	-----	شکل 2-3 تابع همبستگی در چگالی $\rho = 0.018 A^{-3}$
41	-----	شکل 3-3 پتانسیل موثر دو جسمی در چگالی $\rho = 0.014 A^{-3}$
42	-----	شکل 4-3 پتانسیل موثر دو جسمی در چگالی $\rho = 0.0164 A^{-3}$
54	-----	شکل 1-5 نمودار پتانسیل تک ذره در چگالی $\rho = 0.012 A^{-3}$
55	-----	شکل 2-5 نمودار پتانسیل تک ذره در چگالی $\rho = 0.014 A^{-3}$
56	-----	شکل 3-5 نمودار پتانسیل تک ذره در چگالی $\rho = 0.0164 A^{-3}$
57	-----	شکل 4-5 مقایسه پتانسیل تک ذره در چگالی های مختلف به روش LOC
58	-----	شکل 5-5 مقایسه پتانسیل تک ذره در چگالی های مختلف به روش ELOC
59	-----	شکل 6-5 نمودار انرژی تک ذره در چگالی $\rho = 0.012 A^{-3}$
60	-----	شکل 7-5 نمودار انرژی تک ذره در چگالی $\rho = 0.014 A^{-3}$
61	-----	شکل 8-5 نمودار انرژی تک ذره در چگالی $\rho = 0.0164 A^{-3}$
62	-----	شکل 9-5 نمودار اختلاف انرژی تک ذره در تکانه های مختلف وسط فرمی در چگالی $\rho = 0.0164$
63	-----	شکل 10-5 نمودار انرژی تک ذره نمودار اختلاف انرژی تک ذره در تکانه های مختلف وسط فرمی در چگالی $\rho = 0.0166 A^{-3}$
64	-----	شکل 11-5 نمودار جرم موثر در چگالی $\rho = 0.012 A^{-3}$
65	-----	شکل 12-5 نمودار جرم موثر در چگالی $\rho = 0.014 A^{-3}$
66	-----	شکل 13-5 نمودار جرم موثر در چگالی $\rho = 0.0164 A^{-3}$

- 67 شکل 5-14 نمودار جرم موثر در سطح فرمی بر حسب چگالی -----
- 68 شکل 5-15 مقایسه جرم موثر در چگالی های مختلف به روش ELOCV -----
- 69 شکل 5-16 مقایسه جرم موثر در چگالی های مختلف به روش LOCV -----

فصل اول:

مروری بر مطالعات مربوط به مایع

هلیم-3 و روش های بس ذره ای

1-1- مقدمه:

گازی از اتمهای خنثی را که فقط از طریق پتانسیل با برد کوتاه با هم بر همکنش دارند، در نظر می‌گیریم. این گاز در دماهای بالا و فشارهای پایین گاز رقیقی است. هر اتم آزادانه حرکت می‌کند و به ندرت با دیگر اتمها یا با دیواره ی ظرف برخورد می‌کند. این دستگاه کاملاً کلاسیکی است و توسط نظریه ی بنیادی جنبشی گازها توصیف می‌شود؛ گرمای ویژه C_V مستقل از دماست، اگر فشار افزایش یابد و دما پایین آورده شود این مطلب دیگر درست نیست. از یک طرف به دلیل افزایش در چگالی برهمکنش بین ذرات بیشتر می‌شود. از طرفی دیگر به دلیل کاهش دما انرژی جنبشی ذرات در مقابل انرژی برهمکنش آنها ضعیف می‌شود. در این حالت گاز دچار فاز مرتبه اول به حالت مایع می‌شود. این گذار اساساً دینامیکی است چون از برهمکنش ذرات ناشی می‌شود. در این حالت دستگاه یک مایع کلاسیکی است. هرچه دما کمتر می‌شود؛ انرژی جنبشی بیشتر کاهش می‌یابد در صورتی که برهمکنش بین ذرات نقش مهم تری را بازی می‌کنند. در اکثر حالتها گذار فاز مرتبه اول از حالت مایع به حالت جامد ایجاد می‌شود، تنها استثناء ایزوتوپ های هلیوم 3 و هلیوم 4 هستند که تا پایین ترین دما های قابل دسترسی، مایع باقی می‌مانند.

گاز هلیوم معمولی در سال 1895 توسط رمزی¹ کشف شد. هلیوم 3 و هلیوم 4 دو ایزوتوپ پایدار عنصر هلیوم هستند. عنصر هلیوم چند ایزوتوپ ناپایدار هم دارد. ایزوتوپ های پایدار در طبیعت یافت می‌شوند و ایزوتوپ های ناپایدار به دلیل کوتاه بودن طول عمرشان به طور طبیعی پیدا نمی‌شوند. [1] دو ایزوتوپ پایدار هلیوم از بسیاری جهات شبیه به هم هستند و تفاوت آنها به خاطر حجم مولی آنها است. در دماهای پایین هر دو مایع هلیوم 3 و هلیوم 4 انحراف بسیار آشکاری از رفتارهای شبه کلاسیکی را نشان می‌دهند. در مایع هلیوم 4 این تغییر رفتار به وسیله خصوصیتی در گرمای ویژه نشان داده می‌شود که در اصطلاح به آن گذار لامبدا² گویند. [2] در حدود یک تا دو درصد گاز چاه های طبیعی از هلیوم تشکیل می‌شود و بخش عمده ی آن از نوع ایزوتوپ هلیوم 4 است. میزان هلیوم 3 در گاز هلیوم استخراج شده از گازهای طبیعی

¹ Ramsay

² Lambda transition

کمتر از 0.01 درصد است. لذا مقدار گاز هلیوم ^3He که در طبیعت وجود دارد بسیار ناچیز است و می بایستی به ترتیبی آن را در آزمایشگاه تولید کنند. برای تهیه ی مقدار قابل ملاحظه ی از هلیوم ^3He ، ایزوتوپ لیتیم ^6Li را توسط نوترون بمباران می کنند. در این واکنش هسته ای تریتیوم ایجاد می شود. سپس تریتیوم از طریق واپاشی بتا به هلیوم ^3He تبدیل می شود. تولید مقدار کمی هلیوم ^3He در سال 1948 میسر شد و متعاقب آن آزمایش های اولیه بر روی هلیوم ^3He در سال 1949 توسط آسبورن¹ صورت گرفت و به این ترتیب مطالعه ی تجربی گاز، مایع و جامد هلیوم ^3He در دستور کار دانشمندان قرار گرفت. [1]

خصوصیات مایع هلیوم ^3He در دمای بالای 1 درجه کلون تا نزدیکی نقطه ی جوش کاملاً مشابه هلیوم ^4He است. زیرا دو اتم دارای دو لایه الکترونی تقریباً یکسان می باشند. اما در دماهای پایین تر از یک درجه کلون یک تغییر تدریجی در رفتار این مایع وجود دارد که با مایعات عادی فرق می کند. در سال 1908 کامرلینگ² موفق به مایع کردن هلیوم شد. بعد از گذشت 30 سال مشخص شد که اگر آن را تا دمای پایین تر از $2/2$ درجه کلون سرد کنند به مایعی تبدیل می شود که به طور کلی با تمام مایعات متفاوت است. رفتارهای عجیب این ماده در دمای $2/2$ کلون، اولین بار توسط کامرلینگ در حدود سال های 1911 مورد توجه قرار گرفت. او دریافت که وقتی دمای این ماده به کمتر از $2/2$ کلون می رسد، به جای انقباض، انبساط می یابد در سال 1924 کامرلینگ و بوکز³ دریافتند که تابع چگالی - دما دارای یک کمینه تیز به صورت یک ناپیوستگی در شیب آن در دمای $2/2$ کلون است.

مایع های هلیوم ^3He و هلیوم ^4He تنها مایعهای کوانتومی واقعی هستند که در طبیعت یافت می شوند. مایع کوانتومی هلیوم ^3He به دلیل خواص ویژه اش در سالهای نیمه دوم قرن بیستم در شمار مسائل مهم فیزیک ماده چگال قرار گرفته است. چون اسپین هلیوم ^3He برابر $1/2$ است، این مایع را یک مایع فرمی می نامند. دمای فرمی $T_f = \frac{E_f^0}{k}$ (که در آن E_f^0 انرژی فرمی در حالت پایه و k ثابت بولتزمن است) مایع هلیوم ^3He ، حدود 0.5°K است. رفتار کوانتومی این مایع در دماهای زیر دمای فرمی یعنی در دماهای خیلی پایین و از مرتبه ی 0.1°K یافت شده است. در این دما طول موج دو بروی اتم های مایع $1/2 \hbar / (2MkT)$ ، در حدود فاصله ی بین اتمهاست. نام

مایع کوانتومی نیز به همین خاطر بر آن گذارده شده است. این مایع در فشار های کمتر از $33/5$ اتمسفر تا دمای صفر مطلق به صورت مایع باقی می ماند و در دماهای کمتر از 2 میلی کلون به فاز

¹ Osborne

² Kamerlingh

³ Boks

های ابرشاره از نوع BCS گذار می کند. مایع هلیوم 3 در دماهای بالاتر از 2 میلی کلوین نمونه ای از مایع های بهنجار فرمی است. نظریه ی مایع بهنجار هلیوم 3 با کارلاندائو در دهه ی پنجاه میلادی شروع شده است. که در این نظریه، لاندائو مفهوم شبه ذرات و برهمکنش بین آنها را مطرح کرد. [2]

مطالعه هلیوم 3 راهگشای درک ما از دستگاههای بس ذره ای بوده و روشهای به کاررفته برای حل مسئله بس ذره ای این مایع در بخشهای فیزیک ماده چگال کاربرد دارد. حال تعدادی از روشهای حل مورد استفاده در حل مسائل بس ذره ای را مطرح می کنیم که گاهی برای محک زدن پتانسیل های برهمکنش نیز استفاده می شود.

1-2-1- مروری بر روش های بس ذره ای

1-2-1- بسط بروکنر-بت گلدستون (BBG) [3]

در سال 1954 روش BBG که یک روش اختلالی است، توسط بروکنر معرفی گردید، که یک بسط در چگالی های پایین است. این بسط برپایه ی بسط خوشه ای گلدستون [4] برای انرژی حالت پایه استوار است. در این روش تابع موج حالت پایه یک سیستم بس ذره ای که در معادله شرودینگر

$$H\psi = E\psi \quad (1-1)$$

صدق می کند، به صورت زیر نمایش داده می شود،

$$\psi = (1 + \sum_{n \geq 2} F_n) \Phi \quad (2-2)$$

که Φ دترمینان اسلاتر توابع موج ذرات بدون برهمکنش و عملگر F_n دقیقاً n ذره را به بیرون دریای فرمی برانگیخته می کند. هامیلتونی H برای یک سیستم N ذره ای، به صورت زیر است،

$$H = \sum_{i=1}^N t(i) + \sum_{1 < i < j \leq N} V(ij) = T + V \quad (3-1)$$

که $V(ij)$ پتانسیل برهمکنش دوزره ای می باشد، از اینجا عبارت زیر را برای انرژی سیستم خواهیم داشت،

$$E = \langle \Phi | T | \Phi \rangle + \langle \Phi | V + VF_2 | \Phi \rangle \quad (4-1)$$

در این بسط هامیلتونی به دو قسمت شکسته می شود،

$$H = H_0 + H_1 \quad (5-1)$$

که

$$H_0 = T + U \quad (6-1)$$

$$H_1 = V - U \quad (7-1)$$

$$U = \sum_i U_i \quad (8-1)$$

در اینجا پتانسیل تک ذره ای U طوری انتخاب می شود که بسط اختلالی برای H_1 به طور سریع همگرا شود، [5 و 6 و 7]

همگرایی بسط BBG روی کوچکی پارامتر ξ بنا شده است که به صورت معادله انتگرالی زیر تعریف می شود، [6]

$$\xi = \rho \int |\Phi_{mn} - \psi_{mn}|^2 dr \quad (9-1)$$

Φ_{mn} و ψ_{mn} به ترتیب توابع موج دوزره ای غیرهمبسته و همبسته می باشند که معادله بت - گلدستون [8] را برآورده می کنند. در ضمن مقدار ψ به انتخاب پتانسیل تک ذره ای بستگی دارد.

2-2-1 روش مونت کارلو تابع گرین (GFMC)

روش مونت کارلو تابع گرین (GFMC) که توسط کالوس¹ و دیگران [9] بنا شد، مقدار دقیق انرژی حالت پایه یک سیستم بس ذره ای را مشخص می کند. ابتدا این روش برای سیستم های بوزونی به کار رفت [9, 10]. اما بعدها برای سیستم های فرمیونی با وابستگی اسپینی قوی (مثل هسته ها) معرفی شد. [11, 12]

به طور کلی روش (GFMC) برای حل معادله شرودینگر برای حالت پایه ساخته شده است. دو نمونه از این روش به کار رفته است، که یکی روش تابع گرین [9] و دیگری تخمین زمان کوتاه [12] می باشد. روش زمان کوتاه در سیستم های وابسته به اسپین به کار می رود. در زیر به بررسی روش تابع گرین می پردازیم.

معادله شرودینگر برای انرژی حالت پایه E_0 یک سیستم بس ذره ای به صورت زیر است

$$H\psi_0(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N) = E_0 \psi_0(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N) \quad (10-1)$$

اگر ψ_n معرف n امین ویژه حالت با انرژی E_n و R معرف N مختصه $\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N$ سیستم باشد، تابع گرین $G(R, R')$ به صورت زیر می باشد،

$$G(R, R') = \sum_n \frac{|\psi_n(R)\rangle \langle \psi_n(R')|}{E_n} \quad (11-1)$$

با این تابع گرین می توان نوشت،

$$\psi(R) = E \int G(R, R') \psi(R') dR' \quad (12-1)$$

¹ Kalos

یک توالی از توابع رابه صورت

$$\psi^{(n+1)}(R) = E \int G(R, R') \psi^{(n)}(R') dR' \quad : n = 0, 1, \dots \quad (13-1)$$

تعریف می کنیم، در نتیجه حالت پایه ψ_0 معادله (10-1)، فرم مجانبی $\psi^{(n)}$ برای n بزرگ خواهد بود. انرژی حالت پایه E_0 مقدار E خواهد بود که بهنجارش $\psi_n^{(n)}$ رابه طور مجانبی پایدار می سازد. تابع $G(R, R')$ مشخص نیست و حل مستقیم معادله (12-1) امکان پذیر نیست. حال از تابع موج آزمایشی $\psi_j(R)$ استفاده می کنیم

$$\psi_j(R) \psi(R) \quad (14-1)$$

پس معادله (12-1) به صورت زیر در می آید،

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(R) &= E \int \psi_j(R) G(R, R') \psi_j^{-1}(R') \hat{\psi}(R') dR' \\ &= E \int \hat{G}(R, R') \hat{\psi}(R') dR' \end{aligned} \quad (15-1)$$

که در اینجا،

$$\hat{G}(R, R') = \psi_j(R) G(R, R') \psi_j^{-1}(R') \quad (16-1)$$

هنوز $\hat{G}(R, R')$ معلوم نیست ولی می توان آن رابا استفاده از روش مونت-کارلو به دست آورد و مقادیر انرژی رابا تکرار زیاد معادله (15-1)، تعیین نمود.

3-2-1 روش اختلالی پایه های همبسته (CBF)

در مسائلی که برهمکنش بین ذرات وابسته به حالت سیستم است و بایک پتانسیل غیر مرکزی

سروکار داریم، تابع موج آزمایشی $\psi = F\Phi$ را معرفی کرده، به دوروش می توان محاسبات مربوط به سیستم را انجام داد:

تعمیم تابع Φ به صورت تابع های همبسته
تعمیم توابع همبستگی F به صورت عملگرهای همبسته

1-3-2-1 روش پایه های همبسته

در این روش همبستگی القاء شده توسط نیروی دافعه ی قوی در پتانسیل به عنوان یک جمله اختلالی در نظر گرفته می شود [۱۳، ۱۴]. اگر F تابع همبستگی چند ذره ای و $|\Phi_m\rangle$ یک مجموعه کامل متعامد از ویژه حالت های انرژی سیستم ذرات بدون برهمکنش باشد، در این صورت، یک مجموعه کامل بهنجار غیر متعامد از توابع پایه همبسته به صورت زیر می باشد،

$$|\psi_m\rangle = F|\Phi_m\rangle \langle \Phi_m|F^\dagger F|\Phi_m\rangle^{-\frac{1}{2}} \quad (17-1)$$

از طرفی مقدار چشمداشتی انرژی حالت پایه سیستم را از رابطه زیر داریم،

$$E = \frac{\langle \psi|H|\psi\rangle}{\langle \psi|\psi\rangle} \quad (18-1)$$

حال تابع موج آزمایشی ψ را به صورت یک ترکیب خطی از ψ_m می نویسیم.

$$\psi = \sum_m C_m \psi_m \quad (19-1)$$

در نتیجه خواهیم داشت،

$$E = \frac{\sum_{mn} C_m^* C_n H_{mn}}{\sum_{pq} C_p^* C_q N_{pq}} \quad (20-1)$$

در این رابطه $H_{mn} = \langle \psi_m | H | \psi_n \rangle$ و $N_{pq} = \langle \psi_p | \psi_q \rangle$ می باشد. چون E انرژی حالت پایه [13] می باشد شرط اکسترمم

$$\frac{\partial E}{\partial C_m^*} = 0 \quad (21-1)$$

رابطه زیررابطه می دهد،

$$\det(H_{mn} - EN_{mn}) = 0 \quad (22-1)$$

از حل این معادله مقدار انرژی سیستم بر همکنش کننده به دست می آید. حال با در نظر گرفتن پایه های همبسته، انرژی حالت پایه سیستم را به صورت اختلالی بسط می دهیم، که تا مرتبه سوم بسط اختلال به صورت زیر می باشد.

$$E = E_0 + (\delta E)^{(2)} + (\delta E)^{(3)} + \dots \quad (23-1)$$

در اینجا داریم،

$$E_0 = H_{00} \quad (24-1)$$

$$(\delta E)^{(2)} = - \sum_m \frac{W_{0m} W_{m0}}{(E_m - E_0)} \quad (25-1)$$

$$(\delta E)^{(3)} = - \sum_{mn} \frac{W_{0m} W_{mn} W_{n0}}{(E_m - E_0)(E_n - E_0)} \quad (26-1)$$

در روابط بالا

$$E_m = H_{mn} \quad (27-1)$$

$$W_{mn} = (H_{mn} - E_0 N_{mn})(1 - \delta_{mn}) \quad (28-1)$$

اندیس 0 معرف حالت پایه گازفرمی (تابع موج سیستم بدون برهمکنش) می باشد. بنابراین بادر نظر گرفتن تابع همبستگی به صورت تابع همبستگی مستقل از حالت جسترو، E_0 همان انرژی جسترو خواهد بود.

همگرایی بسط اختلالی انرژی حالت پایه سیستم توسط معادله انتگرالی زیر توصیف می شود،

$$\xi = \int |f^2(r) - 1| dr \quad (29-1)$$

که ξ پارامتر کوچکی نامیده می شود. [15]

2-3-2-1 روش عملگر همبستگی

در این روش توابع همبستگی دوزره ای F_{ij} عملگر بوده که روی حالت های ذره های i و j اثر می کنند. تابع موج وردشی عبارت است از فرم تعمیم یافته جسترو

$$\psi = [S \prod_{i < j} F_{ij}] \Phi \quad (30-1)$$

در اینجا S عملگر متقارن کننده و Φ دترمینان اسلاتر توابع موج ذرات بدون برهمکنش می باشند. در اینجا توابع همبستگی F_{ij} دارای شکل کلی زیر هستند،

$$F_{ij} = \sum_p f^p(r_{ij}) O_{ij}^p \quad (31-1)$$

O_{ij}^p عملگرها و $f^p(r_{ij})$ توابعی از فاصله نسبی ذرات i و j می باشند. حال می توان انرژی حالت پایه سیستم،