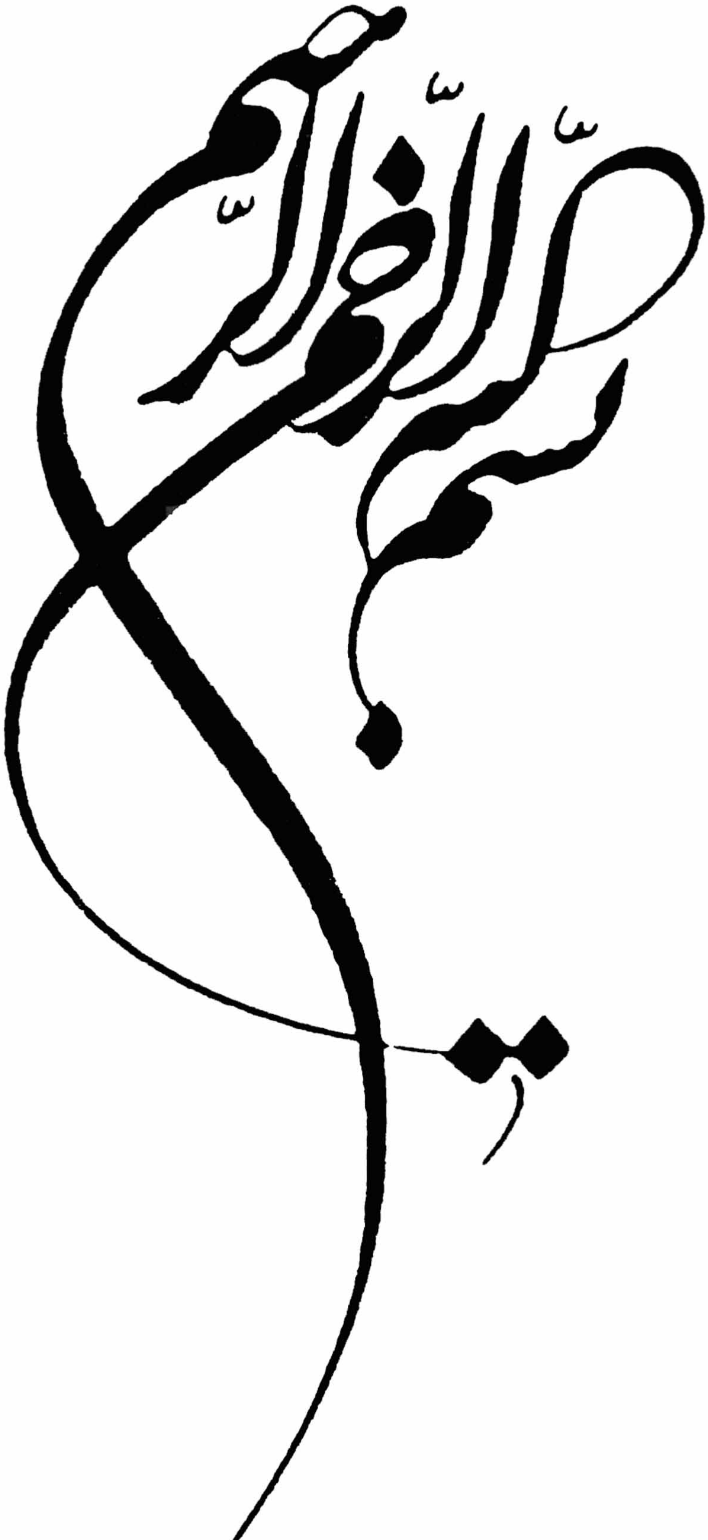
بسم الله الرحمن الرحیم

بسمه تعالی

دانشگاه تربیت مدرس

دانشکده علوم پایه

تاییدیه اعضای هیات داوران حاضر در جلسه دفاع از پایان‌نامه کارشناسی‌ارشد

اعضای هیئت داوران نسخهٔ نهایی پایان‌نامه آقای محسن حافظ‌تربتی رشته **فیزیک (ماده چگال)** تحت عنـوان: «**کاربرد تبدیلات یکانی پیوسته در مدل هابارد**»**از نظر فرم و محتوا بررسی نموده و آنرا برای اخذ درجهٔ کارشناسی‌ارشد مـورد تائیـد قـرار دادند.**

اعضای هیأت داوران	نام و نام خانوادگی	رتبه علمی	امضاء
۱- استاد راهنما	دکتر محمدرضا ابوالحسنی	استادیار	
۲- استاد مشاور	دکتر سیداکبر جعفری	استادیار	۸۷/۴/۳۱
۳- استاد ناظرداخلی	دکتر اسماعیل ساعی‌ور	دانشیار	
٤- استاد ناظر خارجی	دکتر فرهاد شهبازی	استادیار	۸۷/٤/۳۱
۵- نماینده شورای تحصیلات تکمیلی	دکتر اسماعیل ساعی‌ور	دانشیار	

آیین‌نامه حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهشهای علمی
دانشگاه تربیت مدرس

مقدمه: با عنایت به سیاست‌های پژوهشی و فناوری دانشگاه در راستای تحقق عدالت و کرامت انسانها که لازمه شکوفایی علمی و فنی است و رعایت حقوق مادی و معنوی دانشگاه و پژوهشگران، لازم است اعضای هیأت علمی، دانشجویان، دانش‌آموختگان و دیگر همکاران طرح، در مورد نتایج پژوهشهای علمی که تحت عناوین پایان‌نامه، رساله و طرحهای تحقیقاتی با هماهنگی دانشگاه انجام شده است، موارد زیر را رعایت نمایند:

ماده 1- حق نشر و تکثیر پایان نامه/ رساله و درآمدهای حاصل از آنها متعلق به دانشگاه می باشد ولی حقوق معنوی پدید آورندگان محفوظ خواهد بود.

ماده 2- انتشار مقاله یا مقالات مستخرج از پایان‌نامه/ رساله به صورت چاپ در نشریات علمی و یا ارائه در مجامع علمی باید به نام دانشگاه بوده و با تایید استاد راهنمای اصلی، یکی از اساتید راهنما، مشاور و یا دانشجو مسئول مکاتبات مقاله باشد. ولی مسئولیت علمی مقاله مستخرج از پایان نامه و رساله به عهده اساتید راهنما و دانشجو می باشد.

تبصره: در مقالاتی که پس از دانش‌آموختگی بصورت ترکیبی از اطلاعات جدید و نتایج حاصل از پایان‌نامه/ رساله نیز منتشر می‌شود نیز باید نام دانشگاه درج شود.

ماده 3- انتشار کتاب ، نرم افزار و یا آثار ویژه (اثری هنری مانند فیلم، عکس، نقاشی و نمایشنامه) حاصل از نتایج پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرحهای تحقیقاتی کلیه واحدهای دانشگاه اعم از دانشکده ها، مراکز تحقیقاتی، پژوهشکده ها، پارک علم و فناوری و دیگر واحدها باید با مجوز کتبی صادره از معاونت پژوهشی دانشگاه و براساس آئین نامه های مصوب انجام شود.

ماده 4- ثبت اختراع و تدوین دانش فنی و یا ارائه یافته ها در جشنواره‌های ملی، منطقه‌ای و بین‌المللی که حاصل نتایج مستخرج از پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرح‌های تحقیقاتی دانشگاه می باشد، باید با هماهنگی استاد راهنما یا مجری طرح از طریق معاونت پژوهشی دانشگاه انجام گیرد.

ماده 5- این آیین‌نامه در 5 ماده و یک تبصره در تاریخ87/4/1 در شورای پژوهشی و در تاریخ 87/4/23 در هیأت رئیسه دانشگاه به تایید رسید و در جلسه مورخ 87/7/15 شورای دانشگاه به تصویب رسیده و از تاریخ تصویب در شورای دانشگاه لازم‌الاجرا است.

آیین نامه چاپ پایان‌نامه (رساله)های دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس

نظر به اینکه چاپ و انتشار پایان نامه (رساله)های تحصیلی دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس، مبین بخشی از فعالیتهای علمی - پژوهشی دانشگاه است بنابراین به منظور آگاهی و رعایت حقوق دانشگاه،دانش آموختگان این دانشگاه نسبت به رعایت موارد ذیل متعهد می‌شوند:

ماده 1: در صورت اقدام به چاپ پایان نامه (رساله)ی خود، مراتب را قبلاً به طور کتبی به «دفتر نشر آثارعلمی» دانشگاه اطلاع دهد.

ماده 2: در صفحه سوم کتاب (پس از برگ شناسنامه) عبارت ذیل را چاپ کند:

«کتاب حاضر، حاصل پایان نامه کارشناسی ارشد/ رساله دکتری نگارنده در رشته **فیزیک** است که در سال 1387در دانشکده **علوم پایه** دانشگاه تربیت مدرس به راهنمایی جناب آقای دکتر **محمدرضا ابوالحسنی**، مشاوره جناب آقای دکتر **سید اکبر جعفری** از آن دفاع شده است.»

ماده 3: به منظور جبران بخشی از هزینه‌های انتشارات دانشگاه، تعداد یک درصد شمارگان کتاب (در هر نوبت‌چاپ) را به «دفتر نشر آثارعلمی» دانشگاه اهدا کند. دانشگاه می‌تواند مازاد نیاز خود را به نفع مرکز نشر درمعرض فروش قرار دهد.

ماده 4: در صورت عدم رعایت ماده 3، 50% بهای شمارگان چاپ شده را به عنوان خسارت به دانشگاه تربیت‌مدرس، تأدیه کند.

ماده 5: دانشجو تعهد و قبول می کند در صورت خودداری از پرداخت بهای خسارت، دانشگاه می‌تواند خسارت مذکور را از طریق مراجع قضایی مطالبه و وصول کند؛ به علاوه به دانشگاه حق می‌دهد به منظور استیفای حقوق خود، از طریق دادگاه، معادل وجه مذکور در ماده 4 را از محل توقیف کتابهای عرضه شده نگارنده برای فروش، تامین نماید.

ماده 6: اینجانب **محسن حافظ تربتی** دانشجوی رشته **فیزیک** مقطع **کارشناسی ارشد** تعهد فوق وضمانت اجرایی آن را قبول کرده، به آن ملتزم می شوم.

نام و نام خانوادگی: **محسن حافظ تربتی**

تاریخ و امضا: 1387/10/13

دانشکده علوم پایه

پایان نامه دوره کارشناسی ارشد فیزیک (نظری)

کاربرد تبدیلات یکانی پیوسته در مدل هابارد

نگارنده

محسن حافظ تربتی

استاد راهنما

دکتر محمدرضا ابوالحسنی

استاد مشاور

دکتر سید اکبر جعفری

تیر ماه 1387

تقدیر و تشکر

اکنون که به لطف خداوند بزرگ کار این پایان نامه به اتمام رسیده است، بر خود لازم می‌دانم از آقای دکتر محمدرضا ابوالحسنی که راهنمایی این پایان نامه را بر عهده گرفته اند تشکر کنم. راهنمایی‌های ایشان همواره باعث حل مشکلات موجود بوده است.

از آقای دکتر سید اکبر جعفری که بسیار فراتر از وظیفه یک استاد مشاور در این پایان نامه سهم داشته‌اند تشکر می‌کنم. بی شک بدون وجود ایشان کیفیت این پایان نامه در حد حاضر نمی‌بود.

همچنین از آقای سیدرضی علوی زاده، دانشجوی کارشناسی ارشد ریاضی، که در معرفی و راهنمایی استفاده از نرم افزارهای مختلف به این جانب نقش داشته‌اند تشکر می‌کنم.

چکیده

در این پایان نامه با استفاده از تبدیلات یکانی پیوسته (معادلات شار) مدل هابارد یونی یک بعدی نیمه پر در دمای صفر با شرایط مرزی تناوبی را بررسی می‌کنیم. آنچه در مورد این مـدل ابهـام آمیـز اسـت حالت سیستم بین دو عایق مات و نواری است. بدین منظور ابتدا با استفاده از تبدیلات یکـانی پیوسـته یک هامیلتونی مؤثر قطری بدست مـی‌آوریـم کـه شـامل جملـه یـونی، بـرهمکنش درون جایگـاهی و برهمکنش نزدیکترین همسایه‌های برون جایگاهی است. به منظـور تشـخیص گـذارها، گـاف اسـپین و گاف بار را محاسبه می‌کنیم. محاسبات ما دو نقطه گذار را نشان می‌دهند. در Δ ثابت، بـا افـزایش U ابتدا ناحیه‌ای داریم که در آن گاف اسپین Δ_s و گاف بار Δ_c هر دو بزرگتر از صفر هسـتند. سـپس در $U=U_{c_1}$ گاف اسپین وگاف بار صفر می‌شوند و تا $U=U_{c_2}$ صفر باقی می‌مانند و برای $U>U_{c_2}$ گاف اسپین و گاف بار دوباره بزرگتر از صفر می‌شوند. در $U<U_{c_1}$ و $U>U_{c_2}$ ما به ترتیب حالت‌های عایق نواری و عایق مات را برای هامیلتونی مؤثر بدست می‌آوریم.

کلید واژه‌ها: سیستم‌های جفت شده قوی، عایق مات.

فهرست

فهرست شکل‌ها

پیشگفتار

گروه بازبهنجارش و معادله شار وابسته به آن یکی از ابزارهای ضروری برای مطالعه سیستم‌های بس ذره‌ای می‌باشد. دامنه کاربردهای آن شامل تئوری‌های کارآمد برای گذارهای فاز و پدیده‌های بحرانی است. همچنین این روش یکی از روش‌هایی است که بوسیله آن می‌شود سیستم‌های کوانتومی برهمکنشی را به صورت غیر اختلالی بررسی کرد. هدف ما بررسی موردی جدید در این چارچوب، یعنی بررسی معادله شار ناشی از یک تبدیل یکانی پیوسته است که برای اولین بار توسط وگنر[1] و بطور مجزا بوسیله گلازک[2] و ویلسون[3] در سال 1994 معرفی شد. معادله شار، تحول یک عملگر مثلاً هامیلتونی را در نتیجه اثر یک تبدیل یکانی پیوسته بر روی آن تعیین می‌کند. این تبدیلات به گونه‌ای ساخته می‌شوند که عملگر را به شکلی درآورد که تا حد ممکن قطری باشد. هامیلتونی تبدیل یافته از حل معادلات دیفرانسیل براساس پارامتری فرمال بدست می‌آید. این ویژگی‌ها منجر به کاربرد این روش در سیستم‌های کوانتومی مختلف مثلاً جفت‌شدگی الکترون- فونون، مدل اندرسون[4]، مدل‌های بوزونی، مدل هابارد[5]، مدل ساین-گوردن[6] و غیره شده است. این روش به طور برجسته‌ای در مدل لیپکین[7] نیز کاربرد دارد. علاوه بر این، معادله شار برای ساختن هامیلتونی مؤثری که تعداد شبه ذره

---

[1] Wegner
[2] Glazk
[3] Wilson
[4] Anderson
[5] Hubbard
[6] Sine-Gordon
[7] Lipkin

،مثلا برانگیختگی‌های ذره-حفره را در سیستم‌های فرمیونی ثابت نگه می‌دارد، استفاده می‌شود. در این پایان نامه از تبدیلات یکانی پیوسته برای بررسی مدل هابارد یونی در شرایط نیمه پر و دمای صفر استفاده خواهد شد.

مدل هابارد یونی مدلی برای سیستم‌های جفت شده قوی است که علاوه بر مدل هابارد شامل یک پتانسیل تک ذره اضافی است. این پتانسیل تک ذره باعث ایجاد اختلاف انرژی بین جایگاه‌های زوج و فرد می‌شود. مدل هابارد یونی به عنوان مدلی برای توصیف گذارهای خنثی به عایق در نمک‌های انتقال بار آلی[1] و درک گذار فروالکتریک در مواد پروسکیت[2] استفاده شده است. این مدل در حد برهمکنش قوی مشابه با مدل هابارد به هامیلتونی مؤثری تبدیل می‌شود که در شرایط نیمه پر عایق مات[3] را نتیجه می‌دهد. از طرف دیگر در حالتی که برهمکنشی بین الکترون‌ها وجود ندارد مدل هابارد یونی بوسیله تبدیلات بگولیوبوف[4] قطری شده و عایق نواری را نتیجه می‌دهد. آنچه در مورد مدل هابارد یونی ابهام‌آمیز است حالت سیستم بین دو عایق نواری و مات است.

در فصل اول تبدیلات یکانی پیوسته معرفی می‌شود. در ادامه این فصل نتایج حاصل از کاربرد این روش روی مدل‌های مختلف فیزیک ارائه می‌گردد. در فصل دوم شکست‌های نظریه نواری و نیاز به معرفی مدل‌هایی که شامل برهمکنش الکترون-الکترون شوند مورد بحث قرار می‌گیرد. در ادامه فصل دوم مدل هابارد به عنوان مدلی برای سیستم‌های جفت شده قوی معرفی می‌شود. در فصل سوم با استفاده از روش تبدلات یکانی پیوسته مدل هابارد یونی مورد بررسی قرار می‌گیرد. با استفاده از این روش یک هامیلتونی مؤثر قطری برای مدل هابارد یونی بدست می‌آید و برای تشخیص گذارهای فازی گاف بار و گاف اسپین محاسبه می‌شوند.

[1] Organic charge transfer salt
[2] Perovskite
[3] Mott
[4] Bogoliubov

فصل اول

تبدیلات یکانی پیوسته

1-1 کلیات

یکی از مهمترین مسائلی که در بررسی هر سیستم فیزیکی با آن مواجه هستیم تعیین ویـژه مقـادیر و ویژه حالت‌های مربوط به هامیلتونی آن سیستم فیزیکی است. تعداد سیســتم‌هـایی کـه بتـوان معادلـه ویژه مقدار هامیلتونی را برای آنها بطور دقیق حل کرد بسیار اندک است. همین امر باعث بوجود آمـدن روش‌هایی شده است که سیستم‌های کوانتـومی را بـه صـورت اختلالـی بررسـی مـی‌کنـد. یـک روش اختلالی روش اختلالی معمولی است که درآن جمله‌ای که باعث پیچیده شدن هامیلتونی مـی‌شـود بـه صورت اختلالی بررسی می‌گردد. این روش معمولاً در مورد سیستم‌هـای تـک ذره بـه کـار مـی‌رود. در مورد سیستم‌های با تعداد ذره زیاد روش دیاگرام‌های فاینمن[1] استفاده می‌شود که در هر تقریـب یـک مجموعه از دیاگرام‌ها با هم جمع می‌شود.

هدف ما معرفی روش جدیدی است که بوسیله آن بتوان معادله ویژه مقدار مربوط به هامیلتونی را حل کرد. برای حل هر معادله ویژه مقدار کار اساسی قطری کردن عملگر مربوط به آن معادله ویژه مقدار

[1] Feynman

است. در این حالت ویژه مقادیر آن عملگر روی قطر اصلی قرار خواهند گرفت. در این روش ما می-خواهیم بوسیله یک تبدیل یکانی پیوسته هامیلتونی را به شکلی در آوریم که تا جای ممکن قطری شده باشد.

فرض کنید که هامیلتونی به شکل زیر باشد:

$$H = H^d + H^r \tag{1-1}$$

که در آن H^d عنصرهای روی قطر اصلی و H^r عنصرهای خارج قطر اصلی هستند. به عنوان مثال در هامیلتونی زیر:

$$H = a\,(a^\dagger a + \frac{1}{2}) + b\left(a^2 + a^{\dagger 2}\right) \tag{2-1}$$

جمله اول هامیلتونی نوسانگر هماهنگ است که شامل عنصرهای روی قطر اصلی است وجمله دوم عنصرهای غیر قطر اصلی یا همان H^r است. هامیلتونی تبدیل یافته $H(\mathbf{l})$ را بصورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$H(\mathbf{l}) = U(\mathbf{l}) H U^\dagger(\mathbf{l}) \tag{3-1}$$

$$U^\dagger(\mathbf{l}) U(\mathbf{l}) = 1 \tag{4-1}$$

که $\mathbf{l} \in [0, \infty)$ یک پارامتر است. چون $U(\mathbf{l})$ عملگری یکانی است و چون با اثر دادن یک عملگر یکانی روی یک مجموعه پایه متعامد یک مجموعه پایه متعامد دیگر به دست می‌آید بنابراین ویژه

مقادیر هامیلتونی تبدیل یافته با ویژه مقادیر H یکسان خواهد بود. به بیان واضح‌تر فرض کنید $|a\rangle$ یک مجموعه کامل باشد که نمایش ماتریسی هامیلتونی در این پایه نوشته شده است:

$$h_{a'a} = \langle a' | H | a \rangle$$

از طرفی اگر برای نوشتن عنصرهای ماتریس $H(\mathbf{l})$ از پایه $|b\rangle = U(\mathbf{l})|a\rangle$ استفاده شود داریم:

$$h_{b'b}(\mathbf{l}) = \langle b' | H(\mathbf{l}) | b \rangle = \langle a' | H | a \rangle = h_{a'a}$$

که ادعای یکسان بودن ویژه مقادیر $H(\mathbf{l})$ و H را ثابت می‌کند. اگر چه ویژه مقادیر $H(\mathbf{l})$ و H یکسان هستند اما این دو عملگر دارای ویژه حالت‌های متفاوت خواهند بود. بنابراین اگر بتوان $U(\mathbf{l})$ را طوری انتخاب کرد که هامیلتونی قطری شود آنگاه ویژه مقادیر هامیلتونی تعیین خواهند شد.

با مشتق گیری از رابطه (1-3) داریم:

$$\frac{dH(\mathbf{l})}{dl} = \frac{dU(\mathbf{l})}{dl} H U^{\dagger}(\mathbf{l}) + U(\mathbf{l}) H \frac{dU^{\dagger}(\mathbf{l})}{dl}$$

$$= h(\mathbf{l}) H(\mathbf{l}) - H(\mathbf{l}) h(\mathbf{l}) = \left[h(\mathbf{l}), H(\mathbf{l}) \right] \qquad (5\text{-}1)$$

که:

$$h(\mathbf{l}) \equiv \frac{dU(\mathbf{l})}{dl} U^{\dagger}(\mathbf{l}) = -h^{\dagger}(\mathbf{l}) \qquad (6\text{-}1)$$

در نوشتن خط دوم از مشتق رابطه (1-4) استفاده شده است. $h(\mathbf{l})$ در رابطه بالا مولد و معادله (1-5) شار هامیلتونی در اثر تبدیل یکانی پیوسته نامیده می‌شود. وگنر[1] در سال 1994 روش تبدیلات یکانی پیوسته را معرفی کرد [1]. او $h(\mathbf{l})$ را به گونه‌ای انتخاب کرد که $H(\mathbf{l})$ در $\mathbf{l} \to \infty$ قطری شود. ما در ادامه مولد وگنر را معرفی خواهیم کرد و نشان خواهیم داد که چگونه این انتخاب باعث قطری شدن $H(\mathbf{l} = \infty)$ می‌شود. سپس با استفاده از این مولد تبدیلات یکانی پیوسته را روی مدل اندرسون[2] بکار خواهیم برد [2]. به عنوان مثال دیگری برهمکنش الکترون-فونون با یک برهم‌کنش موثر الکترون-الکترون جایگزین خواهد شد [3]. سپس مولد میلک[3] معرفی می‌شود که در بلوکه ماتریس‌ها[4] کاربرد زیادی دارد [4] و با استفاده از این مولد مدل لیپکین[5] مورد بررسی قرار می‌گیرد [5].

1-2 مولد وگنر

استفاده از تبدیلات یکانی برای بدست آوردن یک هامیلتونی مؤثر از سال‌ها قبل در فیزیک استفاده می‌شده است. آنچه جنبه جدید دارد این است که وگنر در مقاله خود [1] از مجموعه‌ای متوالی از تبدیلات یکانی بی نهایت کوچک استفاده می‌کند تا هامیلتونی را به شکلی درآورد که تا حد ممکن قطری شده باشد و رابطه‌ای برای $h(\mathbf{l})$ پیشنهاد می‌کند که باعث می‌شود هامیلتونی در بی نهایت قطری شود. در این بخش مولد وگنر را معرفی می‌کنیم و به عنوان یک مثال ساده نشان می‌دهیم که روش تبدیلات یکانی پیوسته برای H^r کوچک با نظریه اختلال معمولی سازگار است.

فرض کنید $H(\mathbf{l})$ به صورت زیر نوشته شود:

---
[1] Wegner
[2] Anderson
[3] Mielke
[4] Band-matrices
[5] Lipkin

$$H(\mathbf{l}) = H^d(\mathbf{l}) + H^r(\mathbf{l}) \tag{7-1}$$

که مجدداً $H^d(\mathbf{l})$ قسمت قطری و $H^r(\mathbf{l})$ شامل عنصرهای غیر قطری است. به عنـوان مثـال اگـر H به صورت رابطه (7-1) باشد و بعد از تبدیل به صورت زیر درآید:

$$H(\mathbf{l}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(\mathbf{l}) a^{\dagger n} a^n + \sum_{n=0}^{\infty} b_n(\mathbf{l}) \left(a^{\dagger n} + a^n\right) \tag{8-1}$$

جمله اول $H^d(\mathbf{l})$ و جمله دوم $H^r(\mathbf{l})$ است.

وگنر $h(\mathbf{l})$ را به صورت زیر انتخاب می‌کند:

$$h(l) = \left[H(\mathbf{l}), H^r(\mathbf{l})\right] \tag{9-1}$$

در واقع روابط (9-1) و (5-1) قسمت اصلی روش تبدیلات یکانی پیوسته را تشـکیل مـی‌دهنـد. حـال نشان می‌دهیم که با انتخاب (9-1) $H(\mathbf{l})$ در بی نهایت قطری یا بلوکه قطری[1] خواهد شد. بـا توجـه به رابطه (9-1) داریم:

$$h_{kq}(\mathbf{l}) = \sum_p \left(h_{kp}(\mathbf{l}) h^r{}_{pq}(\mathbf{l}) - h^r{}_{kp}(\mathbf{l}) h_{pq}(\mathbf{l})\right) \tag{10-1}$$

چون $H_r(\mathbf{l})$ قسمت غیر قطری $H(\mathbf{l})$ است بنابراین:

$$h_{kq}(\mathbf{l}) = h_{kq}(\mathbf{l})\left(1 - d_{kq}\right) \tag{11-1}$$

---

[1] Block-diagonal

با قرار دادن رابطه (1-11) در (1-10) داریم:

$$h_{kq}(\mathbf{l}) = \sum_p \left(h_{kp}(\mathbf{l}) h_{pq}(\mathbf{l}) - h_{kp}(\mathbf{l}) h_{pq}(\mathbf{l}) d_{pq} - h_{kp}(\mathbf{l}) h_{pq}(\mathbf{l}) + h_{kp}(\mathbf{l}) h_{pq}(\mathbf{l}) d_{kp} \right)$$

$$= h_{kq}(\mathbf{l}) \left(h_{kk}(\mathbf{l}) - h_{qq}(\mathbf{l}) \right) \tag{12-1}$$

و از رابطه (1-5) داریم:

$$\frac{dh_{kq}(\mathbf{l})}{dl} = \sum_p \left(h_{kp}(\mathbf{l}) h_{pq}(\mathbf{l}) - h_{kp}(\mathbf{l}) h_{pq}(\mathbf{l}) \right) \tag{13-1}$$

با استفاده از رابطه (1-12) رابطه (1-13) به صورت زیر در می‌آید:

$$\frac{dh_{kq}(\mathbf{l})}{dl} = \sum_p \left(h_{kp}(\mathbf{l}) h_{pq}(\mathbf{l}) \left(h_{kk}(\mathbf{l}) - h_{pp}(\mathbf{l}) \right) - h_{kp}(\mathbf{l}) h_{pq}(\mathbf{l}) \left(h_{pp}(\mathbf{l}) - h_{qq}(\mathbf{l}) \right) \right)$$

$$= \sum_p h_{kp}(\mathbf{l}) h_{pq}(\mathbf{l}) \left(h_{kk}(\mathbf{l}) + h_{qq}(\mathbf{l}) - 2h_{pp}(\mathbf{l}) \right) \tag{14-1}$$

که معادله شار نامیده می‌شود. با استفاده از رابطه (1-14) می‌توان نشان داد که $Tr\left(H^2(\mathbf{l})\right)$ مستقل از $\mathbf{l}$ است.

$$\frac{d}{dl} Tr\left(H^2(\mathbf{l})\right) = \frac{d}{d\mathbf{l}} \sum_{k,q} h_{kq}(\mathbf{l}) h_{qk}(\mathbf{l}) = 2\sum_{kq} h_{qk}(\mathbf{l}) \frac{dh_{kq}(\mathbf{l})}{d\mathbf{l}}$$

$$= 2\sum_{k,q,p} h_{qk}(\mathbf{l})\, h_{kp}(\mathbf{l})\, h_{pq}(\mathbf{l})\big(h_{kk}(\mathbf{l}) + h_{qq}(\mathbf{l}) - 2h_{pp}(\mathbf{l})\big) = 0 \qquad (15\text{-}1)$$

که نتیجه آخر از عوض کردن p و k در جمله اول، q و p در جمله دوم و q و k در جملـه سـوم بدست آمده است. اگر مشتق $\sum_{k \neq q} \left| h_{kq}(\mathbf{l}) \right|^2$ را محاسبه کنیم داریم:

$$\frac{d}{d\mathbf{l}} \sum_{k \neq q} \left| h_{kq}(\mathbf{l}) \right|^2$$

$$= \frac{d}{d\mathbf{l}} \sum_{k,q} \left| h_{kq}(\mathbf{l}) \right|^2 - \frac{d}{d\mathbf{l}} \sum_{k} h_{kk}{}^2(\mathbf{l}) = \frac{d}{d\mathbf{l}} Tr\left(H^2(\mathbf{l})\right) - \frac{d}{d\mathbf{l}} \sum_{k} h_{kk}{}^2(\mathbf{l})$$

$$= -2\sum_{k} h_{kk}(\mathbf{l}) \frac{dh_{kk}(\mathbf{l})}{d\mathbf{l}} = -4\sum_{k,q} h_{kk}(\mathbf{l})\, h_{kq}(\mathbf{l})\, h_{qk}(\mathbf{l})\big(h_{kk}(\mathbf{l}) - h_{qq}(\mathbf{l})\big)$$

$$= -2\sum_{k,q} \left| h_{kq}(\mathbf{l}) \right|^2 \big(h_{kk}(\mathbf{l}) - h_{kk}(\mathbf{l})\, h_{qq}(\mathbf{l})\big) - 2\sum_{k,q} \left| h_{kq}(\mathbf{l}) \right|^2 \big(h_{qq}{}^2(\mathbf{l}) - h_{qq}(\mathbf{l})\, h_{kk}(\mathbf{l})\big)$$

$$= -2\sum_{k,q} \left| h_{kq}(\mathbf{l}) \right|^2 \big(h_{kk}(\mathbf{l}) - h_{qq}(\mathbf{l})\big)^2 \qquad (16\text{-}1)$$

رابطه (16-1) نشان می‌دهد که $\sum_{k \neq q} \left| h_{kq}(\mathbf{l}) \right|^2$ تابعی نزولی از $\mathbf{l}$ است وچون این تابع از پایین محـدود است بنابراین مشتق این تابع در بی نهایت صفر خواهد شد.

$$\sum_{k,q} \left| h_{kq}(\infty) \right|^2 \big(h_{kk}(\infty) - h_{qq}(\infty)\big)^2 = 0 \rightarrow h_{kq}(\infty)\big(h_{kk}(\infty) - h_{qq}(\infty)\big) = 0 \qquad (17\text{-}1)$$

رابطه (17-1) نشان می‌دهد که $H(\mathbf{l})$ به غیر از تبهگنی‌ها در بی نهایت قطری خواهد شد. در واقع همانطور که ذکر شد انتخاب (9-1) باعث می‌شود که $H(\mathbf{l})$ در $\mathbf{l} \to \infty$ قطری یا بلوکه قطری شود. متأسفانه حل کردن معادلات (14-1) به طور تحلیلی غیر ممکن است.

به‌عنوان یک مثال از حل رابطه (14-1) فرض کنید H^r در رابطه (1-1) کوچک باشد. در این صورت یک حل اختلالی معمولی برای H ممکن می‌شود. $h_{kq}(\mathbf{l})$ را حول $l = 0$ بسط می‌دهیم :

$$h_{kq}(\mathbf{l}) = h_{kq}(\mathbf{l} = 0) + \mathbf{l}\left(\frac{dh_{kq}(\mathbf{l})}{d\mathbf{l}}\right)_{\mathbf{l}=0} + \mathbf{L} \tag{18-1}$$

با استفاده از رابطه (13-1) و (18-1) داریم:

$$h_{kk}{}^{(0)}(l) = h_{kk}(0) \equiv h_{kk}(0) \qquad , \qquad h_{kk}{}^{(1)}(\mathbf{l}) = 0 \tag{19-1}$$

که $h_{kk}{}^{(n)}(\mathbf{l})$ نسبت به عنصرهای ماتریسی H^r از مرتبه nام است. برای عنصرهای غیرقطری $H(\mathbf{l})$ در مرتبه اول داریم:

$$\begin{aligned} \frac{dh_{kq}{}^{(1)}(\mathbf{l})}{d\mathbf{l}} &= h_{kk}{}^{(0)}(\mathbf{l})\, h_{kq}{}^{(1)}(\mathbf{l})\left(h_{qq}{}^{(0)}(\mathbf{l}) - h_{kk}{}^{(0)}(\mathbf{l})\right) + h_{qq}{}^{(0)}(\mathbf{l})\, h_{kq}{}^{(1)}(\mathbf{l})\left(h_{kk}{}^{(0)}(\mathbf{l}) - h_{qq}{}^{(0)}(\mathbf{l})\right) \\ &= -h_{kq}{}^{(1)}(\mathbf{l})\left(h_{kk}(0) - h_{qq}(0)\right)^2 \end{aligned} \tag{20-1}$$

در نتیجه: