بەنام خدا

دانشگاه صنعتی اصفهان
دانشکده فیزیک

پایان‌نامه کارشناسی ارشد فیزیک

گرایش ماده چگال

سیستم‌های همبسته قوی به همراه بی‌نظمی

ملیحه برهانی

استاد راهنما :

دکتر سید اکبر جعفری

فروردین ۸۸

دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده فیزیک

پایان‌نامه کارشناسی ارشد رشته فیزیک

تحت عنوان

سیستم‌های همبسته قوی به همراه بی‌نظمی

توسط

ملیحه برهانی

در تاریخ۱۳۸۸/۱/۲۵ توسط کمیته تخصصی زیر مورد بررسی و تصویب نهایی قرار گرفت.

۱—استاد راهنمای پایان‌نامه	دکتر سید اکبر جعفری
۲—استاد مشاور پایان‌نامه	دکتر فرهاد شهبازی
۳—استاد مدعو	دکتر فرهاد فضیله
۴—استاد ممتحن داخلی	آقای دکتر کیوان سامانی آقابابایی
سرپرست تحصیلات تکمیلی	دکتر فرهاد شهبازی

تشکر و قدر دانی از:

خانواده‌ی عزیزم

استاد راهنمای عزیز و ارجمندم **جناب آقای دکتر سید اکبر جعفری** به خاطر کمک‌ها، حمایت‌ها و راهنمایی‌های بسیار ارزشمندشان

استاد مشاور ارجمند **جناب آقای دکتر فرهاد شهبازی** به خاطر مشاورت پایان‌نامه و مطالعه‌ی پایان‌نامه

آقای دکتر فرهاد فضیله به خاطر مشاوره و راهنمایی‌های مفیدشان

آقای دکتر کیوان سامانی آقابابایی به خاطر مطالعه پایان‌نامه

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات،
ابتکارات و نو آوری‌های ناشی از تحقیق موضوع این
پایان‌نامه متعلق به دانشگاه صنعتی اصفهان است.

تقدیم به پدر و مادر عزیزم
و همسر مهربانم

فهرست مندرجات

۱ مقدمه ۲

۱—۱ نظریه نواری ۲

۱—۲ گذار مات ۳

۱—۳ جایگزیدگی اندرسون ۶

۱—۴ صورت مساله و مرور تحقیقات قبلی ۸

۱—۵ رهیافت کلی پایان‌نامه ۹

۲ تئوری اختلال همبستگی قوی در مدل هابارد ۱۰

۲—۱ هامیلتونی سیستم برهمکنش قوی در مدل هابارد ۱۰

۲—۲ تبدیل هابارد استراتونویچ ۱۲

۲—۳ تابع گرین الکترونی (فرمیون‌های اصلی) ۱۳

۲—۴ قوانین دیاگرامی ۱۴

۳ سیستم برهمکنش قوی به همراه بی‌نظمی در مدل هابارد ۱۹

۳—۱ هامیلتونی سیستم برهمکنش قوی به همراه بی‌نظمی در مدل هابارد ۱۹

۴ عملگرهای هابارد و قضیه ویک ۲۵

۴–۱ عملگرهای هابارد ۲۵
۴–۱–۱ نمایش مدل هابارد بر اساس عملگرهای هابارد ۲۷

۴–۲ قضیه ویک ۲۹

۵ محاسبه کومالانت مرتبه اول، دوم و سوم ۳۷

۵–۱ کومالانت مرتبه اول ۳۷

۵–۲ کومالانت مرتبه دوم ۳۸
۵–۲–۱ کومالانت مرتبه دوم حالت اسپین متفاوت ۳۸
۵–۲–۲ کومالانت مرتبه دوم حالت اسپین یکسان ۴۴

۵–۳ کومالانت مرتبه سه حالت اسپین یکسان ۴۷

۵–۴ کومالانت مرتبه سه حالت اسپین متفاوت ۵۰

۵–۵ نتیجه گیری ۵۷

A نظریه‌ای خوشه‌ای ۵۸

A–۱ تکنیک تکرار ۵۸

A–۲ نظریه‌ای خوشه‌ای ۵۹

B تابع مولد و کومالانت ۶۱

B–۱ کومالانت ۶۱
B–۱–۱ تابع مولد تابع گرین ۶۲
B–۱–۲ تابع مولد کومالانت ۶۳
B–۱–۳ کومالانت مرتبه اول ۶۳
B–۱–۴ کومالانت مرتبه دوم ۶۴
B–۱–۵ کومالانت مرتبه سوم ۶۴

C کومالانت مرتبه سوم اسپین متفاوت ٦٦

D کومالانت مرتبه ۳ اسپین یکسان ۱۲۳

چکیده

مطالعه سیستم‌های همبسته قوی یکی از زمینه‌های فعال در فیزیک ماده چگال در دو دهه اخیر بوده است. مساله‌ای که همیشه در فیزیک ماده چگال اهمیت داشته است، گذار فاز فلز ـ عایق و اینکه چرا بعضی از مواد هادی و بعضی دیگر عایق هستند، می‌باشد. از نقطه نظر آزمایشگاهی در صورتی که دمای جسمی پایین آورده شود و رسانندگی آن به سمت صفر میل کند، این ماده عایق نامیده می‌شود. سه مدل استاندارد برای توصیف مواد وجود دارد که عبارتند از نظریه نواری، عایق مات و عایق اندرسون. بررسی اثر همزمان سیستم‌های برهمکنش قوی به همراه بی‌نظمی، یعنی ترکیب عایق مات و اندرسون، هدف این پایان‌نامه می‌باشد. در این پایان‌نامه به بررسی تحلیلی سیستم‌های برهمکنش قوی ($U \gg t$) در مدل هابارد در حد اتمی بااستفاده از روش ریاضی تبدیل هابارد — استراتونوویچ برای شبکه d بعدی می‌پردازیم. همچنین به بررسی صورت کلی اثر بی‌نظمی با پارامتر u در سیستم‌های همبسته قوی می‌پردازیم. در ابتدا به مطالعه سیستم‌های برهمکنش قوی با استفاده از ایجاد فرمیون‌های کمکی و تبدیل هابارد استراتونوویچ می‌پردازیم و هامیلتونی سیستم را بر اساس این فرمیون‌های کمکی بازنویسی می‌کنیم. درنتیجه می‌توان از رهیافت سیستم‌های برهمکنش ضعیف و قضیه ویک برای بررسی سیستم‌های برهمکنش قوی استفاده کرد. برای این منظور کومالانت مراتب مختلف تولید می‌شود که بوسیله عملگرهای هابارد و قضیه ویک برای عملگرهای هابارد، مراتب ۲ و ۳ این کومالانت‌ها در دوحالت اسپین موازی و اسپین پاد موازی بدست آورده می‌شود که قسمت اصلی این پایان نامه، محاسبه این کومالانت‌ها می‌باشد و در نهایت تاثیر بی‌نظمی روی این کومالانت‌ها بررسی می‌شود.

کلمات کلیدی:

سیستم همبسته قوی، مدل هابارد، تبدیل هابارد — استراتونوویچ، قضیه ویک، فرمیون‌های کمکی، عملگر هابارد، قضیه ویک برای عملگرهای هابارد، پارامتر بی‌نظمی، کومالانت مرتبه ۲ و ۳ اسپین موازی، کومالانت مرتبه ۲ و ۳ اسپین پاد موازی.

فصل ۱

مقدمه

مساله‌ای که همیشه در فیزیک ماده چگال اهمیت داشته است، گذار فاز فلز ـ عایق و اینکه چرا بعضی از مواد هادی و بعضی دیگر عایق هستند، می‌باشد. وقتی دما را در ماده‌ای پایین می آوریم اگر رسانندگی به سمت صفر میل کند یعنی:

$$\lim_{T\to ۰} \sigma(T) = ۰, \qquad (۱-۱)$$

آنگاه این ماده عایق نامیده می‌شود. اگر رسانندگی محدود باقی بماند، این ماده فلز است (در مورد ابر رساناها واگرا می‌شود.) بطور متدوال ۳ مدل استاندارد برای توضیح و توصیف عایق یا فلز بودن مواد و گذار بین این دو حالت، وجود دارد.

۱-۱ نظریه نواری

در نظریه نواری[۱] برای پیدا کردن حالت پایه یک سیستم N الکترونی باید حداقل تعداد $\frac{N}{۲}$ از پایین‌ترین ترازها و هر تراز را با ۲ الکترون پر کنیم و برای محاسبه تابع موج، دترمینان اسلیتر مناسب را محاسبه‌می‌کنیم. در این نظریه ماده‌ای فلز است که چگالی حالات در سطح فرمی غیر صفر باشد، یعنی $\rho(\epsilon_f) \neq ۰$ و اگر $\rho(\epsilon_f) = ۰$ باشد، ماده یک عایق است. در حالت عایق معمولاً یک گاف انرژی بین

[۱] *Band Theory*

دو نوار رسانش خالی و نوار ظرفیت کاملاً پر وجود دارد که ترار فرمی در این گاف قرار دارد. به سادگی می‌توان نتیجه گرفت که اگر تعداد الکترون‌ها در سلول واحد زوج باشد، ماده عایق، و اگر فرد باشد ماده مورد نظر، فلز است. این امکان نیز وجود دارد که بعضی از مواد تعداد زوج الکترون داشته باشند، اما $\rho(\epsilon_f) \neq ۰$، که این به دلیل همپوشانی بین نوار رسانش و ظرفیت است. از نمونه این مواد، فلزهای قلیایی خاکی مانند (Ca.Sr,Br) را می‌توان نام برد. برای مثال یک همپوشانی کوچک نوارها در Bi یک نیمه فلز[۲] جالب می‌سازد. یکی دیگر از قدیمی ترین و شناخته شده‌ترین موادی که به طریقی دیگر نظریه نواری را نقض می‌کند، CoO است. لایه‌های خارجی اتم Co بصورت $۳d^{۷}۴s^{۲}$ و اتم O بصورت $۲s^{۲}۲p^{۴}$ و همینطور که مشخص است تعداد الکترون‌ها در هر سلول واحد $۱۵ = ٦ + ۹$ است که عددی فرد است. ولی با این وجود CoO بعنوان یک عایق شناخته شده است. بنابراین پیش بینی نظریه نواری در بعضی از مواد با شکست مواجه می‌شود که ما را به دومین مدل استاندارد یعنی عایق مات و گذار مات[۳] می‌رساند[۲ ،۱].

۱—۲ گذار مات

با استفاده از اثرهای همبستگی[۴] می‌توان علت عایق بودن CoO را شرح داد. در واقع برهمکنش الکترون ـ الکترون در حالت نیمه پر[۵] می‌تواند باعث گذار عایق ـ فلز شود. حالت نیمه پر یعنی به ازای هر جایگاه در شبکه بلور به طور متوسط ۱ الکترون داشته باشیم.

برای اینکه اثرهای همبستگی را بهتر درک کنیم، مدل ذهنی زیر را در نظر بگیرید: تصویر تنگابست[٦] ساختار نواری سدیم، Na، با یک اتم در هر سلول واحد بصورت $۲s^{۲}۲p^{٦}۳s^{۱}$ است. تراز $۳s$ نیمه پر است و انتظار داریمNa یک فلز باشد. حال اگر ثابت شبکه را از مقدار حالت تعادل آن افزایش دهیم، پهنای نوار همانطور که شکل (۱—۱) مشخص است باریک‌تر می‌شود ولی همچنان فلز باقی می‌ماند. با ادامه این کار مسلماً، یک سری اتم‌های خنثی Na، در کنار هم داریم که بدیهی است، فلز نیست.

شرط رسانا بودن یک ماده این است که الکترون‌ها بتوانند در شبکه منتشر شوند و این باعث افت و خیز بار می‌شود که در شکل (۱—۲) نمایش داده شده است. همانطور که در شکل (۱—۲) مشخص

---

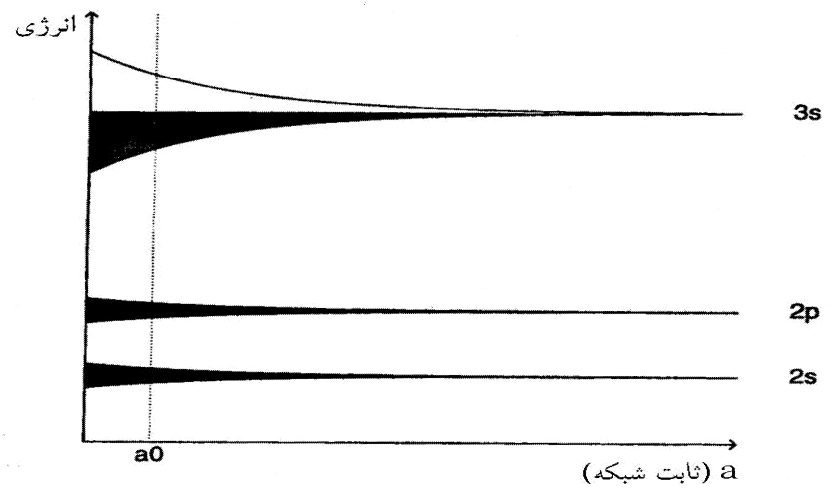
۲ *Semi metal*

۳ *Mott Transition*

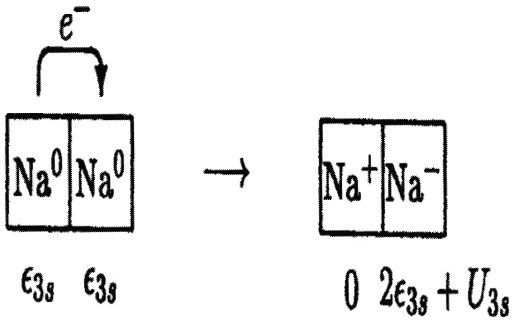
۴ *Correlation effects*

۵ *Half – Filling*

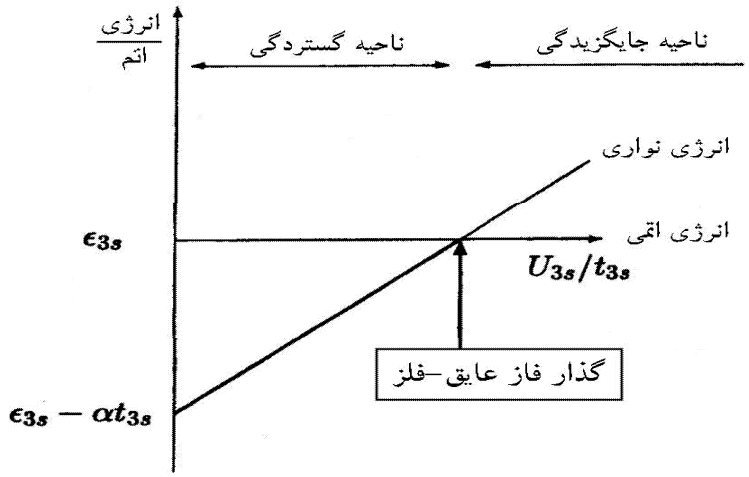
٦ *Tight – Banding*



شکل (۱—۱): نمودار انرژی برحسب ثابت شبکه در اتم Na



شکل (۱—۲): تصویر ذهنی در چگونگی انتشار الکترون در شبکه Na



شکل (۱—۳): تصویر ذهنی در چگونگی انتشار الکترون در شبکه Na

است حرکت الکترون باعث یک برهمکنش دافع کولنی در حالت Na^- می‌شود که بصورت زیر است:

$$U_{3s} = \int dr_1\, dr_2\, |\phi_{3s}(r_1)|^2 \frac{e^2}{|\vec{r_1} - \vec{r_2}|} |\phi_{3s}(r_2)|^2. \qquad (۱—۲)$$

این پارامتر به U هابارد شهرت دارد. شکل هامیلتونی بصورت زیر می‌باشد:

$$H_{3s} = \epsilon_{3s} \sum_j \sum_\sigma \hat{n_{j\sigma}} - t_{3s} \sum_{<jl>} \sum_\sigma (c^\dagger_{j\sigma} c_{l\sigma} + H.C.), \qquad (۱—۳)$$
$$+ U_{3s} \sum_j \hat{n_{j\uparrow}} \hat{n_{j\downarrow}} = H_{band} + H_{coulomb} \ .$$

که در آن $c^\dagger(c)$، عملگر(فنا) خلق می‌باشد و $\hat{n} = c^\dagger c$ عملگر شمارش است. این برهمکنش کولنی باعث می‌شود که اشغال دوگانه مسلتزم افزایش انرژی به اندازه U شود و از طرفی پرش الکترونی باعث کاهش انرژی به اندازه t_{3s} می‌شود. بنابراین برای یک مقدار بحرانی برهمکنش کولنی سیستم به سمتی می‌رود که تمایل به افت و خیز بار نداشته باشد وماده بدست آمده عایق می‌شود. به این گذار فاز فلز به عایق ناشی از اثرهای همبستگی، گذار مات می‌گویند. همانطور که در شکل (۱—۳) مشخص است از یک حد بحرانی به بعد $(\frac{U}{t} > (\frac{U}{t})_{cr})$ حالت پایه جایگزیده[۷] می‌شود و یک عایق بوجود می آید و در حالت $(\frac{U}{t} < (\frac{U}{t})_{cr})$ حالت پایه گسترده[۸] و بیان‌گر فلز است. در موردCoO در فشار اتمسفر، عایق مات داریم اما با افزایش فشار و در نتیجه کاهش ثابت شبکه و نسبت $\frac{U}{t}$ می‌توان گذار عایق ـ فلز داشته باشیم. این نوع گذار برای موادی اتفاق می‌افتد که الکترون‌های شرکت کننده در رسانش متعلق به اربیتال‌های d و f که پهنای نوار کوچکی دارند و اثرهای همبستگی تأثیر زیادی دارند، باشند. مدل استاندارد بعدی برای گذار عایق ـ فلز، گذار اندرسون وجایگزیدگی اندرسون است[۹]است[۲].

---

۷ *Localized*

۸ *Extended*

۹ *Anderson Localization*

۱—۳ جایگزیدگی اندرسون

عایق‌های اندرسون از جمله موادی هستند که با وجود اینکه چگالی حالت در تراز فرمی غیر صفر است یعنی $\rho(\epsilon_f) \neq ۰$ ولی $\lim_{T\to ۰} \sigma(T) = ۰$ می‌باشد و این به دلیل وجود یک پتانسیل غیر دوره‌ای (کاتوره‌ای[۱۰]) است. این پتانسیل ناشی از بی نظمی در شبکه می‌باشد. بی نظمی می‌تواند با ایجاد نقص در شبکه یا وارد کردن ناخالصی، بوجود آید. برای مثال وارد کردن Al در ترکیب $LiTi_۲O_۴$ بصورت $LiAl_yTi_{۲-y}O_۴$ با مقدار بحرانی $y_c = ۰/۳۳$ است که در این مقدار بحرانی گذار فلز ـعایق انجام می‌شود[].

دیدگاه قدیمی (قبل از اندرسون) در باره بی نظمی به این گونه بوده که الکترون‌ها از ناخالصی‌ها پراکنده می‌شوند و این منجر به ویژه توابع با تکانه‌های مختلف می‌شود ولی با این وجود این توابع موج همچنان گسترده هستند. اما اندرسون اثبات کرد که اگر چه این دیدگاه برای بی نظمی‌های ضعیف همچنان برقرار است، اما برای بی نظمی‌های به اندازه کافی قوی، توابع موج در فضا بصورت نمایی با طول جایگزیدگی ζ افت می‌کند و بصورت جایگزیده زیر می‌شوند[۷]:

$$|\psi(r)| \propto \exp(-\frac{|r|}{\zeta}). \qquad (۴—۱)$$

جایگزیدگی اندرسون فقط برای سیستم‌های با ابعاد بزگتر از ۲ یعنی $d > ۲$ وجود دارد و برای سیستم‌هایی با ابعاد ۱ و ۲ حتی مقدار کمی بی نظمی باعث جایگزیدگی توابع موج می‌شوند و سیستم عایق می‌شود. در یک سیستم شامل بی نظمی، همانطور که در شکل (۱—۴) مشخص شده است، حالت‌های جایگزیده (قسمت هاشور خورده) در انتهای طیف قرار دارند و حالت‌های میانی، حالت‌های گسترده هستند. حالت‌های گسترده و جایگزیده توسطانرژی بحرانی ϵ_c که آستانه تحرک پذیری نام[۱۱] دارد، از هم جدا می‌شوند.

مدل پیشنهادی اندرسون برای سیستمی که بی نظمی بصورت تصادفی در آن قرار گرفته است بصورت

$$H = \sum_n \epsilon_n c_n^\dagger c_n + \sum_{nm} V_{nm} c_n^\dagger c_n, \qquad (۵—۱)$$

است. ϵ_n انرژی مربوط به جایگاهایی است که در آن بی نظمی بصورت تصادفی قرار گرفته است. بنابراین انرژی‌های ϵ_n متغیرهای تصادفی هستند که با توزیع احتمال $P(E)dE$ که با پهنای W توصیف می‌شود، روی نوار انرژی‌ها بصورت کاملاً تصادفی توزیع شده‌اند. جمله دوم مربوط به انرژی جنبشی

---

[۱۰] *Random*

[۱۱] *Mobility Edge*

است که در آن الکترون در جایگاه m به روی جایگاه n پرش می‌کند و باعث تغییر انرژی V_{nm} می‌شود. ۲ حالت حدی $V_{nm} = ۰$ و $W = ۰$ وجود دارد که اولی مربوط به رژیم جایگزیدگی قوی است و دومی مربوط به رژیم حالات گسترده است. در واقع مدل اندرسون گذار جایگزیده ـ گسترده که بوسیله نسبت $\frac{V}{W}$ تعیین می‌شود را توضیح می‌دهد. احتمال بازگشت[۱۲] کمیتی است که می‌توان بوسیله آن حالت‌های جایگزیده و گسترده را تشخیص داد. فرض کنید یک ذره در لحظه $t = ۰$ روی یک سایت بی نظمی شبکه d بعدی قرار دارد. به دلیل وجود جمله انرژی جنبشی، احتمال اینکه ذره از محل اول خودش دور شود، وجود دارد. اگر در حد $t \to \infty$ احتمال برگشت به جای اول غیر صفر باشد، تابع موج جایگزیده است و برعکس یعنی احتمال صفر معادل تابع موج گسترده است و مبین حالت رسانا است. بنابراین احتمال برگشت به سایت یک کمیت کلیدی برای مسأله جایگزیدگی است. دامنه احتمال حضور یک الکترون در سایت n در زمان t، $c_n(t)$ می‌نامیم. احتمال بازگشت در زمان طولانی یعنی $\lim_{t\to\infty} |c_n(t)|^۲$ می‌باشد. برای بدست آوردن این کمیت روی معادله حرکت هایزنبرگ متمرکز می‌شویم:

$$i\hbar\dot{c}_n(t) = \epsilon_n c_n + \sum_m V_{nm} c_m. \qquad (۶-۱)$$

V_{nm} تنها وقتی n و m نزدیک‌ترین همسایه‌ها باشند، غیر صفر است. در غیاب جمله انرژی جنبشی، انتظار داریم، احتمال از مقدار اولیه تغییر نکند، اما مسأله بسیار جالب این است که حل‌های جایگزیده حتی اگر جمله انرژی جنبشی غیر صفر باشد هم وجود دارند. تبدیل فوریه رابطه (۳-۷) با تعریف $c_n(E) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{iEt}{\hbar}} c_n(t)dt$ ، بصورت زیر است:

$$c_n(E) = \frac{c_n(t=۰)}{E - E_n} + \sum_{m\neq n} \frac{V_{nm} c_m(E)}{E - E_n}. \qquad (۷-۱)$$

E یک متغیر کلی مختلط با بعد انرژی است. حالت اولیه جایگزیده‌ای را بصورت $c_n(t=۰) = \delta_{n۰}$، در نظر می‌گیریم. بنابراین بدست می آید:

$$c_o(E) = \frac{۱}{E - E_۰} + \sum_{l\neq ۰} \frac{V_{۰l} V_{l۰}}{(E - E_۰)(E - E_l)} + \cdots . \qquad (۸-۱)$$

در نتیجه بدست می آید:

$$c_n(E) = \frac{۱}{E - E_n - S_n(E)}. \qquad (۹-۱)$$

$S_n(E)$، خود انرژی است. ارتباط نزدیکی بین مقدار احتمال حضور در هر سایت و عناصر قطری تابع گرین برای هامیلتونی اصلی وجود دارد. تابع گرین $G(E) = (E - H)^{-۱}$ شامل همه اطلاعات در باره

[۱۲] *Return Probablity*

ویژه توابع معادله ۳—۷ هست. عناصر ماتریس تابع گرین تک ذره بصورت زیر است:

$$(E - E_n)G_{nm}(E) = \delta_{nm} + \sum_{n \neq l} V_{nl} G_{lm}(E). \qquad (۱۰—۱)$$

ویژه حالت mام تابع گرین را می‌توان به صورت کاملاً کلی زیر نوشت:

$$|\phi_m\rangle = \sum_n c_{mn} |n\rangle. \qquad (۱۱—۱)$$

$|n\rangle$ها ویژه توابع پایه‌های اتمی می‌باشند و بنابراین در معادله (۱—۱۱)، c_{mn} دامنه همپوشانی ویژه تابع mام با سایت n را تعیین می‌کند. بدون جمله دوم در معادله (۱—۱۰)، تابع گرین دارای قطب‌های ساده با انرژی $E = E_n$ خواهد بود و ویژه تابع دقیقاً $|m\rangle$ خواهد بود؛ یعنی $|\phi\rangle = |m\rangle$ و این حالت منطبق بر رژیم جایگزیدگی قوی است. عناصر قطری تابع گرین بصورت زیر است:

$$\begin{aligned} G_{nn}(E) &= \frac{۱}{E - E_۰} + \sum_{l \neq n} \frac{V_{nl} V_{lm}}{(E - E_n)(E - E_l)} + \cdots \qquad (۱۲—۱) \\ &= \frac{۱}{E - E_n - S_n(E)}, \end{aligned}$$

که کاملاً شبیه عبارت مربوط به دامنه احتمال حضور در هر سایت است. بنابراین ویژگی‌های تحلیلی تابع گرین بطور مستقیم مرتبط با احتمال بازگشت است. در حالت کلی E می‌تواند مختلط باشد. اگر $Im[S(E)]$ مخالف صفر باشد یعنی $Im[S(E)] \neq ۰$؛ آنگاه تبدیل فوریه زمانی تابع گرین معادله (۱—۱۲) دارای قسمت نمایی بصورت، $G_{nn}(t) \propto e^{-|ImS(E)|t}$ می‌باشد و بنابراین در زمان طولانی یعنی $t \to \infty$، صفر می‌شود و احتمال بازگشت وجود ندارد. بنابراین در حالت $Im[S(E)] \neq ۰$، ویژه حالت با انرژی E گسترده خواهد بود و در حالتی که $Im[S(E)] = ۰$ باشد ویژه حالت مربوطه جایگزیده است. در نتیجه کمیت دقیق مربوط به مسأله جایگزیدگی، خود انرژی تابع گرین می‌باشد که به عنوان مثال در رهیافت اختلالی با استفاده از قوانین فایمن بدست می آید.[۶ ،۲]

۱—۴ صورت مساله و مرور تحقیقات قبلی

همانطور که گفته شد، ترکیب $LiAl_yTi_{۲-y}O_۴$ با مقدار بحرانی $y_c = ۰/۳۳$، گذار فلز به عایق انجام می‌دهد. در واقع Al به عنوان یک بی نظمی (ناخالصی) در شبکه بلور $LiTi_۲O_۴$ وارد شده است. با در نظر گرفتن اثر بی نظمی به تنهایی در این ترکیب، y_c به اندازه ۰/۸ پیش بینی می‌شود که مغایرت بانتایج

آزمایشگاهی دارد. اما با در نظر گرفتن بی نظمی همراه با برهمکنش الکترونی (هابارد)، $U = ۱/۵t$ و $y_c = ۰/۳۳$ بدست می آید[۸ ،۹]

از دیگر نمونه کارهای انجام شده که موضوع این پایان‌نامه بسیار شبیه به آن است، بررسی اثر بی‌نظمی در عایق مات در ۲ بعد می‌باشد. یعنی بررسی اثر همزمان همبستگی الکترونی و جایگزیدگی. نتیجه جالب بدست آمده به این صورت است که گاف طیفی عایق مات ۲ بعدی در پتانسیل بی نظمی $V_{c_۱}$ از بین می‌رود و این درحالی است که خاصیت پاد فرو مغناطیسی[۱۳] تا پتانسیل $V_{c_۲}$ $(V_{c_۲} > V_{c_۱})$ همچنان حفظ می‌شود. سیستم بطور غیر منتظره‌ای بین این دو پتانسیل حدی $V_{c_۱}$ و $V_{c_۲}$ فلز است. در واقع سیستم فلزی بین دو حالت عایق مات درحد کمتر از $V_{c_۱}$، عایق اندرسون در حد بالاتر از $V_{c_۲}$ قرار گرفته است.[۶ ،۱۱]

۱—۵ رهیافت کلی پایان‌نامه

در این پایان نامه با استفاده از رهیافت مقالات مرجع[۴ ،۵]، به بررسی تحلیلی اثر برهمکنش قوی در مدل هابارددبرای شبکه مکعبی d بعدی، می‌پردازیم. از آنجائی که به رژیم همبستگی قوی $U \gg t$ علاقه‌مند هستیم، لازم است یک نظریه اختلال مناسب که در آن قضیه ویک را بتوان اعمال کرد داشته باشیم. برای این منظور لازم است به جای فرمیون‌های فیزیکی (الکترون‌ها) از فرمیون‌های کمکی استفاده کنیم که این کار با استفاده از تبدیل هابارد— استراتنوویچ[۱۴] قابل انجام است. تنها چالش اساسی این است که در هامیلتونی موثر به دست آمده بر حسب فرمیون‌های کمکی (ψ و $\psi^\dagger$)، راس‌های برهمکنش‌ها عبارت پیچیده‌ای دارند و محاسبه آنها مستلزم محاسبه کومالانت‌های مراتب مختلف است. بخش اصلی این پایان‌نامه متمرکز بر محاسبه کومالانت‌های مرتبه ۲ و ۳.

نوع دیگر از راس‌ها برای لحاظ کردن اثرات بی‌نظمی بر حسب فرمیون‌های کمکی مورد نیاز است که در رژیم مختلف سه پارامتر U (هابارد)، v (بی‌نظمی) و t (پرش) به صورت اختلالی قابل استخراج است.

قدم بعدی در ادامه این تحقیق بسط هامیلتونی موثر حاصله بر حسب $\frac{t}{U}$ و $\frac{t}{v}$ است که خود موضوع یک تحقیق جداگانه است.

---

[۱۳] $Antiferomagnetic$

[۱۴] $Hubbard\ Stratnovich$

فصل ۲

تئوری اختلال همبستگی قوی در مدل هابارد

در این بخش به بررسی و محاسبه بسط اختلالی توابع همبستگی [۱] در رژیم همبسته قوی $(U \gg t)$ در مدل هامیلتونی هابارد می‌پردازیم و در ادامه تبدیل هابارد – استراتونویچ گرسمنی [۲] می‌پردازیم.

۲–۱ هامیلتونی سیستم برهمکنش قوی در مدل هابارد

صورت کلی هامیلتونی بصورت $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$ است. $\mathcal{H}_0$، قسمت غیراختلالی است و بر حسب متغیر خاص i (جایگاه سایت) قطری است. همچنین σ اندیس اسپین است. بطور کلی هامیلتونی رفتار یک سیستم فرمیونی بس‌ذره‌ای را توضیح می‌دهد. بنابراین می‌توان هامیلتونی را بر حسب مراتبی از عملگرهای خلق و فنا، $c, c^\dagger$ ، که روی جایگاه i جمع بسته می‌شود، در نظر گرفت. بنابراین داریم:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_i h_i(c^\dagger_{i\sigma}, c_{i\sigma}). \qquad (۱–۲)$$

---

۱ *Correlation Function*

۲ *Grassmann*

معمولا در سیستم‌هایی همبسته قوی (الکترون‌های رسانش در اربیتال‌های d و f قرار دارند.)، از برهمکنش مدل هامیلتونی هابارد، بصورت زیر استفاده می‌شود.

$$h_i(c^\dagger_{i\sigma}, c_{i\sigma}) = U c^\dagger_{i\uparrow} c^\dagger_{i\downarrow} c_{i\downarrow} c_{i\uparrow}. \qquad (۲-۲)$$

جمله اختلالی هامیلتونی، $\mathcal{H}_۱$، همان جمله انرژی جنبشی بصورت زیر است:

$$\mathcal{H}_۱ = \sum_\sigma \sum_{ij} V_{ij} c^\dagger_{i\sigma} c_{i\sigma}. \qquad (۳-۲)$$

V ماتریس پرش[۳] است.تابع پارش را با استفاده از میدان[۴]های گرسمنی[۱۲] وابسته به زمان مختلط[۵]، $\gamma_{i\sigma}(\tau), \gamma^\star_{i\sigma}(\tau)$ ، انتگرال مسیر فایمن و در دمای محدود $T = \frac{۱}{\beta}$ بازنویسی می‌کنیم:

$$Z = \int [d\gamma^\star d\gamma] \exp\left[- \int_\circ^\beta d\tau \left\{ \sum_{i\sigma} \gamma^\star_{i\sigma}(\tau)(\frac{\partial}{\partial\tau} - \mu)\gamma_{i\sigma}(\tau) + \sum_i h_i(\gamma^\star_{i\sigma}(\tau), \gamma_{i\sigma}(\tau)) + \sum_{ij\sigma} V_{ij}\gamma^\star_{i\sigma}(\tau)\gamma_{i\sigma}(\tau) \right\} \right].$$

به منظور واضح‌تر شدن محاسبات بعدی از نماد گذاری کت و برا و حروف الفبایی $(a, b, c, \cdots)$ بجای اندیس‌های جمعی $(i, \sigma, \tau \cdots)$ استفاده می‌کنیم. به عنوان مثال، $\langle\gamma|V|\gamma\rangle$، معادل یک انتگرال زمانی در بازه ۰ تا β و جمع روی اسپین و سایت است:

$$\int_\circ^\beta d\tau \sum_{ij\sigma} V_{ij}\gamma^\star_{i\sigma}\gamma_{j\sigma} = \sum_{ab} V_{ab}\gamma^\star_a\gamma^\star_b = < \gamma|V|\gamma > . \qquad (۴-۲)$$

در سیستم‌های همبسته قوی، نمی‌توان از نظریه اختلال استاندارد برای محاسبه تابع‌های همبستگی استفاده کرد؛ زیرا جمله غیراختلالی،$\mathcal{H}_I$، درجه چهار است که برای آن قضیه ویک[۶][۱۳] برقرار نیست.

نظریه اختلال جفتیدگی قوی که قضیه ویک برای آن برقرار نیست، بوسیله متزنر[۷] در سال ۱۹۹۰ بررسی شده‌است[۱۴] . در این مقاله بسط اختلالی در مدل هابارد (حد اتمی) و در دمای محدود با استفاده از نظریه‌ای خوشه‌ای و بسط کومالانتی[۸]، بدست آمده است و قوانین دیاگرامی مربوط فرمول بندی شده است. اما در رهیافت مورد استفاده در این پایان‌نامه نتایج کار متزنر به شیوه ساده‌تر و با یک تبدیل ساده در تابع پارش بدست می‌آید که در قسمت بعد به آن می‌پردازیم[۴].

---

۳ *Hopping*

۴ *field*

۵ *Imaginary − time*

۶ *Wick Theorem*

۷ *Metzner*

۸ *cumulant*