النظرية الكمية للجسم الصلب

محاضرات ومشائل محلولة

بوديار عبيد أستاذ محاضر بجامعة الشهيد الشيخ العربي التبسي

النظرية الكمية للجسم الصلب

محاضرات ومشائل محلولة

بوديار عبيد أستاذ محاضر بجامعة الشهيد الشيخ العربي التبسي

مقدمة:

نحن الأن في عصر الاكتشافات الكمية ، وهو العصر الذي سوف نشهد فيه تطبيقات لأغرب الظواهر الكمية التي يقوم عليها ميكانيك الكم، ولعل الحوسبة الكمية ، المبنية على التشابك الكمي سوف تكون أفضل هذه التطبيقات ، لما سوف تحدثه من ثورة في مختلف مجالات الحياة ، وذلك بسبب القدرة الخارقة لهذه الحواسيب على القيام بعمليات محاكاة سريعة جدا لأعقد الخوارزميات وذلك في بضع دقائق مقارنة بعدة أشهر أو سنوات باستخدام أقوى وأسرع الحواسيب التي نمتلكها الأن.

ان هذه الامكانية التي يتيحها أحد مبادئ ميكانيك الكم والمتمثل في مبدأ التراكب ، تسمح باكتشافات جديدة لم تكن متاحة ، مثل فيزياء المواد، صناعة الأدوية ، ودراسة تطور الكون ....الخ

تحوي هذه المطبوعة على مجموعة محاضرات ومسائل قمت بتدريسها خلال عشر سنوات لطلبة السنة الثانية ماستر فيزياء المادة المكثفة بجامعة الشيخ العربي التبسي.

يعتمد فهم هذا المقياس على الدراسة المسبقة لأربعة مقاييس أساسية:

أولا ينبغي للطالب أن يكون قد درس مفاهيم رياضية متقدمة كاالتحليل المركب ونظرية الرواسب.

ثانيا ينبغي للطالب أن يكون متمكن من الترموديناميكا و الفيزياء الاحصائية ، وخاصة توزيع كل من فرمي ديراك و بوز أينشتاين.

ثالثا أن يكون الطالب قد درس برنامج متكامل لميكانيك الكم المتقدمة وشيئ من نظرية الحقول.

رابعا أن يكون الطالب متمكن من برنامج فيزياء الجسم الصلب .

يركز برنامج هذه المادة على استخدام طريقة التكميم الثاني ودوال غرين، حيث ينقسم البرنامج الى المحاور الاساسية التالية:

1- تذكير بنظرية التكميم الثاني ، ونظرية الحقل المتوسط.
2- دوال الترابط ، و الاستجابة الخطية.
3- دوال قرين في درجة الحرارة المعدومة.
4- دالة قرين من أجل N جسيم ، طريقة معادلة الحركة.
5- قانون كلديخ من أجل النقل خارج التوازن.
6- نموذج فانو اندرسون تطبيق في فيزياء النانو: النقل
7- الالكترونيك من خلال النقطة الكمية المعدنية.
8- دوال غرين في درجات الحرارة غير المعدومة.
9- تطبيقات في الناقلية الفائقة. ورابطة جوزفسون.

10- مخططات فاينمان

11- الالكترونات أثناء التفاعل: و نظرية سائل فرمي .

12- مواضيع متقدمة: مفعول هولl الكمي ، مفعول كوندو ، الفرميونات الثقيلة، الفرميونات الثقيلة، النقل الكمي ، الغرافن.

الفصل الأول:

تذكير بنظرية التكميم الثاني و نظرية الحقل المتوسط

1- الحالة الكمية المنفردة

يكتب هاملتون N جسيم متفاعلة مثنى مثنى بالعبارة

$$H(1,2,\dots\dots N)=\sum_{i}^{N}h(i)+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}v(i,j)$$

حيث نرمز لجميع الإحداثيات اللازمة لتحديد الحالة الكمية بالأرقام من 1 إلى N ، ونقصد بالإحداثيات اللازمة / الموضع ، الزمن ، السبين ....

كما أن $h(i)$ عبارة عن مجموع الطاقة الحركية و الطاقة الكامنة المطبقة من طرف حقول خارجية على الجسيم رقم (i) و يعطى بالعبارة التالية

$$h(i)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+v(i)$$

فمثلا عند حركة الالكترونات في المجال لذرة فان $v(i)$ يمثل تفاعل الإلكترون (i) مع النواة.

أما في بلورة فان $v(i)$ يمثل في هذه الحالة تفاعل الالكترون (i) مع أيونات البلورة.

الحد $v(i,j)$ في المعادلة الأولى يمثل التفاعل بين الجسيمات مثنى مثنى ، حيث تم استثناء الحالة $(i=j)$ ، بينما يضمن لنا المعامل $1/2$ قبل المجموع عدم حساب نفس الحد مرتين .

يمكننا أن نقوم بنشر دالة الموجة الخاصة ب N جسيم على جملة كاملة مشكلة من جداء ذو تناضر معين للحالات $|\phi_i>$ الخاصة بالجسيمات المنفردة . التي تحقق المعادلة التالية

$$h|\phi_\nu>=\epsilon_\nu|\phi_i>$$

تسمى الحالات $|\phi_i>$ بالحالات الكمية المنفردة ونرمز لها من هنا فصاعدا بالرمز المختصر sps.

2- دوال بلوخ

1-2 –دوال بلوخ من النمط الأول

من المعلوم جيدا أنه يمكننا الانتقال بين مواقع الشبكة البلورية عن طريق شعاع انسحاب $R_{n_1n_2n_3}$

$$R_{n_1n_2n_3}=n_1a_1+n_2a_2+n_3a_3$$

حيث
$n_1.n_2.n_3$ عبارة عن ثلاثة أعداد صحيحة ، بينما تسمى $a_1.a_2.a_3$ بالأشعة الأولية للشبكة ، وهي تشكل معا الخلية الأولية ، أو خلية الوحدة للشبكة.

ومن خلال تعريف الشبكة البلورية ، عندما تكون الأيونات في وضع التوازن ، فالوسط المحيط حول أي نقطة P هو نفسه الوسط المحيط حول أي نقطة Q تبعد عن النقطة السابقة بشعاع انسحاب $R_{n_1 n_2 n_3}$ ، وبالتالي فالكمون $V(r)$ حول النقطة P هو نفسه حول النقطة Q . كما أن $V(r)$ سوف يمتلك نفس دورية الشبكة.

وتشكل دوال بلوخ *Bloch* تشكل الحالة المعتادة من sps. داخل البلورة. وهي حل لمعادلة شرودنجر التالية

$$h\phi_\nu = \left(= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\phi_\nu = \epsilon_\nu \phi_\nu$$

حيث يكون $V(r)$ كمون دوري يمتلك دور شعاع انسحاب الشبكة R أي أن

$$V(r+R) = V(r)$$

و من أجل حل معادلة شرودنجر بطريقة ذكية سوف ندخل مؤثر انسحاب نرمز له بالرمز T_R، يعرف تأثيره على دالة كيفية $f(r)$ كمايلي

$$T_R f(r) = f(r+R)$$

ويمكن استنتاج الخواص التالية

$$T_R T_{\acute{R}} f(r) = T_R f\left(r+\acute{R}\right) = f\left(r+\acute{R}+R\right) = T_{R+\acute{R}} f(r)$$

وبالتالي نجد أن

$$T_R T_{\acute{R}} = T_{R+\acute{R}}$$

كما أنه عند التأثير على الهاملتوني $h(r)$ نجد

$$T_R h(r) f(r) = T_R[h(r) f(r)] = h(r+R) f(r+R)$$

وحيث أن الهاملتوني $h(r)$ دوري لأنه يتشكل من كمون دوري

$$V(r+R) = V(r)$$

كما أن إضافة شعاع انسحاب R للاحداثيات ، لا يؤثر على عملية الاشتقاق ، أي أن

$$\nabla^2_{r+R} = \nabla^2_r$$

وبالتالي نجد أن $h(r+R) = h(r)$ و بالعودة إلى العلاقات السابقة يمكن أن نستنتج بسهولة أن

$$[T, h] = 0$$

ومن خلال العلاقات السابقة نجد هذه الجملة من المبدلات

$$[h, T_R, , T_{\acute{R}} \dots\dots\dots\dots\dots\dots] = 0$$

وبالتالي يمكننا لختيار الدوال الذاتية للهاملتوني h بحيث تكون نفسها الدوال الذاتية لمؤثر الانسحاب T_R من أجل كل شعاع انسحاب R . فاذا رمزنا للقيم الذاتية للمؤثر T_R بالرمز $\lambda(R)$

$$T_R\phi = \lambda(R)\phi$$

وعند التأثير مرتين بالمؤثر T_R نجد

$$T_R T_{\acute{R}}\phi = \lambda(R)\lambda(\acute{R})\phi$$

كما أن

$$T_R T_{\acute{R}}\phi = T_{R\acute{+}R}\phi = \lambda(R+\acute{R})\phi$$

وعليه نستطيع التوصل الى

$$\lambda(R)\lambda(\acute{R}) = \lambda(R+\acute{R})$$

وهذا يكون محقق اذا وضعنا $\lambda(R) = e^{iKR}$ من أجل قيم معينة للشعاع K ومن أجل قيم مختلفة سوف نحصل على قيم مختلفة للفيمة الذاتية $\lambda(R)$ و بالتالي دوال ذاتية مختلفة $\phi(R)$ ، وعليه نستنتج بسهولة أن

$$T_R\phi(r) = e^{iKR}\phi(r)$$

ومن تعريف مؤثر الاتسحاب ، نستطيع أن نكتب:

$$\phi(r+R) = e^{iKR}\phi(r)$$

طبيعة الشعاع K يقوم بتحديده الحدود الدورية للشبكة. فاذا كان لدينا N_1 خلية أولية على طول الشبكة في اتجاه a_1 و N_2 خلية أولية على طول الشبكة في اتجاه a_2 كان لدينا N_3 خلية أولية على طول الشبكة في اتجاه a_3 فان شروط الحدود الدورية تكتب كمايلي

$$\phi_K(R+N_i a_i) = \phi_k(r) \qquad \text{i=1,2,3}$$

وهذه الشروط الدورية مبنية على أساس أن الخواص الفيزيائية الداخلية للبلورة لن تتأثر باختيار الشروط الدورية على السطح، وبالتالي يمكننا أن نكتب

$$\phi_K(r+N_i a_i) = e^{iKN_i a_i}\phi_k(r)$$

بالمطابقة بين الشروط الدورية السابقة و هذه العبارة نجد

$$e^{iKN_i a_i} = 1 \qquad i=1.2.3$$

ومن أجل ايجاد الشعاع K سوف ندخل أشعة الشبكة المعكوسة $b_1.b_2.b_3$ معرفة كمايلي

$$b_1 = \frac{2\pi}{\Omega} a_2.\times a_3$$

$$b_2 = \frac{2\pi}{\Omega} a_3.\times a_1$$

$$b_3 = \frac{2\pi}{\Omega} a_1.\times a_2$$

حيث Ω هو حجم الخلية الأساسية

$$\Omega = |a_1 . a_2 \times a_3|$$

بينما تحقق الأشعة العلاقات التالية

$$b_i . a_j = 2\pi\delta_{ij}$$

فاذا كتبنا الشعاع K على الشكل:

$$K = \beta_1 b_1 + \beta_2 b_2 + \beta_3 b_3$$

فسوف تحقق الأشعة الأساسية العلاقات التالية

$$k . a_i = 2\pi\beta_i$$

و بالتعويض في العبارة الأسية السابقة نحصل على

$$e^{i2\pi\beta_i N_i} = 1$$

و هذا يلزمنا أن نكتب $\beta_i = m_i/N_i$ حيث m_i عبارة عن عدد صحيح وبالتالي نجد

$$K = \frac{m_1}{N_1} b_1 + \frac{m_2}{N_2} b_2 + \frac{m_3}{N_3} b_3$$

وتسمى العبارة التالية مع وجود الشرط السابق يدوال بلوخ من النمط الأو

$$\phi(r + R) = e^{iKR}\phi(r)$$

2-2–دوال بلوخ من النمط الثاني

توجد أيضا صيغة أخرى مفيدة جدا لدوال بلوخ ، لتكن $U_k(r)$ دالة تكتب بدلالة دالة بلوخ من النمط الأول كمايلي

$$U_k(r) = e^{-ikr}\phi_k(r)$$

باستخدام الخاصية الدورية الانسحابية لدوال بلوخ من النمط الأول نجد

$$U_k(r) = e^{-ikr}e^{-ikR}\phi_k(r+R) = e^{-ik(r+R)}\phi_k(r+R) = U_k(r+R)$$

وبالتالي نستنتج أن الدالة $U_k(r)$ هي دالة دورية ، تملك نفس دورية الشبكة ، و يمكننا أن نكتب دالة الحالة المستقرة كمايلي

$$\phi_k(r) = U_k(r)e^{ikr}$$

ومنه فدالة الحالة المستقرة عبارة عن دالة موجة مستوية ذات سعة دورية ، تمتلك نفس دورية الشبكة المدروسة ..ومنه يمكننا كتابة معادلة

$$hU_k(r)e^{ikr} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)U_k(r)e^{ikr} = \epsilon_k U_k(r)e^{ikr}$$

حيث يمكننا التعبير عن المشتق الأول كمايلي

$$\nabla\left[U_k(r)e^{ikr}\right] = e^{ikr}(\nabla + ik)U_k(r)$$

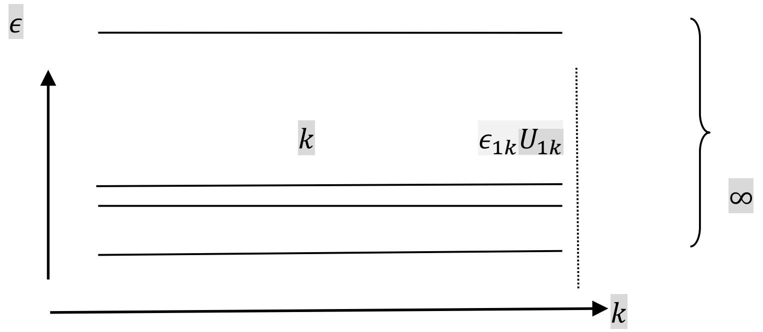
و منه نصبح معادلة شرودنجر

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla + ik)^2 + V(r)\right)U_k(r) \quad = \epsilon_k U_k(r)$$

حيث تبدو كأنها معادلة قيم ذاتية للدوال $U_k(r)$ وسوف نبحث عن الحل داخل خلية أولية ، والتي سوف تتحقق فيها شروط الحدود الدورية

$$U_k(r + a_i) \quad = U_k(r)$$

ونلاحظ أنه من أجل كل قيمة للعدد k يوجد عدد لانهائي من القيم الذاتية $\epsilon_{1k}, \epsilon_{2k}$,.... والتي تقابلها عدد لانهائي من الدوال الذاتية $U_{1k}U_{2k}, \ldots$.. ، وبالتالي ينبغي أن نكتب الدوال الدورية $U_k(r)$ بالشكل التالي $U_{nk}(r)$ احيث يرمز العدد $n = 1,2$ .... الى رقم مايسمى بعصابة الطاقة



وبسبب كون الأبعاد بين قيمتين متتاليتين للشعاع k صغيرة جدا بالمقارنة مع قيمة شعاع الشبكة المعكوسة ، وبالتالي يمكن اعتبار القيم الذاتية $\epsilon_{1k}, \epsilon_{2k}$,.... **مستمرة. تابعة** ل k

مثال// في الشبكة المكعبة البسيطة حيث تملك ثابت شبكة $\boldsymbol{a}$ و الشبكة المعكوسة سوف تملك ثابت شبكة $\boldsymbol{2\pi/a}$ ، وباستخدام عبارة تغير شعاع الشبكة في اتجاه معين

$$\Delta k = 1/N$$

حيث N عبارة عن عدد الذرات في اتجاه معين وترتبط بطول الشبكة في هذا الاتجاه بالعبارة $L = Na$ وفي حالة شبكة تحتوي تقريبا على عدد أفوقادرو 10^{24} سوف نجد أنها تحوي على 10^{8} ومن أجل توضيح مدى صغر التغير الحاصل Δk نجد أن

$$\frac{\Delta k}{k} = \frac{a/L}{2\pi/a} = \frac{a}{2\pi N} \ll 1$$

و هذا يبرر لنا اعتبار الاستمرارية في الطاقة ، كما يبرر سبب ادخال مايسمى بعصابة

مبأ الاختزال// يمكن اعتبار الطاقات مستمرة داخل مجال معين يسمى **عصابة أو اشرطة الطاقة** ويمكن اختزال جميع الحسابات في منطقة واحدة تسمى منطقة **بريلوان الأولى** كما يلي

لقد رمزنا سابقا لشعاع الأنسحاب في فضاء الشبكة الحقيقية بالرمز R ، ونرمز لشعاع الانسحاب في فضاء الشبكة المعكوسة بالرمز G حيث

$$\begin{cases} R = n_1a_1 + n_2a_2 + n_3a_3 \,, m \in Z \\ G = m_1b_1 + m_2b_2 + m_3b_3 \,, n \in Z \end{cases}$$

أو اشرطة الطاقة كما أنه عند التأثير على الهاملتوني $h(r)$ نجد

تقدر .... عناية مستمرة $10^{-8} \sim \frac{\Delta K}{2\pi/a_1}$

تكون مستويات الطاقة متقاربة جدا تكاد تكون مستمرة لأن التغير في الشعاع k مهمل أمام حجم الخلية الأولية في الشبكة المعكوسة حيث أنه اذا أخذنا شبكة مربعة تحتوي على 10^{24} ذرة

مبدأ الاختزال:

يمكن اعتبار الطاقات مستمرة داخل مجال معين تسمى عصابة الطاقة ويمكن اختزال جميع الحسابات في منطقة واحدة برلوان كما يلي:

نسمي G شعاع الانسحاب في الشبكة المعكوسة

نسمي R شعاع الانسحاب في الشبكة الحقيقية

$$\vec{G} = m_1\vec{b_1} + m_2\vec{b_2} + m_3\vec{b_3} \ / \ m_1, m_2, m_3 \epsilon Z$$

$$\vec{R} = n_1\vec{a_1} + n_2\vec{a_2} + n_3\vec{a_3}$$

حيث يعبر $\vec{G}$ على دورية الشبكة المعكوسة

$$\vec{G}.\vec{R} = m_1n_1\,2\pi + m_2n_2\,2\pi + m_3n_3\,2\pi$$

$$e^{i\,\vec{G}\vec{R}} = e^{i\,s\,2\pi} = 1$$

نسحب بـ $\vec{G}$

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{\nabla} + i\vec{K} + i\vec{G})^2 + v(\gamma)U_{K+G}(\gamma) = \epsilon_{K+G}U_{K+G}(\gamma)$$

نسمي

$$f_{KG}(\gamma) = e^{-i\,Gr}U_{K+G}(\gamma)$$

...... الطريقة في

$$f_{KG}(\gamma) = e^{-i\,Gr}e^{i\,Gr}$$

تصبح

$$\frac{\hbar^2}{2m}\{(\vec{\nabla} + i\vec{K} + i\vec{G} - i\vec{G})^2 e^{-i\,Gr} + v(\gamma)\}f_{KG} = \epsilon_{K+G}f_{KG}$$

توجد نظرية المعادلات التفاضلية الجزيئية تسمى نظرية وحدانية الحل بالمطابقة مع معادلة U_{K+G} نجد نجد أن

$$\begin{cases} f_{KG}(\gamma) = U_K(\gamma) \\ \epsilon_{K+G} = \epsilon_K \end{cases}$$

$$f_{KG}(r+R) = e^{i\,G(r+R)} U_{K+G}(r+R)$$

$$f_{KG}(r+R) = e^{i\,Gr} e^{i\,GR} U_{K+G}(r)$$

$$f_{KG}(r+R) = e^{i\,Gr} U_{K+G}(r) = f_{KG}(r)$$

نتيجة

$$\emptyset_{K+G}(r) = U_{K+G}(r) e^{i\,(K+G)r}$$

$$= e^{i\,kr} f_{KG}(r)$$

$$= \emptyset_k(r)$$

$$\begin{cases} \emptyset_{m,k+G}(r) = \emptyset_{m,k}(r) \\ E_{m,k+G} = E_{m,k} \end{cases}$$

نستنتج من خلال العلاقة الاخيرة انه يمكن الاكتفاء بدراسة خلية اولية في فضاء الشبكة المعكوسة حيث يمكن استنتاج جميع الخواص في النقطة k في هذه الخلية من خلال الانسحاب بالشعاع G وتسمى هذه المنطقة منطقة برلوان الأولى

ملاحظة : عند اخذ spin بعين الاعتبار فان دالة بلوخ تكتب بهذا الشكل

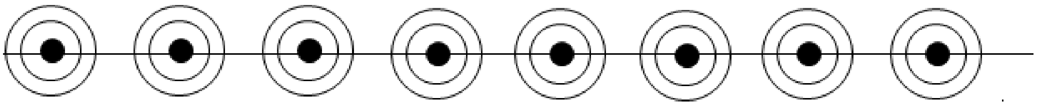
$$\emptyset_{n,k,\sigma}(r) = e^{i\,kr} U_{nk}(r) !\, \sigma\rangle$$

حيث يرمز n رقم عصابة الطاقة , k شاع شبكة معكوسة، بينما يأخذ $\langle\sigma\,!$ أحد اتجاهي السبين ↑↓ ، بينما ينتمي الشعاع k ، إلى منطقة برلوان الأولى كما أننا نحتاج الى خمسة أعداد كمية لوصف دالة بلوخ.

تمرين

نعتبر N ذرة تشكل شبكة وحيدة البعد على المحور x ثابت الشبكة هو a مع كمون دوري

$$V(x) = V(x+a)$$



نعتبر ان عصابة الطاقة تشكلت بسبب امتداد المدارات 3s نسمي المدارات الذرية هذه بالرمز $|m\rangle = |\phi_m\rangle$ متمركزة حول مواقع الذرات

$$\langle \phi_m|H|\phi_m\rangle = \varepsilon$$

$$\langle \phi_m|H|\phi_n\rangle = -t\delta_{n,m\pm1}$$

حيث نعتبر التقاطع الاكبر بين مدارات الجوار الاقرب الاول فقط حيث $t \in R$ المطلوب اوجد طاقة التشتت E_k

التكميم الثاني

في الحقيقة ان ميكانيك الكم الذي تعاملنا معه يسمى التكميم الأول ، حيث نتعامل مع الدوال الذاتية كدوال رياضية بحتة . في حين يوجد مايسمى التكميم الثاني الذي يعتبر بأن دالة الموجة في حد ذاتها عبارة عن مؤثر. وتكمن أهمية التكميم الثاني في استعمالها من أجل دراسة عدد كبير من الجسيمات ، وذلك من خلال استعمال مؤثرات الانشاء و الهدم .

لتكن ψ(Nجسيم) هي دالة الموجة لعدد N من الجسيمات والتي يمكن نشرها على جداء من دوال الجسيمات المنفردة SPS^s كمايلي

ويمكننا أن نبرهن بسهولة أن دالة الموجة لعدد N من الجسيمات يتم نشرها على جداء من دوال الحالة المنفردة SPS^s كمايلي

$$\psi(1,2,\dots\dots,N) = \Sigma_{v_1}A_{v_1}(1,2,3,\dots\dots N)\emptyset(1)\emptyset(2)\emptyset(3)\dots\dots\emptyset(N)$$

حيث سوف نأخذ الأساس $|\phi_i\rangle$ الذي يحقق علاقات التعامد والتجانسية حيث يمكن الحصول على النشر من خلال اجراء عدد من التبديلات لمواقع الجسيمات المتطابقة و المتماثلة ، أو القيام بعملية أخرى تكافئها تماما و هي اجراء تبديلات لأدلة دوال الموجة المنفردة

$$\psi(1,2,\dots\dots,N) = \sum_{v_1v_2\dots v_n} C_{v_1v_2\dots v_n}\,\phi_{v_1}(p^{(1)})\phi_{v_2}(p^{(2)})\dots\phi_{v_n}(p^{(n)})$$

ففي حالة البوزونات سوف يأخذ أساس النشر العبارة الرياضية التالية:

$$\phi^{\beta}_{v_1v_2\dots v_n}(1,2,\dots\dots,N) = \frac{1}{\Pi_u\sqrt{n_u!}\ \sqrt{N!}}[\phi_{v_1}(p^{(1)})\phi_{v_2}(p^{(2)})\dots\phi_{v_n}(p^{(n)})]$$

حيث ينتج معامل التنظيم $\sqrt{N!}$ من عملية تبديل الجسيمات في مستويات طاقوية E مختلفة. بينما $\sqrt{n_u!}$ تبديل الجسيمات في نفس E.

أما في حالة الفرميونات ولأنها تخضع لمبدأ الاستبعاد لباولي فان أساس النشر يأخذ العبارة ضد المتناضرة التالية:

$$\phi^{f}_{v_1 v_2 \ldots v_n}(1,2,\ldots\ldots,N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{p}(-1)^{p}\,\phi_{v_1}[p(1)]\ldots.\phi_{v_n}[p(n)]$$

والتي يمكن اعادة صياغته على شكل محدد يسمى محدد سلاتر :

$$\phi^{f}_{v_1 v_2 \ldots v_n}(1,2,\ldots\ldots,N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}.\begin{vmatrix}[\phi_{v_1}(1) & \phi_{v_1}(2) & \ldots\phi_{v_1}(N)\\ \phi_{v_N}(1) & \phi_{v_N}(2) & \ldots\phi_{v_N}(N)\end{vmatrix}$$

واصطلاحا يمكن أن نكتبه على الشكل الشعاعي ولكنه ليس شعاع حقيقي كمايلي :

$$|\phi_{v_1}\phi_{v_2}\ldots.\phi_{v_n}>$$

مؤثرات الإنشاء:

سوف نوضح كيفية عمل مؤثرات الانشاء و الهدم الخاصة بفضاء الفرميونات ، والتي تشبه في عملها مؤثرات الانشاء و الهدم الخاصة بالبوزونات، تعرف مؤثرات الانشاء C_v^+ وهي المؤثرات التي تنشئ الجسم في الحالة الكمية ϕ_v كما يلي :

$$C_v^+|\phi_{v_1}\phi_{v_2}\ldots.\phi_{v_n}>=|\phi_{v_1}\phi_{v_2}\ldots.\phi_{v_n}>$$

بعده(N×N) بعده (N+1)× (N+1)

بصفة عامة:

$$\forall v\in\{v_1,v_2,\ldots v_N\}\Rightarrow C_v^1|v_1\ldots\ v_2\rangle=0$$

من أجل محدد سلاتير:

$$C_v^+C_{\acute v}^+|\varphi_{v_1}\ldots\varphi_{v_N}\rangle=|\varphi_v,\varphi_{\acute v},\varphi_{v_1},\ldots\ \varphi_N\rangle$$
$$=-|\varphi_{\acute v},\varphi_v,\varphi_{v_1},\ldots\ \varphi_N\rangle$$
$$=-C_{\acute v}^+C_v^+|\varphi_{v_1}\ldots\varphi_{v_N}\rangle$$

$$C_{v}^{+}C_{\acute{v}}^{+} = -C_{\acute{v}}^{+}C_{v}^{+}$$

$$\{C_{v}^{+}, C_{\acute{v}}^{+}\} = 0$$

مؤثر الهدم:

هو المؤثر الذي يزيل الجسيم من الحالة الكمية C_{ν}, ϕ_{ν} (عكس مؤثر الإنشاء)

$$C_{\nu}\,|\phi_{\nu}\ ,\phi_{i},\phi_{j}\,\ldots\rangle = |\phi_{i},\phi_{j}\,\ldots\rangle$$

$$C_{\nu}\,|\phi_{i},\phi_{\nu}\ ,\phi_{j}\,\ldots\rangle = -(1)C_{\nu}\,|\phi_{\nu}\ ,\phi_{i},\phi_{j}\,\ldots\rangle$$

ملاحظة هامة

يجيب جلب ϕ_{ν} المفقودة للجسيم إلى أقصى يسار محدد سلاتير قبل القيام بعملية التأثير.

مثال:

- $\{C_{v}^{+}, C_{\acute{v}}^{+}\}?$

$$\{C_{v}^{+}, C_{\acute{v}}^{+}\}^{\dagger} = (C_{v}^{+}C_{\acute{v}}^{+} - C_{\acute{v}}^{+}C_{v}^{+})^{\dagger}$$

$$\nu = \acute{\nu} \Rightarrow C_{\nu}^{1} = 0$$

- $\{C_{\nu}\ , C_{\acute{v}}^{+}\} =?$

الحالة 01: لا يحتوي على ϕ :

$$(C_{\nu}\ C_{\acute{v}}^{+} - C_{\acute{v}}^{+}C_{\nu}\ )|\varphi_{\nu_1}\varphi_{\nu_2}\ldots\rangle \quad = C_{\nu}\ C_{\acute{v}}^{+}|\varphi_{\nu_1}\varphi_{\nu_2}\ldots\varphi_{N}\rangle$$

$$= |\varphi_{\nu_1}\varphi_{\nu_2}\ldots\varphi_{N}\rangle$$

$$C_{\nu}\ C_{\acute{v}}^{+} - C_{\acute{v}}^{+}C_{\nu}\ \ = 1$$

فضاء فوك – فضاء العد:

لقد لا حظنا سابقا أن استخدام الدوال الموجية يصبح أكثر تعقيدا مع زيادة كلما زاد عدد الجسيمات المدروسة ، خاصة في وجود عدة أنواع من التفاعلات بين الالكترونات ، أو بين الالكترونات و البوزونات . لذلك فالامور تصبح أكثر سهولة عند استخدامنا لفضاء فوك ، والذي يسمى أيضا فضاء العد لأن الاشعة التي تكون هذا الفضاء محددة بعدد الجسيمات في الحالات الكمية المختلفة .حيث يتحوي الأشعة الخاصة **بالفرميونات** على الرقمين 0 و 1 فقط مرتبة حسب تصاعد ترتيب الطاقة ، وهذا بسبب وجود مبدأ الاستبعاد لباولي :

$$|100011101\ldots>$$

أما **البوزونات** فهي لاتخضع لمبدأ الاستبعاد لباولي، وبالتالي يمكن أن نجد أي عدد من البوزونات n_v في نفس الحالة الكمية:

$$|n_1 n_2 n_3 \ldots\ldots n_i\ldots>$$

وعندما تكون جميع الحالات الكمية غير مشغولة ، يسمى الشعاع في هذه الحالة **الفراغ** ويعرف بالعبارة التالية :

$$C_v|0>=0$$

والتي تعني أنه لايمكن الانشاء من فراغ . وبالتالي يمكن كتابة فضاء فوك على شكل مجموع مباشر لفضاءات جزئية كمايلي:

$$F = F^{(0)} \oplus F^{(1)} \oplus F^{(2)} \oplus \ldots\ldots\ldots \oplus F^{(N)}$$

حيث يمكن أن يشغل كل فضاء من الفضاءات الجزئية $F^{(l)}$ عدد من الجسيمات يساوي l جسيم ، ويمكن أن تمثل بالشكل التالي :

$$F^{(0)} = \{|0000000>\}$$

$$F^{(1)} = \{|100000\ldots>, |010000\ldots>, |001000\ldots>, \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots |000000\ldots 01>\}$$

$$F^{(2)} = \{|110000\ldots>, |101000\ldots>, |100100\ldots>, \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots |000000\ldots 11>\}$$

يمكن أن يكون بعد فضاء فوك لانهائي وبالتالي فهو يتسع لدراسة أي عدد من الجسيمات مهما كان بعدها ، بالاضافة الى المرونة التي يتميز بها أثناء اجراء الحسابات ، حيث يمكن الانتقال بين فضاء جزئي وآخر بمجرد استعمال مؤثري البناء والهدم ، فمثلا :

$$C_v^+|\psi^{(i)}> \longrightarrow |\psi^{(i+1)}> \in F^{(i+1)}$$

$$C_v^+|n_1 - n_2> = (-1)^{n_1+n_2+\cdots+n_{v-1}}(1-n_v)|n_1 - n_v + 1, \ldots.>$$

$$C_v|n_1 - n_2> = (-1)^{n_1+n_2+\cdots+n_{v-1}}(n_v)|n_1 - n_v + 1, \ldots.>$$

$$\{C_v, C_v^+\} = \{C_{v'}^+, C_{v'}^+\} = 0$$

$$\{C_v, C_{v'}^+\} = \delta_{vv'}$$

$$a_v^+|n_1 - n_v >= \sqrt{n_v + 1}|n_1 - n_v + 1, \dots >$$

$$a_v|n_1 - n_v >= \sqrt{n_v + 1}|n_1 - n_v + 1, \dots >$$

$$[a_v, a_v^+] = [a_{v'}^+, a_{v'}^+] = 0$$

$$[a_v, a_{v'}^+] = \delta_{vv'}$$

التكميم الثاني:

من المعلوم أن التكميم الأول والذي يتم تدريسه عادة في المراحل الأولى مبني على الفصل بين المؤثرات ودوال الموجة واستخدام مبدأ التقابل من أجل الانتقال بين الميكانيك الكلاسيكي وميكانيك الكم ، ولكن التكميم الثاني تصبح دالة الموجة مؤثر أيضا ، وندخل مايسمى حقول الجسيمات ، كما أن كتابة المؤثرات واستعمالها تصبح أكثر مرونة عند استخدام فضاء فوك ، فمثلا نستطيع كتابة هاملتوني N جسيم المعطى بالعبارة التالية:

$$H = \sum_{i=1} h(i) + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} v(i,j)$$

بدلالة مؤثرات البناء و الهدم C_v, C_v^+ حيث ينقسم الهاملتوني السابق الى حدين ، الأول $h(i)$ يسمى هاملتوني الجسيم المنفرد ، ولايقصد به هاملتوني جسيم وحيد ، بل هو هاملتوني عدد كيفي من الجسيمات غير المتفاعلة فيما بينها والتي يمكن أن تتفاعل مع حقول كالحقل المغناطيسي أو الكهربائي، حيث يتصرف فيها كل جسيم بشكل حر كأنه موجود بمفرده . بينما يمثل الحد الثاني $v(i,j)$ التفاعل بين الجسيمات **مثنى مثنى** :

$$H = \sum_{kp} < \emptyset_k|h|\emptyset_l > C_k^+ C_l + \frac{1}{2}\sum_{klmn} < \emptyset_k\emptyset_l|v|\emptyset_m\emptyset_n > C_k^+ C_l^+ C_n C_m$$

التكميم الثاني في حالة التناظر الانسحابي :

في حالة الانتظام البلوري للجسم الصلب ، تكون جميع الأماكن متماثلة هندسيا و بالتالي سوف يكون هناك تناظر انسحابي بمعنى :

$$v(\vec{r_i}, \vec{r_j}) = v(\vec{r_i}, -\vec{r_j})$$

حيث أن الانسحاب بشعاع بلوري $\vec{R}$ في اي أتجاه لن يؤثر على قيمة كمون التفاعل v فمثلا عند تغير قيمة الشعاعين $(\vec{r_i}, \vec{r_j})$ لتصبحا :

$$\vec{r_i}' = \vec{r_i} + \vec{R}$$

$$\vec{r_j}' = \vec{r_j} + \vec{R}$$

وبالتالي لن تتغير عبارة الكمون v أي أن :

$$v(\vec{r_i}, \vec{r_j}) = v(\vec{r_i}', \vec{r_j}')$$

باستخدام تمثيل دوال **بلوخ** ، في الحالة البسيطة جدا ، وذلك عندما تكون السعة u ثابتة فتصبح عبارة عن **أمواج مستوية** :

$$|k\sigma> \rightarrow \quad \phi = \frac{1}{\sqrt{v}} e^{ikr} |\sigma>$$

وبالتالي يمكننا كتابة الحد المتعلق بالتفاعل في صيغة التكميم الثاني كمايلي :

$$\sum < \kappa_1\sigma_1\kappa_2\sigma_2 | v(\vec{r_1} - \vec{r_2}) | \kappa_3\sigma_3\kappa_4\sigma_4 > C^+_{\kappa_1\sigma_1} C^+_{\kappa_2\sigma_2} C_{\kappa_3\sigma_3} C_{\kappa_4\sigma_4}$$

والجزئ الذي يجب أن نفصل في حسابه هو العناصر المصفوفية M كمايلي :

$$\mathrm{M} =< \kappa_1\sigma_1\kappa_2\sigma_2 | v(\vec{r_1} - \vec{r_2}) | \kappa_3\sigma_3\kappa_4\sigma_4 >$$

$$= \frac{1}{v^2} \int dr_1^3 \int dr_2^3 \, e^{-ik_1r_1} e^{-ik_2r_2} v(\vec{r_1} - \vec{r_2}) e^{ik_3r_1} e^{ik_4r_2} \langle\sigma_1|\sigma_3\rangle\langle\sigma_2|\sigma_4\rangle$$

$$= \frac{1}{v^2} \delta_{\sigma_1\sigma_3}, \delta_{\sigma_2\sigma_4} \int dr_1^3 \int dr_2^3 \, e^{-ik_1r_1} e^{-ik_2r_2} v(\vec{r_1} - \vec{r_2}) e^{ik_3r_1} e^{ik_4r_2}$$

وباستخدام تحويل **فورييه** للحد $v(\vec{r_1} - \vec{r_2})$ نستطيع اعادة كتابة العبارة السابقة كمايلي :

$$= \frac{1}{v^3} \delta_{\sigma_1\sigma_3}, \delta_{\sigma_2\sigma_4} \sum_q v_q \int dr_1^3 \, e^{i(k_3-k_1+q)r_1} \int dr_2^3 \, e^{i(k_4-k_2+q)r_2}$$

$$= \frac{1}{v} \delta_{\sigma_1\sigma_3}, \delta_{\sigma_2\sigma_4} \sum_q v_q \delta_{-qk_3-k_1}, \delta_{-qk_4-k_2}$$

وبالتالي فالعبارة السابقة تكون معدومة دائما الا في حالة تحقق الشروط التالية :

$$\sigma_1 = \sigma_3 \, , \qquad \sigma_2 = \sigma_4$$

$$k_1 = k_3 + q, \qquad k_2 = k_4 - q$$

و بالتالي تصبح عبارة كمون التفاعل :

$$V_{int} = \frac{1}{2v} \sum_q \sum_{\kappa_3\sigma_3} \sum_{\kappa_4\sigma_4} v_q C^+_{k_3+q\sigma_3} C^+_{k_4-q\sigma_4} C_{\kappa_4\sigma_4} C_{\kappa_3\sigma_3}$$

وباستبدال $k_3\sigma_3$ بواسطة $k\sigma$ وكذلك $\kappa_4\sigma_4$ ب $\acute{k}\acute{\sigma}$ يصبح المجموع أكثر بساطة كمايلي :

$$V_{int} = \frac{1}{2v} \sum_q \sum_{\kappa_3\sigma_3} \sum_{\kappa_4\sigma_4} v_q C^+_{k+q\sigma} C^+_{\acute{k}-q\acute{\sigma}} C_{\acute{k}\acute{\sigma}} C_{k\sigma}$$

نظرية الحقل المتوسط :

تعتبر نظرية الحقل المتوسط من الوسائل المهمة عند اجراء الابحاث المتعلقة بالتكميم الثاني في جملة متعددة الجسيمات . ، حيث تسمح لنا بالتعامل مع الحقل المتوسط الذي تولده جملة الجسيمات ، بدلا من التعامل مع التفاعل مثنى- مثنى بين الجسيمات، ويمكننا استعمال الكتابة العامة للهاملتوني في الحالتين التاليتين :

أولا: في حالة الجمل **غيرالمتفاعلة ، ونوع واحد** من الجسيمات المتطابقة:

$$H = \sum_{ij} h_{ij}\, C_i^+ C_j$$

$$H = \sum_{ij} \in_{ij} C_i^+ C_j + \sum_{lm} V_{lm}\, C_l^+ C_m$$

حيث يمكن تمثيله بالمخطط البسيط التالي :

ثانيا: في حالة الجمل **غيرالمتفاعلة ونوعين** من الجسيمات المتطابقة:

$$H = \sum_{ij} h_{ij}{}^{A}\, a_i^+ a_j + \sum_{jm} h_{jm}{}^{B}\, b_j^+ b_m$$

حيث يمكن تمثيله بالمخطط البسيط التالي :

ثالثا: في حالة الجمل **المتفاعلة ونوع واحد** من الجسيمات المتطابقة:

$$H = \sum_{k} \in_k C_k^+ C_k + \sum_{ijkm} V_{ijkm}\, C_i^+ C_j^+ C_m C_k$$

حيث يمكن تمثيله بالمخطط البسيط التالي :

رابعا: في حالة الجمل **المتفاعلة ونوعين** من الجسيمات غيرالمتطابقة:

$$H = \sum_{k} \in_k{}^{A}\, a_k^+ a_k + \sum_{m} \in_m{}^{B}\, b_m^+ b_m + \sum_{ijkm} V_{ijkm}\, a_i^+ b_j^+ b_m a_k$$

حيث يمكن تمثيله بالمخطط البسيط التالي :

التقلبات بالنسبة للقيمة المتوسطة الحرارية :

نقصد بالتقلب هنا ، التغير بالنسبة للقيمة المتوسطة الحرارية عند حسابها بالنسبة للحالة الأرضية ، فمثلا في حالة المؤثر $n_{ij} = C_i^+ C_j$ نجد أن التقلب يعطى بالعبارة التالية :

$$\delta n_{ij} = n_{ij} - \langle n_{ij} \rangle$$

بالتعويض في عبارة الهاملتوني الخاص بالجمل المتفاعلة لنوعين من الجسيمات المتطابقة والذي يمكن اعادة كتابته على الشكل :

$$H = \sum_{k} \in_k{}^{A}\, n_k^a + \sum_{m} \in_m{}^{B}\, n_m^b + \sum_{ijkm} V_{ijkm}\, a_i^+ b_j^+ b_m a_k$$

حيث يمكننا اعادة كتابة الحد الخاص بالتفاعل :

$$V^{A,B}=\sum_{ijkm} V_{ijkm}\, a_i^+ b_j^+ b_m a_k$$

$$V^{A,B}=\sum_{ijkm} V_{ijkm}\left[\left(\delta n_{ij}{}^{A}+\langle n_{ij}{}^{A}\rangle\right)\left(\delta n_{ij}{}^{B}+\langle n_{ij}{}^{B}\rangle\right)\right]$$

$$V^{A,B}=\sum_{ijkm} V_{ijkm}\left[\langle n_{ik}{}^{A}\rangle\langle n_{jm}{}^{B}\rangle+\left(n_{ik}{}^{A}-\langle n_{ik}{}^{A}\rangle\right)\langle n_{jm}{}^{B}\rangle+\left(n_{jm}{}^{B}-\langle n_{jm}{}^{B}\rangle\right)\langle n_{ik}{}^{A}\rangle+\delta n_{ij}{}^{A}\delta n_{ij}{}^{B}\right]$$

تسمح لنا نظرية الحقل المتوسط باهمال الحدود من الدرجة الثانية ، وبالتالي فالحد الأخير مهمل في المعادلة السابقة وتصبح :

$$V^{A,B}=\sum_{ijkm} V_{ijkm}\left[n_{ik}{}^{A}\langle n_{jm}{}^{B}\rangle+n_{jm}{}^{B}\langle n_{ik}{}^{A}\rangle-\langle n_{ik}{}^{A}\rangle\langle n_{jm}{}^{B}\rangle\right]$$

وبالتالي قامت نظرية تقريب الحقل المتوسط بتحويل حد التفاعل لجملة جسيمين ، الى شكل يشبه الجسيم المنفرد الذي يسبح في حقل متوسط تم توليده من طرف بقية الجسيمات المحيطة به. ولتوضيح أهمية هذه الفكرة سوف ندخل الاختصارين التاليين :

بريحة اليمنع تواجد نوضح كيفية عمل مؤثرات الانشاء و الهدم الخاصة بفضاء الفرميونات ، والتي تشبه في عملها مؤثرات الانشاء و الهدم الخاصة بالبوزونات، تعرف مؤثرات الانشاء C_v^+ وهي المؤثرات التي تنشئ الجسم في الحالة الكمية ϕ_v كما يلي :

دوال الترابط:

تلعب دوال الترابط دورا مهما في النظرية الكمية للجسم الصلب ، لاسيما أنها تربط مباشرة بين النتائج التجريبية و الحسابات النظرية من خلال دالة كثافة الطيف. هذا الجزئ من البرنامج مهم جدا ، حيث أنه مرتبط بشكل وثيق ببقية الفصول.

تعرف دالة الترابط C بين المؤثرين A, B كمايلي:

$$C_{AB}^{T}(t,t') = -i < T\,A(t)\,B(t') >$$

حيث ترمز العارضتين $\langle \ldots \rangle$ الى القيمة المتوسطة الحرارية والتي يتم حسابها من خلال العلاقة التالية :

$$\langle * \rangle = Z_G^{-1}\,\mathrm{Tr}\left[e^{-B\tilde{H}}\,*\right]$$

حيث Z_G هي دالة القسمة للمجموعة الماكروقانونية ، بينما $\tilde{H}$ عبارة عن الهاملتون المعدل :

$$\tilde{H} = H - \mu N$$

N : مؤثر العد

μ : الكمون الكيميائي

حيث ننتقل بين تمثيل هايزنبرغ المعدل $A(t)$ وتمثيل شرودينغر A حسب العلاقة التالية:

$$A(t) = e^{i\frac{\tilde{H}t}{\hbar}}\,A\,e^{-i\frac{\tilde{H}t}{\hbar}}$$

المؤثر T: يقوم بترتيب المؤثرات من الزمن الأكبر إلى الزمن الأصغر ويعكس الإشارة إذا كان $t < t'$ في حالة الفرميونات كمايلي:

$$T\,A(t)\,B(t') = \begin{cases} A(t)\,B(t')\,, t > t' \\ \pm B(t')\;A(t)\;\,, t < t' \end{cases}$$

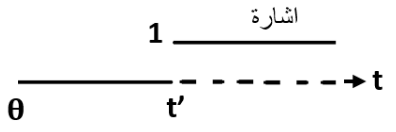
أنواع دوال الترابط :

-1 دالة الترابط C^R المتأخرة:

$$C_{AB}^{R}(t,t') = -i\theta(t-t')\,\langle\{A(t), B(t')\}\rangle$$

دالة الاستجابة المتأخرة تحتوي على المبدل المضاد $\{A(t), B(t')\}$ في حالة الفرميونات، أما في حالة البوزونات نستخدم المبدل العادي $[A(t), B(t')]$ ، بينما $\theta(t-t')$ هي دالة هيفيسايد وتسمى أيضا دالة الخطوة ، وهي تكتب بالعبارة التالية :

$$\theta(t-t') = \begin{cases} 1 & , t \geq t' \\ o & , t < t \end{cases}$$



الفصل الثاني: دوال الترابط ونظرية الاستجابة الخطية

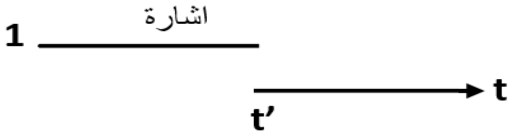
-2 دالة الترابط C^A المتقدمة:

ان مصطلح متأخرة لأن الاستجابة أتت بعد زمن t' ، أما مصطلح متقدمة فالعكس تماما وتكتب دالة الترابط المتقدمة بالعبارة:

$$C^A_{AB}(t,t') = +i\theta(t-t')\,\langle\{A(t),B(t')\}\rangle$$

حيث $\theta(t-t')$ هي دالة هيفيسايد وتختلف مع الشكل السابق فقط في بداية الزمن وتكتب بالعبارة التالية :

$$\theta(t-t') = \begin{cases} 1 & ,t \le t' \\ o & ,t > t' \end{cases}$$



تتحول دوال الترابط الى دوال Green بمجرد استبدال المؤثرات A,B بمؤثرات الحقل Ψ و Ψ^+ حيث يرتبطان مع مؤثري الانشاء و الهدم $C^+_{k\sigma}$ ، $C_{k\sigma}$ بالعلاقتين التاليتين :

$$\Psi^+_\sigma = \sum_k \phi_k{}^*(r)C^+_{k\sigma}$$

$$\Psi_\sigma = \sum_k \phi_k(r)C_{K\sigma}$$

وفي حالة استخدام دوال بلوخ على شكل أمواج مستوية :

$$\Psi^+_\sigma = \frac{1}{\sqrt{v}}\sum_k e^{-ikr}C^+_{k\sigma}$$

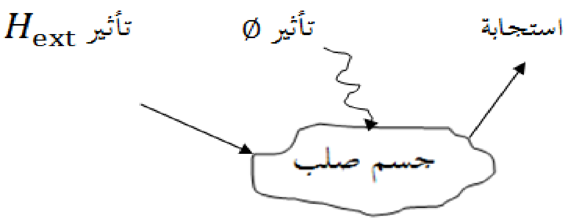
$$\Psi_\sigma = \frac{1}{\sqrt{v}}\sum_k e^{ikr}C_{k\sigma}$$

تتحول دوال الترابط الى دوال Green بمجرد استبدال المؤثرات A,B بمؤثرات الحقل Ψ و Ψ^+ حيث يرتبطان مع مؤثري الانشاء و الهدم $C^+_{k\sigma}$ ، $C_{k\sigma}$ بالعلاقتين التاليتين :

نظرية الاستجابة الخطية :

ان دراسة الاجسام التي تحوي عدد كبير من المكونات الاساسية ، وبتفاعلات متنوعة هو أمر بالغ التعقيد ومن النادر أن نجد مسألة يتم حلها بدقة ، ولذلك لابد من القيام بحسابات تقريبية ، وفي هذا الاطار تعمل نظرية الاستجابة الخطية وهي مرتبطة بالقياس أو التجربة بحيث يكون المؤثر الخارجي ضعيف الى درجة لايؤثر فيها على الطبيعة الاساسية للمادة المدروسة ، و تسمى خطية بسبب اهمالنا الحدود من الدرجات الثانية ، والاعلى من ذلك.

$$f(x) = a + bx + 0(x)$$



$$n(\vec{r},t)$$

$$\emptyset(n(r^2,t)) \to \emptyset\, n(r,t)$$

بعد→قبل الكمون

فاذا أثرنا بمؤثر خارجي $H^{ext}(r)$ على جسم صلب من أجل قياس خاصية كما يظهر في الشكل ، فسوف يترابط المؤثر الخارجي ، مع مؤثر محلي للمادة المدروسة $A(r)$ ، فمثلا عند استخدام الكمون الكهربائي من أجل القياس سوف يكون الترابط مع الكثافة الالكترونية المحلية للجسم الصلب ، وعموما تكتب علاقة الترابط كما يلي :

$$H^{ext}(r) = \int dr^3 \underbrace{F(r,t)}_{\text{قوة معمملة}} . \underbrace{A(r)}_{\text{مؤثر محلي للمادة المدروسة}}$$

مثال

$$H^{ext}(r) = -e \int dr^3\, \varphi(r,t) n(r)$$

$$\begin{cases} H^{ext}(r) = 0 \to n(r) = cst \\ H^{ext}(r) \neq 0 \to n \pm n(r,t) \end{cases}$$

ان عملية القياس في الحقيقة هي بحث عن الفرق $\delta\langle A\rangle$ بين القيمة المتوسطة $\langle A\rangle$ في وجود المؤثر الخارجي ، وفي عدم وجوده :

$$\delta\langle A\rangle = \langle A\rangle_{\underset{\text{وجود مؤثر خارجي}}{ext}} - \langle A\rangle_{\text{عدم وجود مؤثر خارجي}}$$

ومنه نستطيع كتابة عبارة الاستجابة للمؤثر الخارجي كمايلي :

$$\delta\langle A\rangle(r,t) = \int d\acute{r}^3 \int d\acute{t}\; \underbrace{\chi(rt,\acute{r}\acute{t})}_{\text{الحساسية المعممة}} \underbrace{F(\acute{r}\acute{t})}_{\text{القوة المعممة}}$$

نكتب دالة الحالة بدلالة مؤثر التطور $|\Psi(t)\rangle$ من أجل $t < t_0$ كما في المعادلة التاليلة :

$$|\Psi(t)\rangle = e^{\frac{-iHt}{\hbar}} |\Psi(0)\rangle$$

وعند تطور الحالة مع الزمن، أي من أجل $t > t_0$ تصبح :

$$i\hbar\frac{\partial|\Psi(t)>}{\partial t}=[H+H^{ext}]|\Psi(t)>$$

حيث :

$$\begin{cases}|\Psi(t)>=e^{-\frac{iHt}{\hbar}}U(t)|\Psi(t_0)> \\ \mathrm{U(t)}=1 \quad \mathrm{t}\leq t_0\end{cases}$$

بالتعويض في المعادلة السابقة نجد :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left\{e^{-\frac{iHt}{\hbar}}U(t)|\Psi(t_0)\right)>=(H+H^{ext}(t))e^{-iHt/\hbar}U(t)|\Psi(t_0)>$$

$$=He^{-\frac{iHt}{\hbar}}U(t)|\Psi(t_0)>+e^{-\frac{iHt}{\hbar}}ih\frac{\partial\Psi(t)}{\partial t}|\Psi(t_0)>$$

$$=He^{-\frac{iHt}{\hbar}}U(t)|\Psi(t_0)>+H^{ext}(t)e^{-iHt/h}U(t)|\Psi(t_0)>$$

$$e^{-\frac{iHt}{\hbar}}i\hbar\frac{\partial\Psi(t)}{\partial t}|\Psi(t_0)>=H^{ext}(t)e^{-iHt/\hbar}U(t)|\Psi(t_0)>$$

نضرب الطرفين في المرافق لنحصل على شكل تمثيل هايزنبرغ للمؤثر H^{ext} كمايلي :

$$\rightarrow i\hbar\frac{\partial U(t)}{\partial t}=e^{\frac{iHt}{\hbar}}H^{ext}(t)e^{-\frac{iHt}{\hbar}}U(t)$$

$$\rightarrow i\hbar\frac{\partial U(t)}{\partial t}=H_H^{ext}u(t)$$

بمكاملة طرفي المعادلة السابقة نحصل على معادلة تكاملية :

$$i\hbar\int_{t_0}^{t}\frac{\partial U(t')}{\partial t'}dt'=\int_{t_0}^{t}H_H^{ext}(t')\,U(t')dt'=i\hbar[U(t)-U(t_0)]$$

حيث $U(t_0)=1$ ، وبالتالي نحصل على المعادلة التكاملية المستهدفة ، بالنسبة لمؤثر التطور $U(t)$ كمايلي :

$$U(t)=1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}H_H^{ext}(t')\,U(t')dt'$$

بتعويض عبارة المؤثر $U(t)$ **من نفس** العبارة و**في** نفس العبارة ، مع تغيير تسمية حدود التكامل نجد :

$$\rightarrow U(t)=1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\,H_H^{ext}(t')\left[1-\frac{i}{\hbar}\int_{t'_0}^{t'}H_H^{ext}(t'')\,U(t'')dt'\right]$$

بالاستمرار بالتعويض المتتالي لعبارة المؤثر $U(t)$ **من** نفس العبارة السابقة و**في** نفس العبارة نحصل على :

$$\to U(t)=1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\,H_H^{ext}(t')+(\frac{-i}{\hbar})^2\int_{t_0}^{t}dt'\,H_H^{ext}(t')\int_{t_0''}^{t''}dt''\,H_H^{ext}(t'')\,U(t'')dt''$$

ومنه تصبح

$$U(t)=1-\int_{t_0}^{t}dt'\,H_1^{ext}(t_1')+\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2H_H^{ext}(t_1)H_H^{ext}(t_2)+\cdots$$

من أجل حساب القيمة المتوسطة الحرارية

$$\begin{cases}H|n>=E_n|n>\\ N|n>=n|n>\end{cases}$$

تتطور الحالة $|n>$ مع الزمن لتصبح $|n.t>$ كمايلي :

$$H^{ext}=0\to|n.t>=e^{-\frac{iHt}{\hbar}}|n>$$

وتكتب القيمة المتوسطة الكمية في اللحظة t للمؤثر A في حالة عدم وجود مؤثر خارجي كمايلي :

$$\to\langle n.t|A|n.t\rangle=\left\langle n\middle|e^{\frac{iHt}{\hbar}}Ae^{-\frac{iHt}{\hbar}}\middle|n\right\rangle$$

حيث تمثل العبارة السابقة القيمة المتوسطة الحرارية للمؤثر A في تمثيل هايزنبرغ ، ويمكن اختصارها كمايلي :

$$\langle n|A_H(t)|n\rangle$$

حيث

$$e^{\frac{iHt}{\hbar}}e^{-\frac{iHt}{\hbar}}=A_H(t)$$

أما في حالة كون المؤثر الخارجي H^{ext} يختلف عن الصفر فالقيمة المتوسطة تصبح كمايلي :

$$H^{ext}\neq0\to\langle n.t|A|n.t\rangle=\left\langle n\middle|U^+e^{\frac{iHt}{\hbar}}Ae^{-\frac{iHt}{\hbar}}U\middle|n\right\rangle$$

ونستطيع أن نكتب أيضا

$$\langle n|U^+A_H(t)U|n\rangle$$

نعوض الأن عبارة كل من U و U^+ في المعادلة * لنجد :

$$=<n\left|[1+\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{\varepsilon}dt'H_H^{ext}(t')+\cdots]A_H\,(t)[1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'H_H^{ext}(t')+\cdots]\right|n>$$

$$=<n|A_H(t)|n>+\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'<n|[H_H^{ext}(t')A_H(t)-A_H(t)H_H^{ext}(t')]|n>+\cdots$$

نحتفظ فقط بالحدود من الدرجة الأولى ، للسبب الذي ذكرناه سابقا و الذي يعبر عن التسمية الخطية:

$$=<n|A_H(t)|n> + \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' < n|[H_H^{ext}(t'), A_H(t)]|n> + ...$$

وبالتالي فالفرق في القياس من أجل $H^{ext} = 0$ و من أجل $H^{ext} \neq 0$ يصبح :

$$\delta < n,t|A|n,t >= -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' < n|A_H(t), H_H^{ext}(t')]|n >+....$$

و هي القيمة المتوسطة الكمية ، ولحساب القيمة المتوسطة الحرارية يكفي ضرب الطرفين في الاحتمال الإحصائي.

$$P_n = \frac{e^{-\beta(E_n-\mu N)}}{Z_q}$$

بالجمع على الطرفين نحصل على القيمة المتوسطة الحرارية:

$$\delta < A >= -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' < [A_H(t), H_H^{ext}(t')] >$$

بتعويض عبارة H_H^{ext} في التكامل * نحصل على :

$$\delta < A >= -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \int d^3r' < [A(r,t), A_H(r't')] > F(r',t')$$

$$= \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t} d^3\, D^R(rt, r't')F(r',t')$$

حيث نستطيع كتابة $A_{\tilde{H}}$ بدلا من A_H بسبب التبادل بين H و N

$$A_H(rt) = e^{iHt/\hbar}A(r)e^{-iHt/\hbar} = e^{\frac{i(H-\mu N)t}{\hbar}}A(r)e^{\frac{-i(H-\mu N)t}{\hbar}} = A_{\tilde{H}}(t)$$

حيث

$$\tilde{H} = H - \mu N$$

أما D^R فهي عبارة عن دالة غرين متأخرة و هي تسمى عبارة كيوبو

$$D^R(rt, r't') = -i\theta(t-t') < [A(r,t), A_H(r't')] >$$

و منه نستنتج أن عبارة الحساسية المكممة ما هي إلا عبارة عن دالة غرين حيث:

$$\chi(rt, r't') = \frac{1}{\hbar}D^R(rt, r't')$$

$$D^R(rt, r't') = -i\theta(t-t') < [A(r,t), A_H(r't')] >$$

الفصل الثالث:

دوال غرين في درجات الحرارة المعدومة

دوال غرين:

تلعب دوال غرين دورا مهما في النظرية الكمية للجسم الصلب ، حيث تقوم بدور متخصص وهي نوع من أنواع دوال الترابط ، يمكن الحصول عليها بمجرد استبدال المؤثرين A, B في عبارة دوال الترابط التي رأيناها في الفصل الثاني بمؤثري الهدم والبناء الخاصين بالحقل $\Psi_\sigma(r\tau)$،$\Psi_\sigma^+(\acute{r}\acute{\tau})$ ، و كما هو الحال بانسبة لدوال الترابط ، تلعب دوال غرين دور مهم ، حيث أنها صلة الوصل بين التجربة و النظرية .

تعرف دالة غرين G بين المؤثرين $\Psi_\sigma(r\tau)$،$\Psi_\sigma^+(\acute{r}\acute{\tau})$ كمايلي:

$$G\,(\mathrm{r\sigma t}, \acute{r}\acute{\sigma}\mathrm{t'}) = -\mathrm{i} < T\,\Psi_\sigma(rt)\text{،}\Psi_\sigma^+(\acute{r}\acute{t}) >$$

وتسمى هذه بدالة غرين السببية ، حيث ترمز العارضتين $\langle\ldots\rangle$ الى القيمة المتوسطة الحرارية والتي يتم حسابها من خلال العلاقة التالية :

$$\langle * \rangle = \mathrm{Z_G^{-1}}\,\mathrm{Tr}\left[\mathrm{e^{-B\tilde{H}}} *\right]$$

حيث $\mathrm{Z_G}$ هي دالة القسمة للمجموعة الماكروقانونية ، بينما $\tilde{H}$ عبارة عن الهاملتون المعدل :

$$\tilde{H} = H - \mu\, N$$

N : مؤثر العد

μ : الكمون الكيميائي

حيث ننتقل بين تمثيل هايزنبرغ المعدل A(t) وتمثيل شرودينغر A حسب العلاقة التالية:

$$\Psi_\sigma(rt) = e^{i\frac{\tilde{H}t}{\hbar}}\,\Psi_\sigma\, e^{-i\frac{\tilde{H}t}{\hbar}}$$

المؤثر T: يقوم بترتيب المؤثرات من الزمن الأكبر إلى الزمن الأصغر ويعكس الإشارة إذا كان t < t' في حالة الفرميونات كمايلي:

$$T\,\Psi_\sigma(rt)\text{،}\Psi_\sigma^+(\acute{r}\acute{t}) = \begin{cases} \Psi_\sigma(rt)\Psi_\sigma^+(\acute{r}\acute{t})\;, \mathrm{t} > \mathrm{t'} \\ \pm\Psi_\sigma^+(\acute{r}\acute{t})\Psi_\sigma(rt)\;\;, \mathrm{t} < t' \end{cases}$$

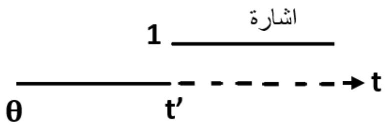
أنواع دوال غرين:

1- دالة اغرين $\mathrm{G^R}$ المتأخرة:

$$G^{\mathrm{R}}(\mathrm{r\sigma t}, \acute{r}\acute{\sigma}\mathrm{t'}) = -\mathrm{i}\theta(\mathrm{t}-\mathrm{t'})\,\langle\{\Psi_\sigma(rt), \Psi_\sigma^+(\acute{r}\acute{t})\}\rangle$$

دالة الاستجابة المتأخرة تحتوي على المبدل المضاد $\{\Psi_\sigma(rt), \Psi_\sigma^+(\acute{r}\acute{t})\}$ في حالة **الفرميونات**، أما في حالة البوزونات نستخدم المبدل العادي $[\Psi_\sigma(rt), \Psi_\sigma^+(\acute{r}\acute{t})]$ ، بينما $\theta(\mathrm{t}-\mathrm{t'})$ هي دالة هيفيسايد وتسمى أيضا دالة الخطوة ، وهي تكتب بالعبارة التالية :

$$\theta(\mathrm{t}-\mathrm{t'}) = \begin{cases} 1 & ,\mathrm{t} \geq \mathrm{t'} \\ \mathrm{o} & ,\mathrm{t} < t \end{cases}$$



-2 دالة اغرين G^A المتقدمة:

تختلف دالة غرين المتقدمة عن دالة غرين المتأخرة من حيث بداية الحدث ، وبالتالي سوف نجد انعكاسا في الاشارة بالاضافة الى انعكاس دور اللحظات الزمنية في دالة الخطوة أو دالة هيفيسايد $\theta(t-t')$ عكساحيث تصبح $\theta(t'-t)$ **كمايلي :**

$$\theta(t'-t)=\begin{cases}1 & ,t<t'\\ o & ,t\geq t'\end{cases}$$

وتكتب دالة غرين المتقدمة كمايلب :

$$G^A(r\sigma t,\acute{r}\acute{\sigma}t')=+i\theta(t'-t)\,\langle\{\Psi_\sigma(rt),\Psi_{\acute{\sigma}}^{+}(\acute{r}\acute{t})\}\rangle$$

-1 دالة اغرين الكبرى $G^>$ ودالة اغرين الصغرى $G^<$:

$$G^>(r\sigma t,\acute{r}\acute{\sigma}t')=-i\,\langle\Psi_\sigma(rt)\Psi_{\acute{\sigma}}^{+}(\acute{r}\acute{t})\rangle$$

$$G^<(r\sigma t,\acute{r}\acute{\sigma}t')=\pm i\,\langle\Psi_{\acute{\sigma}}^{+}(\acute{r}\acute{t})\Psi_\sigma(rt)\rangle$$

و هذه الكتابة ليست اعتباطية حيث انها تحما معنا فيزيائيا عميق ، حيث أن القيمة المتوسطة الحرارية **للكثافة المحلية** لعدد من الجسيمات يمكن التعبير عنها بالشكل التالي :

$$\langle n_\sigma(rt)\rangle=\langle\Psi_\sigma^{+}(rt)\Psi_\sigma(rt)\rangle$$

$$\langle n_\sigma(rt)\rangle=\mp i\,G^<(r\sigma t,r\sigma t)$$

كما أن دالة الترابط لجسيم منفرد تكتب بالعبارة التالية :

$$G(r\sigma t,\acute{r}\acute{\sigma}t')=\langle\Psi_\sigma(rt)\Psi_{\acute{\sigma}}^{+}(\acute{r}\acute{t})\rangle$$

يمكن تعميم الكتابة السابقة على أي أساس مكتمل ، واستخدام مؤثرات البناء و الهدم في هذا الأساس .

$$G^R\left(nlm\sigma t,n\acute{l}\acute{m}\acute{\sigma}t'\right)=-i\theta(t-t')\,\langle\left\{C_{nlm\sigma}(t),C_{n\acute{l}\acute{m}\acute{\sigma}}^{+}(\acute{t})\right\}\rangle$$

الكتابة الطيفية لدوال غرين

الكتابة الطيفية لاي مؤثر H تكون كما يلي

$$\sum|n><n|\;=1$$

$$H=1M1=\sum_{m,n}|n><n|H|m><m|$$

حيث استخدمنا علاقة الانغلاق للفضاء الشعاعي $|n>$ وبالتالي نستطيع كتابة الهاملتوني H على شكل نشر للقيم الذاتية بالشكل :

$$H=\sum|n>E_n<n|$$

ولهذا السبب تسمى الكتابة الطيفية للمؤثر H لأن كتابتها تمت بواسطة طيف الهاملتوني E_n وأشعته الذاتية .

بنفس الطريقة يمكننا كتابة دالة غرين على شكل تمثيل طيفي ولكن مع اختلاف بسيط :

$$\rightarrow G^R(k\sigma,\omega)=\frac{-1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} P(n\sigma,E)(1\mp e^{-\beta\hbar E})\frac{dE}{(\omega-E+i\eta)}$$

حيث تسمى $P(k\sigma,E)$ دالة الطيف ، بينما تسمى $A(k\sigma,E)$ دالة كثافة الطيف ، وتربط بينهما العلاقة التالية :

$$A(k\sigma,E) = -P(k\sigma,E).(1\mp e^{-\beta\hbar E})$$

↓ ↓

دالة دالة

كثافة الطيف الطيف

وتربط بينهما العبارة التالية :

$$G^R(k\sigma,\omega) = \lim_{\eta\to 0+}\frac{A(k\sigma,E)}{\omega-E+i\eta}\frac{dE}{2\pi}$$

$$G^A(k\sigma,\omega) \rightarrow G^R(i\eta \rightarrow -i\eta)$$

$$G^R(k\sigma,\omega) = \lim_{\eta\to 0+}\frac{A(k\sigma,E)}{\omega-E+i\eta}\frac{dE}{2\pi}$$

$$G^A(k\sigma,\omega) \rightarrow G^R(i\eta \rightarrow -i\eta)$$

الفصل الرابع:

دوال غرين من أجل n جسيم - طريقة معادلة الحركة

من الصعب استخدام دوال غرين بسبب تعقيدها ، وتعدد طرقها ، ولكن توجد بعض المعادلات التي تساعد الطلبة من أجل التمكن من هذا الموضوع والمضي قدما في ميادين البحث التي تحتاج للربط مع التجربة . سوف نقوم في هذا الفصل باستخراج معادلة تفاضلية عامة من أجل كمون تفاعل كيفي V ، حيث يكتب الشكل العام للهاملتونيان المعدل كمايلي :

$$\widetilde{H} = \widetilde{H_0} + V$$

وتكتب عبارة التكميم الثاني للهاملتون المعدل بالشكل :

$$\widetilde{H} = \sum \widetilde{\epsilon_{k\sigma}}\, C_{k\sigma}^{+} C_{k\sigma} + V$$

باستخدام عبارة دوال غرين * المكتوبة في الفضاء $k\sigma$:

$$G^R(k\sigma, t) = -i\theta(t) < \{C_{k\sigma}(t), C_{k\sigma}^{+}(0)\} >$$

واشتقاق الطرفين بالنسبة للزمن نجد :

$$i\frac{\partial}{\partial t} G^R(k\sigma, t) = i\frac{\partial\theta(t)}{\partial t} < \{C_{k\sigma}(t), C_{k\sigma}^{+}(0)\} > +i\theta(t) < \left\{\frac{\partial}{\partial t} C_{k\sigma}(t), C_{k\sigma}^{+}(0)\right\} >$$

حيث نستطيع التأكد بحسابات سهلة أن من العبارات التالية :

$$\frac{\partial\theta(t)}{\partial t} = \delta(t)$$

$$\delta(x) f(x) = \delta(x) f(0)$$

وباستخدام عبارة مشتق المؤثرات في ميكانيك الكم :

$$\frac{\partial}{\partial t} A = \frac{i}{\hbar}[\widetilde{H}, A(t)]$$

نجد أن:

$$\frac{\partial}{\partial t} C_{k\sigma}(t) = \frac{i}{\hbar}[\widetilde{H}, C_{k\sigma}(t)]$$

وبالتالي تصبح المعادلة * بالشكل :

$$= \delta(t) < \{C_{k\sigma}(0), C_{k\sigma}^{+}(0)\} > +\theta(t) < \left\{\frac{i}{\hbar}[\widetilde{H}, C_{k\sigma}(t)], C_{k\sigma}^{+}(0)\right\} >$$

$$[\widetilde{H}, C_{k\sigma}(t)] = [\widetilde{H_0}, C_{k\sigma}(t)] = [\widetilde{H}, C_{k\sigma}(t)] + [V, C_{k\sigma}(t)]$$

الفصل الخامس:

قانون كلديخ من أجل النقل خارج التوازن.

دوال غرين المستقلة عن الزمن:

يمكن أن تعرف دوال غرين عموما كحلول لمعادلات تفاضلية غير متجانسة كالتالي:

$$[z - L(r)]G(r,r';z) = \delta(r - r') \qquad (5,1)$$

z عبارة عن متغير مركب حيث $(\vec{r},\vec{\acute{r}})$ للمتغيرين (Ω) في المجال المسموح (S)و هذا في وجود شروط حدية معرفة على سطح بحيث:

$$\begin{cases}\lambda = Re\{z\} \\ s = Im\{z\}\end{cases}$$

$L(r)$: مؤثر خطي تفاضلي و هو مستقل عن الزمن هرميتي ،عبارته من الشكل التالي:

$$L(r)\Phi_n = \lambda_n \Phi_n(r) \qquad (5,2)$$

و هنا $\Phi_n(r)$ تملك نفس الشروط الحدودية الخاصة ب $G(r,r';z)$ ويمكن ل (n) أن يمثل مجموعة من المتغيرات ، تسمى في ميكانيك الكم الأعداد الكمية وتخضع هذه الأخيرة لشرط التنظيم:

$$\int \Phi_n^*(\mathrm{r})\Phi_n(r)dr = \delta_{nm} \qquad (5,3)$$

تحقق علاقة الانغلاق كما يلي: $\Phi_n(r)$كما أن مجموعة الدوال الذاتية

$$\sum_n \Phi_n(r)\Phi_n^*(\acute{r})dr = \delta(r - r') \qquad (5,4)$$

يمكن للعدد (n) أن يأخذ مجموعة من القيم قد تكون منفصلة (و/أو) متصلة بمعنى مستمرة بحيث يصبح المجموع على (n) هو عبارة عن جزئين جزء $(\sum')$ يشير إلى حقيقة الجمع على الدوال الذاتية والمنتمية إلى الطيف المنفصل أما الجزء $(\int dc)$ فهو تكامل على الطيف المستمر.

يصبح العمل مع دوال غرين أسهل بكثير ، عند الانتقال إلى فضاء **هيلبرت** المجرد ، و هو ما يسمى بجبر ديراك ، حيث نتفادى بعض الحسابات الروتينية كالتكاملات و غيرها ، والتي تستبدل هنا بالجداءات السلمية ، و هناك العديد من الخواص المعروفة في ميكانيك الكم ، سنذكر بعضها فقط :

$$\Phi_n(r) = \langle r|\Phi_n\rangle \qquad (5,5)$$

$$\delta(r - r')L(r) = \langle r|L|r'\rangle \qquad (5,6)$$

$$G(r,r';z) = \langle r|G(z)|r'\rangle \qquad (5,7)$$

$$\langle r|r'\rangle = \delta(r - r') \qquad (5,8)$$

$$\int dr|r\rangle\langle r| = 1 \qquad (5,9)$$

يمكن كتابة المعادلة (1,1) كالتالي:

$$[z-L(r)]G(z)=1 \qquad (5,10)$$

وتصبح العلاقات السابقة كالتالي:

$$L|\Phi_n\rangle=\lambda_n|\Phi_n\rangle \qquad (5,11)$$

$$\langle\Phi_n|\Phi_m\rangle=\delta_{nm} \qquad (5,12)$$

$$\sum_n|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|=1 \qquad (5,13)$$

ويمكن الرجوع من العلاقة $(1,1)'$ إلى العلاقة $(1,1)$ باستخدام كل من $(1,6)$ و $(1,7)$ كالتالي:

$$\langle r|[z-L(r)]G(z)|r'\rangle=\langle r|1|r'\rangle$$

$$\langle r|zG(z)|r'\rangle-\langle r|L(r)G(z)|r'\rangle=\langle r|r'\rangle$$

$$zG(r,r';z)-L(r)G(r,r';z)=\delta(r-r')$$

$$[z-L(r)]G(r,r';z)=\delta(r-r')$$

حيث يكتب توزيع ديراك على الشكل التالي:

$$\delta(r-r')=\begin{cases}0:(r-r')\neq 0\\ \infty:(r-r')=0\end{cases}$$

وفق خاصية دوال ديراك التي تعمل على جمع الدوال كالتالي:

$$\int_\Omega \delta(r-r')f(r')dr'=f(r) \qquad (*)$$

بتبسيط الجهة اليسرى للعلاقة $(1,1)'$:

$$(z-L)G(z)=\langle r|zG(z)|r'\rangle-\langle r|LG(z)|r'\rangle$$

$$=zG(r,r';z)-\langle r|LG(z)|r'\rangle$$

ندخل مؤثر الوحدة $(|s\rangle\langle s|\ \ \int ds)$ بين كل من L و G في العلاقة الأخيرة:

$$zG(r,r';z)-\int ds\langle r|L|s\rangle\langle s|G(z)|r'\rangle$$

$$=zG(r,r';z)-L(r)G(r,r';z)=\delta(r-r')$$

وهذا يعطينا تعريفا مطابقا للمعادلة $(1,1)$ كذلك من فوائد خواص ديراك: سهولة الانتقال بين العلاقات جبريا وهذا لايقتصر على العمل داخل الفضاء الحقيقي (r) فقط بل يمكن التعبير عنه في فضاء (k) باستخدام تحويل "فوريه":

اذا كانت جميع القيم الذاتية لـ $(L-Z)$ تختلف عن الصفر بمعنى إذا كان $(z \neq \lambda_n)$.إذن يمكن أن نكتب:

$$G(z) = \frac{1}{z-L} \qquad (1,10)$$

بضرب طرفي هذه المعادلة في علاقة الانغلاق $(1,4)'$ نجد :

$$G(z) == \sum_n \frac{|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|}{z-L} \qquad (1,11)$$

نظرا لامكانية وجود نوعين من الطيف المستمر و المتقطع فالمعادلة (1,11) يمكن كتابتها بشكل أعم :

$$G(z) = \sum\nolimits_n' \frac{|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|}{z-\lambda_n} + \int dc \frac{|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|}{z-\lambda_c} \qquad (1,12)$$

كما أنه من السهل إعادة كتابتها في الفضاء الحقيقي وذلك عند إظهار المتغير r:

$$G(r,r';z) = \sum\nolimits_n' \frac{\Phi_n(r)\Phi_n^*(r')}{z-\lambda_n} + \int dc \frac{\Phi_c(r)\Phi_c^*(r')}{z-\lambda_c} \qquad (1,13)$$

عندما يكون (L) مؤثرا هرميتيا تكون جميع قيمه الذاتية (λ_n) حقيقة وبالتالي عندما يكون $Im(z) \neq 0$ فينبغي أن يتحقق $(z \neq \lambda_n)$ هذا يعني أن $G(z)$ هي دالة تحليلية في المستوى الذي يحمل قيم (z) إلا في تلك النقاط أو أجزاء من المحور الحقيقي لـ(z) التي تتوافق مع القيم الذاتية لـ(L).

تقبل $G(z)$ أقطاب بسيطة في مواضع القيم الذاتية المنفصلة من (L) كما أن العكس صحيح ، حيث تعطي أقطاب $G(z)$ القيم الذاتية المتقطعة الخاصة بالمؤثر (L).

نرمز + للمؤثر لدالة غرين عند $Im(z) > 0$ ونرمز G^- لدالة غرين عند $Im(z) < 0$

ونعبر عن ذلك رياضيا عندما يكون $(z = \lambda)$ كالتالي:

$$G^{\pm}(r,r';\lambda) = \lim_{s\to 0^+} G(r,r';\lambda \pm is) \qquad (1,14)$$

حيث:

$$(z = \lambda \pm is) \qquad (1,15)$$

و حسب تعريفي المؤثرين G^+ و G^- ومن خلال العبارة (1,13) نستنتج أن:

$$G^*(r,r';z) = G(r,r';z^*) \qquad (1,16)$$

ونستطيع التمييز بين الحالات التالية :

الحالة الأولى: إذا كان z عددا حقيقاً، $z = \lambda$ و $\lambda \neq \lambda_n$ من العلاقة (1,16) نجد أن $G(r,r';\lambda)$ هي دالة هرميتية ، وفي حالة خاصة يمكن أن تكون $(r,r';\lambda)$ حقيقية.

الحالة الثانية: من جهة أخرى عندما يكون λ ينتمي إلى القيم المستمرة ومن خلال تعريف العلاقات (1,16) و (1,15) و (1,14) نجد أن:

$$G^-(r,r';z) = [G(r',r;\lambda)]^* \qquad (1,17)$$

ونستنتج من ذلك:

$$Re\{G^-(r,r;\lambda)\} = Re\{G^+(r,r;\lambda)\} \quad (1,18)$$
$$Im\{G^-(r,r;\lambda)\} = -Im\{G^+(r,r;\lambda)\} \quad (1,19)$$

وباستتخدام الخاصية الرياضية المعروفة :

$$\lim_{y\to 0^+} \frac{1}{x \pm iy} = \mathrm{p}\frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x) \quad (1,20)$$

انطلاقا من (1,13) يمكننا التعبير عن القيم المنفصلة $\tilde{G}(\lambda)$ من خلال خاصية دالة ديراك:

$$\tilde{G}(\lambda) \equiv G^+(\lambda) - G^-(\lambda) = -2\pi i\delta(\lambda - L) \quad (1,21)$$

بالانتقال إلى الفضاء الحقيقي و إظهار r و r' نجد :

$$\tilde{G}(r,r';\lambda) = -2\pi i \sum_n (\lambda - \lambda_n)\, \Phi_n(r)\Phi_n^*(r') \quad (1,22)$$
$$= -2\pi i \sum\nolimits_n' \delta(\lambda - \lambda_n)\Phi_n(r)\Phi_n^*(r') - 2\pi i \int \delta(\lambda - \lambda_c)\Phi_c(r)\Phi_c^*(r')dc$$

للحصول على العناصر القطرية للمصفوفة نستخدم العلاقتين (1,13) و (1,20).

$$G^{\pm}(r,\mathrm{r};\lambda) = p\sum_n \frac{\Phi_n(r)\Phi_n^*}{(\lambda - \lambda_n)} \mp i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n)\Phi_n(r)\Phi_n^*(\mathrm{r}) \quad (1,23)$$

بمكاملة العلاقة (1,23) بالنسبة لـ(r):

$$\int drG^{\pm}(r,r;\lambda) = \int dr \left\langle r\middle|G^{\pm}(\lambda)\middle|r\right\rangle$$
$$\equiv Tr\{G^{\pm}(\lambda)\} \quad (\square)$$
$$= p\sum_n \frac{1}{(\lambda - \lambda_n)} \mp i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \quad (1,24)$$

الكمية $\sum_n \delta(\lambda - \lambda_n)$ تمثل كثافة الحالات DOS عند القيم λ و$N(\lambda)$ و $N(\lambda)d\lambda$ تعطي عدد الحالات في المجال $[\lambda, \lambda + d\lambda]$ كالتالي:

$$\rho(r,\lambda) \equiv \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n)\Phi_n(r)\Phi_n^*(r)$$

$$= \sum\nolimits_n' \delta(\lambda - \lambda_n)\Phi_n(r)\Phi_n^* + \int \delta(\lambda - \lambda_c)\Phi_c(r)\Phi_c^*(r)dc \quad (1,25)$$
$$N(\lambda) = \int \rho(r,\lambda)dr \quad (1,26)$$

حيث نضرب العلاقة (1,22) في $\left(-\frac{1}{2\pi i}\right)$ نجد العلاقة:

$$\rho(r,\lambda) = -\frac{1}{2\pi i}\tilde{G}(r,r;\lambda) \quad (\Delta)$$

ومن جهة أخرى نضرب الجزء التخيلي للعلاقة (1,23) في $\left(\pm\frac{1}{\pi}\right)$ نجد أن:

$$\rho(r,\lambda) = \mp Im\{G^{\pm}(r,r;\lambda)\} \quad (\bigcirc)$$

ومن المرحلتين السابقتين نستنتج أن:

$$\rho(r,\lambda) = \mp Im\{G^{\pm}(r,r;\lambda)\} = -\frac{1}{2\pi i}\tilde{G}(r,r;\lambda) \quad (1,27)$$

بإدخال التكامل بالنسبة لـ r على طرفي المعادلة (○) نتحصل مباشرة على:

$$N(\lambda) = \mp\frac{1}{\pi}Im\{TrG^{\pm}(\lambda)\} \qquad (1,28)$$

وفق المعادلة (*) والعلاقة (1,26)، يمكن التعبير عن $G(z)$ بدلالة التقطع $\tilde{G}(z)$:

$$\tilde{G}(z) \equiv G^{+}(\lambda) - G^{-}(\lambda)$$

$$G(r,r';z) = \sum_{n}\frac{\Phi_c(r)\Phi_c^{*}(r)}{z-\lambda}$$

$$G(r,r';z) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda \sum_{n}\frac{\delta(\lambda-\lambda_n)\Phi_n(r)\Phi_n^{*}}{z-\lambda}$$

وبالضرب والقسمة في نفس المرحلة من الجهة اليمنى للمعادلة الأخيرة في $\left(\frac{2\pi i}{2\pi i}\right)$ نجد:

$$G(r,r';z) = \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda \frac{\tilde{G}(r,\acute{r};\lambda)}{z-\lambda} \qquad (1,29)$$

لدينا من العلاقة (Δ):

$$\tilde{G}(r,r;\lambda) = -2\pi i\rho(r,\lambda)$$

نقوم بتعويضها في العلاقة (1,29) نجد:

$$G(r,r';z) = \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\acute{\lambda} \frac{\rho(r,\acute{\lambda})}{z-\acute{\lambda}} \qquad (1,30)$$

الفصل السادس:

نموذج فانو اندرسون . تطبيق في فيزياء النانو: النقل

في هذا الفصل نعتبر الحالة المهمة جدا حيث يمكن فصل الهاملتون H الى جزئين ، الأول هو H_0 وهو الهاملتون في حالة عدم وجود أي اضطراب بالإضافة إلى الجزء الثاني H_1 الذي يعبر عن الإضطراب.

$$H = H_0 + H_1 \qquad (2,1)$$

حيث يمكن الحصول على القيم الذاتية لـH_0 بسهولة ، أي هي مسألة معروفة الحل، لكن السؤال المطروح كيف يمكن إيجاد القيم الذاتية لـH_1 ومنه H وغالبا ما يتحقق ذلك من خلال اتخاذ ما يلي:

- إيجاد أولا دوال غرين $G_0(z)$ المقترنة مع H_0.
- استخراج دوال غرين G من خلال G_0 و H_1 المقترنة بالهاملتوني الكلي H.
- الحصول على معلومات حول القيم الذاتية من H من خلال G.

دوال غرين G_0 و G الموافقتين لـH_0 و H_1 على الترتيب هما:

$$G_0(z) = (z - H_0)^{-1} \qquad (2,2)$$

$$G(z) = (z - H)^{-1} \qquad (2,3)$$

باستخدام (2,1) و (2,2) يمكن إعادة كتابة (2,3) كالتالي:

$$\begin{aligned} G(z) &= (z - H_0 - H_1)^{-1} = \{(z - H_0)[1 - (z - H_0)^{-1}H_1]\}^{-1} \\ &= [1 - (z - H_0)^{-1}H_1]^{-1}(z - H_0)^{-1} \\ &= [1 - G_0(z)H_1]^{-1}G_0(z) \qquad (2,4) \end{aligned}$$

نقوم بنشر المؤثر $(1 - G_0H_1)^{-1}$ وفق سلاسل قوى كالتالي:

$$G = G_0 + G_0H_1G_0 + G_0H_1G_0H_1G_0 + \cdots \qquad (2,5)$$

ويمكن كتابتها أيضا بأشكال أخرى مختلفة كالتالي:

$$G = G_0 + G_0H_1(G_0 + G_0H_1G_0 + \cdots) = G_0 + G_0H_1G \qquad (2,6)$$
$$G = G_0 + (G_0 + G_0H_1G + \cdots)H_1G_0 = G_0 + GH_1G_0 \qquad (2,7)$$

وعند الكتابة في الفضاء (r) تصبح المعادلة (2,6) كمايلي:

$$G(r,r';z) = G_0(r,r';z) + \int dr_1dr_2\, G_0(r,r_1;z)H_1(r_1,r_2)G(r_2,r';z) \qquad (2,6)'$$

عادة ما يأخذ ${}_1(r_1,r_2)$ الشكل التالي: $\delta(r_1 - r_2)V(r_1)$ ، ومنه تصبح $(2,6)'$ كالتالي:

$$G(r,r';z) = G_0(r,r';z) + \int dr_1\, G_0(r,r_1;z)V(r_1)G(r_1,r';z) \qquad (2,8)$$

وتكتب المعادلة (2,6) في الفضاء (k) كما يلي:

$$G(k,k';z) = G_0(k,k';z) + \sum_{k_1k_2} G_0(k,k_1;z)H_1(k_1,k_2)G(k_2,k';z) \qquad (2,9)$$

مع الأخذ بعين الاعتبار أن:

$$\langle r|k\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}/\sqrt{\Omega}$$

$$\sum_k = \Omega \int \frac{dk}{(2\pi)^d} \qquad (2,10)$$

حيث يمثل (   ) البعد الفضائي ، كما أن العبارة (2,9) هي مجرد تحويل فوريه للعبارة $(2,6)'$.

مصفوفة التشتت— t :

تلعب المصفوفة — t دورا مهما في حسابات نظرية التشتت ، كما أنها مرتبطة مباشرة بكل من دالتي غرين بـG و $G_0(\mathrm{z})$.

تعرف المصفوفة $T(z)$ التي تتعلق بالهاملتون (H_0) و الاضطراب (H_1) و المتغير (z) كالتالي:

$$T(z) = H_1 G(z)(z - H_0) \qquad (2,11)$$

التعريف السابق ل $T(z)$ يكون صحيحا من أجل $z \neq \{E_n\}$ ، حيث $\{E_n\}$ هي مجموعة القيم الذاتية لـH . أما إذا كان $z = E$ حيث تكون (   ) في هذه الحالة تنتمي إلى مجموعة الطيف المستمر لـ(H) ندخل العبارة :

$$T^{\pm}(E) = H_1 G^{\pm}(E)(E - H_0) \qquad (2,12)$$

وإذا توافقت z مع أحد القيم الذاتية لـ H ولتكن هي E_n ، ففي هاته الحالة تكون $T(E_n)$ غير معرفة ، لأن $G(z)$ و بالتالي $T(z)$ سوف تملك قطب عند E_n. والعبارات السابقة صحيحة ما عدا الحالة النادرة ، حيث.

$$H_0|\Phi_n\rangle = E_n|\Phi_\mathrm{n}\rangle$$

في هذه الحالة يتم إلغاء قطب $G(z)$ عند E_n بواسطة الصفر الناتج من انعدام $(\mathrm{z} - \mathrm{H}_0)$ عند $\mathrm{z} = E_\mathrm{n}$ ، و بالتالي تصبح $T(z)$ تحليلية بجوار E_n . و العبارة التحليلية لـ$T(z)$ قريبة جدا من العبارة التحليلية $G(z)$، حيث يكون $T(z)$ تحليلي في المستوي المركب — z ويملك شذوذ على المحور الحقيقي ، وقيمة أقطاب $T(z)$ على المحور الحقيقي تعطي القيم ذاتية المتقطعة للهاملتوني -H والعكس صحيح . وباستخدام (2,5) و (2,11) نتحصل على عبارة النشر التالية:

$$T(z) = H_1 + H_1 G_0(z) H_1 + H_1 G_0(z) H_1 G_0(z) H_1 + \cdots \qquad (2,13)$$

الجمع في المعادلة السابقة يمكن التعبير عنه بعدة أشكال:

$$T(z) = H_1 + H_1(G_0 + G_0 H_1 G_0 + \cdots)H_1 = H_1 + H_1 G H_1 \qquad (2,14)$$
$$= H_1 + H_1 G_0(H_1 + H_1 G_0 H_1 + \cdots) = H_1 + H_1 G_0 T \qquad (2,15)$$
$$= H_1 + (H_1 + H_1 G_0 H_1 + \cdots)G_0 H_1 = H_1 + T G_0 H_1 \qquad (2,16)$$

بمساعدة T ، و المعادلة الأساسية (2,5) نعيد كتابتها كالتالي:

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z) T(z) G_0(z) \qquad (2,17)$$

مما يعني أن معرفة T تؤدي حتما أو تكافئ معرفة G . والمعادلات (2,15) و (2,16) في تمثيل r أو k عبارة عن معادلات خطية تكاملية غير متجانسة لمؤثر $T(r,r;z)$ أو $T(k,k;z)$ و تكتب على النحو التالي:

$$T(k,k';z) = H_1(k,k') + \sum_{k_1 k_2} H_1(k,k_1) G_0(k_1,k_2;z) T(k_2,k';z) \qquad (2,18)$$

$$H_1(k,k') \equiv \langle k|H_1|k'\rangle$$

$$= \frac{1}{\Omega}\int dr dr' exp(-ik.r + ik'.r')\, H_1(r,r') \qquad (2,19)$$

$$G_0(k_1,k_2;z) \equiv \langle k_1|G_0(z)|k_2\rangle$$

$$= \frac{1}{\Omega}\int dr_1 dr_2 exp(-ik_1.r_1 + ik_2.r_2)\, G_0(r_1, r_2; z) \qquad (2,20)$$

$$T(k, k'; z) \equiv \langle k|T(z)|k'\rangle$$

$$= \frac{1}{\Omega}\int drdr' exp(-ik.r + ik'.r')\, T(r, r'; z) \qquad (2,21)$$

فاذا كان هاملتون التفاعل هو $H_1(r, r') = \delta(r - r')V(r)$ فسوف يصبح في التمثيل k كالتالي:

$$H_1(k, k') = V(k - k')/\Omega \qquad (2,22)$$

حيث $V(q)$ هو تحويل فورييه للكمون $V(r)$:

$$V(q) = \int drV(r)e^{-iq.r} \qquad (2,23)$$

في الحالة الاعتيادية تتعلق الدالة $G_0(r_1, r_2)$ بالفرق $(r_1 - r_2)$ ونجد من العلاقة (2,20) أن:

$$G_0(k_1, k_2; z) = \delta_{k_1, k_2} G_0(k_1; z) \qquad (2,24)$$

ومن خلال هذه الشروط يمكن إعادة كتابة (2,18) كالتالي:

$$T'(k, k'; z) = V(k - k') + \int \frac{dk_1}{(2\pi)^d} V(k - k_1)G_0(k_1; z)T'(k_1, k'; z) \qquad (2,25)$$

حيث: $T'(, k'; z) = \Omega T(k, k'; z)$

وكما ذكرنا من قبل فإن $G(z)$ [المكافئة(z)]تسمح لنا بتحديد القيم الذاتية والدوال الذاتية المقابلة لـ H وتسمح لنا أيضا بالحصول على كثافة الحالات للجزء المستمر لـ H.

من أجل دراسة كيفية إيجاد الحالات الذاتية المرتبطة مع القيم الذاتية المستمرة لـ H ، والتي يمكن الحصول عليها باستخدام معادلة شرودينغر المستقلة عن الزمن: $(\mathrm{E} - \mathrm{H})\mathrm{I}\Psi\rangle = 0$ والتي يمكن كتابتها أيضا بالشكل:

$$(\mathrm{E} - H_0)\mathrm{I}\Psi\rangle = \mathrm{H}_1\mathrm{I}\Psi\rangle \qquad (2,26)$$

حيث ينتمي E إلى القيم المستمرة لطيف - H . ويمكن اعتبار المعادلة (2,26) كمعادلة غير متجانسة يكون حلها العام كالتالي:

$$\mathrm{I}\Psi^{\pm}\rangle = \mathrm{I}\Phi\rangle + G_0^{\pm}(\mathrm{E})\mathrm{H}_1\mathrm{I}\Psi^{\pm}\rangle \qquad (2,27)$$

حيث $\mathrm{I}\Phi\rangle$ هوالحل العام للمعادلة المتجانسة $(\mathrm{E} - H_0)\mathrm{I}\Phi\rangle = 0$.

المعادلة (2,27) هي معادلة تكاملية للحالة المجهولة $\mathrm{I}\Psi^{\pm}\rangle$ ، وبإستخدام التمثيل-r تصبح كالتالي:

$$\Psi^{\pm}(r) = \phi\Phi(r) + \int dr_1 dr_2 G_0^{\pm}(r, r_1; E)H_1(r_1, r_2)\Psi^{\pm}(r_2) \qquad (2,27)'$$

في الحالة المعتادة حيث $H(r_1, r_2) = \delta(r_1 - r_2)V(r_1)$ نجد:

$$\Psi^{\pm}(r) = \Phi(r) + \int dr_1 G_0^{\pm}(r, r_1; E)\mathrm{V}(r_1)\Psi^{\pm}(\mathrm{r}_1) \qquad (2,28)$$

إذا كانت (E) لاتنتمي إلى القيم المستمرة لطيف (H_0) فإن المعادلة (2,28) تكتب بالشكل التالي:

$$\Psi^{\pm}(r) = \int dr_1 G_0^{\pm}(r, r_1; E)\mathrm{V}(r_1)\Psi^{\pm}(\mathrm{r}_1) \qquad (2,29)$$

و بنشر العبارة (2,27) نجد.

$$\left|\mathrm{I}\Psi^{\pm}\right\rangle = |\phi\rangle + G_0^{\pm}H_1|\phi\rangle + G_0^{\pm}H_1G_0^{\pm}H_1|\phi\rangle + \cdots \qquad (2,30)$$

نستخدم العبارة (2,13) ضمنيا في عبارة (2,30) لتصبح متعلقة بـ ($T^{\pm}$) كالتالي:

$$\left|\mathrm{I}\Psi^{\pm}\right\rangle = |\phi\rangle + G_0^{\pm}T^{\pm}|\phi\rangle \qquad (2,31)$$

نضرب المعادلة (2,5) من اليمين أو اليسار في H_1 ونستخدم العبارة (2,13) فنجد:

$$H_1G = TG_0\ ;\ GH_1 = G_0T \qquad (2,32)$$

من العلاقة (2,32) تصبح العلاقة (2,31) كما يلي:

$$\left|\mathrm{I}\Psi^{\pm}\right\rangle = |\phi\rangle + G_0^{\pm}H_1|\phi\rangle \qquad (2,33)$$

المعادلات (2,31) مع (2,33) مهمة لأنها تحدد القيم الذاتية $\mathrm{I}\Psi^{\pm}\rangle$ بدلالة كل من ($T^{\pm}$) و ($G^{\pm}$).

بمقارنة (2,31) مع (2,27) ونفرض أن ($G^{\pm} \neq 0$) نجد أن:

$$T^{\pm}|\phi\rangle = H_1\left|\Psi^{\pm}\right\rangle \qquad (2,34)$$

الفصل السابع:

الالكترونيك من خلال النقطة الكمية المعدنية.

يعتبر نموذج الترابط الضيق من أبسط وأنجح النماذج التي يمكن استخدامها ، وخاصة عند استخدام دوال غرين ، وهو يعطى بالعبارة البسيطة التالية:

$$H = \sum_{l} |l\rangle\, \varepsilon_l \langle l| + \sum_{lm} |l\rangle\, V_{lm} \langle m|; V_{ll} = 0 \qquad (3,1)$$

حيث تمثل كل حالة $\langle l|$ شبه مدار ذري متمركز في الموقع l من الشبكة ، حيث l عبارة عن شعاع انسحاب داخل الشبكة ويملك تناظرها أيضا ، فمن أجل $(d = 3)$لدينا:

$$l = \sum_{\alpha=1}^{d} l_\alpha e_\alpha$$

e_α هي أشعة الوحدة الخاصة بالشبكة ، بينما تأخذl_α جميع القيم الصحيحة الممكنة.

إن اعتبار الهاملتوني الذي يمتلك دورية الشبكة ، سوف يسمح بظهور الطيف المستمر ، وليس المتقطع فقط،كما أننا لانعني الطيف المستمر للأجسام الحرة فقط ، بل تلك التي تظهر فيها عصابات الطاقة أيضا. وهذا النوع من الهاملتوني فعال جدا، من أجل فهم فيزياء الأجسام الصلبة المثالية ، كما أنه يشكل أساس فهم الخواص الالكترونية للأجسام الصلبة الحقيقية أو غير المثالية. لأن الحالة الغير المثالية يمكن اعتبارها اضطراب H_1 وتتم معالجتها باستخدام التقنيات التي تكلمنا عنها في الفصل السابق .

يمتلك هذا النوع من الهاملتوني دوال تمتلك دورية البلورة التي تتحرك فيها، وهي أمواج شبه مستوية ، تتعدل سعة اهتزازها على حسب موقع الالكترون في الشبكة، تسمى هذه الدوال بدوال بلوخ . حيث تنتشر هذه الأمواج في الوسط البلوري دون أي مقاومة ، تشبه انتشار أمواج الكترون حر، ولكنها غير متطابقة معها.

نحتاج في الغالب إلى دوال متمركزة حول نقاط الشبكة l وتعتبر دوال ونير مناسبة جدا لهذا الغرض والتي يرمز لها بالرمز$\mathrm{W}(r-l)$.و بالتالي فإن عناصر المصفوفة من هذا الفضاء الجزئي تعطى كالتالي:

$$\langle l|H|m\rangle = \varepsilon_l \delta_{lm} + V_{lm} \qquad (3,3)$$

نرمز للعناصر القطرية للمصفوفة بالرمز (ε_l) بينما نرمز للعناصر الغير قطرية بالرمز (V_{lm}) ، حيث $(V_{ll} = 0)$. كماالخاصية الدورية للهاملتون "أي ثابتة بالنسبة للتحويلات الخاصة بأشعة الشبكة " تعني أن:

$$\begin{cases} \varepsilon_l = \varepsilon_0 & (3,4)_a \\ ، & \\ V_{lm} = V_{l-m} & (3,4)_b \end{cases}$$

ينبغي التأكيد على أن الهاملتون الذي يصف الأجسام الصلبة الحقيقية يملك عنناصر مصفوفية خارج الفضاء الجزئي الذي تم انشاؤه بواسطة دوال ونير المتمركزة $\langle l|$ و بالنسبة لهذا الفضاء الجزئي فهو مرتبط بباقي فضاء هيلبرت ومع ذالك نحن نتقيد بهذا الفضاء الجزئي من أجل البساطة علاوة على ذلك، العصابات الناشئة عن المدارات الذرية تتداخل بشكل ضعيف مع جيرانها (أي مرتبطة بإحكام بذراتهم) يمكن وصفها بدقة عند استعمالنا لهذا الفضاء الجزئي . ولهذا السبب فإن الهاملتونيان(3,1) الذي يقتصر عمله داخل هذا الفضاء الجزئي المولد بواسطة الأساس $\{|l\rangle\}$. يعرف بنموذج الترابط الضيق (TBM) أو هاملتوني الترابط الضيق (TBH) ، أين يمسح(l) جميع مواقع الشبكة الدورية.

في الحالة العامة يمكن تقسيم الشبكة إلى شبكتين فرعيتين متداخلتين بحيث تحيط كل نقطة من النقاط الفرعية للشبكة (1) بنقاط تنتمي إلى الشبكة (2): في هذه الحالة يبقى الهاملتونيان ثابت تحت التحويلات بواسطة الأشعة من الشبكة (1) أو الشبكة (2).في هذه الحالة:

من أجل التبسيط نفترض أن$(l$ و$m)$ أقرب الجيران :

$$V_{lm} = \begin{cases} V & \text{الجوار الأقرب} \\ 0 & \text{بقية الحالات} \end{cases} \qquad \begin{matrix}(3,6)_a \\ (3,6)_b\end{matrix}$$

وبالتالي يتميز ب :

1.البنية الشبكية المرتبطة بالنقاط $\{l\}$.

2.القيم أو العناصر القطرية للمصفوفة $\{\varepsilon_l\}$ وهناك قيمة وحيدة مشتركة يمكن أن تأخذها الطاقة من خلال التعريف الصحيح لأصلها في حالة شبكتين دوريتين كما ذكرنا سابقا (3,4) ودلالة القيمة الفيزيائية تكمن في الفرق: $\{\varepsilon_1 - \varepsilon_2 > 0\}$.

3.تعتمد عناصر المصفوفة الغير فطرية V_{lm} في الحالة الدورية فقط على الفرق $(l-m)$.

4. إشارة (V) بالنسبة إلى المدارات (s) تكون سالبة أما بالنسبة للمدارات (p) أو (d) فإن الإشارة تعتمد على الاتجاه النسبي للمدارات مع احترام الخط الذي يضم الذرتين المتجاورتين.

إن الحد الأول من العلاقة (3,1) يصف إمكانية أسر الجسيم حول أي موقع (l) في الشبكة مع طاقة مساوية (ε_l) ، أما الحد الثاني فهو يصف إمكانية قفز الجسيم من الموقع (l) إلى الموقع (m).مع عنصر مصفوفة النقل V_{lm}.

3-2 دوال غرين من أجل النموذج :

تعطى دالة غرين في هذه الحالة كالتالي :

$$G(z) = \sum_k \frac{|k\rangle\langle k|}{z - E(k)} \qquad (3,7)$$

و العناصر المصفوفية $G(z)$ تكتب كالتالي:

$$G(l,m,z) = \langle l|G(z)|m\rangle = \sum \frac{\langle l|k\rangle\langle k|m\rangle}{z - E(k)}$$

$$= \frac{\Omega}{N(2\pi)^d} \int_{1Bz}^{k} dk \frac{e^{ik(l-m)}}{z - E(k)} \qquad (3,8)$$

حيث يرمز $1BZ$ إلى منطقة بريلوا الأولى ، وكحالة خاصة جميع العناصر المصفوفية القطرية متساوية فإن:

$$G(l,l,z) = \frac{\Omega}{N(2\pi)^d} \int_{1bz} \frac{dk}{z - E(k)} \qquad (3,9)$$

و من أجل قيم كبيرة لـ(z) تهمل $E(k)$ بحيث تصبح العلاقة الأخيرة كالتالي:

$$G(l,l,z) \xrightarrow[z\to\infty]{} \frac{1}{z} \frac{\Omega}{N(2\pi)^d} \int_{1bz} dk$$

حيث أن المقدار $\left\{\frac{(2\pi)^d}{\Omega_0}\right\}$ يساوي حجم منطقة بريلوان الأولى، كما أن $\left(\Omega_0 = {}^{\Omega}/_{N}\right)$ هو حجم الخلية الأولية للشبكة ومنه:

$$G(l,l,z) \xrightarrow[z\to\infty]{} \frac{1}{Z} \qquad (3,10)$$

يمكن أن يفهم هذا السلوك إذا عبرنا عن الدالة $G(l,l,z)$ بدلالة كثافة الحالات $\rho(E)$، كالتالي:

$$G(l,l,z) = \int \frac{\rho(E)}{z-E}dE \underset{z\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{z}\int \rho(E)dE \qquad (3,11)$$

وحتى تتطابق العلاقتين السابقتين ينبغي أن يكون لدينا $\int (E)dE = 1$ ومنه ينتج لدينا حالة واحدة لكل موقع.

3-3 تشتت شائبة وحيدة [نوع واحد]:

في هذه الحالة سنرى أن الترابط الضيق الهاملتوني سيتم كسر دوريته في موقع واحد فقط{الموقع l} وتصبح العناصر القطرية للمصفوفة ε_l تساوي $(\varepsilon_0 + \varepsilon)$ ،بينما في كل موقع آخر هناك قيمة غير مضطربة

(ε_0) ، هذه الوضعية تقريبا نعبر عنها فيزيائيا كاستبدال ذرة المضيف [ذرة المادة أو الوسط] في الموقع (l) بذرة أجنبية تملك مستوى طاقوي (ε) أكبر من المستوى الطاقوي المشترك للذرات المضيفة: وبالتالي يمكن كتابة H الخاص بهذه الحالة:

$$H = H_0 + H_1 \qquad (3,1)$$

H_0: الجزء الغير المضطرب ويكتب وفق النموذج كالتالي:

$$H_0 = \sum_m |m\rangle\, \varepsilon_0 \langle m| + V {\sum}'_{nm} |n\rangle\langle m| \qquad (3,1)'$$

(H_1) هو الاضطراب الناشئ عن الشائبة الوحيدة و التي من المفترض أن لا تؤثر على عناصر المصفوفة خارج القطر:

$$H_1 = |l\rangle\, \varepsilon\, \langle l| \qquad (3,3)'$$

دالة غرين (G_0) الموافقة لهاملتون الوسط (H_0) معروفة من خلال الحسابات السابقة ، بينما تبقى دالة غرين (G) الموافقة لـ $H = H_0 + H_1$ وبعد إيجاد (G) [وبالتكافؤ إيجاد T] يمكننا استخراج جميع المعلومات عن القيم الذاتية والدوال الذاتية لـ (H).

وجدنا فيما سبق أن:

$$G = G_0 + G_0H_1G_0 + G_0H_1G_0H_1G_0 + \cdots \qquad (3,4)'$$

كما يمكننا استخدام العبارة المكافئة:

$$T = H_1 + H_1G_0H_1 + H_1G_0H_1G_0H_1 + \cdots \qquad (3,5)'$$

من خلال $(3,3)'$ و $(3,5)'$ نجد:

$$\begin{aligned} T &= |l\rangle\varepsilon\langle l| + |l\rangle\varepsilon\langle l|G_0|l\rangle\varepsilon\langle l| + |l\rangle\varepsilon\langle l|G_0|l\rangle\varepsilon\langle l|G_0|l\rangle\varepsilon\langle l| + \cdots \\ &= |l\rangle\varepsilon\{1 + \varepsilon G_0(l,l) + [\varepsilon G_0(l,l)]^2 + \cdots\}\langle l| \\ &= |l\rangle \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon G_0(l,l)}\langle l| \end{aligned} \qquad (3,6)'$$

حيث :

$$G_0(l,l) \equiv \langle l|G_0|l\rangle \qquad (3,7)'$$

بعد الحصول على عبارة (T) يمكن التعبير عن (G) بسهولة:

$$G = G_0 + G_0|l\rangle \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon G_0(l,l)}\langle l|G_0 \qquad (3,8)'$$

كما رأينا سابقا فإن أقطاب $G(E)$ أو $T(E)$ تقابل القيم الذاتية المتقطعة لـ (H) ، وفي هذه الحالة نجد أن أقطاب (G)تعطى كما يلي:

$$G_0(l,l;Ep) = 1/\varepsilon \qquad (3,9)'$$

الأقطاب Ep يحب أن تكون خارج نطاق(H_0) وذلك بسبب أن داخل نطاق $\mathrm{G}_0(,l\,;E)$ الجزء التخيلي لا يساوي الصفر وعليه تكون$(3{,}9)'$ غير معرفة وبالتالي نستخدم العلاقة $(3{,}8)'$لإيجاد رواسب $G(n,m)$ لدى القطب (E_p) كالتالي:

$$Res\{G(n,m;E_p)\} = -\frac{G_0(n,l;E_p)G_0(l,m;E_p)}{G_0'(l,l;E_p)} \qquad (3{,}10)'$$

حيث $_0'(l,l;E_p)$ عبارة عن مشتق $G_0(l,l;Ep)$.

يعرف الانحلال(f_p) الخاص بالمستوي (E_p) باستخدام كل من$(3{,}10)'$و (3 ,6) كالتالي:

$$f_p = Tr\left\{Res\{G(E_p)\}\right\} = \sum_n Res\,\{(n,m;E_p)\}$$

$$= -\frac{1}{G_0'(l,l)}\sum_n G_0(n,l)G_0(l,n)$$

$$= -\frac{\langle l|(E_p-H_0)^{-2}|l\rangle}{G_0{}'(l,l)} = 1 \qquad (3{,}11)'$$

الآن نعرف الدالة الذاتية المنفصلة $\langle b|$كالتالي:

$$\langle n|b)(b|m\rangle) = Res\{G(n,m;E_p)\} \qquad (3{,}12)'$$

من خلال $(3{,}10)'$ و $(3{,}12)'$ نجد أن:

$$|b\rangle = \frac{G_0(E_p)}{\sqrt{-G_0'(l,l;E_p)}}|l\rangle \qquad (3{,}13)'$$

أو بالشكل التالي:

$$|b\rangle = \sum_n b_n|n\rangle \qquad (3{,}14)'$$

حيث

$$b_n = \frac{G_0(n,l,E_p)}{\sqrt{-G_0'(l,l,E_p)}} \qquad (3{,}15)'$$

هنا $\mathrm{G}_0'(l,l,E_p)$ دوما سالبة من أجل (E) لا تنتمي إلى الطيف كما في العلاقة (3,31)

لقد وجدنا فيما سبق أن $\mathrm{G}_0(\mathrm{n,l,E})$ يضمحل تدريجيا مع المسافة $|n-l|\ = R_{nl}$ أي:

$$G_0(n,l,E) \xrightarrow[R_{nl}\to\infty]{} const\ \times exp[-a(E)R_{nl}] \qquad (3{,}16)'$$

حيث: $a(E) > 0$

كل من العلاقتين $(3{,}14)'$ و$(3{,}15)'$تعني أن الدالة الذاتية $\langle b|$ هي عبارة عن ترجمة لمحيط الشائبة الواقعة في (l) وتتحلل بعيدا عن هذا الموقع متبعة الشكل الأسي $[-a(f_p/R_{ln})]exp$. وتعبر الكمية $a^{-1}(E_p)$ عن الامتداد الخطي للدالة الذاتية. و تعطى $\mathrm{a(E)}$ في حالة البعد الواحد كالتالي:

$$a(E) = -\frac{1}{a}\ln\left[\frac{|E-\ \varepsilon_0|}{B} - \sqrt{\frac{(E-\varepsilon_0)^2}{B^2}-1}\right];|E-\ \varepsilon_0| > B \qquad (3{,}17)'$$

سنرى لآن تأثير الاضطراب في حالة الطيف المستمر لـلهاملتوني (H_0).حيث تكون E داخل عصابة الطاقة.

تعطى كثافة الحالات عند الموقع (n)بالعبارة :

$$\rho(n,E) = -Im\,\{\langle n|G^{+}(E)|n\rangle\}\,/\,\pi$$

نستخدم الآن العلاقة′(3,8) تصبح:

$$\rho(n,E) = \rho_0(n,E) - \frac{1}{\pi}\,Im\left\{\frac{\varepsilon\langle n|G_0^{+}(E)|l\rangle\langle l|G_0^{+}(E)|n\rangle}{1-\varepsilon G_0^{+}(l,l;E)}\right\} \qquad (3,18)'$$

بعد تبسيط على العلاقة الأخيرة تصبح كثافة الحالات عند الموقع (l) الخاص بالشائبة كالتالي:

$$\rho(l;E) = \frac{\rho_0(l,E)}{|1-\ \varepsilon G_0^{\pm}(l,l;E)|^2} \qquad (3,19)'$$

نأخذ بعين الاعتبار أن:

$$G_0(E)\xrightarrow[E\to\infty]{}1/E$$

وكذلك من ′(3,8) نجد أن:

$$G(E)\xrightarrow[E\to\infty]{}1/E$$

إذن : $G(n,n;E) = \langle n|G(E)|n\rangle \xrightarrow[E\to\infty]{} 1/E$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\rho(n,E)dE = -\frac{1}{\pi}\,Im\left\{\int_{-\infty}^{+\infty}G^{+}(n,n;E)dE\right\} = 1 \qquad (3,20)'$$

المعادلة ′(3,18)تشير إلى أن كثافة الحالات (DOS) هي دالة مستمرة غير معدومة بدلالة (E) داخل العصابة الغير مضطربة - مع استثناء قد يكون في بعض المناطق المعزولة. وتكون عصابات الطاقة المستمرة الخاصة بالهاملتوني H متوافقة مع (H_0) ، وعلى عكس $\rho_0(n,E)$ ، تظهر الكمية $\rho(n,E)$ شذوذ (δ) خارج عصابة الطاقة عند الطاقة (E_p) لتصبح عبارتها كالتالي:

$$\rho(n,E) = \frac{G_0(n,l;E_p)G_0(l,n;E_p)}{-G_0'(l,l;E_p)}\,\delta(E-E_p)$$

$$= |b_n|^2\delta(E-E_p)\ ;\ E\approx E_p \qquad (3,21)'$$

للحصول على النتيجة الأخيرة نستعمل العلاقة ′(3,15). و يمكن كتابة ′(3,20) كالتالي:

$$\int_{E_l}^{E_u}\rho(n,E)dE + \sum_{p}|b_n^2| = 1 \qquad (3,22)'$$

الجمع هنا على جميع الأقطاب (G).

E_u : الطاقة العليا للعصابة

E_l : الطاقة السفلى للعصابة

إذا تم الجمع على كل المواقع (n) والأخذ بعين الاعتبار أن عصابة الدوال الذاتية منظمة فإنه يمكن إيجاد:

$$\int_{E_l}^{E_u}N(E)dE + P = N \qquad (3,23)'$$

$$\int_{E_l}^{E_u}N(E)dE + P = N$$

(حيث: $P = \sum_p$العدد الكلي للأقطاب)

$N(E)$: كثافة الحالات الكلية على النطاق المستمر.

العلاقة $(3,23)'$ تعني أنه يمكن تشكيل مستويات منفصلة على حساب الطيف المستمر.

تعطى الحالات الذاتية في النطاق أو داخل النطاق حسب نوع الانتشار وهنا في هذه الحالة يمكن كتابتها من الشكل التالي:

$$|\Psi_E\rangle = |k\rangle + G_0^+(E)T^+(E)|K\rangle \qquad (3,24)'$$

$|K\rangle$: هي موجة بلوخ كما رأينا في السابق

و من خلال $(3,6)'$ و $(3,24)'$ وبعد التبسيط الجبري بعد الضرب على اليسار لـ $|\Psi_E\rangle$ في $\langle n|$ نجد:

$$\langle n|\Psi_E\rangle = \langle n|k\rangle + \frac{\langle n|G_0^+(E)|l\rangle\varepsilon\langle l|k\rangle}{1 - \varepsilon G_0^+(l,l,E)} \qquad (3,25)'$$

وباستبدال $|n\rangle$ بـ موقع الشائبة $|l\rangle$ نجد:

$$\langle l|\Psi_E\rangle = \frac{\langle l|k\rangle}{1 - \varepsilon G_0^+(l,l,E)} \qquad (3,26)'$$

4-3 شائبتين "نوعين مختلفين":

في هذا الجزء من الفصل نقوم بدراسة نظام يتكون من شائبتين "مخلفتين" وهو جزء لا يتجزأ من نموذج الترابط الضيق الدوري (TBM) وهذه الطريقة تسمح بفهم تقريبي لهذا للجمل غير المنظمة والتي تحتوي على تركيز ضعيف من الشوائب. وسوف نهتم على وجه الخصوص بمتوسط كثافة الحالات (DOS) والتي تعتمد أساسا على متوسط دوال غرين $\langle G\rangle$.

حالة نظام يحوي نوعين:

نعتبر في هذه الحالة نوعين من الشوائب قد أدخلا إلى موقعين مختلفين من الشبكة (l) و(m) ، الهاملتون الموافق لهذا النظام يكون كالتالي:

$$H = H_0 + H_l + H_m$$

حيث: H_0:هاملتون الوسط [في عدم وجود الشائبتين]، وأيضا:

$$\begin{cases} H_l = |l\rangle\varepsilon\langle l| & (3,2)'' \\ H_m = |m\rangle\varepsilon'\langle m| & (3,3)'' \end{cases}$$

و نعرف أيضا:

$$\begin{cases} H_{0l} = H_0 + H_l & (3,4)'' \\ H_{0m} = H_0 + H_m & (3,5)'' \end{cases}$$

إذن:

$$H = H_{0l} + H_m = H_{0m} + H_l \qquad (3,6)''$$

إن دوال غرين G_0، G_{0l}، G_{0m}،و G والتي توافق على الترتيب H_0، H_{0l}، H_{0m}،و H دورها التبسيط و الدقة.

كما رأينا فيما سابقا أن:

$$G_{0l} = G_0 + G_0 T_l G_0 \qquad (3,7)''$$

يعطى المؤثر (T_l) و الذي يتعلق بكل من (H_0) و (H_l) كالتالي:

$$T_l = |l\rangle t_l \langle l|; \qquad t_l = \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon G_0(l,l)} \qquad (3,8)''$$

مع الأخذ بعين الاعتبار أن (H_{0l}) هو الجزء غير المضطرب و الاضطراب هو (H_m)نعرف العلاقة العامة لـG:

$$G = G_{0l} + G_{0l} H_m G_{0l} + G_{0l} H_m G_{0l} H_m G_{0l} + \cdots \qquad (3,9)''$$

هذا الجمع الأخير يمكن ضبطه أكثر من خلال إعطاء عبارة أبسط لـ$(\quad _m)$ كالتالي:

$$G = G_{0l} + G_{0l}|m\rangle \frac{\varepsilon'}{1 - \varepsilon' G_{0l}(m,m)} \langle m|G_{0l} \qquad (3,10)''$$

بتعويض"(3,7) و "(3,8) في عبارة "(3,10).

$$G = G_0 + G_0 T G_0 \qquad (3,11)''$$

ومع التبسيط بـ(H_0) و $(H_l + H_m)$:

$$T = f_{ml}(T_l + T_m + T_l G_0 T_m + T_m G_0 T_l)$$

$$= f_{ml}[|l\rangle t_l \langle l| + |m\rangle t_m \langle m| + |l\rangle t_l G_0(l,m) t_m \langle m| + |m\rangle t_m G_0(m,l) t_l \langle l|] \qquad (3,12)''$$

حيث:

$$t_m = \frac{\varepsilon'}{1 - \varepsilon' G_0(m,m)}; f_{ml} = \frac{1}{1 - t_m t_l G_0(m,l) G_0(l,m)} \qquad (3,13)''$$

الآن الترجمة الكلية لهذا المخطط هي كالتالي:

$$G(j,i) = G_0(j,i) + \langle j|G_0(T_l + T_m + T_l G_0 T_m + T_m G_0 T_l G_0)|i\rangle f_{ml} \qquad (3,15)''$$

.

يعطى المؤثر الكلي (T) الخاص بالشائبتين (l) و (m) أو بمراكز التشتت كالتالي:

$$T = T_l + T_m + O(T_l T_m) \qquad (3,16)''$$

هناك حالة خاصة: $T = T_l + T_m$

حيث: $|l - m| \to \infty$ في هذه الحالة يكون التشتت عبارة عن موجة منبعثة من مركزي التشتت (l) و (m) بغض النظر عن مدى تباعد الشائبتين عن بعض. من المهم دراسة مسألة المستويات المنفصلة في حالة اثنين من الذرات الشائبة والأكثر ملائمة للعثور على هذه المستويات هو من خلال إيجاد أقطاب G المعطاة في العلاقة "(3,10).هذه الأقطاب هي حلول للمعادلة:

$$1 - \varepsilon' G_{0l}(m,m) = 0 \qquad (3,17)''$$

يمكن الحصول على المعادلة "(3,12) في خطوة واحدة من خلال النظر لعبارة الاضطراب

$H_1 \equiv H_p + H_m$ وبتطبيق العلاقة (2,13) نجد إذن ومن خلال مؤثر الوحدة:

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \sum_i |i\rangle\langle i|$$

$$T = H_1 + H_1 \sum_n |n\rangle\langle n|G_0 \sum_i |i\rangle\langle i|H_1 + \cdots \qquad (3,21)''$$

$$T = H_1 + H_1 \sum_n |n\rangle\langle n|G_0 \sum_i |i\rangle\langle i|H_1 + \cdots$$

من الجمع على جميع المواقع نحن بحاجة للحفاظ على عبارتين فقط هما: $|l\rangle\langle l| + |m\rangle\langle m|$ و لأن جميع العبارات تعطي الصفر وذلك نتيجة لشكل الهاملتون $H_1 = |l\rangle\varepsilon\langle l| + |m\rangle\varepsilon'\langle m|$ والآن يمكن كتابة :

$$|l\rangle\langle l| + |m\rangle\langle m| = (|l\rangle, |m\rangle)\begin{pmatrix}\langle l|\\ \langle m|\end{pmatrix} \qquad (3,22)''$$

نضع $|\alpha\rangle$ المصفوفة $(|l\rangle, |m\rangle)$ وكذلك $\langle\alpha|$ المصفوفة العكسية $\begin{pmatrix}\langle l|\\ \langle m|\end{pmatrix}$ يمكن كتابة "(3,21) كالتالي:

$$T = H_1 + H_1|\alpha\rangle\langle\alpha|G_0|\alpha\rangle\langle\alpha|H_1 + H_1|\alpha\rangle\langle\alpha|G_0|\alpha\rangle\langle\alpha|H_1|\alpha\rangle\langle\alpha|G_0|\alpha\rangle\cdots \qquad (3,23)''$$

الكمية $\langle\alpha|_0|\alpha\rangle$ هي عبارة عن مصفوفة (2×2)

$$\langle\alpha|G_0|\alpha\rangle = \begin{bmatrix} G_0(l,l)G_0(l,m)\\ G_0(m,l)G_0(m,m)\end{bmatrix} \qquad (3,24)''$$

ومنه:

$$\langle\alpha|H_1|\alpha\rangle = \begin{bmatrix}\varepsilon & 0\\ 0 & \varepsilon'\end{bmatrix} \qquad (3,25)''$$

و:

$$\langle\alpha|T|\alpha\rangle = \begin{bmatrix}\langle l|T|l\rangle\langle l|T|m\rangle\\ \langle m|T|l\rangle\langle m|T|m\rangle\end{bmatrix} \qquad (3,26)''$$

ومن خلال "(3,23) نجد أن:

$$\langle\alpha|T|\alpha\rangle = \langle\alpha|H_1|\alpha\rangle(1 + \langle\alpha|G_0|\alpha\rangle\langle\alpha|H_1|\alpha\rangle + \cdots)$$

$$= \langle\alpha|H_1|\alpha\rangle(1 - \langle\alpha|G_0|\alpha\rangle\langle\alpha|H_1|\alpha\rangle + \cdots)^{-1} \qquad (3,27)''$$

حساب معكوس المصفوفة (2×2) لـ $1 - \langle\alpha|G_0|\alpha\rangle\langle\alpha|H_1|k\rangle$ يمكن إيجاد بسهولة أن المعادلة $(3,27)''$ أن تساوي المعادلة"(3,12).

في حالة الشوائب: إذا كان عدد الشوائب كبيرا جدا تصبح الحسابات مملة في هذه الحالة من المفيد النظر في طريقة ثالثة للحساب [حساب مجموع المصفوفة]T كتالي:

$$H_1 = \sum_m H_m \qquad (3,28)''$$

يكون الجزء المضطرب وهو الكمية($_m$) يأخذ الشكل التالي:

$$H_m = |m\rangle \sum\nolimits_m' \langle m| \qquad (3,29)''$$

يمتد الجمع على جميع المواقع ( )،المواقع التي تشغلها الذرات المضيفة تملك $(\varepsilon_m' = 0)$ ونعرف أيضا أن:

$T_m = |m\rangle t_m \langle m|$ المرتبط بالجزء الغير المضطرب لهاملتون الوسط (H_0) وكذلك الإضطراب (H_m) وجدنا سابقا أن:

$$t_m = \frac{\varepsilon_m'}{(1 - \varepsilon_m' G_0(m,m)}$$

إذا كان:(T) هو مجموعة المصفوفة (t) المرتبط بالجزء الغير المضطرب H_0 والجزء المضطرب H_1 فإن:

$$T = H_2 + H_1 G_0 T = H_1(1 + G_0 T)$$

$$= \sum_m H_m(1 + G_0 T) = \sum_m Q_m \qquad (3,30)''$$

أين: $Q_m = H_m(1 + G_0 T)$

من "(3,30) نجد أيضاً أن : $T = \sum_n Q_n$ ومنه: $Q_m = H_m(1 + G_0 \sum_n Q_n)$ أو:

$$(1 - H_m G_0) Q_m = H_m(1 + G_0 \sum_{n \neq m} Q_n) \qquad (3,32)''$$

أو:

$$Q_m = (1 - H_m G_0)^{-1} H_m(1 + G_0 \sum_{n \neq m} Q_n) \qquad (3,33)''$$

الكمية $_0)^{-1} H_m$ $_m$ $-$ 1)تساوي T_m ومنه "(3,33) تصبح:

$$Q_m = T_m \left(1 + G_0 \sum_{n \neq m} Q_n\right) \qquad (3,34)''$$

الفصل الثامن:

دوال غرين في درجات الحرارة غير المعدومة

ان عملية استخدام دالة غرين في شكلها المعتاد ، حيث يكون الزمن حقيقي صالح فقط من أجل درجات الحرارة المنخفضة جدا ، ولكن عند الانتقال الى درجات الحرارة الأعلى يصبح النشر متباعد ، وبالتالي لابد من ادخال مايسمى **بالزمن التخيلي** حيث نستبدل تسمية دالة غرين المجردة ، باسم دالة غرين ذات الزمن التخيلي $\tau = it$ حيث نتعامل معه على أنه زمن حقيقي ، وبالتالي ينبغي أن نعيد صياغة شكل هايزنبرغ ليتوافق مع هذا التعريف الجديد . فاذا كان A مؤثر فينبغي أن نكتبه بهذا الشكل:

$$A(\tau) = e^{\tilde{H}\frac{\tau}{\hbar}} A e^{-\tilde{H}\frac{\tau}{\hbar}}$$

حيث :

$$\tilde{H} = \tilde{H}_0 + V$$

ليكن $A(C_{k\sigma}, C_{k\sigma}^{+})$ و $B(C_{k\sigma}, C_{k\sigma}^{+})$ مؤثرين يتعلقان بمؤثرات الانشاء و الهدم الخاصين بالفرميونات أو البوزونات ، تعرف دالة الترابط ذات الزمن التخيلي أو دالة الترابط ل Matsubara كمايلي :

$$C_{AB}^{T}(\tau, \acute{\tau}) = -\langle T A(\tau) B(\acute{\tau}) \rangle$$

T هو مؤثر الترتيب الزمني الذي يعرف عمله بالعبارة التالية :

$$T A(\tau) B(\acute{\tau}) = \begin{cases} A(\tau) B(\acute{\tau}) & if \quad \tau > \acute{\tau} \\ \pm B(\acute{\tau}) A(\tau) & if \quad \tau < \acute{\tau} \end{cases}$$

ويمكن أن نجمع الشرطين السابقين معا باستخدام دالة هيفيسايد Θ كمايلي :

$$C_{AB}^{T}(\tau, \acute{\tau}) = -\Theta(\tau - \acute{\tau}) \langle A(\tau) B(\acute{\tau}) \rangle \mp \Theta(\acute{\tau} - \tau) \langle B(\acute{\tau}) A(\tau) \rangle$$

حيث :

$$\Theta(\tau - \acute{\tau}) = \begin{cases} 0 & \tau > \acute{\tau} \\ 1 & \tau < \acute{\tau} \end{cases}$$

والآن بفرض أن $\tau > 0$ ، فدالة ماتسبيارا تصبح بالشكل التالي :

$$C_{AB}^{T}(\tau, \acute{\tau}) = -\langle A(\tau) B(0) \rangle$$

$$C_{AB}^{T}(\tau > 0) = -Z_G^{-1} tr\left[e^{-\beta \tilde{H}} e^{\tilde{H}\frac{\tau}{\hbar}} A e^{-\tilde{H}\frac{\tau}{\hbar}} B \right]$$

حيث $A(0)$ و $B(0)$ هما عبارة عن A و B على الترتيب ، و الآن باستخدام خواص tr نتبع الخطوات التالية :

- نقوم بنقل المؤثر B الى أقصى اليمين.
- نقوم بادخال العبارة $e^{\beta \tilde{H}} e^{-\beta \tilde{H}} = 1$ في اقصى اليمين.
- نقوم بنقل المؤثر $e^{-\beta \tilde{H}}$ الى أقصى اليسار.

وفي النهاية سوف نتحصل على :

$$C_{AB}^{T}(\tau > 0) = -Z_G^{-1} tr\left[e^{-\beta \tilde{H}} B e^{\tilde{H}\frac{(\tau - \beta\hbar)}{\hbar}} A e^{-\tilde{H}\frac{(\tau - \beta\hbar)}{\hbar}} \right]$$

$$C_{AB}^{T}(\tau > 0) = -Z_G^{-1} tr\left[e^{-\beta \tilde{H}} B(0) A(\tau - \beta\hbar) \right]$$

$$C_{AB}^{T}(\tau > 0) = -\langle B(0) A(\tau - \beta\hbar) \rangle$$

باعتبار τ يتغير في المجال $-\beta\hbar$ الى $+\beta\hbar$ ، وبما أن $\tau > 0$ فسوف يكون $\tau - \beta\hbar < 0$ ، وبالمقارنة مع العلاقة *نجد:

$$C_{AB}^T(\tau) = \pm C_{AB}^T(\tau - \beta\hbar)$$

وبما أن $-\beta\hbar < \tau < \beta\hbar$ فسوف نستطيع تفكيك دالة الترابط $C_{AB}^T(\tau)$ الى سلسلة **فورييه** كمايلي :

$$C_{AB}^T(\tau) = \frac{1}{\beta\hbar}\sum_n C_{AB}^T(\omega_n)e^{-i\omega_n\tau}$$

ان النتيجة السابقة تستوجب أن تحقق معاملات النشر العلاقة التالية :

$$e^{-i\omega_n\tau} = \pm e^{-i\omega_n\tau(\tau-\beta\hbar)}$$

وهذا يعني أن

$$\omega_n = \begin{cases} 2n\pi/\beta\hbar & \text{بوزونات} \\ \text{أو} & \text{أو} \\ 2(n+1)\pi/\beta\hbar & \text{فرميونات} \end{cases}$$

يمكننا أن نجد معاملات النشر ω_n بسهولة ، وذلك بضرب طرفي المعادلة * في الدالة الأسية $e^{i\omega_m\tau}$ و المكاملة من $-\beta\hbar$ الى $\beta\hbar$ كمايلي :

$$\int_{-\beta\hbar}^{\beta\hbar} e^{i\omega_m\tau}C_{AB}^T(\tau)d\tau = \frac{1}{\beta\hbar}\sum_n C_{AB}^T(\omega_n)\int_{-\beta\hbar}^{\beta\hbar} e^{i(\omega_m-\omega_n)\tau}d\tau$$

وبما أن

$$\omega_m - \omega_n = 2(m-n)2\pi/\beta\hbar$$

فالتكامل الموجود في المجموع السابق سوف يكون معدوم الا في حالة $m = n$ ، حيث يصبح مساويا $2\beta\hbar$ وبالتالي :

$$C_{AB}^T(\omega_n) = \frac{1}{2}\int_{-\beta\hbar}^{\beta\hbar} e^{i\omega_m\tau}C_{AB}^T(\tau)d\tau$$

وهي صحيحة لكل من البوزونات و الفرميونات ، ويمكننا كتابة التكامل بالشكل التالي :

$$C_{AB}^T(\omega_n) = \frac{1}{2}\int_{-\beta\hbar}^{0} e^{i\omega_m\tau}C_{AB}^T(\tau)d\tau + \frac{1}{2}\int_{0}^{\beta\hbar} e^{i\omega_m\tau}C_{AB}^T(\tau)d\tau$$

وباستخدام الخاصية الدورية التي توصلنا اليها في المعادلة * نجد:

$$C_{AB}^T(\omega_n) = \int_{0}^{\beta\hbar} e^{i\omega_m\tau}C_{AB}^T(\tau)d\tau$$

دالة غرين التخيلية :

تعرف دالة **غرين التخيلية** أو دالة **ماتسوبارا** بدلالة الزمن التخيلي بالشكل التالي :

$$g(r\sigma\tau, \acute{r}\acute{\sigma}\acute{\tau}) = -\langle T\Psi_\sigma(r\tau)\Psi_{\acute{\sigma}}^+(\acute{r}\acute{\tau})\rangle$$

حيث :

$$\Psi_\sigma(r\tau) = e^{\tilde{H}\frac{\tau}{\hbar}}\Psi_\sigma(r)e^{-\tilde{H}\frac{\tau}{\hbar}}$$

ومن تعريف مؤثر الترتيب الزمني T نجد أن العبارة السابقة لدالة غرين يمكن اعادة كتابتها بالشكل التالي :

$$g(r\sigma\tau, \acute{r}\acute{\sigma}\acute{\tau}) = \begin{cases} -\langle\Psi_\sigma(r\tau)\Psi^+_{\acute{\sigma}}(\acute{r}\acute{\tau})\rangle & \tau > \acute{r} \\ \mp\langle\Psi^+_{\acute{\sigma}}(\acute{r}\acute{\tau})\Psi_\sigma(r\tau)\rangle & \tau < \acute{r} \end{cases}$$

حيث تعبر اشارة **ناقص في** هذه الكتابة على **البوزونات** ، بينما تعبر اشارة **زائد** على **الفرميونات** . وتفسير دالة غرين من أجل τ **أكبر** من $\acute{\tau}$ هو أنها تعبر عن سعة احتمال أن نجد جسيم مضاف يمتلك مسقط سبين σ في اللحظة الزمنية τ عند الموضع r . اذا كان جسيم يمتلك مسقط سبين $\acute{\sigma}$ كان قد أضيف للجملة الفيزيائية في اللحظة الزمنية $\acute{\tau}$ عند الموضع $\acute{r}$.

بينما تفسيره دالة غرين من أجل τ **أصغر**من $\acute{\tau}$ هو أنها تعبر عن سعة احتمال أن ينقص جسيم يمتلك مسقط سبين $\acute{\sigma}$ في اللحظة الزمنية $\acute{\tau}$ عند الموضع $\acute{r}$. اذا كان قد نزعنا من النظام جسيم يمتلك مسقط سبين σ في اللحظة الزمنية τ عند الموضع r .

ملاحظات:

1- عند غياب التفاعل مع مؤثر خارجي يسبب **انقلاب** في اتجاه السبين ، يمكننا كتابة نفس الترميز في العلاقة السابقة σ.
2- عندما يكون $\tilde{H}$ مستقل عن السبين فان دالة غرين $g(r\sigma\tau, \acute{r}\acute{\sigma}\acute{\tau})$ سوف تكون متعلقة بالفترة الزمنية $(\tau - \acute{\tau})$ فقط.
3- في حالة الجمل الانسحابية نجد أن دالة غرين تتعلق بالمسافة $(r - \acute{r})$ وليس بالموقع .

التمثيل الطيفي لدالة غرين التخيلية :

من أجل ايجاد عبارة $g(k\sigma, \omega_n)$ نستعمل تحويل فورييه بالشكل التالي :

$$g(k\sigma, \omega_n) = \int_0^{\beta\hbar} g(k\sigma, \tau)e^{i\omega_m\tau}d\tau$$

$$g(k\sigma, \omega_n) = \int_0^{\beta\hbar} g^>(k\sigma, \tau)e^{i\omega_m\tau}d\tau$$

حيث :

$$g^>(k\sigma, \tau) = g(k\sigma, \tau > 0) == -Z_G^{-1}tr\left[e^{-\beta\tilde{H}}TC_{k\sigma}(\tau)C^+_{k\sigma}(0)\right]$$

$$= -Z_G^{-1}tr\left[e^{-\beta\tilde{H}}e^{\tilde{H}\frac{\tau}{\hbar}}C_{k\sigma}e^{-\tilde{H}\frac{\tau}{\hbar}}C^+_{k\sigma}(0)\right]$$

$$= \sum_{n,m}\left\langle n\middle|e^{-\beta\tilde{H}}e^{\tilde{H}\frac{\tau}{\hbar}}C_{k\sigma}\middle|m\right\rangle\left\langle m\middle|e^{-\tilde{H}\frac{\tau}{\hbar}}C^+_{k\sigma}\middle|n\right\rangle$$

$$= \sum_{n,m} e^{-\beta\tilde{E}_n}e^{\frac{-(\tilde{E}_m-\tilde{E}_n)\tau}{\hbar}}\langle n|C_{k\sigma}|m\rangle\langle m|C^+_{k\sigma}|n\rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} P^>(k\sigma, \epsilon)e^{-\epsilon\tau}\frac{d\in}{2\pi}$$

حيث :

$$P^{>}(k\sigma,\epsilon) = -2\pi Z_G^{-1}\sum_{n,m} e^{-\beta\tilde{E}_n}|\langle m|C_{k\sigma}^{+}|n\rangle|^2\delta\left(\in -\frac{1}{\hbar}(\tilde{E}_m-\tilde{E}_n)\right)$$

يمكننا الأن استخدام تحويل فورييه من أجل الحصول على $g(k\sigma,\omega_n)$ كمايلي :

$$g(k\sigma,\omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} P^{>}(k\sigma,\epsilon)\frac{d\in}{2\pi}\int_0^{\beta\hbar} e^{\frac{-(i\omega_n-\in)\tau}{\hbar}}d\tau$$

$$g(k\sigma,\omega_n) = -\int_{-\infty}^{+\infty} P^{>}(k\sigma,\epsilon)\frac{\left(1\mp e^{\frac{-\beta\hbar\in\tau}{\hbar}}\right)}{i\omega_n-\in}\frac{d\in}{2\pi}$$

$$g(k\sigma,\omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{A(k\sigma,\epsilon)}{i\omega_n-\in}\frac{d\in}{2\pi}$$

حيث $A(k\sigma,\epsilon)$ هي دالة كثافة الطيف وتكتب بالعبارة التالية :

$$A(k\sigma,\epsilon) = -P^{>}(k\sigma,\epsilon)\left(1\mp e^{\frac{-\beta\hbar\in\tau}{\hbar}}\right)$$

قد ستنتج أنه في حالة كون عرف تمثيل التفاعل للمؤثر A بالعبارة التالية ويرمز له بالرمز $\hat{A}(\tau)$ لتمييزه عن تمثيل هايزنبرغ $A(\tau)$:

$$\hat{A}(\tau) = e^{\tilde{H}_0\frac{\tau}{\hbar}}Ae^{-\tilde{H}_0\frac{\tau}{\hbar}}$$

بتطبيق التعريف السابق على جداء مؤثرين A و B نجد العبارة التالية :

$$A(\tau)B(\acute{\tau}) = e^{\tilde{H}\frac{\tau}{\hbar}}Ae^{-\tilde{H}\frac{\tau}{\hbar}}e^{\tilde{H}\frac{\acute{\tau}}{\hbar}}Be^{-\tilde{H}\frac{\acute{\tau}}{\hbar}}$$

$$A(\tau)B(\acute{\tau}) = e^{\tilde{H}\frac{\tau}{\hbar}}\left(e^{\tilde{H}_0\frac{\tau}{\hbar}}\hat{A}(\tau)e^{-\tilde{H}_0\frac{\tau}{\hbar}}\right)e^{-\tilde{H}\frac{\tau}{\hbar}}e^{\tilde{H}\frac{\acute{\tau}}{\hbar}}\left(e^{\tilde{H}_0\frac{\acute{\tau}}{\hbar}}\hat{B}(\acute{\tau})e^{-\tilde{H}_0\frac{\acute{\tau}}{\hbar}}\right)e^{-\tilde{H}\frac{\acute{\tau}}{\hbar}}$$

نعرف المؤثر $\hat{U}$ بالعبارة التالية :

$$\hat{U}(\tau,\acute{\tau}) = e^{\tilde{H}_0\frac{\tau}{\hbar}}e^{-\tilde{H}\frac{(\tau-\acute{\tau})}{\hbar}}e^{-\tilde{H}_0\frac{\acute{\tau}}{\hbar}}$$

وبالتالي فجداء مؤثرات هايزنبرغ يمكن أن تختزل الى العبارة التالية :

$$A(\tau)B(\acute{\tau}) = \hat{U}(0,\tau)\hat{A}(\tau)\hat{U}(\tau,\acute{\tau})B(\acute{\tau})\hat{U}(\acute{\tau},0)$$

حيث يمكن التأكد أن :

$$\hat{U}(\tau,\acute{\acute{\tau}}) = \hat{U}(\tau,\acute{\tau})\hat{U}(\acute{\tau},\acute{\acute{\tau}})$$

$$\hat{U}(\tau,\tau) = 1$$

ويمكننا التعبير عن المؤثرات المكتوبة في تمثيل هايزنبرغ بدلالة تمثيل التفاعل كمايلي :

$$A(\tau) = e^{\widetilde{H}\frac{\tau}{\hbar}} e^{-\widetilde{H}_0\frac{\tau}{\hbar}} \hat{A}(\tau) e^{\widetilde{H}_0\frac{\tau}{\hbar}} e^{-\widetilde{H}\frac{\tau}{\hbar}}$$

$$A(\tau) = \widehat{U}(0,\tau)\hat{A}(\tau)\widehat{U}(\tau,0)$$

ومن خلال تعريف $\widehat{U}(\tau,\acute{\tau})$ نجد أن المشتق بالنسبة ل τ هو :

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\widehat{U}(\tau,\acute{\tau}) = \frac{1}{\hbar}\widetilde{H}_0\widehat{U}(\tau,\acute{\tau}) - \frac{1}{\hbar}e^{\widetilde{H}_0\frac{\tau}{\hbar}}\widetilde{H}_0 e^{-\widetilde{H}\frac{(\tau-\acute{\tau})}{\hbar}} e^{-\widetilde{H}_0\frac{\acute{\tau}}{\hbar}}$$

وحيث أن $\widetilde{H}_0$ متبادل مع $e^{\widetilde{H}_0\frac{\tau}{\hbar}}$ وكذلك :

$$\widetilde{H} = \widetilde{H}_0 + V$$

فمن السهل التأكد أن النتيجة التالية محققة:

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\widehat{U}(\tau,\acute{\tau}) = -\frac{1}{\hbar}\widehat{V}(\tau)\widehat{U}(\tau,\acute{\tau})$$

بمكاملة الطرفين من τ الى $\acute{\tau}$ نجد مايلي :

$$\int_{\acute{\tau}}^{\tau}\frac{\partial}{\partial\tau_1}\widehat{U}(\tau_1,\acute{\tau})d\tau_1 = -\frac{1}{\hbar}\int_{\acute{\tau}}^{\tau}\widehat{V}(\tau_1)\widehat{U}(\tau_1,\acute{\tau})d\tau_1$$

وبالتالي :

$$\widehat{U}(\tau,\acute{\tau}) - \widehat{U}(\acute{\tau},\acute{\tau}) = -\frac{1}{\hbar}\int_{\acute{\tau}}^{\tau}\widehat{V}(\tau_1)\widehat{U}(\tau_1,\acute{\tau})d\tau_1$$

وحيث أن $\widehat{U}(\acute{\tau},\acute{\tau})$ يساوي مؤثر الوحدة ، فالمعادلة السابقة تصبح عبارة عن معادلة تكاملية كالتالي :

$$\widehat{U}(\tau,\acute{\tau}) = 1 - \frac{1}{\hbar}\int_{\acute{\tau}}^{\tau}\widehat{V}(\tau_1)\widehat{U}(\tau_1,\acute{\tau})d\tau_1$$

بتعويض عبارة المؤثر $\widehat{U}(\tau,\acute{\tau})$ داخل التكامل ، أي في نفس المعادلة مع تغيير حدود التكامل نحصل على :

$$\widehat{U}(\tau,\acute{\tau}) = 1 - \frac{1}{\hbar}\int_{\acute{\tau}}^{\tau}\widehat{V}(\tau_1)d\tau_1\left[1 - \frac{1}{\hbar}\int_{\acute{\tau}}^{\tau_1}\widehat{V}(\tau_2)\widehat{U}(\tau_2,\acute{\tau})d\tau_2\right]$$

يمكننا التعويض مرة أخرى في نفس العبارة التكاملية :

$$\widehat{U}(\tau,\acute{\tau}) = 1 - \frac{1}{\hbar}\int_{\acute{\tau}}^{\tau}d\tau_1\widehat{V}(\tau_1) + \left(-\frac{1}{\hbar}\right)^2\int_{\acute{\tau}}^{\tau}d\tau_1\int_{\acute{\tau}}^{\tau_1}d\tau_2\widehat{V}(\tau_1)\widehat{V}(\tau_2)\widehat{U}(\tau_2,\acute{\tau})$$

يمكننا مواصلة التعويض المتتالي في نفس المعادلة التكاملية مع تغيير حدود التكامل فنحصل على الرتبة الثالثة:

$$\widehat{U}(\tau,\acute{\tau}) = 1 - \frac{1}{\hbar}\int_{\acute{\tau}}^{\tau}d\tau_1\widehat{V}(\tau_1) + \left(-\frac{1}{\hbar}\right)^2\int_{\acute{\tau}}^{\tau}d\tau_1\int_{\acute{\tau}}^{\tau_1}d\tau_2\widehat{V}(\tau_1)\widehat{V}(\tau_2)$$
$$+\left(-\frac{1}{\hbar}\right)^3\int_{\acute{\tau}}^{\tau}d\tau_1\int_{\acute{\tau}}^{\tau_1}d\tau_2\int_{\acute{\tau}}^{\tau_2}d\tau_3\widehat{V}(\tau_1)\widehat{V}(\tau_2)\widehat{V}(\tau_3) + \cdots \ldots \ldots$$

ومن أجل اختصار الكتابة يمكننا أن نستعين بدالة هيفيسايد $\Theta(\tau_2-\tau_1)$ حيث نستطيع كتابة التكامل الثاني مثلا في العبارة **كمايلي

$$\int_{\acute{\tau}}^{\tau} d\tau_1 \int_{\acute{\tau}}^{\tau_1} d\tau_2 \hat{V}(\tau_1)\hat{V}(\tau_2) = \frac{1}{2}\int_{\acute{\tau}}^{\tau} d\tau_1 \int_{\acute{\tau}}^{\tau_1} d\tau_2 \left[\hat{V}(\tau_1)\hat{V}(\tau_2)\Theta(\tau_1-\tau_2) + \hat{V}(\tau_2)\hat{V}(\tau_1)\Theta(\tau_2-\tau_1)\right]$$

هذه العبارة يمكن أن تصبح أكثر اختصارا عند ادخال مؤثر الترتيب الزمني T كمايلي:

$$\int_{\acute{\tau}}^{\tau} d\tau_1 \int_{\acute{\tau}}^{\tau_1} d\tau_2 \hat{V}(\tau_1)\hat{V}(\tau_2) = \frac{1}{2}\int_{\acute{\tau}}^{\tau} d\tau_1 \int_{\acute{\tau}}^{\tau_1} d\tau_2 T\hat{V}(\tau_1)\hat{V}(\tau_2)$$

وبالاستمرار بالتعويض المتتالي تظهر الحدود كأنها تقريبات متتالية من الدرجة صفر ، حيث يكون مؤثر التطور مساويا للواحد، الى أي درجة كيفية n حيث يصبح هذا الحد مساويا ل:

$$\frac{1}{n!}\int_{\acute{\tau}}^{\tau} d\tau_1 \dots\dots\dots. \int_{\acute{\tau}}^{\tau_{n-1}} d\tau_n T\left[\hat{V}(\tau_1)\dots\dots\dots\hat{V}(\tau_n)\right]$$

وبالتالي فالعبارة النهائية لمؤثر التطور مكتوبة في تمثيل التفاعل يمكن اختصارها الى المجموع التالي :

$$\hat{U}(\tau,\acute{\tau}) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{-1}{\hbar}\right)^n \int_{\acute{\tau}}^{\tau} d\tau_1 \dots\dots\dots. \int_{\acute{\tau}}^{\tau_{n-1}} d\tau_n T\left[\hat{V}(\tau_1)\dots\dots\dots\hat{V}(\tau_n)\right]$$

العلاقة بين دوال غرين و مؤثر التطور $\hat{U}$

بتعويض الزمنين التخيليين τ و $\acute{\tau}$ بالمقدارين $\beta\hbar$ و 0 على الترتيب في العبارة ** الخاصة بمؤثر التطور $\hat{U}(\tau,\acute{\tau})$ نجد :

$$e^{-\beta\tilde{H}_0}\hat{U}(\beta\hbar,0) = e^{-\beta\tilde{H}}$$

وبالتالي يمكننا كتابة دالة غرين ذات الزمن التخيلي كمايلي:

$$g(k\sigma,\tau) = -\langle TC_{k\sigma}(\tau)C_{k\sigma}^{+}(0)\rangle$$

$$= -Z_G^{-1}tr\left[e^{-\beta\tilde{H}}TC_{k\sigma}(\tau)C_{k\sigma}^{+}(0)\right]$$

$$= -Z_G^{-1}tr\left[e^{-\beta\tilde{H}_0}\hat{U}(\beta\hbar,0)TC_{k\sigma}(\tau)C_{k\sigma}^{+}(0)\right]$$

باستعمال كتابة هايزنبرغ للمؤثرين $C_{k\sigma}(\tau)$ و $C_{k\sigma}^{+}(0)$ كمايلي :

$$C_{k\sigma}(\tau) = \hat{U}(0,\tau)\hat{C}_{k\sigma}(\tau)\hat{U}(\tau,0)$$

$$C_{k\sigma}^{+}(0) = \hat{C}_{k\sigma}^{+}$$

ففي حالة القيم الموجبة ل τ نستطيع كتابة دالة غرين بالشكل التالي :

$$g(k\sigma,\tau>0) = -Z_G^{-1}tr\left[e^{-\beta\tilde{H}_0}\hat{U}(\beta\hbar,0)\hat{U}(0,\tau)\hat{C}_{k\sigma}(\tau)\hat{U}(\tau,0)C_{k\sigma}^{+}(0)\right]$$

$$= -Z_G^{-1}tr\left[e^{-\beta\tilde{H}_0}\hat{U}(\beta\hbar,\tau)\hat{C}_{k\sigma}(\tau)\hat{U}(\tau,0)C_{k\sigma}^{+}(0)\right]$$

ان عبارة نشر $\hat{U}(\tau,0)$ تبين بوضوح أن جميع المؤثرات $\hat{V}$ تظهر بين الزمنين 0 و τ ، بينما عبارة نشر $\hat{U}(\beta\hbar,\tau)$ تبين أن جميع المؤثرات $\hat{V}$ تظهر بين الزمنين τ و $\beta\hbar$. حيث $\tau \le \beta\hbar$. وبالتالي :

$$T\left[\hat{U}(\beta\hbar,\tau)\hat{U}(\tau,0)\hat{C}_{k\sigma}(\tau)C_{k\sigma}^{+}(0)\right] = \hat{U}(\beta\hbar,\tau)\hat{C}_{k\sigma}(\tau)\hat{U}(\tau,0)C_{k\sigma}^{+}(0)$$

عندما يقوم مؤثر الترتيب الزمني T بتبديل مواضع المؤثرات $\hat{V}(\tau_1)$ الى غاية $\hat{V}(\tau_n)$ **فلا ينبغي** تغيير الاشارة حتى وان كان المؤثرين $\hat{V}(\tau_i)$ و $\hat{V}(\tau_j)$ يمثلان التفاعل بين الفرميونات ، و**السبب هو** أن كتابة عبارة $\hat{V}$ في صيغة التكميم الثاني تحتوي على عدد **زوجي** من المؤثرات ، وبالتالي يمكننا اعتبار $\hat{V}$ دائما **كأنه مؤثر بوزونات.**

وبالتالي :

$$g(k\sigma,\tau>0) = -Z_G^{-1}tr\left[e^{-\beta\tilde{H}_0}T\hat{U}(\beta\hbar,0)\hat{C}_{k\sigma}(\tau)C_{k\sigma}^{+}(0)\right]$$

أما في حالة القيم السالبة ل τ نستطيع كتابة دالة غرين بالشكل التالي :

$$g(k\sigma,\tau<0) = -\langle TC_{k\sigma}(\tau)C_{k\sigma}^{+}(0)\rangle = \mp\langle C_{k\sigma}^{+}(0)C_{k\sigma}(\tau)\rangle$$

$$g(k\sigma,\tau<0) = \mp Z_G^{-1}tr\left[e^{-\beta\tilde{H}_0}T\hat{U}(\beta\hbar,0)C_{k\sigma}^{+}(0)\hat{C}_{k\sigma}(\tau)\right]$$

يمكننا عكس ترتيب المؤثرات لأن الجداء $\hat{U}(\beta\hbar,0)C_{k\sigma}^{+}(0)\hat{C}_{k\sigma}(\tau)$ مرتب زمنيا مع تصاعد الزمن ، مع التذكير بأن $\tau<0$:

$$g(k\sigma,\tau<0) = \mp Z_G^{-1}tr\left[e^{-\beta\tilde{H}_0}T\hat{U}(\beta\hbar,0)\hat{C}_{k\sigma}(\tau)C_{k\sigma}^{+}(0)\right]$$

حيث يجب تغيير الاشارة بسبب تبديل مضع المؤثرين $\hat{C}_{k\sigma}(\tau)C_{k\sigma}^{+}(0)$ في حالة الفرميونات، وبكتابتهما في الشكل التفاعلي نجد:

$$g(k\sigma,\tau<0) = \mp Z_G^{-1}tr\left[e^{-\beta\tilde{H}_0}T\hat{U}(\beta\hbar,0)\hat{U}(0,\tau)\hat{C}_{k\sigma}(\tau)\hat{U}(\tau,0)C_{k\sigma}^{+}(0)\right]$$

وبما أن المؤثرات $\hat{V}$ التي تظهر في عبارة $\hat{U}(0,\tau)$ هي **بوزونية لأنها تحتوي على عدد زوجي** من موثرات الانشاء والهدم فيمكننا تبديل $\hat{U}(0,\tau)$ و $\hat{C}_{k\sigma}(\tau)$ بدون تغيير الاشارة ، وباستخدام خواص مؤثر التطور:

$$\hat{U}(0,\tau)\hat{U}(\tau,0) = \hat{U}(0,0) = 1$$

نحصل على :

$$g(k\sigma,\tau<0) = \mp Z_G^{-1}tr\left[e^{-\beta\tilde{H}_0}T\hat{U}(\beta\hbar,0)\hat{C}_{k\sigma}(\tau)C_{k\sigma}^{+}(0)\right]$$

و هي نفس العبارة ***

كما أن دالة القسمة للمجموعة الماكروقانونية يمكن أيضا كتابتها بنفس الطريقة كمايلي :

$$Z_G = tr\left[e^{-\beta\tilde{H}}\right] = tr\left[e^{-\beta\tilde{H}_0}e^{\beta\tilde{H}_0}e^{-\beta\tilde{H}}\right]$$

$$Z_G = tr\left[e^{-\beta\tilde{H}_0}\hat{U}(\beta\hbar,0)\right]$$

وبالتالي :

$$g(k\sigma,\tau) = -\frac{tr\left[e^{-\beta\tilde{H}_0}T\hat{U}(\beta\hbar,0)\hat{C}_{k\sigma}(\tau)C_{k\sigma}^{+}(0)\right]}{tr\left[e^{-\beta\tilde{H}_0}\hat{U}(\beta\hbar,0)\right]}$$

بقسمة البسط والمقام على دالة القسمة الماكروقانونية في حالة عدم وجود التفاعل $Z_{G0} = tr\left[e^{-\beta\tilde{H}_0}\right]$ نحصل على:

$$g(k\sigma,\tau) = -\frac{\langle T\hat{U}(\beta\hbar,0)\hat{C}_{k\sigma}(\tau)C^{+}_{k\sigma}(0)\rangle_0}{\langle \hat{U}(\beta\hbar,0)\rangle_0}$$

حيث يشير الدليل "0" الى أن القيمة المتوسطة الحرارية قد تم حسابها في الحالة غير المتفاعلة وفق القانون المعروف:

$$\langle\blacksquare\rangle_0 = \frac{tr\left[e^{-\beta\tilde{H}_0}\blacksquare\right]}{tr\left[e^{-\beta\tilde{H}_0}\right]}$$

وبالتالي نستطيع أن نكتب :

$$g(k\sigma,\tau) = -\frac{\langle T\hat{C}_{k\sigma}(\tau)C^{+}_{k\sigma}(0)\hat{U}(\beta\hbar,0)\rangle_0}{\langle \hat{U}(\beta\hbar,0)\rangle_0}$$

عند ادخال عبارة نشر مؤثر التطور $\hat{U}$ في العبارة الأخيرة نحصل على الشكل النهائي لدالة غرين كمايلي :

$$g(k\sigma,\tau) = -\frac{\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{-1}{\hbar}\right)^n\langle\int_0^{\beta\hbar}d\tau_1\ldots\ldots\ldots\int_0^{\beta\hbar}d\tau_n T\hat{C}_{k\sigma}(\tau)\hat{C}^{+}_{k\sigma}(0)\hat{V}(\tau_1)\hat{V}(\tau_2)\ldots\hat{V}(\tau_n)\rangle_0}{\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{-1}{\hbar}\right)^n\langle\int_0^{\beta\hbar}d\tau_1\ldots\ldots\ldots\int_0^{\beta\hbar}d\tau_n T\hat{V}(\tau_1)\hat{V}(\tau_2)\ldots\ldots\hat{V}(\tau_n)\rangle_0}$$

نظرية ويك:

التقلصات:

يعرف التقلص بالعبارة الرياضية التالية :

$$\overbrace{\hat{A}\hat{B}} = \langle T\hat{A}\hat{B}\rangle_0$$

فمثلا :

$$\overbrace{\hat{C}_{k\sigma}(\tau)\hat{C}^{+}_{k\sigma}(0)} = \langle T\hat{C}_{k\sigma}(\tau)\hat{C}^{+}_{k\sigma}(0)\rangle_0$$

$$\overbrace{\hat{C}_{k\sigma}(\tau)\hat{C}^{+}_{k\sigma}(0)} = -g^0(k\sigma,\tau)$$

حيث ترمز $g^0(k\sigma,\tau)$ الى دالة غرين ذات الزمن التخيلي لجملة جسيمات **غير متفاعلة** ، وبما أن القيمة الموسطة في أي حالة ذاتية لجداء مؤثرين من نفس النوع أي $\hat{C}_{k\sigma}\hat{C}_{k\sigma}$ أو $\hat{C}^{+}_{k\sigma}\hat{C}^{+}_{k\sigma}$ تكون مساوية للصفر فان التقلصات التالية تكون أيضا معدومة :

$$\overbrace{\hat{C}^{+}_{k\sigma}\hat{C}^{+}_{k\sigma}} = \overbrace{\hat{C}_{k\sigma}\hat{C}_{k\sigma}} = 0$$

ومنه يمكننا الأن صياغة نظرية ويك بالشكل التالي والذي يكون صالحا لكل من البوزنات والفرميونات :

ان **القيمة المتوسطة الحرارية** المحسوبة بالنسبة للنظام **الغير المتفاعل** لجداء مجموعة من المؤثرات المكتوبة في **تمثيل التفاعل** ومرتبة **زمنيا** تكون **مساوية لمجموع جميع التقلصات الممكنة :**

$$\langle T\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}\ \ldots\ldots\rangle_0 = \overbrace{\hat{A}\hat{B}}\ \overbrace{\hat{C}\hat{D}}\ \ldots\ldots\ldots + \hat{A}\ \underbrace{\hat{B}\hat{C}\hat{D}} + \overbrace{\hat{A}\ \underbrace{\hat{B}\hat{C}}\ \hat{D}} + \cdots$$

وفي الحالة العامة :

$$\langle T\prod_{i=1}^{2n}\hat{A}_i\rangle_0 = \sum(-1)^p\prod\langle T\hat{A}_j\hat{A}_k\rangle_0$$

الفصل التاسع: تطبيقات في الناقلية الفائقة ورابطة جوزفسون.

الفصل العاشر: مخططات فاينمان.

ان الحسابات المباشرة باستخدام دوال غرين أمر معقد ومطول ، ولكن توجد طريقة ناجحة جدا ابتكرها العالم *Feynman* . تعتمد هذه الطريقة على الحسابات التقريبية وفق نشر دالة غرين كما رأيناه سابقا . حيث يتم ارفاقها بمخططات بسيطة يتغير شكلها حسب درجة التقريب وفق قواعد ثابتة. وللتبسيط سوف نعتبر حالة الجمل الانسحابية التي رأيناها سابقا في الفصل**** وتكتب كمايلي:

$$\hat{V}(\tau)=\frac{1}{2}\sum_{q}\sum_{k_1\sigma_1}\sum_{k_2\sigma_2} v_q \hat{C}^{+}_{k_1+q\sigma_1}(\tau)\hat{C}^{+}_{k_2-q\sigma_2}(\tau)\hat{C}_{k_2\sigma_2}(\tau)\hat{C}_{k_1\sigma_1}(\tau)$$

ان عملية حساب دوال غرين عن طريق النشر تعتمد على البسط ، وذلك بسبب عماية اختزال سوف نراها لاحقا من خلال المخططات غير المتصلة. فمثلا الرتبة **صفر**نستطيع كتابتها باشكل :

$$-\langle T\hat{C}_{k\sigma}(\tau)\hat{C}^{+}_{k\sigma}(0)\rangle_0 = g^0(k\sigma,\tau)$$

والتي نستطيع تمثيلها بمخطط بسيط وفق قواعد فاينمان التي سوف نلخصها لاحقا

******

وتفسيره هو انه عند اللحظة الزمنية 0 يتم انشاء جسيم في الحالة الكمية $|k\sigma>$، أي تمثيلها بسهم **يدخل** النقطة ذات اللحظة الزمنية 0 ، بينما عند اللحظة الزمنية τ يتم افناء جسيم في الحالة الكمية $|k\sigma>$ ، وبالتالي **فدالة غرين** $g^0(k\sigma,\tau)$ **تمثل خط مستمرمتجه من النقطة** τ **الى النقطة 0 كما في الشكل*****.**

وبالتالي فالحد من **الرتبة الاولى** في المقام سوف نكتبه كما يلي :

$$\delta g^{(1)}_{\text{المقام}}=\frac{1}{\hbar V}\int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 \sum_q\sum\sum \frac{1}{2} v_q \langle T\hat{C}_{k\sigma}(\tau)\hat{C}^{+}_{k\sigma}(0)\hat{C}^{+}_{k\sigma}(0)\hat{C}^{+}_{k\sigma}(0)\hat{C}_{k\sigma}(\tau)\hat{C}_{k\sigma}(\tau)\rangle_0$$

باستخدام نظرية **ويك** نجد:

$$\langle T\hat{C}_{k\sigma}(\tau)\hat{C}^{+}_{k\sigma}(0)\hat{C}^{+}_{k_1+q\sigma_1}(\tau_1)\hat{C}^{+}_{k_2-q\sigma_2}(\tau_1)\hat{C}_{k_2\sigma_2}(\tau_1)\hat{C}_{k_1\sigma_1}(\tau_1)\rangle_0 =$$

$$-\langle T\hat{C}_{k\sigma}(\tau)\hat{C}^{+}_{k\sigma}(0)\rangle_0\langle T\hat{C}^{+}_{k_1+q\sigma_1}(\tau_1)\hat{C}_{k_2\sigma_2}(\tau_1)\rangle_0\langle T\hat{C}^{+}_{k_2-q\sigma_2}(\tau_1)\hat{C}_{k_1\sigma_1}(\tau_1)\rangle_0$$
$$+\langle T\hat{C}_{k\sigma}(\tau)\hat{C}^{+}_{k\sigma}(0)\rangle_0\langle T\hat{C}^{+}_{k_1+q\sigma_1}(\tau_1)\hat{C}_{k_1\sigma_1}(\tau_1)\rangle_0\langle T\hat{C}^{+}_{k_2-q\sigma_2}(\tau_1)\hat{C}_{k_2\sigma_2}(\tau_1)\rangle_0+\cdots ....$$

والتي يمكن تمثيلها على شكل مخططات حسب كتابة كل حد كما في الشكل

نعتبر وجود ثلاثة شوائب والتي توجد في ثلاثة مواقع كيفية من الشبكة l,m,s وبالتالي يمكننا إعادة كتابة الهاملتونيان كما يلي

$$H=H_0+H_l+H_m+H_s$$

حيث H_0 عبارة عن الهاملتونيان الخاص بنموذج *TBM*

$$H_l=|l\rangle\varepsilon\langle l|$$

$$H_m=|m\rangle\varepsilon'\langle m|$$

$$H_s=|s\rangle\varepsilon''\langle s|$$

وبالتالي يمكننا تعريف ثلاثة تركيبات ممكنة من الهاملتوني H_0 والهاملتونيات الخاصة بالشوائب الثلاثة

$$H_{0m}=H_0+H_l+H_s$$

$$H_{0l} = H_0 + H_m + H_s$$

$$H_{0s} = H_0 + H_l + H_m$$

حيث h_m تعني الهاملتونيان الذي لا يحوي الحد H_m ، h_l تعني الهاملتونيان الذي لا يحوي الحد H_l بينما h_s تعني الهاملتونيان الذي لا يحوي الحد H_s

وبالتالي يمكننا كتابة الهاملتونيان بأحد الأشكال التالية

$$H_{0m} = H_0 + h_m$$

$$H_{0l} = H_0 + h_l$$

$$H_{0s} = H_0 + h_s$$

نرمز لدوال Green الخاصة بالهاملتونيات H_{0m} ، H_{0s} ، H_{0l} و H بالرموز G_{0m} ، G_{0s} ، G_{0l} و G على الترتيب.كما أننا بينا في الفصول السابقة أن العبارات التالية محققة

$$G_{0l} = G_0 + G_0 T_l G_0$$

$$T_l = |l\rangle t_l \langle l|$$

$$t_l = \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon G_0(l,l)}$$

$$G_{0m} = G_0 + G_0 T_m G_0$$

$$T_m = |m\rangle t_m \langle m|$$

$$t_m = \frac{\varepsilon'}{1 - \varepsilon G_0(m,m)}$$

$$G_{0s} = G_0 + G_0 T_s G_0$$

$$T_s = |s\rangle t_s \langle s|$$

$$t_s = \frac{\varepsilon''}{1 - \varepsilon G_0(s,s)}$$

الكتابات السابقة تعطينا بعض الحرية في اختيار الحد الرئيسي و الحد المضطرب ، حيث يمكننا اعتبار H_{0l} الحد الغير مضطرب ، بينما h_l يصبح يمثل حد الاضطراب ، وبتطبيق العبارة العامة لنشر دوال *Green*

$$G = G_{0l} + G_{0l}h_lG_{0l} + G_{0l}h_lG_{0l}h_lG_{0l} + G_{0l}h_lG_{0l}h_lG_{0l}h_lG_{0l} + \dots$$

كما أنه ومن خلال الحسابات في الفصول السابقة ، وبسبب بساطة h_l فالعبارة السابقة يمكن حسابها بدقة كمايلي

$$G = G_{0l} + G_{0l}|x\rangle \frac{\varepsilon_x}{1-\varepsilon_x G_{0l}(x,x)} \langle x|G_{0l}$$

حيث اعتبرنا $|x\rangle$ عبارة عن تركيب خطي بين كل من $|m\rangle$ و $|s\rangle$ كمايلي

$$|x\rangle = a|m\rangle + b|s\rangle$$

بينما الطاقة ε_x عبارة مساهمة كل من المدارين $|m\rangle$ و $|s\rangle$ ويمكن التعبير عنها بالشكل التالي

$$\varepsilon_x = x\varepsilon' + (1-x)\varepsilon''$$

بتعويض كل من المعادلتين 7-7 و 8-10 في المعادلة 7-10 نجد

$$G = G_0 + G_0TG_0$$

حيث يعطى T بالعبارة التالية

$$T = f_{xl}\left(T_l + T_x + T_lG_0T_x + T_xG_0T_l\right)$$

$$T = f_{xl}\left(|l\rangle t_l\langle l| + |x\rangle t_x\langle x| + |l\rangle t_lG_0(l,x)t_x\langle x| + |x\rangle t_xG_0(x,l)t_l\langle l|\right)$$

حيث تعطى الكمية f_{xl} بالعبارة التالية

$$f_{xl} = \frac{1}{1-T_xT_lG_0(x,l)G_0(l,x)}$$

كما أن الكمية t_x تعطى بالعبارة التالية

$$t_x = \frac{\varepsilon_x}{\left[1-\varepsilon_xG_0(x,x)\right]}$$

يمكن تمثيل العبارات الرياضية السابقة على شكل مخططات كما سوف نوضحه في الشكل 4-1 ، حيث قمنا برسم جميع الخطوط من الموقع (i) إلى الموقع (j) ، أما المواقع الوسطية فهي عبارة عن مواقع تشتتات بسبب وجود الشوائب (l) ، (m) و (s) و التي يمثلها الارتباط الخطي (x).

ولذلك فالمساهمة الكلية للجزء (a) من المخطط الممثل في الشكل 4-1 يمكن التعبير عنها كمايلي

$$\begin{aligned}
&G_0(j,l)t_l G_0(l,i) + G_0(j,l)t_l G_0(l,x)t_x G_0(x,l)t_l G_0(l,i) + \ldots \\
&= G_0(j,l)t_l G_0(l,i).\{1 + t_l G_0(l,x)t_x G_0(x,l) + [t_l G_0(l,x)t_x G_0(x,l)]^2 + \ldots\ldots\} \\
&= G_0(j,l)t_l G_0(l,i) f_{xl}
\end{aligned}$$

وبنفس الطريقة نجد المساهمة الكلية للجزء (b,c) وكذلك الجزء (d) في الشكل 4-1

$$\begin{aligned}
&G_0(j,x)t_x G_0(x,i) f_{xl} \\
&G_0(j,x)t_x G_0(x,l)t_l G_0(l,i) f_{xl} \\
&G_0(j,l)t_l G_0(l,x)t_x G_0(x,i) f_{xl}
\end{aligned}$$

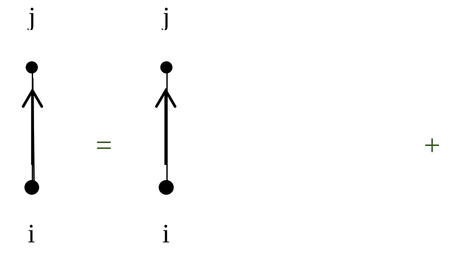
وبالتالي يمكن التعبير عن المخططات الموضحة في الشكل 4-1 بالعبارة الرياضية التالية

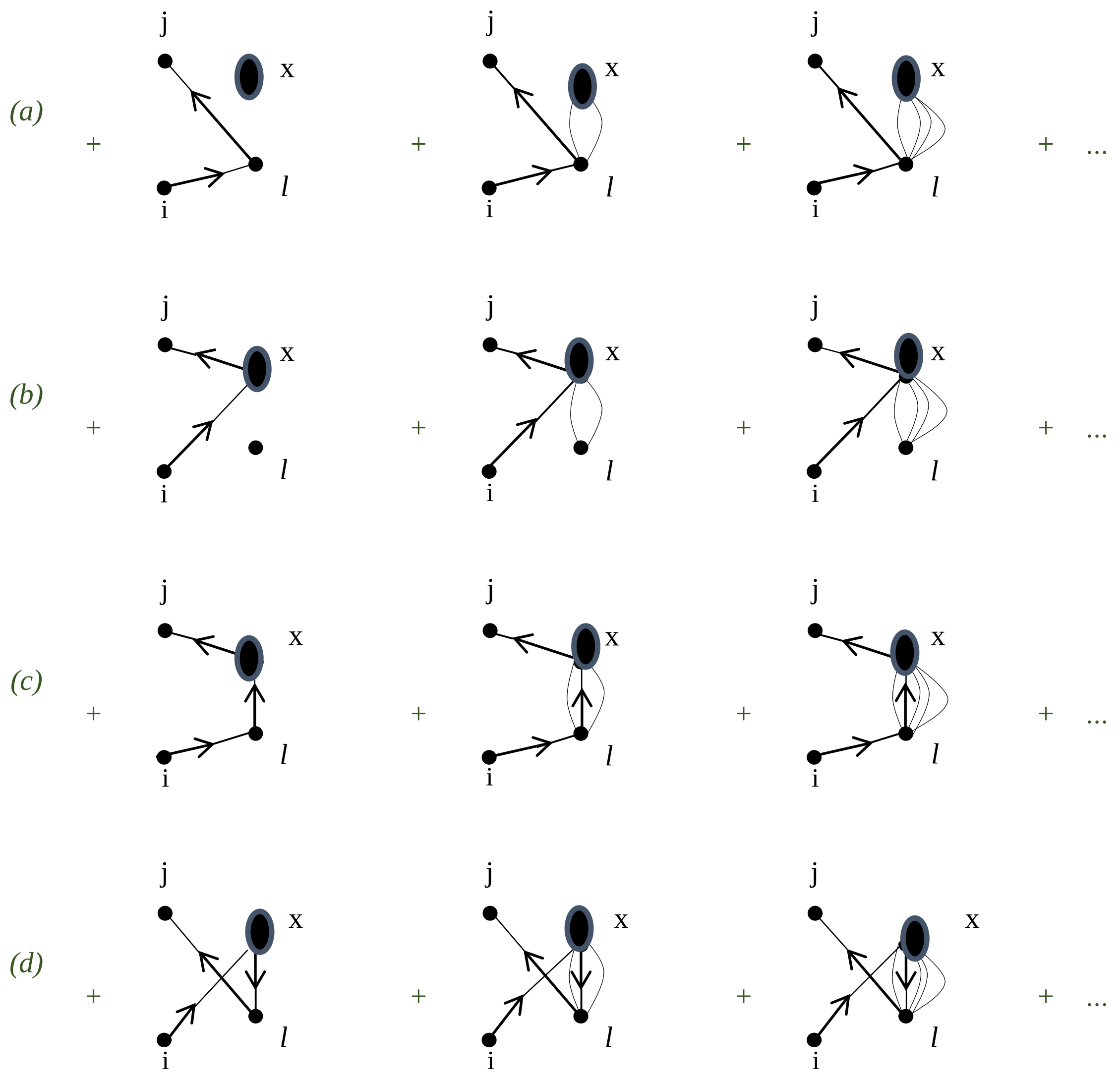
$$G(j,i) = G_0(j,i) + \langle j|G_0(T_l + T_x + T_l G_0 T_x + T_x G_0 T_l)G_0|i\rangle f_{xl}$$

ثانيا

يمكن تفسير هذه المخططات فيزيائيا كمايلي

- الخطوط من (i) إلى الموقع (j) تعني انتشار دون تشتت وهي تمثل $G_0(j,i)$.
- أما في المجموعة (a) فيمكن تفسير المخططات فهو عبارة عن انتشار من الموقع (i) إلى الموقع وهو موقع الشائبة (l) يعبر عنه الحد $G_0(l,i)$ يسعة تشتت قدرها t_l ثم يتم بعد ذلك انتشارمن (l) الى (j) يسعة ويعبر عنه الحد $G_0(j,l)$
- يمكن تفسير جميع المخططات السابقة بنفس الطريقة





الشكل 1-10 – مخطط الحدود المساهمة في دالة *Green* في وجود ثلاثة شوائب بعد إدخال الارتباط الخطي *x*

أعمال موجهة

السلسلة-1

التمرين الأول:

نعتبر الالكترونات الموجودة في بنية شبكية **ثنائية البعد** ، والتي تملك أشعة أولية للشبكة **المعكوسة** تكتب بالعبارتين التاليتين :

$$\vec{b}_1 = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\vec{i} + \frac{3}{2}\vec{j}\right) \quad , \quad \vec{b}_2 = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\vec{i} - \frac{3}{2}\vec{j}\right)$$

وتعطى عبارة طاقة عصابات النقل و التكافؤ، بالمعادلة التالية، حيث $a = 0.142nm$ و كذلك $t = 3eV$:

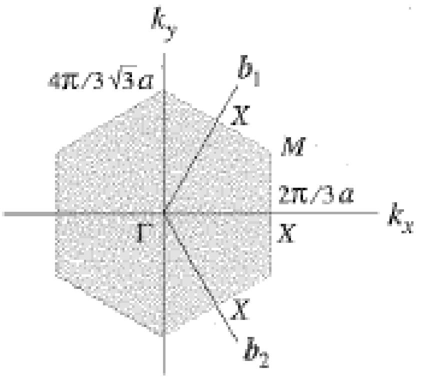
$$E_{c,v} = \pm t\sqrt{1 + 4\cos\left(\sqrt{3}k_y\frac{a}{2}\right)\cos\left(3k_x\frac{a}{2}\right) + 4\cos^2\left(\sqrt{3}k_y\frac{a}{2}\right)}$$

1- استخدم الشكل المرافق من أجل إيجاد k_x و k_y. عند النقاط X في الاتجاهات,[10]، [01] و [11].
توجيه : ضع الشعاع $\vec{k}$ على الشكل $\vec{k} = \alpha\vec{b}_1 + \beta\vec{b}_2$ ، مستخدما الشكل المرافق الذي يمثل منطقة بريلوان الأولى .

2- أوجد عبارة $E_{c,v}$ بدلالة الوسائط α ، β في اتجاه الشعاعين [10]،, [01] و بدلالة γ في اتجاه الشعاع [11]. ثم قم برسمها في نفس الشكل بدلالة الوسائط المذكورة مع توضيح المنطقة الممنوعة .

3- أكتب العبارة العامة لمقلوب تنسور الكتلة الفعالة من أجل عصابة النقل E_c.

4- قم بتطبيق النتيجة السابقة عند النقطة Γ .



التمرين الثاني :

a. نعتبر نموذج شديد الارتباط أحادي البعد لالكترونات تستطيع الانتقال من ذرة إلى أخرى عددها N ، يفصل بينها ثابت شبكة a موزعة كما في **الشكل** المرافق ، ونرمز للمدار الموجود على الذرة رقم n بالرمز $|n\rangle$.

- نعتبر أن $\langle n|H|n\rangle = \epsilon$.
- نعتبر أن المدارات متعامدة أي $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$.
- نأخذ في لحسبان الجوار الأقرب فقط أي $\langle n|H|m\rangle = -t$ من أجل $n = m \pm 1$.
- يمكننا أخذ $|\Psi\rangle$ لالكترونات البلورة كتركيب خطي للمدارات الذرية $|\Psi\rangle = \sum_n \phi_n |n\rangle$.

$$-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}-$$

1- استخدم معادلة شرودنجر من أجل الحصول على المعادلة التالية :

$$E\phi_n = \epsilon\phi_n - t(\phi_{n+1} + \phi_{n-1})$$

2- باستخدام التقريب $\phi_n = e^{ikna}$ أوجد عبارة التشتت للطاقة $E(k)$.
3- أكتب العبارة التقريبية للطاقة $E(k)$ بجوار النقطة $k = 0$
4- أحسب الكتلة الفعالة $m^\star$ بطريقتين.
5- أحسب كثافة الحالات.
6- إذا كان هناك **إلكترونين** لكل ذرة A ، استنتج السعة الحرارية.

b. نعتبر الآن نفس الشكل السابق في الجزء a مع وجود نوعين من الذرات (A, B) كما في الشكل التالي :

$$-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}-$$

نحتفظ **بنفس** الاعتبارات السابقة في الجزء a مع تغييرات بسيطة ، حيث يصبح لدينا ϵ_A و ϵ_B و إدخال السعتين $\mathcal{A}$ و $\mathcal{B}$ في الحل الخاص بالذرة A بحيث $\phi_n^A = \mathcal{A}e^{ikna}$ و الحل الخاص بالذرة B بحيث $\phi_n^B = \mathcal{B}e^{ikna}$.

1- استخدم المعادلة التي تحصلت عليها في السؤال (**1**.) من أجل إيجاد عبارة التشتت للطاقة $E(k)$.
2- قم بتمثيل $E(k)$ في المنطقة المختزلة و المنطقة الموسعة.
3- أحسب الكتلة الفعالة $m^\star$ بجوار قعر عصابة الطاقة السفلى.
4- إذا علمت أن كل من الذرتين (A, B) **أحادية التكافؤ** ، فهل النظام المدروس معدن أم عازل.

حل السلسلة-1

التمرين الأول

1- باستخدام أشعة الشبكة المعكوسة b_1 و b_2 نجد أن طول كل منهما يساوي $\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}$ ، باستخدام العبارة وبما أن الشعاعان $\vec{b}_1$ و $\vec{b}_2$ وبما أن حدود منطقة بريلوان الأولى تقطع الشعاعين في منتصفهما ، نستنتج أنه في حالة المتجه [10] تكون $\alpha = 1/2$ بينما $\beta = 0$

المتجه [01] تكون $\alpha = 0$ بينما $\beta = 1/2$

المتجه [11] تكون $\alpha = 1/2$ بينما $\beta = 1/2$

2- من خلال العبارة المعطاة للشعاع $\vec{k} = \alpha\vec{b}_1 + \beta\vec{b}_2$ نجد أن :

في الاتجاه [10] تكون $k_y = \frac{\sqrt{3}}{2}\alpha\frac{4\pi}{3a}$ بينما $k_x = \frac{1}{2}\alpha\frac{4\pi}{3a}$

في الاتجاه [01] تكون $k_y = -\frac{\sqrt{3}}{2}\beta\frac{4\pi}{3a}$ بينما $k_x = \frac{1}{2}\beta\frac{4\pi}{3a}$

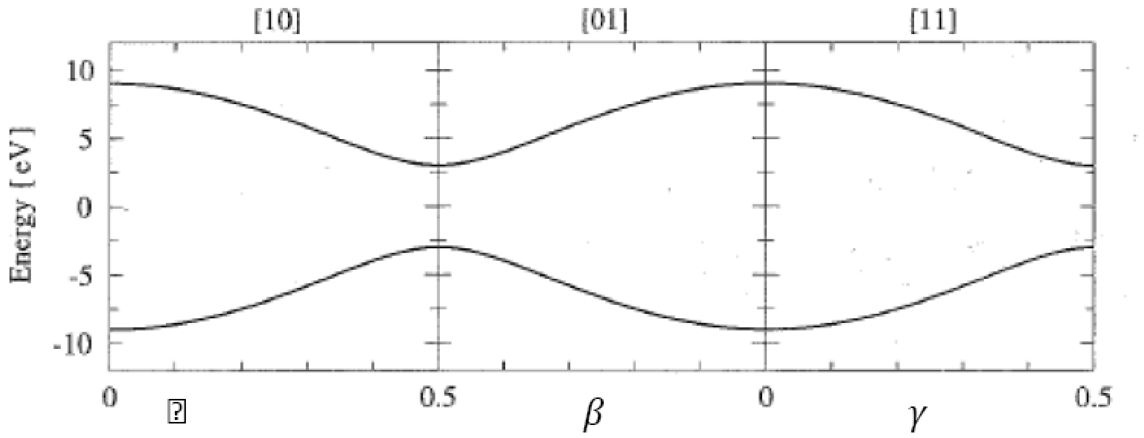
في الاتجاه [11] تكون $k_y = 0$ بينما $k_x = \gamma\frac{4\pi}{3a}$

بالتعويض في العبارة العامة المعطاة $E_{c,v}$ بقيم k_x و k_y نجد :

في الاتجاه [10] ← $E_{c,v}(\alpha) = \pm t\sqrt{[1 + 8\cos^2(\alpha\pi)]}$

في الاتجاه [01] ← $E_{c,v}(\beta) = \pm t\sqrt{[1 + 8\cos^2(\beta\pi)]}$

في الاتجاه [11] ← $E_{c,v}(\gamma) = \pm t\sqrt{[5 + 4\cos 2\gamma\pi]}$



3- العبارة العامة لمقلوب تنسور الكتلة الفعالة من أجل عصابة النقل E_c

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{\alpha\beta}=\frac{1}{\hbar^2}\begin{pmatrix}\partial^2E_c/\partial\, k_x^2 & \partial^2E_c/\partial k_x\partial k_y\\ \partial^2E_c/\partial\, k_y\partial k_x & \partial^2E_c/\partial k_y^2\end{pmatrix}$$

4- عند النقطة Γ يكون لدينا $\mathrm{k_x}=\mathrm{k_y}=0$ وبالتالي :

$$\partial^2E_c/\partial\, k_x^2=\partial^2E_c/\partial k_y^2=\frac{-3}{2}ta^2$$

$$\partial^2E_c/\partial\, k_y\partial k_x=\partial^2E_c/\partial k_x\partial k_y=0$$

وبالتالي نجد :

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{\Gamma}=\frac{1}{\hbar^2}\begin{pmatrix}\frac{-3}{2}ta^2 & 0\\ 0 & \frac{-3}{2}ta^2\end{pmatrix}$$

5- بمكننا كتابة

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{\Gamma}=\frac{-3ta^2}{2\hbar^2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

وبالتالي نجد:

$$m^*(\Gamma) = \frac{-2\hbar^2}{3ta^2}.1$$

التمرين الثاني

a. $-A-A-A-A-A-A-A-A-A-A-A-$

1- باستخدام معادلة شرودنجر $H|\Psi\rangle = E\Psi\rangle$ نجد أن :

$$\sum_n \phi_n H|n\rangle = \sum_n \phi_n E|n\rangle$$

بضرب طرفي المعادلة السابقة في $\langle m|$ نجد :

$$\sum_n \phi_n \langle m|H|n\rangle = \sum_n \phi_n E\langle m|n\rangle$$

باستخدام علاقة التعامد $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$ ، وأخذ الجوار الأقرب فقط أي $n = m \pm 1$ نجد :

$$\phi_{n+1}\langle n+1|H|n\rangle + \phi_{n-1}\langle n-1|H|n\rangle + \phi_n \epsilon^A = E\phi_n$$

بتعويض $\langle n|H|m\rangle = -t$ من أجل $n = m \pm 1$ نجد :

$$E\phi_n = \epsilon\phi_n - t(\phi_{n+1} + \phi_{n-1})$$

2- بتعويض $\phi_n = e^{ikna}$ في المعادلة السابقة نجد :

$$Ee^{ikna} = \epsilon e^{ikna} - t\left(e^{ik(n+1)a} + e^{ik(n-1)a}\right)$$

باختزال e^{ikna} من طرفي المعادلة السابقة نجد :

$$E = \epsilon - 2t\cos ka$$

3- نقوم بنشر $\cos ka$ بجوار $k = 0$ فنحصل على :

$$E = \epsilon - 2t\left(1 - \frac{(ka)^2}{2}\right)$$

$$E = Cte + |t|a^2k^2$$

4- حساب الكتلة الفعالة بطريقتين :

الطريقة 1 : باستخدام العلاقة الاعتيادية للكتلة الفعالة

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{h^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$$

نجد أن $m^* = \frac{\hbar^2}{2ta^2}$

الطريقة1 : باعتبار الثابت Cte مبدأ حساب الطاقة تصبح

$E = |t|a^2k^2$ بالمطابقة مع الطاقة الحركية $E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$ نجد *نفس النتيجة أي* $m^* = \frac{\hbar^2}{2ta^2}$.

-5 حساب كثافة الحالات:

$$\frac{dN}{dE} = \frac{dN}{dk}\frac{dk}{dE}$$

حيث

$$\frac{dN}{dk} = \frac{1}{2\pi/L} = \frac{L}{2\pi} = \frac{Na}{2\pi}$$

وحيث أن

$$\frac{dE}{dk} = 2ta\sin ka$$

$$\frac{dE}{dk} = 2ta\sqrt{1 - \frac{(E-\epsilon)^2}{4t^2}}$$

$$\frac{dN}{dE} = \frac{N}{2\pi}\frac{2.2}{2ta\sqrt{1 - \frac{(E-\epsilon)^2}{4t^2}}}$$

-6 اذا كان **الكترونين** لكل ذرة فالعصابة تكون ممتلئة تماما وبالتالي لاتوجد حربة في الجملة ككل ، وبالتالي فالسعة الحرارية معدومة.

.b $-A-B-A-B-A-B-A-B-A-B-A-$

-1 ياستخدام المعادلة التي تحصلنا عليها في السؤال $(a.1)$ ولكن الجوار الأقرب يتغير لأن كل ذرة من النوع A هي بين ذرتين من النوع B والعكس صحيح . أي كل ذرة من النوع B هي بين ذرتين من النوع A أي :

$$E\phi_n^A = \epsilon_A\phi_n^A - t(\phi_n^B + \phi_{n-1}^B)$$

$$E\phi_n^B = \epsilon_B \phi_n^B - t(\phi_n^A + \phi_{n+1}^A)$$

بالتعويض في هاتين المعادلتبن و الاختزال نجد جملة المعادلتين التاليتين :

$$(E - \epsilon_A)\mathcal{A} + t\left(1 + e^{-ika}\right)\mathcal{B} = 0$$

$$t\left(1 + e^{ika}\right)\mathcal{A} + (E - \epsilon_B)\mathcal{B} = 0$$

ونقبل جملة المعادلات حل يختلف عن الصفر اذاكان المحدد التالي معدوم :

$$\begin{vmatrix} (E - \epsilon_A) & t\left(1 + e^{-ika}\right) \\ t\left(1 + e^{ika}\right) & (E - \epsilon_B) \end{vmatrix} = 0$$

ومنه نحصل على عبارة التشتت للطاقة :

$$E^2 - (\epsilon_A + \epsilon_B)E + [\epsilon_A \epsilon_B - t^2(2 + 2\cos ka)]$$

$$E = \frac{1}{2}\left\{(\epsilon_A + \epsilon_B) \pm \sqrt{(\epsilon_{A-}\epsilon_B)^2 + 4t^2(2 + 2\cos ka)}\right\}$$

السلسلة2

التمرين الأول:

يعطى هاملتوني إلكترون في بلورة خطية تملك ثابت شبكة a بالعبارة :

$$H = E_0 \sum_n |f_n\rangle \langle f_n| + \gamma \sum_n \{|f_n\rangle\langle f_{n+1}| + |f_{n+1}\rangle\langle f_n|\}$$

وتتمركز مدارات الأساس **المتعامدة** f_n في المواقع $t_n = na$ للذرات التي تكون البلورة الخطية.

اذا علمت أننا نستطيع كتابة حل تقريبي لمعادلة شرودنجر $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ بواسطة نشر كما يلي :

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |f_n\rangle$$

1- ماهو المعنى الفيزيائي للثابتين E_0 و γ
2- باستخدام المعلومات السابقة أوجد العلاقة بين المعاملات C_{n+1}، C_{n-1}، C_n وكل من γ، E و E_0
3- استنتج مصفوفة التحويل $M(E)$ التي تربط بين الشعاع $\begin{pmatrix} C_{m+1} \\ C_m \end{pmatrix}$ و الشعاع $\begin{pmatrix} C_m \\ C_{m-1} \end{pmatrix}$.
4- بتطبيق نظرية بلوخ على الجوار الأقرب أوجد العلاقة بين المعاملات C_{m+1} و C_m
5- أعد كتابة جملة المعادلات في السؤال **الثاني** واستنتج عبارة طاقة الإلكترون في البلورة.

التمرين الثاني :

باستخدام **الشكل-1** الذي يمثل منطقة بريلوان الأولى لشبكة مربعة ، ذات ثابت شبكة a:

6- بين أن الطاقة الحركية لإلكترون حر في النقطة M وهي رأس أحد زوايا منطقة بريلوان الأولى أكبرمن الطاقة الحركية لإلكترون في النقطة X بنسبة b ، المطلوب تحديد قيمة النسبة b .
7- أحسب بالتقريب عرض المنطقة الممنوعة لنقطة موجودة في وسط سطح منطقة بريلوان الأولى. مع العلم أن:

$$V(x,y) = -2V_0 \left(\cos\frac{2\pi x}{a} + \cos\frac{2\pi y}{a}\right)$$

حيث $V(x,y)$ هو الكمون البلوري ، بينما V_0 عبارة عن ثابت .

8- باعتبار المادة المدروسة **ثنائية التكافؤ** ، ماهو الشرط اللازم حتى تكون **معدن** .

التمرين الثالث :

نعتبر إلكترون موجود في شبكة برافي طولها L تملك كمون **دوري** ضعيف أحادي البعد $V(r+R)=V(r)$ ، حيث يمكن اعتباره كاضطراب ، ويمكننا كتابة الهاملتوني $H=H_0+V$. و العناصر المصفوفية للكمون V تختلف عن الصفر **فقط** عندما يساوي الفرق $(\acute{k}-k)$ أحد أشعة الشبكة المعكوسة G ، ويمكن حسابها كمايلي :

$$\langle\acute{k}|V|k\rangle=\frac{1}{L^3}\int dr e^{i(k-\acute{k})r}\,V(r)=V_{\acute{k}-k}$$

.a

1- باستخدام نظرية الاضطرابات المستقرة أكتب عبارة التصحيح **الأول و الثاني** لطاقة الالكترون $\epsilon_0(k)$.
2- ماهي الحالات التي تتساوى فيها الطاقتين $\epsilon_0(k)$ و $\epsilon_0(\acute{k})$ ، وكيف نحل مشكلة **تباعد التصحيح الثاني** .

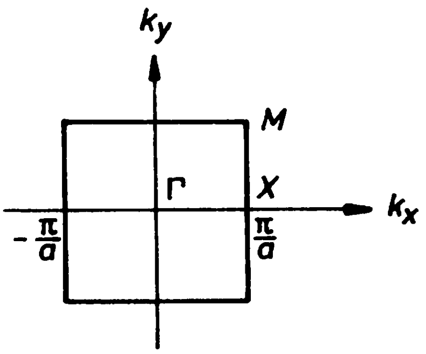
.b

1- أوجد العناصر المصفوفية للهاملتوني H بين الحالتين $|k\rangle$ و $|\acute{k}\rangle$ حيث $|\acute{k}\rangle=|k+G\rangle$ بدلالة ϵ_0, V_G
2- كيف نكتب أشعة الحالة $|\Psi\rangle$ للالكترونات ، واستنتج المعادلة المصفوفية للقيم الذاتية للهاملتوني H و استعملها في إيجاد المعادلة التي تستعمل في حساب عبارة عصابات الطاقة $E(k)$.
3- في حالة $|k|=|k+G|$ ماهو عرض المنطقة الممنوعة.

.c

1- لنفرض أن $V(x)=\tilde{V}\cos(2\pi x/a)$ ، حيث $\tilde{V}>0$ ، أوجد عبارة أشعة الحالة $|\Psi\rangle$ للالكترونات عند حدود منطقة بريلوان الأولى بدلالة $|k\rangle$ و $|\acute{k}\rangle$

إذا علمت أن الحالتين $|k\rangle$ و $|\acute{k}\rangle$ يقابلهما موجتين مستويتين في الفضاء الفيزيائي e^{ikx} و $e^{i\acute{k}x}$ ، قم بحساب كل من دالتي الموجة ψ_+ و ψ_-



الشكل-1- منطقة بريلوان الأولى لشبكة مربعة ، ذات ثابت شبكة a

حل السلسلة2

التمرين الأول

9- E_0 هي طاقة الالكترون في أي مدار من المدارات $f_n\rangle$ بينما γ هو التفاعل بين الجوار الأقرب .
10- بتعويض $|\psi\rangle = \sum_m C_m|f_m\rangle$ في معادلة معادلة شرودنجر $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ نجد أن :

$$\left[E_0 \sum_n |f_n\rangle\langle f_n| + \gamma \sum_n \{|f_n\rangle\langle f_{n+1}| + |f_{n+1}\rangle\langle f_n|\}\right] \sum_m C_m|f_m\rangle = E \sum_m C_m|f_m\rangle$$

باستخدام علاقات التعامد والتجانس نحصل على :

$$\left[E_0 \sum_{nm} C_m|f_n\rangle\,\delta_{nm} + \gamma \sum_{nm} C_m|f_n\rangle\delta_{m,n+1} + \gamma \sum_{nm} C_m|f_{n+1}\rangle\delta_{m,n} +\right] \times$$
$$\sum_m C_m|f_m\rangle = E \sum_m C_m|f_m\rangle$$

وبالتالي نحصل على :

$$E_0 \sum_n C_n|f_n\rangle + \gamma \sum_n C_{n+1}|f_n\rangle + \gamma \sum_n C_{n-1}|f_n\rangle\delta_{m,n} = E \sum_n C_n|f_n\rangle$$

بضرب طرفي المعادلة السابقة في$\langle f_m|$ واستخدام علاقات التعامد والتجانس نجد :

$$(E_0 - E)C_m + \gamma\{C_{m+1} + C_{m-1}\} = 0$$

11- إيجاد مصفوفة التحويل $M(E)$

$$\begin{pmatrix} a & b \\ e & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_m \\ C_{m-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{m+1} \\ C_m \end{pmatrix}$$

بالتوزيع نحصل على جملة المعادلتين التاليتين :

$$\begin{cases} aC_m + bC_{m-1} = C_{m+1} \\ eC_m + dC_{m-1} = C_m \end{cases}$$

بالمطابقة مع المعادلة الأخيرة التي تحصلنا عليها في السؤال الثاني نجد مصفوفة التحويل :

$$M(E) = \begin{pmatrix} \frac{E - E_0}{\gamma} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

12- بتطبيق **نظرية بلوخ** على الجوار الأقرب أي $\Psi(r+a) = e^{ika}\Psi(r)$ كما أن الشعاع $|f_n\rangle$ يتحول الى الشعاع $f_{n+1}\rangle$ نجد:

$$\Psi(r+a) = \sum_n C_n |f_{n+1}\rangle = \sum_n e^{ika} C_n |f_n\rangle = \sum_n C_{n-1} |f_n\rangle.$$

وهذا يعني $C_{n-1} = e^{ika} C_n$ أو $C_n = e^{ika} C_{n+1}$

13- بالتعويض في المعادلة المصفوفية نجد:

$$\begin{pmatrix} \frac{E - E_0}{\gamma} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_m \\ C_{m-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ika} C_m \\ e^{-ika} C_{m-1} \end{pmatrix}$$

نعيد الكتابة السابقة كمايلي :

$$\begin{pmatrix} \frac{E - E_0}{\gamma} - e^{-ika} & -1 \\ 1 & -e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_m \\ C_{m-1} \end{pmatrix} = 0$$

وهي تقبل حل غير معدوم اذا كان المحدد التالي يساوي الصفر :

$$\begin{vmatrix} \frac{E - E_0}{\gamma} - e^{-ika} & -1 \\ 1 & -e^{-ika} \end{vmatrix} = 0$$

بحساب المحدد السابق نجد طاقة الالكترون في البلورة :

$$E = E_0 + 2\gamma \cos ka$$

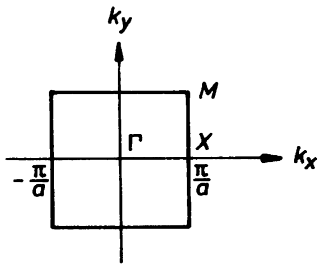
التمرين الثاني

-7 الطاقة الحركية للالكترون الحر تكتب ببساطة ب : $E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$

باستخدام الشكل المعطى في التمرين نجد : $\overline{\Gamma M}^2 = \overline{\Gamma X}^2 + \overline{XM}^2$ *وبما أن* $\Gamma X = XM$ نجد :

$$\overline{\Gamma M}^2 = 2\overline{\Gamma X}^2$$

النسبة $b = \frac{\frac{\hbar^2}{2m}\overline{\Gamma M}^2}{\frac{\hbar^2}{2m}\overline{\Gamma X}^2} = 2$



-8 يمكننا أن نكتب V المعطى بالتمرين :

$$V(x,y) = -V_0\left\{e^{\frac{2i\pi x}{a}} + e^{\frac{-2i\pi x}{a}} + e^{\frac{2i\pi y}{a}} + e^{\frac{-2i\pi y}{a}}\right\}$$

نلاحظ أن جميع معاملات Fourier في النشر هي $-V_0$ وبالتالي عرض المنطقة الممنوعة هو $\Delta = 2|V_0|$

.

-9 من أجل المواد **ثنائية التكافؤ** ، الشرط اللازم لكي تكون **معدنية** هو **تقاطع عصابات الطاقة** ، باستخدام النتيجة السابقة نجد الشرط : $E_M - E_X \leq 2|V_0|$

التمرين الثالث

.a .

-1 باستخدام نظرية الاضطرابات :

$$\epsilon(k) = \epsilon_0(k) + \langle k|V|k\rangle$$

التصحيح الأول $\epsilon(k) = \epsilon_0(k) + V_0$

التصحيح الثاني

$$\in (k) = \in_0 (k) + \sum_{\acute{K}=k+G} \frac{|\langle \acute{K}|V|K\rangle|^2}{\in_0 (k) - \in_0 (\acute{k})}$$

حيث $G \neq 0$

2- الحالات التي تتساوى فيها الطاقتين $\epsilon_0(k)$ و $\epsilon_0(\acute{k})$ هي عندما $K = \acute{k} + G$ وهذا حسب خواص منطقة بريلوان
.

ومن أجل حل **مشكلة التباعد** بسبب **انعدام مقام** المجموع في التصحيح الثاني يجب أن نلجأ الى استخدام نظرية الاضطرابات في حالة **وجود انحلال**. أي و $\epsilon_0(\acute{k}) = \epsilon_0(k)$.

.b .

-1 العناصر المصفوفية للهاملتوني H بين الحالتين $|k\rangle$ و $|\acute{k}\rangle$ حيث $|\acute{k}\rangle = |k+G\rangle$ بدلالة ϵ_0, V_G

$$\langle k|H|K\rangle = \epsilon_0(k)\,,\ \ \langle \acute{k}|H|\acute{K}\rangle = \epsilon_0(\acute{k}) = \epsilon_0(k+G)$$

$$\langle k|H|\acute{K}\rangle = V_{K-\acute{K}} = {V_G}^{*},\ \ \langle \acute{k}|H|K\rangle = V_{\acute{K}-K} = V_G$$

وبسبب كون الكمون V. حقيقي $V^* = V$ لذلك نجد $\ {V_G}^* = V_{-G}$

-2 أشعة الحالة $|\Psi\rangle$ للالكترونات سوف تكتب على شكل تركيب خطي للشعاعين $|K\rangle$ و $|\acute{K}\rangle$.

$$|\Psi\rangle = \alpha|K\rangle + \beta|\acute{K}\rangle = \alpha|K\rangle + \beta|k+G\rangle$$

ومنه المعادلة المصفوفية للقيم الذاتية للهاملتوني :

$$\begin{pmatrix} \epsilon_0(k) & {V_G}^* \\ V_G & \epsilon_0(k+G) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

في إيجاد المعادلة التي تستعمل في حساب عبارة عصابات الطاقة $E(k)$.

$$\begin{vmatrix} \epsilon_0(k) - E & {V_G}^* \\ V_G & \epsilon_0(k+G) - E \end{vmatrix} = 0$$

$$(\epsilon_0(k) - E)[\epsilon_0(k+G) - E] - |V_G|^2 = 0$$

3- في حالة $|k| = |k+G|$ فنحن بالضبط في حدود منطقة بريلوان الأولى وبالتالي $\epsilon_0(k) = \epsilon_0(k+G)$

ومنه معادلة القيم الذاتية سوف تصبح:

$$(\epsilon_0(k) - E)^2 - |V_G|^2 = 0$$

وهي تقبل حلين :

$$E_\pm = \epsilon_0(k) \pm |V_G|$$

وبالتالي فعرض المنطقة الممنوعة هو:

$$E_+ - E_- = 2|V_G|$$

.c .

1- في حالة $V(x) = \tilde{V}\cos(2\pi x/a)$ ، حيث $\tilde{V} > 0$ ، أوجد عبارة أ

في حدود منطقة بريلوان الأولى يكون $k = \frac{\pi}{a}$ يكون $G = \frac{-2\pi}{a}$ وبالتالي $\acute{k} = k + G = -\frac{\pi}{a}$

وهذا يعني أن $\epsilon_0(k) = \epsilon_0(\acute{k})$.

باعادة كتابة المعادلة المصفوفية لهذه الخالة الخاصة نجد:

$$\begin{pmatrix} \epsilon_0 & V_G{}^* \\ V_G & \epsilon_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = (\epsilon_0 \pm V_0) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

بحل هذه الجملة البسيطة نجد $\alpha = \pm\beta$ و بالتالي شرط التنظيم $\alpha^2 + \beta^2 = 1$ مايلي :

$$|\Psi\rangle^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\mathrm{K}\rangle \pm |\acute{\mathrm{K}}\rangle\}$$

وبالتالي

$$\Psi^{+} = e^{ikx} + e^{-ikx} \sim \cos kx$$

$$\Psi^{-} = e^{ikx} - e^{-ikx} \sim \sin kx$$

السلسلة3

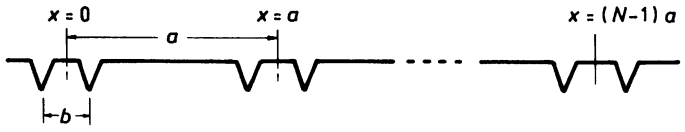
التمرين الأول:

نعتبر شبكة أحادية البعد ، طولها $L = Na$ تتكون من N جزيئ ثنائي الذرة ، حيث متوسط المسافة بين الذرتين التي تشكل الجزيئ هي b حيث $2b < a$ ، بينما يمثل a المسافة بين مركزي جزيئين متتاليين .

يمكننا تمثيل الكمون البلوري V كمجموع لدوال دلتا-ديراك متمركزة على الذرات كمايلي :

$$V = -A\sum_{n=0}^{N-1}\left[\delta\left(x - na + \frac{b}{2}\right) + \delta\left(x - na - \frac{b}{2}\right)\right]$$

حيث A عبارة عن عدد موجب ويأخذ العدد الطبيعي n القيم من 0 إلى $N-1$ و الشكل التالي يوضح ذلك:



1- في حالة إهمالنا الكمون البلوري ، أكتب عبارة الطاقة والدوال الموجية للالكترونات في البلورة.
2- أكتب الكمون البلوري على شكل نشر فورييه ، واستعمل شرط دورية الكمون V من أجل تحديد القيم المسموحة q و المعاملات V_q .

$$V(x) = \sum_q V_q e^{iqx}$$

3- أكتب عبارة المنطقة الممنوعة في تقريب الإلكترون **شبه الحر** .
4- ماهو عدد الحالات الموجودة في منطقة بريلوان الأولى.
5- إذا اعتبرنا إلكترون واحد لكل ذرة، فهل المادة المدروسة ناقلة أم عازلة (لا تقبل الإجابة دون تبرير)
6- كيف تصبح النتائج السابقة في حالة $2b = a$. فسر هذه النتيجة .

تذكير:

$$V_q = \frac{1}{a}\int_0^a V(x)e^{-iqx}dx \quad \text{و} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x - x_0)dx = f(x_0)$$

التمرين الثاني :

نعتبر شبكة مربعة ، ذات ثابت شبكة a:

14- أرسم منطقة بريلوان الأولى وحدد عليها الأبعاد في فضاء الشبكة المعكوسة .
15- بين أن الطاقة الحركية لإلكترون حر في النقطة M وهي رأس أحد زوايا منطقة بريلوان الأولى أكبر بنسبة b من الطاقة الحركية لإلكترون في النقطة X وهي نقطة تقاطع حدود منطقة بريلوان الأولى مع المحور k_x، المطلوب تحديد قيمة النسبة b .
16- أحسب بالتقريب عرض المنطقة الممنوعة لنقطة موجودة في وسط سطح منطقة بريلوان الأولى. مع العلم أن:

$$V(x,y) = -2V_0\left(\cos\frac{2\pi x}{a} + \cos\frac{2\pi y}{a}\right)$$

حيث $V(x,y)$ هو الكمون البلوري ، بينما V_0 عبارة عن ثابت .

17- باعتبار المادة المدروسة **ثنائية التكافؤ** ، ماهو الشرط اللازم حتى تكون **معدن** .

التمرين الثالث :

تعطى العبارة العامة لكثافة الحالة الالكترونية $g(E)$ محسوبة في وحدة الحجم :

$$g(E) = 2\int \frac{dS_E}{8\pi^3}\frac{1}{|\vec{\nabla}E|}$$

حيث يتم حساب المشتقات $\vec{\nabla}E$ بالنسبة لمركبات الشعاع $\vec{k}$ ، و يتم التكامل على سطح متساوي الطاقة في الفضاء $\vec{k}$.

a.

1- برهن العبارة السابقة مع استخدام رسم توضيحي.

2- باستخدام العبارة العامة أوجد كثافة الحالة من أجل الالكترونات الحرة .

b. تعطى طاقة الالكترونات وفق تقريب معين بدلالة الثوابت b, c, a والثوابت E_1, E_2, E_3 بالعبارة التالية :

$$E = -E_0\left(E_1\cos k_x a + E_2\cos k_y b + E_3\cos k_z\right)$$

1- باستخدام العبارة العامة أوجد كثافة الحالة أسفل عصابة الطاقة .
2- أحسب **محدد** مصفوفة الكتلة الفعالة ، وماذا تستنتج .

حل السلسلة3

التمرين الأول

18- في حالة اهمالنا الكمون البلوري ، تكون الالكترونات حرة وبالتالي طاقته عبارة عن **طاقة حركية** ، وتكتب

$$H = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$$

وبالتالي فحل معادلة شرودنجر $H\Psi = E\Psi$ هي موجة مستوية

$$\Psi(x) = Ae^{ikx}$$

$$\mathrm{E} = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$$

نقوم بتنظيم الدالة Ψ حيث

$$\int_0^L \Psi\,\Psi^*\mathrm{dx} = 1$$

نجد :

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}$$

باستخدام شروط الحدود الدورية : $\Psi(0) = \Psi(L)$ نجد :

$$e^{ikL} = 1$$

أي أن

$$k = \frac{2\pi n}{L}, n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots.$$

19- كتابة الكمون البلوري على شكل نشر فورييه

باستخدام دورية الكمون البلوري أي $V(x) = V(x+a)$. نجد أن $e^{iqx} = e^{iq(x+a)}$ ،

وبالتالي نجد $e^{iqa} = 1$ ومنه القيم المسموحة هي :

$$q = \frac{2\pi n}{a}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots.$$

باستخدام المعطيات :

$$V_q = \frac{-A}{a}\left[\int_0^a \delta\left(x - na + \frac{b}{2}\right)e^{-iqx} + \int_0^a \delta\left(x - na - \frac{b}{2}\right)e^{-iqx}dx\right]$$

$$= \frac{-A}{a}\left[e^{-iq\left(na-\frac{b}{2}\right)} + e^{-iq\left(na+\frac{b}{2}\right)}\right]$$

$$= -2e^{-iqna}\frac{A}{a}\cos\left(\frac{bq}{2}\right)$$

وحيث أن : $e^{iqna} = e^{i2\pi na} = 1$ فالعبارة النهائية للمعاملات V_q تكتب كمايلي :

$$V_q = \frac{-2A}{a}\cos\left(\frac{bq}{2}\right)$$

20- حسب تقريب الالكترون شبه الحر نجد المنطقة الممنوعة $\Delta E = 2|V_q|$ *وبالتعويض في العبارة السابقة نجد :*

$$\Delta E = \frac{2A}{a}\cos\left(\frac{bq}{2}\right)$$

21- عدد الحالات الموجودة في منطقة بريلوان الأولى يمكن حسابها كما يلي :
في بعد واحد نجد منطقة بريلوان الأولى محصورة بين $\frac{-\pi}{a} \le k \le \frac{\pi}{a}$

كما أنه حسب الحسابات السابقة لفأصغر تغير للشعاع k هو $\Delta k = \frac{2\pi}{L}$

وبالتالي فعدد الحالات في منطقة بريلوان الأولى دون احتساب السبين هو

$$\frac{2\pi}{a}\Big/\frac{2\pi}{L} = N$$

لأن $L = Na$

وبادخال السبين تصبح عدد الحالات هو $2N$

22- إذا اعتبرنا إلكترون واحد لكل ذرة فسوف يكون هناك $2N$ حالة وبالتالي سوف تكون **منطقة بريلوان الأولى ممتلئة** وبالتالي فالمادة **عازلة** .

23- في حالة $2b = a$ فسوف تتغير **دورية** الكمون V وتصبح $\frac{a}{2}$ وبالتالي سوف **يزداد عرض منطقة بريلوان الأولى ،**
وبالتالي سوف يصبح لدينا $4N$ حالة متاحة
وسوف يقوم N الكترون **بملئ نصف العصابة فقط** وبالتالي تصبح **المادة ناقلة**

التمرين الثالث

.a .

10- عدد قيم المحصورة K في فضاء القشرة بين E و $E + dE$ يساوي :

$$g(k)dk = \frac{2V}{(2\pi)^3}\int_{\text{القشرة}} d^3k$$

حيث d^3k عنصر حجمي من الفضاء $\vec{K}$ ، بأخذ dS_E عنصر مساحي من السطح $E = Cst$ وبالتالي نحصل على الحجم العنصري في الفضاء $\vec{K}$ *من الشكل* $d^3k = dS_E dk_\perp$ حيث $dE = \vec{\nabla}\mathrm{E}.\,\mathrm{d}\vec{\mathrm{k}} = |\vec{\nabla}\mathrm{E}|dk_\perp$ وبالتالي

$$g(E)dE = g(k)dk = \frac{2V}{(2\pi)^3}\int_{\text{القشرة}} dS_E dk_\perp = \frac{2V}{(2\pi)^3}\int_{\text{القشرة}} dS_E \frac{dE}{|\vec{\nabla}\mathrm{E}|}$$

ومنه نحصل على المطلوب باختزال :dE من الطرفين واعتبار V يساوي وحدة الحجوم

$$g(E) = \frac{2}{(2\pi)^3}\int_{\text{القشرة}} \frac{dS_E}{|\vec{\nabla}\mathrm{E}|}$$

-11 في حالة الالكترونات **الحرة** تكون الطاقة $E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$ وبالتالي $|\vec{\nabla}\mathrm{E}| = \frac{\hbar^2}{m}k$. بتطبيق العلاقة السابقة نجد:

$$g(E) = \frac{2}{(2\pi)^3}\int_{\text{القشرة}} \frac{2\pi k dk}{\frac{\hbar^2}{m}k} = \frac{m}{2\pi^2\hbar^2}k = \frac{m}{\pi^2\hbar^2}\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2}\left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{E}$$

.b

-1 إيجاد كثافة الحالة:

$$\frac{\partial E}{\partial k_x} = E_1 a \sin k_x a$$

$$\frac{\partial E}{\partial k_y} = E_2 b \sin k_y b$$

$$\frac{\partial E}{\partial k_z} = E_3 c \sin k_z c$$

وبالتالي نجد:

$$|\vec{\nabla}E| = \sqrt{(E_1 a \sin k_x a)^2 + \left(E_2 b \sin k_y b\right)^2 + (E_3 c \sin k_z c)^2}$$

في أسفل عصابة الطاقة $k{\sim}0$ وبالتالي نستطيع تقريب الكتابة السابقة للجذر $|\vec{\nabla}E|$ كمايلي :

$$|\vec{\nabla}E| \simeq \sqrt{(E_1 a^2 k_x)^2 + \left(E_2 b^2 k_y\right)^2 + (E_3 c^2 k_z)^2}$$

ومن أجل تسهيل حساب التكامل نستبدل المتغيرات كمايلي :

$$\mathcal{K}_x = \sqrt{E_1}ak_x \quad , \quad \mathcal{K}_y = \sqrt{E_1}bk_y \quad , \quad \mathcal{K}_z = \sqrt{E_1}ck_z$$

وبهذا التقريب وهذه المتغيرات تصبح عبارة الطاقة المعطاة في قعر منطقة بريلوان كما يلي :

$$E \simeq \frac{1}{2}({\mathcal{K}_x}^2 + {\mathcal{K}_y}^2 + {\mathcal{K}_z}^2) + Const = \frac{1}{2}\mathcal{K}^2 + const$$

و هذا باعتبار E_0 وحدة قياس الطاقة

ومنه تصبح الحسابات سهلة جدا ونحصل على

$$g(E) = (E_1 E_2 E_3 a^2 b^2 c^2)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{\pi^2}\sqrt{2E}$$

.

2- باستخدام العبارة العامة في حساب الكتلة الفعالة نجد

$$\det M = \frac{\hbar^6}{E_1 E_2 E_3 a^2 b^2 c^2}$$

نلاحظ أن عبارة كثافة الحالة للالكترونات الحرة و تلك المحسوبة في الجزء ***b*** تصبح نفسها بشرط استبدال الكتلة الفعالة بدلالة $\det M$

السلسلة4

التمرين الأول

بالتالي فالحد

$$v_c \to V_x = \frac{e^2}{r} e^{-\mu_r}$$

$$V_c = \lim_{\mu \to 0} v_y$$

اذن:

$$v_\varphi = e^2 \int_0^\infty \frac{r^x dr}{r} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} e^{-\mu r} e^{-iar\cos\theta} \sin\theta d\theta d\varphi$$

$$= -2\pi e^2 \int_0^\infty r dr \int_1^{-1} e^{-\mu r} e^{-iar\varepsilon} d\varepsilon$$

حيث:

$$\cos\theta = \varepsilon$$

$$0 \to 0 \Rightarrow \varepsilon = 1$$

$$0 \to \pi \Rightarrow \varepsilon = -1$$

$$d\varepsilon = -\sin d\theta$$

$$= 2\pi e^2 \int_0^\infty r dr \int_{-1}^{1} e^{-\mu r} e^{-iqr\varepsilon} d\varepsilon$$

$$= 2\pi e^2 \int_0^\infty r d r e^{-\mu r} \int_{-1}^{1} e^{-iqr\varepsilon} d\varepsilon$$

$$= 2\pi e^2 \int_0^\infty r d r e^{-\mu r} \int_0^\infty \not{r} d r e^{-iqr\varepsilon} \int \frac{-1}{iq\not{r}} e^{-iqr\varepsilon} \Big|_{-1}^{1}$$

$$= \frac{-4\pi e^2}{q} \int_0^\infty e^{-\mu r} \left(\frac{e^{-iqr} - e^{iqr}}{2i} \right) dr$$

$$= \frac{4\pi e^2}{2iq} \int_0^\infty \left[-e^{-(iq+4)r} + e^{(iq-4)r} \right] dr$$

$$= \frac{4\pi e^2}{2iq} \left\{ \frac{e^{-(iq+4)r}}{iq+4} \Big|_0^\infty + \frac{e^{(iq-4)r}}{iq-4} \Big|_0^\infty \right\}$$

$$= \frac{4\pi e^2}{2iq} \left\{ \frac{-1}{iq+4} - \frac{1}{iq-4} \right\}$$

$$v_\varphi = \lim_{\mu \to 0^+} \frac{+4\pi e^2}{\mu^2 + q^2} \Rightarrow v_\varphi = \frac{4\pi e^2}{q}$$

$$v_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{i, k\sigma, k'\sigma'} \frac{4\pi e^2}{q} C^+_{k+q\sigma} C^+_{k'-q\sigma'} C_{k'\sigma'} C_{k\sigma}$$

في حالة استخدام دوال ونير كأساس نجد :

$$H=\sum_{i\sigma_1 j\sigma_2}\langle i\sigma_1|h|j\sigma_2\rangle C^+_{i\sigma_1}C_{j\sigma_2}+\frac{1}{2}\sum_{i\sigma_1 j\sigma_2 i'\sigma_3 j'\sigma_4}\langle i\sigma_1 j\sigma_2|v|i'\sigma_3 j'\sigma_4\rangle C^+_{i\sigma_1}C^+_{j\sigma_2}C_{j'\sigma_4}C_{i'\sigma_3}$$

التمرين الثاني :

في ما يخص البوزومات نستبدل المبدل المضاد بالمبدل

F ⟶ B

{ } [ ]

يعطي $H=\sum h(i)$

$h(i)$: لجسم منفرد

كثافة H باستخدام Ψ^+, Ψ

$$H=\sum_{vv`}<\Phi v|h|\Phi v`>\,^1_v C\,C_{V`}$$

$$H=\sum_{n`\sigma`n\sigma}<\Phi_{n\sigma}|h|\Phi_{n`\sigma`}>C^+_{n\sigma}\,C_{n`\sigma`}$$

$$H=\sum_{n`\sigma`n\sigma}\int dr^3\,\Phi(r)^r_n<\sigma|h|\sigma`>\Phi(r`)_{n`}C^+_{n\sigma}\,C_{n`\sigma`}$$

$$H=\sum_{\sigma\sigma`}\int dr^3\,{}^+_\sigma\Psi(r)h_{\sigma\sigma`\Psi(r`)_{\sigma`}}$$

في حالة جسم يمتلك سبين $\frac{1}{2}$ يقسم الي قسمان يمكن اختصار

قسم 1: يكون ↑

قسم 2: يكون ↓

الكتابة في مايلي :(شعاع)(من دون σ)

$$\Psi(r)^+=(\,{}^+_\downarrow\Psi(r)\quad {}^+_\uparrow\Psi(r))$$

$$\Psi(r)=\begin{pmatrix}\Psi(r)_\uparrow\\ \Psi(r)_\downarrow\end{pmatrix}$$

$$H(r)=\begin{bmatrix}h(r)_{\uparrow\uparrow} & h(r)_{\uparrow\downarrow}\\ h(r)_{\downarrow\uparrow} & h(r)_{\downarrow\downarrow}\end{bmatrix}$$

$$H=\int \Psi(r)^+h(r)\Psi(r)dr^3$$

لا يجب الخلط بين هذا العبارة وعبارة القيمة المتوسطة في ميكانيك الكم لان $\Psi(r)$ و Ψ^+ هما موثرين حقل وليسا دالتين

التمرين الثالث :

$$G^R(r-r', \sigma t) = -i\frac{\theta(t)}{v}\sum_{kk'} e^{ik(r-r')}\, e^{i(k-k')r'}$$

$$<\{ (C_{k\sigma}(t) , C^+_{k'\sigma'}0) \}> r \rightarrow r + R$$

$$\square\ R\rightarrow \quad r'\rightarrow r'+ R$$

$$G^R(r + R - (r' + R)\ \sigma t) = -i\,\frac{\theta(t)}{v}\sum_{kk'} e^{ik}$$

$$\sum_{kk'} e^{ik(r+R-R-r')}\, e^{i(k-k')(r'+R)}$$

$$<\{ C_{k\sigma}(t) , C^+_{k'\sigma'}(0) >\}$$

$$=-i\,\frac{\theta(t)}{v}\sum_{kk'} e^{ik(r-r')}\, e^{i(k-k')r'} e^{i(k-k')R}$$

$$<\{ C_{k\sigma}(t) , C^+_{k'\sigma'}(0) \}>$$

مهما يكن الانسحاب دالة Green و بذلك فان :

$$e^{\,i(k-k')R} = 1 \qquad \rightarrow \qquad k=k'$$

$$G(r-r' , \sigma t) = -i\frac{\theta(t)}{v}\sum_{k} e^{ik(r-r')}<\{ C_{k\sigma}(t) , C_{k\sigma'}(0) \}>$$

$$G\ (r-r' , \sigma\ t) = \frac{1}{v}\sum_{k} e^{ik(r-r')}(-i\theta(t) <\{C_{k\sigma}(t) , C_{k\sigma'}(0)\}>$$

$$\rightarrow \quad G^R(k\sigma t) = -i\theta(t) < \{C_{k\sigma}(t) , C^+_{k\sigma'}\} >$$

هذا هو تحويل فورييه لدالة Green G(r-r' , σt)

التمرين الرابع :

اوجد في حالة الجسيم المنفرد

$$C(k\sigma, t) = -\int_{-\infty}^{+\infty} p(k\sigma, E)e^{-iEt}\ \frac{dE}{2\pi}$$

$$C(k\sigma, \omega) = -\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t} C(k\sigma, t)dt$$

$$=-\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} P(k\sigma, E)e^{i(\omega-E)t}\, dt\frac{dE}{2\pi}$$

$$= -\int_{-\infty}^{+\infty} P(k\sigma,\omega)\frac{dE}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(\omega-t)}dt$$

$$= -\int_{-\infty}^{+\infty} P(k\sigma,E)\frac{dE}{2\pi}2\pi\,\delta(\omega-E)$$

$$= -P(k\sigma,\omega)$$

$$C(k\sigma,\omega) = -P(k\sigma,\omega)$$

التمرين الخامس:

2- اكتب C(kσ,ω) بدلالة توزيع فرمي fω وتوزيع بوزnω حيث الكمون الكيميائي $\mu = 0$

$$A(k\sigma,C) = -(1 \pm e^{-\beta\hbar\omega})\, P(k\sigma,E)$$

لدينا :

$$C((k\sigma,\omega) = -P(k\sigma,\omega) = \frac{A(k\sigma,\omega)}{1 \pm e^{-\beta\hbar E}}$$

$$f\omega = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}+1} \quad ; \quad n\omega = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}\;\;-1}$$

$$= 2\,\pi\,\delta\,(E - \frac{\widetilde{E_{ka}}}{\hbar})\,(1\,\pm e^{-\beta\widetilde{E_{ka}}})\,Z_G^{-1}\sum_n e^{-\beta\widetilde{E_n}}\,\langle n|C_{ka}C_{ka}^{+}|n\rangle$$

$$= 2\,\pi\,\delta\,(E - \frac{\widetilde{E_{ka}}}{\hbar})\,(1\,\pm e^{-\beta\widetilde{E_{ka}}})\,Z_G^{-1}\sum_n e^{-\beta\widetilde{E_n}}\,\underbrace{\langle C_{ka}C_{ka}^{+}\rangle}$$

نحاول استخراج مؤثر الحد

$$[C_{ka}, C_{ka}^{+}] = C_{ka}C_{ka}^{+} \pm C_{ka}^{+}C_{ka} = 1$$

$$\Rightarrow C_{ka}C_{ka}^{+} = 1 \pm C_{ka}^{+}C_{ka}$$

$$\langle C_{ka}C_{ka}^{+}\rangle = 1 \pm \langle C_{ka}^{+}C_{ka}\rangle$$

$$\langle C_{ka}C_{ka}^{+}\rangle = 1 \pm \begin{Bmatrix} n_{ka} \\ f_{ka} \end{Bmatrix}$$

$$A\,(ka\,,E_{ka}) \;=\; 2\,\pi\,\delta\,(E-\frac{\widetilde{E_{ka}}}{\hbar})\,\frac{1\pm\begin{Bmatrix} f_{ka} \\ n_{ka}\end{Bmatrix}}{1\pm\begin{Bmatrix} f_{ka} \\ n_{ka}\end{Bmatrix}}$$

$$\boxed{A\,(ka\,,E_{ka}) \;=\; 2\,\pi\,\delta\,(E-\frac{\widetilde{E_{ka}}}{\hbar})}$$

$$G^{f0}(ka,\omega) \;=\; \lim_{\eta\to0^+}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{A(ka,E)}{\omega-\varepsilon+i\eta}\;\frac{dE}{2\pi}$$

التمرين السادس:

باستخدام معادلة الحركة لدالة غرين أوجد $G^R(k\sigma,\omega)$ من اجل جسيمات غير متفاعلة $V=0$

$$(i\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\tilde{E}}{\hbar})G^R(k\sigma,t)=\delta(t)$$

$$G^R(k\sigma,t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-i\omega t}\,G^R(k\sigma,\omega)dw$$

$$\delta(t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-i\omega t}d\omega$$

$$(i\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\tilde{E}}{\hbar})\,\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-i\omega t}G^R(k\sigma,\omega)d\omega=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-i\omega t}d\omega$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}(\omega-\frac{\tilde{E}}{\hbar})G^R(k\sigma,\omega)e^{-i\omega t}d\omega=\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-i\omega t}d\omega$$

بالمطابقة:

$$(\omega-\frac{\tilde{E}}{\hbar})\,G^R(k\sigma,\omega)=1$$

$$\Rightarrow G^R(k\sigma,\omega)=\frac{1}{\omega-\frac{\tilde{E}}{\hbar}+0^+}$$

التمرين السابع:

نعتبر N ذرة تشكل شبكة وحيدة البعد على المحورx ثابت الشبكة هو a مع كمون دوري

$$V(x)=V(x+a)$$

نعتبر ان عصابة الطاقة تشكلت بسبب امتداد المدارات3s نسمي المدارات الذرية هذه بالرمز $|m\rangle = |\phi_m\rangle$ متمركزة حول مواقع الذرات

$$\langle \phi_m | H | \phi_m \rangle = \varepsilon$$

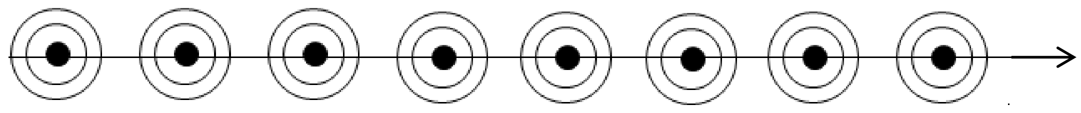
$$\langle \phi_m | H | \phi_n \rangle = -t\delta_{n,m\pm 1}$$

حيث نعتبر التقاطع الاكبر بين مدارات الجوار الاقرب الاول فقط حيث $t \in R$

المطلوب اوجد طاقة التشتت E_k

الحل

$$| \psi_k > = \sum_{m=1} C_{k,m} | \phi_m >$$



دوال بلوخ

$$\psi_k(x+a) = e^{ika}\,\psi(x)$$

ايجاد E_k

$$H | \psi_k > = E_k | \psi_k >$$

$$\psi_k(x+a) = \sum_{m=1}^{N} C_{mk}\,\phi_m(\,x - ma + a\,)$$

$$= \sum_{m=1}^{N} C_{mk}\,\phi_m(x-(m-1)a)$$

نضع

$$n = m - 1 \quad \Rightarrow \quad m = n + 1$$

$$n = m - 1 \quad \Rightarrow \quad n = 0$$

$$\psi_k(x + a) = \sum_{n=0}^{N-1} C_{n+1,k}\ \phi_{n+1}(x - na)$$

$$= C_{1k}\phi_1(x) + C_{2k}\phi_2(x) + \cdots\cdots\cdots + C_{Nk}\phi_N(x - (N-1)a) \quad \cdots\cdots (*)$$

$$\psi_k(x) = C_{1k}\phi_1(x - a) + C_{2k}\phi_2(x - 2a) + \cdots\cdots\cdots + C_{Nk}\phi_N(x - Na) \quad \cdots\cdots (**)$$

باستخدام شروط الحدود الدورية

$$\phi_1(x) = \phi_N(x - Na)$$

تصبح$(*)$

$$(*) = C_{2k}\phi(x-1) + C_{3k}\phi(x - 2a) + \cdots\cdots\cdots + C_{Nk}\phi_N(x - (N-1)a) + C_{1k}\phi_N(x - Na)$$

نجد الحالات التراجعية التالية$(*)$و$(**)$بمطابقة

$$C_{m+1,k} = e^{ika}C_{mk}$$

$$C_{mk} = e^{ika}C_{m-1k}$$

$$C_{mk} = e^{ika}C_{m-2k}$$

$$C_{mk} = e^{imka}C_{0k}$$

$$|\psi> = C_{0k}\sum_{m=1}^{N} e^{imka}|\phi_m>$$

نستخرج C_{0k} بواسطة علاقة التنظيم $<\psi|\psi> = 1$

$$<\psi| = C_{0k}^*\sum_{m\prime=1}^{N} e^{-im\prime ka}|\phi_{m\prime}>$$

التمرين الثامن:

- اوجد محدد سلاتر لثلاثة الكترونات موزعة على ثلاثة مستويات طاقوية للالكترونات

الحل

$$=\frac{1}{\sqrt{v}}\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{vmatrix} e^{-ikr_{1|\uparrow 1>}} & e^{-ikr_{2|\uparrow 2>}} & e^{-ikr_{3|\uparrow 3>}} \\ e^{-ikr_{1|\downarrow 1>}} & e^{-ikr_{2|\downarrow 2>}} & e^{-ikr_{3|\downarrow 3>}} \\ e^{-ik'r_{1|\uparrow 1>}} & e^{-ik'r_{2|\uparrow 2>}} & e^{-ik'r_{3|\uparrow 3>}} \end{vmatrix}$$

التمرين التاسع:

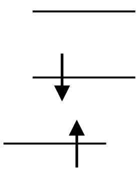
يكتب هاملتونيان الكترونات غير متفاعلان كما يلي :

مستقل عن السبين :h/ H=h(1)+h(2)

$[H ,S_z]=[H , S^2]=[S^2 , S_z]=0$

موزعة كما يلي :

$E_3 \emptyset 3$



E_2 $\emptyset 2$

E_1 $\emptyset 1$

دالة الجسيم المنفرد تعطى ب: $h\emptyset_{n\sigma} \quad / \quad \sigma = \downarrow\uparrow = E_n\emptyset_{n\sigma}$

$\emptyset_{1\uparrow}=\emptyset_1(r)\alpha \quad / \alpha = |\uparrow>$

$\emptyset_{2\uparrow}=\emptyset_2(r)\beta \quad / \beta = |\downarrow>$

1- اكتب محدد سلاتر لالكترونين

2- هل يمكن فصل الجزء المتعلق بالسبين عن الجزء الفضائي

فسر الاجابة

3- بين ان : $\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi(1,2) + \psi'(1,2)|$

الحل :

1- محدد سلاتر ψ_s $=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} \emptyset_1(r_1)\alpha(1) & \emptyset_1(r_2)\beta(2) \\ \emptyset_2(r_1)\alpha(1) & \emptyset_2(r_2)\beta(2) \end{vmatrix}$

2- نلاحظ انه يمكن فصل الجزء الفضائي عن الجزء المتعلق بالسبين في محدد سلاتر لان ψ_s هو دالة ذاتية لكل من H وSz وليس دالة ذاتية لS^2

$S^2={}_1S+ S_2+S_2S_12$

ولكن$\{H,Sz,S^2\}$=Ecoc

وبالتالي توجد جملة كاملة من الاشعة الذاتية المشتركة بينهم والتي يمكن ان نحدها

3- حيث لدينا

$\psi(1,2) = 1/2$(جزء فضائي متناظر)(جزء سبين ضد متناظر)

$\psi(1,2) = 1/2$(جزء فضائي متناظر)(جزء سبين ضد متناظر)

لما يكون ضد متناظر يكون باشارة (-)

$$\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)$$

متناظر يكون باشارة (+)

$$\alpha(1)\beta(2)+\alpha(2)\beta(1)$$

ومنه:

$$\Psi(1.2)=\frac{1}{2}[\emptyset_1(r_1)+\emptyset_2(r_2)+\emptyset_1(r_2)+\emptyset_2(r_1)][\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)]$$

$$\Psi'(1.2)=\frac{1}{2}[\emptyset_1(r_1)+\emptyset_2(r_2)-\emptyset_1(r_2)+\emptyset_2(r_1)][\alpha(1)\beta(2)+\alpha(2)\beta(1)]$$

بالحساب نجد: Ψ_S

أحسب S_z و S^2 في هذه الحالة

لدينا $S_z=S_{1z}+S_{2z}$

التمرين العاشر:

$$\widetilde{H}=\sum_{k\sigma}\tilde{E}_{k\sigma}\,C_{k\sigma}^{+}C_{k\sigma}$$

$$\tilde{E}_{k\sigma}=\delta_{k\sigma}-\mu N_{k\sigma}$$

المطلوب $A(k\sigma.w)$ و $G^R(k\sigma.w)$

الحل

إذا كان عدد الجسيمات m أكثر من n بجسيم واحد $\langle m|C_{k\sigma}^{+}|n\rangle=0$

وعليه يكون

$$\tilde{E}_m-\tilde{E}_n=\tilde{E}_{K\sigma}$$

$$A(k\sigma.w)=-P(k\sigma.w)(1\pm e^{-\beta Eh})$$

$$\mathrm{P}(k\sigma.w)=2\pi Z_G^{-1}\sum_{n.m}e^{-\beta\tilde{E}_n}|\langle m|C_{k\sigma}^{+}|n\rangle|^2(1\pm e^{-\beta Eh})\delta(E-\frac{(E_m-E_n)}{h}$$

$$\mathrm{A}(k\sigma.w)=2\pi Z_G^{-1}\delta\left(E-\frac{\tilde{E}_{k\sigma}}{h}\right)(1\pm e^{-\beta Eh})\sum_{n.m}e^{-\beta\tilde{E}_1}\langle n|C_{k\sigma}|m\rangle\langle m|C_{k\sigma}^{+}|n\rangle$$

التمرين الحادي عشرة:

1) بين أن $C(k\sigma.\omega) = -p(k\sigma.\omega)$

2) باستخدام العبارة الرياضية $\frac{1}{X \pm i0^+} = p\left(\frac{1}{X}\right) \pm i\pi\delta(X)$

أوجد العلاقة بين $A(k\sigma.w)$ و$G^R(k.w)$

3) استنتج العلاقة بين $C(k\sigma.w)$ و$^R(k.w)$

الحل :

1) لدينا : $C(K\sigma.t) = -\int_{-\infty}^{+\infty} P(k\sigma.\varepsilon)\, e^{i\varepsilon t}\frac{d\varepsilon}{2\pi}$

$$C(K\sigma.w) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iwt}\, C(k\sigma.t)dt$$

$$C(K\sigma.w) = -\int_{-\infty}^{+\infty} e^{iwt}\left[\int_{-\infty}^{+\infty} P(k\sigma.\varepsilon)\, e^{i\varepsilon t}\frac{d\varepsilon}{2\pi}\right] dt$$

$$= -\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\varepsilon}{2\pi} P(k\sigma.\varepsilon)\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(w-\varepsilon)t}\,\mathrm{dt}$$

$$\boldsymbol{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(w-\varepsilon)t}\,\mathrm{dt} = 2\pi\delta(w - \varepsilon)}$$

حيث

دالة زوجية

$$C(K\sigma.w) = -\int_{-\infty}^{+\infty} p(k\sigma.\varepsilon)\delta(\mathrm{w}-\varepsilon)d\varepsilon$$

ومنه $C(k\sigma.\omega) = -p(k\sigma.\omega)$

2) $G^R(k\sigma.w) = \lim_{n\to 0^+}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{A(k\sigma.\varepsilon)}{w-\varepsilon+in}\frac{d\varepsilon}{2\pi}$

$$G^R(k\sigma.w) = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{A(k\sigma.\varepsilon)}{w-\varepsilon+i0^+}\frac{d\varepsilon}{2\pi}$$

$$G^R(k\sigma.w) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k\sigma.\varepsilon)p\left(\frac{1}{w-\varepsilon}\right)\frac{d\varepsilon}{2\pi} - \frac{i}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} A(k\sigma.\varepsilon)\delta(w-\varepsilon)\,d\varepsilon$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} A(k\sigma.\varepsilon)p\left(\frac{1}{w-\varepsilon}\right)\frac{d\varepsilon}{2\pi} \qquad ★$$

نـهتم بالـجزء التخيلـي للحصول على A:

$$G^R(k\sigma.w) = \qquad -\frac{i}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} A(k\sigma.\varepsilon)\delta(w-\varepsilon)\, d\varepsilon \qquad ✪$$

$$G^R(k\sigma.w) = \qquad -\frac{i}{2}A(k\sigma.w) \qquad ✪$$

$$A(k\sigma.w) = -2I_m G^R(k\sigma.w)$$

$$C(k\sigma.w) = \left(1 \pm e^{-\beta wh}\right)^{-1} A(k\sigma.w) \quad (3$$

التمرين الثاني عشرة:

نسلط حقل مغناطيسي غير متجانس يتعلق ب B (r,t) و$t=t_0$ لهدف دراسة خواصها المغناطيسية نقوم باهمال استجابة العزوم الناتجة عن الحركة المدارية امام استجابة السبين الالكترونات يعطى العزم المغناطيسي $\vec{\mu} = \vec{s}\frac{-e}{m}$

و التاثير الخارجي H^{ext} $r(t)=-\int m(t)B(r,t)d^3$:

$t<t_0$

كثافة العزوم المغناطيسية

$$m(r) = -\frac{e}{mc}\overrightarrow{s(r)}$$

باستخدام نظرية الاستجابة الخطية اوجد

$$\delta < m_i > (r,t)$$

واستنتج الحساسية المغناطيسية X(q,ω)

الحل:

مؤثر كثافة السبين $s(r) = s_i \sum_{i=1}^{n} \delta(r-r_i)$

$$C_{k+r}(t)\left|n > = e^{i\frac{\widetilde{H}}{\hbar}t} C_{k+q,\sigma}\, e^{-i\frac{\widetilde{H}}{\hbar}t}\right| n >$$

$$C_{k+q,\sigma}(t) = e^{-i\frac{\tilde{E}_{k+q,\sigma}}{\pi}t}\, C_{k+q,\sigma}$$

و منه :

$$n_{\tilde{H}}(q,t)=\sum C^{A}_{K,\sigma}(t)C_{k+q,\sigma}(t)$$

$$D^{2}(q,t-t')=-i\frac{\theta(t-t')}{v}\sum_{k\sigma,k'\sigma'}\left(e^{\frac{i(\tilde{E}_{k\sigma}-\tilde{E}_{k+q,\sigma})t}{\hbar}}\right)\left(e^{\frac{i\left(\tilde{E}_{k'\sigma'}-\tilde{E}_{k'+q,\sigma'}\right)t'}{\hbar}}\right)$$

$$>]C^{+}_{k,\sigma}C_{k+q,\sigma},C^{+}_{k'\sigma'}C_{k'-q,\sigma'}[<$$

A$\{B,C\}D-AC\{B,D\}+\{A,C\}DB-C\{A,D\}B$]=AB,CD[

$$=C^{+}_{k\sigma}\{C_{k+q,\sigma},C^{+}_{k'\sigma'}\}C_{k'-q,\sigma'}-C^{+}_{k\sigma}C^{+}_{k'\sigma'}\{C_{k+q,\sigma},C_{k'-q,\sigma'}\}+\{C^{+}_{k\sigma'}C^{+}_{k'\sigma'}\}C_{k'-q,\sigma'}C_{k+q,\sigma}-C^{+}_{k'\sigma'}\{C^{+}_{k\sigma'},C_{k'-q,\sigma'}\}C_{k+q,\sigma}$$

$\binom{k+q=k'}{k=k'-q}$ le méme k=k'-q

$$=(C^{+}_{k\sigma}C_{k'-q,\sigma'}-C^{+}_{k'\sigma'}C_{k+q,\sigma})\delta_{k+q\sigma,k'\sigma'}$$

$$D^{2}(q,t-t')=-i\frac{\theta(t-t')}{v}\sum_{k\sigma,k'\sigma'}\left(e^{\frac{i(\tilde{E}_{k\sigma}-\tilde{E}_{k+q,\sigma})t}{\hbar}}\right)\left(e^{\frac{i\left(\tilde{E}_{k'\sigma'}-\tilde{E}_{k'+q,\sigma'}\right)t'}{\hbar}}\right)$$

$$>\delta_{k+q\sigma,k'\sigma'}]\ C^{+}_{k,\sigma}C_{k'+q,\sigma'},C^{+}_{k'\sigma'}C_{k\ \ -q,\sigma}[<$$

K=k'-q $\qquad \sigma=\sigma'$

$$=\frac{-i\theta(t-t')}{v}\sum_{k\sigma}e^{i\frac{(t-t')}{\hbar}(\tilde{E}_{k\sigma}-\tilde{E}_{k+q,\sigma})}\left[<C^{+}_{k\sigma}C_{k\sigma}>-<C^{+}_{k+q\sigma}C_{k-q\sigma}>\right]$$

$$D^{2}(q,t-t')=-i\frac{\theta(t-t')}{v}\sum e^{i\frac{(t-t')(\tilde{E}_{k\sigma}-\tilde{E}_{k+q,\sigma})}{\hbar}}(f_{k\sigma}-f_{k+q\sigma})$$

تحويل فوريي

$$D^{R}(q,\omega)=\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i\omega t}D^{R}(q,t)dt \qquad t'=0 \qquad t>0 \quad \theta=1$$

$$=\frac{-i}{v}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i\omega t}\sum e^{i\frac{t(\tilde{E}_{k\sigma}-\tilde{E}_{k+q,\sigma})}{\hbar}}(f_{k\sigma}-f_{k+q\sigma})$$

$$=\frac{-i}{v}\sum_{k\sigma}(f_{k\sigma}-f_{k+q\sigma})\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i\frac{t(\tilde{E}_{k\sigma}-\tilde{E}_{k+q,\sigma+\omega})t}{\hbar}}dt$$

$$\frac{-i}{v}\sum_{k\sigma}(f_{r-\sigma}-f_{r+q\sigma})\lim_{n\to 0^{+}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i(\frac{\tilde{E}_{K\sigma}-\tilde{E}_{K+q\widetilde{\sigma+\omega}+\iota n)t}}{\hbar}}dt$$

$$\frac{-i}{v}\sum_{k\sigma}(f_{r-\sigma}-f_{r+q\sigma})\left(\frac{-i}{\frac{\tilde{E}_{K\sigma}-\tilde{E}_{K+q\widetilde{\sigma+\omega t}}+\iota 0^{+})t}{\hbar}}\right)$$

D^R(q,ω)=$\frac{-1}{v}\sum_k(f_{k\sigma-}f_{k+q\sigma})\frac{1}{\tilde{E}_{K\sigma}-\tilde{E}_{K+q\sigma}\widetilde{+\hbar\omega}+\iota 0^+)}$)=$\frac{1}{h}$ωX(q,

المراجع

1- Robert W. Batterman - A Middle Way_ A Non-Fundamental Approach to Many-Body Physics-Oxford University Press (2021)
2- White, Mary Anne - Physical properties of materials-CRC Press (2019)
3- Albert-Laszlo Barabasi, Harry Eugene Stanley - Fractal concepts in surface growth-Cambridge University Press (1995)
4- Richard M. Martin - Electronic Structure_ Basic Theory and Practical Methods, 2nd Edition-Cambridge University Press (2020)
5- (Cambridge topics in mineral physics and chemistry 4) Martin T. Dove - Introduction to lattice dynamics-Cambridge University Press (1993)
6- D.W. Snoke - Instructor Solutions Manual for Solid State Physics_ Essential Concepts (2009)
7- (UNITEXT for Physics) Attilio Rigamonti, Pietro Carretta (auth.) - Structure of Matter_ An Introductory Course with Problems and Solutions-Springer International Publishing (2015)
8- Michael V Sadovskii - Diagrammatics Lectures on Selected Problems in Condens Diagrammatics Lectures on Selected Problems in Condensed Matter Theory-World Scientific Publishing Co. (2006)
9- Chaikin P.M., Lubensky T.C. - Principles of Condensed Matter Physics-Cambridge University Press (2000)
10- David L. Goodstein - States of matter-Dover Pubns (2002)
11- Joseph A., Jr. Angelo - Solid Matter (States of Matter) -Facts on File (2011)
12- (Advanced Texts in Physics) Harald Ibach, Hans Lüth (auth.) - Solid-State Physics_ An Introduction to Principles of Materials Science-Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2009)
13- J M Ziman - Principles of the theory of solids-Cambridge, University Press (1972)
14- (The Manchester Physics Series) J. R. Hook, H. E. Hall - Solid state physics-Wiley (1991)
15- (Addison-Wesley series in solid state sciences) M. Ali. Omar - Elementary Solid State Physics_ Principles and Applications-Addison-Wesley (1975)
16- R. J. Singh - Solid State Physics-Pearson Education (2011)
17- J. S. Blakemore - Solid State Physics-Cambridge University Press (1985)
18- Roger James Elliott, Alan Frank Gibson - An Introduction to Solid State Physics and Its Applications-Macmillan (1974)
19- Michael Tinkham - Group Theory and Quantum Mechanics-Dover Publications (2003)
20- David W. Snoke - Solid State Physics_ Essential Concepts-Cambridge University Press (2020)
21- D.W. Snoke - Instructor Solutions Manual for Solid State Physics_ Essential Concepts (2009)
22- Hendrik Bluhm, Thomas Brückel, Markus Morgenstern, Gero von Plessen, Christoph Stampfer - Electrons in Solids-De Gruyter (2019)
23- (The Manchester Physics Series) J. R. Hook, H. E. Hall - Solid state physics-Wiley (1991)
24- M.A. Wahab - Solid State Physics_ Structure and Properties of Materials-Narosa Publishing House (2021)
25- Philip L. Taylor, Olle Heinonen - A quantum approach to condensed matter physics-Cambridge University Press (2002)
26- Sharon Ann Holgate - Understanding Solid State Physics-CRC Press (2021)
27- (Graduate Texts in Physics) Henri Alloul (auth.) - Introduction to the Physics of Electrons in Solids-Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2011)
28- R. E. Peierls - Quantum Theory of Solids (Oxford Classic Texts in the Physical Sciences) (2001)
29- Liang-Fu Lou - Introduction to phonons and electrons-World Scientific (2003)
30- Efthimios Kaxiras, John D. Joannopoulos - Quantum Theory of Materials-Cambridge University Press (2019)

31- (UNITEXT for Physics) Attilio Rigamonti, Pietro Carretta (auth.) - Structure of Matter_ An Introductory Course with Problems and Solutions-Springer International Publishing (2015)
32- (Oxford Master Series in Physics) John Singleton - Band Theory and Electronic Properties of Solids-Oxford University Press (2001)
33- Ketterson, John Boyd - The Physics of Solids-Oxford University Press (2016)
34- (Graduate Texts in Physics) Mildred Dresselhaus,Gene Dresselhaus,Stephen Cronin,Antonio Gomes Souza Filho (auth.) - Solid State Properties_ From Bulk to Nano-Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2018)
35- Madou, Marc J. - Solid-State Physics, Fluidics, and Analytical Techniques in Micro- and Nanotechnology-CRC Press (2011)
36- Ahmad A. Kamal (auth.) - 1000 Solved Problems in Modern Physics-Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2010)
37- Mircea S. Rogalski, Stuart B. Palmer - Solid State Physics-CRC Press (2000)
38- R. K. Puri, V.K. Babbar - Solid State Physics-S Chand & Co Ltd (2010)
39- Giuseppe Grosso, Giuseppe Pastori Parravicini - Solid State Physics, Second Edition-Academic Press (2013)
40- Joginder Singh Galsin - Solid State Physics_ An Introduction to Theory-Academic Press (2019)
41- J Paglione (editor), N P Butch (editor), E E Rodriguez (editor) - Fundamentals of Quantum Materials_ A Practical Guide to Synthesis and Exploration-WSPC (2020)
42- Laszlo Mihaly, Michael C Martin - Solid state physics_ problems and solutions-Wiley-Interscience (1996) (2)
43- (xixaro) Han, Fuxiang - Problems in solid state physics with solutions-World Scientific (2012) (2)
44- Luciano Colombo - Solid State Physics_ A Primer-IOP Publishing (2021)
45- (UNITEXT for Physics) Leonardo Angelini - Solved Problems in Quantum Mechanics-Springer (2019)
46- Amnon Yariv - Quantum Electronics-John Wiley & Sons (1989)
47- François Gelis - Problems in Quantum Field Theory_ With Fully-Worked Solutions-Cambridge University Press (2021)
48- K. Kong Wan (editor) - Quantum Mechanics_ Problems and Solutions-Jenny Stanford Publishing (2020)
49- S.O. Pillai - Solid State Physics-New Age International (P) Ltd., Publishers (2005)