

كلية العلوم الدقيقة و علوم الطبيعة و الحياة

قسم: علوم المادة

مذكرة ماستر أكاديمي  
المجال: علوم المادة  
الميدان: فيزياء  
التخصص: فيزياء المادة المكثفة

## الموضوع

دراسة نموذج هيبارد ذو بعدين بواسطة نظرية الاضطرابات  
المتعددة الأجسام

من تقديم

سليمان جهيبة

حناشي فهيمة

أمام اللجنة المناقشة المكونة من

رئيسا	جامعة العربي التبسي-تبسة	د. أستاذة	بوهلال منى
مؤطرا	جامعة العربي التبسي-تبسة	أستاذ محاضر أ	طق محمد أمين
ممتحنا	جامعة العربي التبسي-تبسة	أستاذة محاضر ب	مسعي ناجة

تاريخ المناقشة: 2021/06/22

## شكر وعرفان

الحمد لله رب العالمين والصلاة والسلام على المبعوث رحمة للعالمين  
سيدنا محمد وعلى آله وصحبه اجمعين.

اشكر الله تعالى على نعمه التي لا تقدر ولا تحصى ومنها توفيقى في  
انجاز هذا العمل المتواضع.

كما اتقدم بجزيل الشكر وخالص التقدير والعرفان الى استاذى المشرف  
الدكتور طق محمد امين، الذي شرفنى بقبوله على هذه المذكرة وعلى  
دعمه وتوجيهاته القيمة.

واتقدم بوافر التقدير وعظيم الامتنان للجنة المناقشة: الدكتورة مسعى  
نجاه والبروفيسوة بوهلال منى.

اشكر كل من ساعدنى في انجاز هذا العمل .

## إهداء

الحمد لله الذي خلقنا ورزقنا من كل خير واورثنا العلم سلاحا وصلى الله وسلم على نبينا محمد حبيبنا وشفيعنا خاتم الانبياء والمرسلين اما بعد.

بادئة بتكرار شكري للمولى عز وجل العلي القدير الذي وفقنا في انجاز هذا العمل المتواضع الذي كان نجاحنا بيده كما اهدي ثمرة جهدي الى:

الى طيب القلب الذي علمني بمثاليته وتواضع صفاته الى والي العزيز اطال الله في عمره.

الى من خلد الله ذكراها في قران يتلى ليوم الدين وجعلي اللجنة تحت قداميها حملتني وهن على وهن الى والدي العزيزة (صابرة) اطال الله بعمرها.

الى شموع البيت المنيرة اخوتي عبد الستار، محسن ورشيد واخواتي .

الى اللواتي جمعنا بيهم القدر "قتال شهيناز"، "ناصر كوثر"، "ناصر احلام"، اغلى واعز الناس.

الى كل الصديقات والزميلات اللواتي جمعني بهن القدر الى اللذين قاسموني مقاعد الدراسة في الجامعة دفعة 2021\_2022 فيزياء المادة المكثفة.

## إهداء

باسم الخالق الذي اضاء الكون بنوره وحده اعبد وله وحده اسجد شاكرة لي  
فضله على اتمام هذا العمل المتواضع وصلى الله وسلم على سيدنا محمد وعلى  
اله وصحبه اجمعين اما بعد :

الى من كان لهما الفضل الاول في بلوغي التعليم العالي الى " ابي " والى " امي "  
الغالية الصبورة الى منبع الحنان التي لونتني اطال الله في عمرها وحفظها لي.  
الى اخوتي :

الى " بلال " منير " و " منذر " و " عبد الرؤوف "  
الى اخواتي:

الى " دنيا " بهية " و " نسيمه "  
الى ابناء اخواتي:

الى " معتز بالله يوسف " و " مقتدر بالله قيصر " و " دعاء ريماس " و " نمارق " و  
" ماريا "

الى رفيقة دربي ومؤنستي طول المسيرة الدراسية " مشير سلاف " .

سليماني جهينة

## ملخص

في هذه المذكرة ندرس كيفية إيجاد الطاقة الحرة باستخدام نظرية الاضطرابات المتعددة الاجسام عند درجة الحرارة المرتفعة، وذلك عن طريق نظرية المخططات وبالتحديد خوارزميات إيجاد كل الحلقات في مخطط غير مباشر وتعداد الأشجار الممتدة، حيث تمكنا من إيجاد مساهمة مخططات الفراغ لفينمان في هذه الطاقة الحرة. وكتطبيق نحسب قيمة الطاقة الحرة في درجة الحرارة المرتفعة لنموذج هيبارد في بعدين حتى الحد العاشر.

## **Abstract**

In this work, we study how to find the free energy by using many-body perturbation theory (MBPT) at high temperature, through the theory of graphs, specifically the algorithms for finding all the rings in an undirected diagram and enumerating all spanning trees, where we were able to find the contribution of Feynman's vacuum diagrams to this free energy. As an application, we calculate the free energy at high temperature of the Hubbard model in two dimensions up to the tenth term.

## Résumé

Dans ce travail, nous étudions comment trouver l'énergie libre en utilisant la théorie des perturbations multi-corps à haute température, à travers la théorie des graphes, en particulier les algorithmes pour trouver tous les cycles dans un diagramme indirect et énumérer les arbres couvrants, où nous étions capables de trouver la contribution des diagrammes du vide de Feynman à cette énergie libre. Comme application, nous calculons la valeur de l'énergie libre à haute température du modèle de Hubbard en deux dimensions jusqu'au dixième ordre.

## فهرس

2.....عامة.

### الفصل الأول: نموذج هيبارد في بعدين

2 ..... هاملتون الجسيمات المتشابهة.

5 ..... نموذج هيبارد.

6 ..... هاملتون نموذج هيبارد.

8 ..... نموذج هيبارد في بعدين.

### الفصل الثاني: نظرية الاضطرابات

9.....مقدمة.

9 ..... نظرية الاضطرابات.

15..... حساب القيمة التحليلية للمخطط الغير قابل للاختزال من الدرجة الثانية.

16..... الطريقة المباشرة.

19..... طريقة المخططات.

20..... تعاريف.

25..... إحصاء جميع الحلقات لمخطط متصل.

25..... إحصاء جميع الأشجار الممتدة لمخطط متصل.

25..... إجراءات التهيئة.

26 ..... عملية الحذف والانكماش.

### الفصل الثالث: نشر الطاقة الحرة عند درجات الحرارة العالية

33.....مقدمة.

33..... نشر الطاقة الحرة عند درجات الحرارة العالية.



35 .....	كتابة المساهمات للطاقة الحرة على شكل تفاضلات كسرية
40.....	طريقة خوارزمية النشر في درجات الحرارة المرتفعة
43.....	نشر الطاقة الحرة لنموذج هيبارد في بعدين عند درجة حرارة مرتفعة
44.....	خاتمة عامة

## قائمة الجداول

العنوان	رقم الصفحة
العدد الإجمالي لمخططات الفراغ من نوع هيجنهولتز المترابطة والتميزة أساساً دون المخططات الفرعية الخاصة ب هارتري-فوك.	44

## قائمة الأشكال

رقم الصفحة	عنوان الشكل	رقم الشكل
13	مخطط يمثل مؤثرات الانشاء والهدم الواردة والصادرة في كل ذروة $T_i$ .	1.2
18	المخطط غير المختزل للطاقة الحرة من الدرجة الثانية.	2.2
23	جميع الأشجار الممكنة لمخطط من الدرجة الثانية.	3.2
28	مثال على المخطط المتصل: تمثل الخطوط السمكية مثلاً على امتداد الشجرة $T$ ، في حين أن تمثل الخطوط الرفيعة $T$ المرتبط بـ $T$ . القطع الأساسية التي تمثلها الخطوط المتقطعة $\{v_1, v_3, v_4\}$ و $\{E_2, E_3, E_8\}$ هي ، على التوالي ، نهايات قمم وفروع الشجرة الممتدة $T$ .	4.2
25	مثال على جميع الأشجار الممتدة في الرسم التخطيطي $G_3^1$ .	5.2
33	جميع الأشجار الممتدة في الرسم التخطيطي $G_3^1$ .	6.2
47	مخطط تدرج الدوال المستخدمة في برنامج Grand Potential	7.2

## مقدمة عامة

تعتبر دراسة الخواص الفيزيائية للمواد من أهم المسائل الفيزيائية التي تم التطرق اليها منذ بداية ظهور ميكانيك الكم. لكن أي جسم صلب مكون من عدد هائل من الالكترونات وهذا ما يصعب إيجاد خصائصه الفيزيائية بالطرق الحاسوبية العادية، لذلك تم اللجوء الى استخدام طرق عددية وبرمجيات مخصصة لهذا الغرض. من بين الطرق المستخدمة هي طريقة الاضطرابات المتعددة الأجسام.

نظرية الاضطرابات المتعددة الأجسام هي طريقة أساسية لوصف نظام فيزيائي مكون من  $N$  جسيم متشابه ، وذلك عن طريق هاملتون مكون من جزء قابل للحل وجزء غير قابل للحل تحليليا ، نستخدم هذه الطريقة عندما لا نجد حل نظري واضح لهذه الأنظمة. حيث اقترح العلماء منهجية لأول مرة من طرف العالم فينمان Feynman [1] سنة 1949 وذلك لتسهيل تمثيل التفاعلات بين الجسيمات تعتمد هذه المنهجية على تقنية المخططات ، وتم تطبيقها على الأنظمة المتعددة الأجسام بواسطة العلماء بريكينار Brueckner [2] سنة 1955 ثم هيجنهولتز Hugenholtz [3] و قولدستون Goldstone [4] سنة 1957 في الأنظمة الخاصة بالجسم الصلب، بالرغم من وجود وصف مثالي لهذه النظرية في عدة كتب، إلا أنه بسبب العدد الهائل للمخططات حيث أنه نجد كلما زادت درجة النشر  $n$  زاد عدد المخططات بمقدار  $(2n)!$ ، وهذا ما يؤكد على هذه الطريقة انها صعبة وغير ممكن ان نوفق في حساب كل المخططات بالطريقة اليدوية، لذلك لجانا الى طرق اخرى معتمدين على الكمبيوتر، و عن طريق تطوير خوارزميات برمجية سريعة الأداء وأقل سعة من حيث التحميل على الذاكرة.

نتطرق في هذه المذكرة إلى نظام تفاعل سبين الجسيمات المحلية والخارجية في نظام هيبارد ذو بعدين وذلك لكتابته في التكميم الثاني. ندرس الخصائص الترموديناميكية لهذا النموذج في درجات الحرارة المرتفعة باستخدام نظرية الاضطرابات المتعددة الاجسام ، نجد قيمة الطاقة الحرة حتى الدرجة السادسة من النشر.

في الفصل الأول من هذه المذكرة سنتطرق الى أساسيات التكميم الثاني وكذلك نقدم نبذة عن نموذج هيبارد في بعدين . الفصل الثاني نصف فيه بالتدقيق كيفية إيجاد قيمة مساهمة مخطط فينمان أو هيجنهولتز في الطاقة الحرة وذلك باستخدام نظرية الاضطرابات متعددة الاجسام على نموذج هيبارد من أجل إيجاد الطاقة الحرة في درجات الحرارة المرتفعة، في الأخير نختم المذكرة بخاتمة عامة.

### 1.1. هاملتون الجسيمات المتشابهة

في حالة جملة مكونة من  $N$  جسيم متطابق تتحرك دون تفاعل بينها داخل كمون  $V(x)$  فإن هاملتون هذه الجملة هو عبارة على مجموع هاملتون كل جسيم :

$$H = \sum_{i=1}^N h_i \quad (1.1)$$

حيث  $h_i$  هو هاملتون الجسيم  $i$ ، وهو يصف جسيم داخل كمون  $V(x)$  ويكتب على الشكل:

$$h(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x) \quad (1.2)$$

هنا يسمى  $h(x)$  مؤثر جسم واحد.

نقترح أن الأشعة الذاتية  $\phi_{\alpha,\sigma}(x)$  والقيم الذاتية  $\varepsilon_{\alpha,\sigma}$  لهاملتون الجسيم  $\alpha$  (1.2) معروفة، حيث  $\sigma$  يمثل سبين الجسيم. يمكن تحديد قيم  $\varepsilon_{\alpha,\sigma}$  بواسطة معادلة القيم الذاتية التالية:

$$h\phi_{\alpha,\sigma}(x) = \varepsilon_{\alpha,\sigma}\phi_{\alpha,\sigma}(x) \quad (1.3)$$

العلاقة (1.3) تعرف بمعادلة القيم الذاتية لمؤثر  $h$ .

من خلال هذه الشروط، صيغة التكميم الثاني تمكننا بوصف هذه المجموعة من الجسيمات بواسطة مؤثر حقل المادة  $\Psi(x)$ . يكتب هاملتون الجملة  $H_0$  ببساطة على أنه "القيمة المتوسطة تحت تأثير حقل المادة" لهاملتون جسيم وحيد  $h$  كتالي [2]:

$$H_0 = \int \Psi^+(x)h(x)\Psi(x)dx \quad (1.4)$$

حيث  $\Psi(x)$  هو مؤثر الحقل الذي يهدم جسيماً عند النقطة  $x$  والمؤثر  $\Psi^+(x)$  يُنشئ جسيماً عند النقطة  $x$ . يمكن نشر مؤثر الحقل  $\Psi(x)$  باستعمال قاعدة الأشعة الذاتية  $\phi_{\alpha}(x)$  لجسيم وحيد كتالي:

$$\begin{aligned}\Psi(x) &= \sum_{\alpha,\sigma} \phi_{\alpha,\sigma}(x) c_{\alpha,\sigma} \\ \Psi^+(x) &= \sum_{\alpha,\sigma} \phi_{\alpha,\sigma}^*(x) c_{\alpha,\sigma}^+\end{aligned}\quad (1.5)$$

حيث  $c_{\alpha,\sigma}$ ،  $c_{\alpha,\sigma}^+$  تمثل مؤثرات الهدم والإنشاء، بوزونية أو فيرميونية اعتماداً على النظام المدروس. حيث يحقق هذان المؤثران علاقات التبادل التالية :

$$\begin{aligned}c_{\alpha,\sigma} c_{\beta,\sigma'}^+ - \epsilon c_{\beta,\sigma'}^+ c_{\alpha,\sigma} &= \delta_{\alpha\beta} \delta_{\sigma\sigma'} \\ c_{\alpha,\sigma} c_{\beta,\sigma'} - \epsilon c_{\beta,\sigma'} c_{\alpha,\sigma} &= 0 \\ c_{\alpha,\sigma}^+ c_{\beta,\sigma'}^+ - \epsilon c_{\beta,\sigma'}^+ c_{\alpha,\sigma}^+ &= 0\end{aligned}\quad (1.6)$$

حيث  $\epsilon = -1$  بالنسبة للفرميونات و  $\epsilon = 1$  بالنسبة للبوزونات.

هدف المؤثرات  $c_{\alpha,\sigma}$  و  $c_{\alpha,\sigma}^+$  هو هدم أو إنشاء جسيمات لدالة الموجة  $\phi_{\alpha,\sigma}(x)$  في الحالة الفردية. وبالتالي هذه المعاملات لا تؤثر على إحدائيات الجسيمات  $x$  ولكن هذه المعاملات تغير عدد الجسيمات الموجودة في هذه أو تلك الحالة الفردية. بتعبير أصح، إنها تؤثر على الأشعة  $\{n_{\alpha,\sigma}, n_{\beta,\sigma'}, \dots\}$  المسماة عدد الحالات، تنتمي هذه الأشعة إلى فضاء شعاعي يسمى فضاء فوك (Fock) [3]. إذن هذه الحالة  $\{n_{\alpha,\sigma}, n_{\beta,\sigma'}, \dots\}$  تصف الوضعية التي فيها  $n_{\alpha,\sigma}$  جسيم (بوزون أو فرميون) متواجدون في الحالة الفردية  $\phi_{\alpha,\sigma}(x)$ ،  $n_{\beta,\sigma}$  جسيم متواجدون في الحالة الفردية  $\phi_{\beta,\sigma}(x)$ ، ... إلخ. تأثير مؤثرات الإنشاء والهدم على سبيل هذه الحالات يعرف ب:

$$c_{\alpha,\sigma} |n_{\alpha,\sigma}, n_{\beta,\sigma'}, \dots\rangle = \sqrt{n_{\alpha,\sigma}} |n_{\alpha,\sigma} - 1, n_{\beta,\sigma'}, \dots\rangle \quad (1.7)$$

$$c_{\alpha,\sigma}^+ |n_{\alpha,\sigma}, n_{\beta,\sigma'}, \dots\rangle = \sqrt{n_{\alpha,\sigma} + 1} |n_{\alpha,\sigma} + 1, n_{\beta,\sigma'}, \dots\rangle \quad (1.8)$$

التمثيل بواسطة فضاء فوك له أوجه نظر مختلفة: حيث لا نهتم بحالة تواجد الجسيمات لكن بعدد الحالات المشغولة التي تميز حالة النظام. من أجل بوزونات من نفس النوع عدد الحالات المشغولة يكون كيفي. أما

بالنسبة لفرميونات من نفس النوع فإن عدد الحالات المشغولة يساوي 0 أو 1. يمكن زيادة أو تقليل عدد الحالات المشغولة دون إدخال الترابط في غياب التفاعل.

الحقل الكمي يصبح موضوع أساسي جديد و هو ما يمثل الثنائية (موجة/جسيم) في ميكانيك الكم. أخيراً، هاملتون الجملة للجسيمات يمكننا كتابته على الشكل التالي وذلك بتعويض حقل المادة المعرف بالعلاقة (1.5) في القيمة المتوسطة (1.4) نجد:

$$H_0 = \sum_{ij} \sum_{\sigma} h_{ij} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} \quad (1.9)$$

حتى الآن، تم إهمال التفاعلات بين الجسيمات. لذلك نترض أن الجسيمات تتفاعل فيما بينها عن طريق كمون ثنائي الجسم  $V(x, x')$ . في هذه الحالة هاملتون الجملة  $H$  المعرف بالعلاقة (1.4) يضيف حد آخر، يكتب على الشكل التالي :

$$H = \int \Psi^+(x) h(x) \Psi(x) dx + \frac{1}{2} \int \int \Psi^+(x') \Psi^+(x) V(x, x') \Psi(x) \Psi(x') dx dx' \quad (1.10)$$

نعوض كذلك بمؤثرات الحقل المعرفة بالعلاقة (1.5) في الهاملتون (1.10) نجد أن هاملتون الجملة في حالة وجود تفاعل بين الجسيمات يكتب على الشكل النهائي التالي [4] :

$$H = H_0 + H_I = \sum_{ij} \sum_{\sigma} h_{ij} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \sum_{\sigma\sigma'} g_{ijkl} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma'}^+ c_{l,\sigma'} c_{k,\sigma} \quad (1.11)$$

حيث أن  $h_{ij}$  وعناصر المصفوفة  $g_{ijkl}$  يكتبان على الشكل:

$$h_{ij} = \int \phi_i^*(x) h(x) \phi_j(x) dx \quad (1.12)$$

$$g_{ijkl} = \int \int \phi_i^*(x') \phi_j^*(x) V(x, x') \phi_k(x') \phi_l(x) dx dx' \quad (1.13)$$

هنا الهاملتون  $H_0$  يمثل الجسيمات الحرة دون تفاعل وأحياناً يمثل الجزء القابل للحل. بينما الهاملتون  $H_I$  يمثل حد التفاعل بين الجسيمات وأحياناً يضاف على أنه اضطراب يضاف للجزء القابل للحل والممثل في الهاملتون  $H_0$ .

### 2.1. نموذج هيبارد

نموذج هيبارد هو نموذج تقريبي، في فيزياء الحالة الصلبة، لوصف الانتقال بين أنظمة التوصيل وأنظمة العزل. نموذج هيبارد، الذي سمي على اسم جون هيبارد John Hubbard [1]، هو نموذج بسيط لتفاعل الجسيمات في شبكة حيث يحتوي على حدين فقط في الهاملتون، حد حركي يسمح بالقفز النفقي للجسيمات بين مواقع الشبكة وحد محلي ينتج من كمون التفاعل في كل موقع. يمكن أن تكون الجسيمات إما فرميونات، كما في عمل هيبارد الأصلي، أو بوزونات وفي هذه الحالة يُشار إلى النموذج باسم "نموذج بوز-هيبارد". نموذج هيبارد هو تقريب مهم للجسيمات في الكمونات الدورية عند درجات حرارة منخفضة بما فيه الكفاية، حيث يمكن افتراض أن جميع الجسيمات في أدنى نطاق بلوخ، ويمكن تجاهل التفاعلات طويلة المدى بين الجسيمات. إذا تم إدراج التفاعلات بين الجسيمات في مواقع مختلفة من الشبكة فإنه غالباً ما يُشار إلى النموذج باسم "نموذج هيبارد الممتد".

تم اقتراح النموذج في الأصل عام 1963 لوصف الإلكترونات في المواد الصلبة [2]. منذ ذلك الحين، تم تطبيقه على دراسة الناقلية الفائقة في درجات الحرارة العالية، والمغناطيسية الكمومية، وموجات كثافة الشحنة. يقدم نموذج هيبارد تفاعلات قصيرة المدى بين الإلكترونات إلى نموذج الربط المحكم، والذي يتضمن فقط الطاقة الحركية (مصطلح "القفز") والتفاعلات مع ذرات الشبكة (جهد "ذري"). عندما يكون التفاعل بين الإلكترونات قوياً، يمكن أن يختلف سلوك نموذج هيبارد نوعياً عن نموذج الربط المحكم. على سبيل المثال، يتنبأ نموذج هيبارد بشكل صحيح بوجود عوازل موت Mott insulators وهي المواد التي تكون عازلة بسبب التناظر القوي بين الإلكترونات، على الرغم من أنها تقي بالمعايير المعتادة للموصلات، مثل وجود عدد فردي من الإلكترونات لكل وحدة خلية.

### 3.1. هاملتون نموذج هيبارد

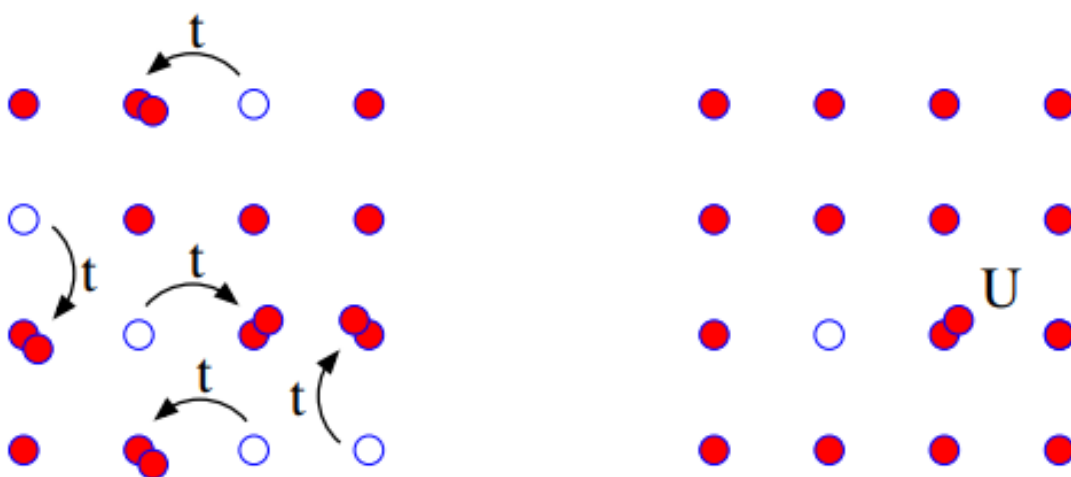
بعد إدخال معاملات الإنشاء والإفناء، يمكننا الآن كتابة هاملتون هيبارد. يتشكل الهاملتون بشكل طبيعي تماماً عند التفكير في كيفية وصف حركة وتفاعلات الإلكترونات في مادة صلبة.



أولاً، نحتاج إلى مراعاة حقيقة أن هناك مجموعة منتظمة من مواضع الأنوية في الشبكة، والتي نعتبرها ثابتة غير متحركة بسبب كتلتها الكبيرة مقارنة بالإلكترونات (تقريب بورن أو بنهايمر). أي أننا نبدأ بشبكة من الذرات (المواقع) التي تتحرك عليها الفرميونات. بالطبع، فإن الذرة الحقيقية الواحدة هي بالفعل بنية معقدة للغاية، حيث تحتوي على العديد من مستويات الطاقة المختلفة (المدارات). يبسط هاملتون هيبارد الذرات في مادة صلبة إلى مجموعة مواقع لكل منها مستوى واحد (مداري). هذه صورة جيدة لجسم صلب به نطاق طاقة واحد فقط على سطح فيرمي، لذلك، في الواقع، يوجد مدار واحد فقط مناسب.

مع هذا التبسيط (الكبير!)، فإن مواقع هاملتون هيبارد مقيدة بمبدأ Pauli بأربعة تكوينات: فارغة، أو فرميون واحد Up، أو فرميون واحد Down، أو محجوزة بواسطة زوج من الفرميونات Up و Down.

في مادة صلبة حيث يمكن للإلكترونات أن تتحرك، تتفاعل الإلكترونات عبر تفاعل كولوم. سيكون أكبر تفاعل للإلكترونات عندما يكونان في نفس الموقع. يتوقف هاملتون هيبارد عند هذا الحد فقط: يتم نمذجة التفاعلات بمصطلح يكون صفراً إذا كان الموقع خالياً من الفرميونات أو يحتوي على فرميون واحد فقط، ولكن له القيمة  $U$  إذا كان الموقع مشغولاً بشكل مضاعف، ووفقاً لمبدأ الاستبعاد لبولي، فإنه يجب أن يكون مشغولاً بالكترونين متعاكسين في السبين. إذن الحد  $Un_{j\uparrow}n_{j\downarrow}$  يعبر عن هذا التفاعل (شكل 1). في هاملتون هيبارد البسيط، لا يوجد تفاعل  $Vn_{i\sigma}n_{j\sigma'}$  بين الفرميونات على مواقع مختلفة  $i$  و  $j$ ، على الرغم من تضمين هذه التفاعلات في هاملتون هيبارد الممتد.



شكل 1. التمثيل التصويري لحدود هاملتون هيبارد. اليسار: الطاقة الحركية  $t$ . اليمين: التفاعل في الموقع

المحلي  $U$ .

إن التفكير المنطقي للطاقة الحركية هو التعبير الذي يهدم الفرميون في موقع ما ويخلقه على أحد الجيران. سيتم تحديد مقياس الطاقة  $t$  الذي يحكم هذا "القفز" من خلال تداخل دالتين موجيتين على زوج الذرات. نظرًا لأن الدوال الموجية تتداخل بشكل أسي، فمن المعقول أن نسمح بالتنقل (القفز) فقط بين أقرب الذرات في شبكتنا.

إذن فإن هاملتون هيبارد يمكن التعبير عنه بالعلاقة التالية:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{j\sigma}^+ c_{i\sigma} + c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma}) + U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} - \mu \sum_j (n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow}) \quad (1.14)$$

الحد الأول هو الطاقة الحركية: يصف هدم فرميون من السبين  $\sigma$  على الموقع  $i$  وخلقه في الموقع  $j$  (أو العكس). يمثل الترميز  $\langle ij \rangle$  على أن التنقل مسموح به فقط بين موقعين. الحد الثاني هو طاقة التفاعل. حيث يمر عبر جميع المواقع ويضيف طاقة  $U$  إذا وجد أن الموقع مشغول بشكل مضاعف. الحد الأخير هو الكمون الكيميائي حيث يتحكم في التعبئة. نشير إلى الموقع الذي يوجد فيه فرميون واحد لكل موقع على أنه "نصف مملوء" Half-filling لأن الشبكة تحتوي على نصف عدد الفرميونات حيث أن العدد الأقصى هو اثنان لكل موقع.

غالبًا ما تركز دراسات هاملتون هيبارد على الحالة نصف الممتلئة لأنها تعرض الكثير من الظواهر المثيرة للاهتمام (سلوك العزل Mott، الترتيب المضاد للمغناطيسية الحديدية، إلخ).

#### 4.1. نموذج هيبارد في بعدين

باستخدام تحويل فوريي لمؤثرات الهدم والبناء التالية:

$$c_{i,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i \vec{R}_i \vec{k}} c_{\vec{k},\sigma}$$

$$c_{i,\sigma}^+ = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{-i \vec{R}_i \vec{k}} c_{\vec{k},\sigma}^+$$

$$H = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon(\vec{k}) c_{\vec{k},\sigma}^+ c_{\vec{k},\sigma} + U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} - \mu \sum_j (n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow}) \quad (1.14)$$



2 . مقدمة

سوف نتعرض في هذا الفصل الى الخوارزميات المستحدثة لحساب المخططات المتميزة المولدة عن طريق الخوارزمية [27] بطريقة الية وطباعة العبارة التحليلية لها مباشرة .

ان جميع الخوارزميات المستعملة في هذا الفصل هي مواضيع اساسية في نظرية المخططات ، كذلك نقدم في بعض الاحيان نسخ جديدة عن بعض من هذه الخوارزميات خاصة المستعملة المرجع [28] .

1.2. نظرية الاضطرابات

هاملتون عبارة على نظام مكون من عدة جسيمات متشابهة تتفاعل مع بعضها البعض جزء قابل للحل تحليلي  $H_0$  وجزء غير قابل للحل تحليلي  $H_I$  ونعبر عنه بالتكميم الثاني كالتالي:

$$H = H_0 + H_I = \sum_{k\sigma} (\varepsilon_{k\sigma} + \mu) a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \frac{1}{4} \sum_{rsml\sigma} V_{ml\sigma}^{rs} a_{r\sigma_1}^+ a_{s\sigma_2}^+ a_{l\sigma_3} a_{m\sigma_4} \quad (2.1)$$

حيث:  $a_{k\sigma}^+$  هو مؤثر الانشاء و  $a_{k\sigma}$  : مؤثر الهدم

عناصر مصفوفة كمون التفاعل  $V_{ml\sigma}^{rs}$  فهي تحوي مصفوفة كمون التفاعل المباشر  $\langle rs|V|ml\sigma \rangle$  ومصفوفة كمون التبادل  $\langle rs|V|lm\sigma \rangle$ .

حيث تكتب على النحو التالي:

$$V_{ml\sigma}^{rs} = \langle rs|V|ml\sigma \rangle + \varepsilon \langle rs|V|lm\sigma \rangle \quad (2.2)$$

الثابت  $\varepsilon$  يختلف حسب نوع الجسيمات أي بوزونات او فرميونات

فاذا كان:

$$\varepsilon = 1 \text{ بالنسبة للجسيمات من نوع بوزون}$$

$$\varepsilon = -1 \text{ بالنسبة للجسيمات من نوع فرميون}$$

أما  $\epsilon_k$  فهي تمثل طاقة أشباه الجسيمات للنظام

$\mu$  يمثل الكمون الكيميائي.

تعتمد نظرية FT-MBPT على نشر دالة القسمة المعرفة بـ:

$$Z = Tr(e^{-\beta H}) \quad (2.3)$$

نستعمل نشر تايلور للدالة الأسية مع الأخذ بعين الاعتبار مؤثر الهاملتون  $H$ .

في العلاقة (3.3)

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

تمثل معكوس درجة الحرارة

حيث  $T$  تمثل درجة الحرارة و  $k_B$  ثابت بولتزمان، حيث تنشر على الشكل:

$$\frac{Z}{Z_0} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! 4^n} \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \times \int_0^{\beta} d\tau_n \left\langle O_t \prod_{i=1}^n V_{m_i l_i}^{r_i s_i} a_{r_i}^+(\tau_i) a_{s_i}^+(\tau_i) a_{l_i}(\tau_i) a_{m_i}(\tau_i) \right\rangle_0 \quad (2.4)$$

حيث:

يمثل  $O_t$  مؤثر الترتيب الزمني.

المقدار  $\langle A \rangle_0$  يمثل القيمة المتوسطة الحرارية في الديناميكا الإحصائية للمؤثر  $A$  في الفراغ

يعرف رياضياً بـ:

$$\langle A \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} Tr(Ae^{-\beta H_0}) \quad (2.5)$$

نعرف الطاقة  $E_i$  على الشكل:

$$E_i = \varepsilon_i - \mu$$

المقدار  $Z_0$  يمثل دالة القسمة للنظام الغير متفاعل أي:

$$Z_0 = Tr(e^{-\beta H_0}) \quad (2.6)$$

تتعلق مؤثرات الإنشاء  $a_p^+(\tau)$  والهدم  $a_p(\tau)$  بالزمن التخيلي  $\tau$

حيث يمكن حسابها كما يلي:

من التعريف لدينا:

$$a_p^+(\tau) = e^{\tau H_0} a_p^+ e^{-\tau H_0} \quad (2.7)$$

$$a_p(\tau) = e^{\tau H_0} a_p e^{-\tau H_0}$$

باستخدام نشر تايلور للدالة  $e^{-\tau H_0}$  نجد

$$a_p^+ e^{-\tau H_0} = a_p^+ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\tau H_0)^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\tau)^n}{n!} a_p^+ H_0^n \quad (2.8)$$

حيث من تعريف هاملتون الجملة للجزء الغير متفاعل:

$$H_0 = \sum_p E_p a_p^+ a_p$$

فإننا نجد العلاقة التالية:

$$a_p^+ H_0^n = (H_0 - E_p)^n a_p^+ \quad (2.9)$$

باستخدام العلاقة (2.8) نجد أن

$$a_p^+ e^{-\tau H_0} = e^{-\tau H_0} e^{\tau E_p} a_p^+ \quad (2.10)$$

ومنه بالرجوع للعلاقة (2.7) نجد أخيراً:

$$a_p^+(\tau) = a_p^+ e^{\tau E_p} \quad (2.11)$$

بنفس الطريقة نجد أن:

$$a_p(\tau) = a_p e^{-\tau E_p} \quad (2.12)$$

باستخدام نظرية ويك [19] (Wicks) حيث يمكننا نظرياً تعداد جميع الانقباضات (contractions) بين مؤثرات الهدم والإنشاء لكل رتبة من سلسلة النشر (2.4).  
وتكمن نظرية ويك في الربط بين مؤثرات الإنشاء  $a^+$  والافناء  $a$  بكل الطرق الممكنة، حيث كل ربط ينتج انقباض مقداره  $\langle a^+ a \rangle$ .

حيث أنه يمكن إيجاد عبارة كل انقباض على الشكل [8].

$$\langle a_p(\tau) a_q^+(\tau') \rangle_0 = \epsilon \langle a_q^+(\tau') a_p(\tau) \rangle_0 = \delta_{pq} g_p(\tau - \tau'), \quad (2.13)$$

بينما المقدار  $g_p(\tau)$  يسمى الناشر propagator وهو يمثل مزيج بين تكون ثقب أو جسيم أثناء زمن تخيلي  $\tau$  ويمكن صياغته رياضياً [8] الى الشكل:

$$g_p(\tau - \tau') = e^{-(\tau - \tau') E_p} [f_p^+ \theta(\tau - \tau' - \eta) + f_p^- \theta(\tau' - \tau + \eta)] \quad (2.14)$$

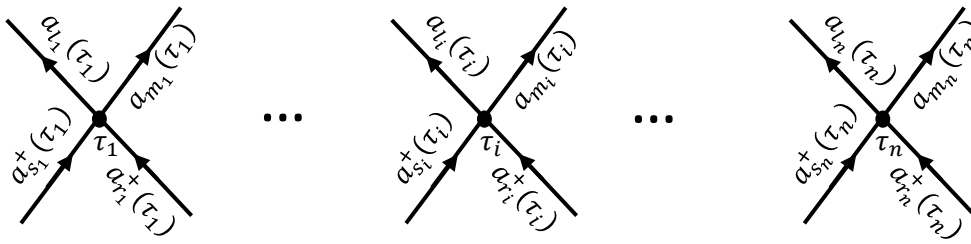
والثابت العنصري  $\eta \rightarrow 0^+$  الموجود في دالة هيفيسايد Heaviside  $\theta(x)$  يبين أنه يجب أخذ المقدار الثاني في حالة تساوي الأزمنة  $\tau = \tau'$  في العلاقة (2.10).  
المقادير الإحصائية  $f_p^\pm$  معرفة بالعلاقتين:

$$\begin{cases} f_p^- = \epsilon (e^{\beta E_p} - \epsilon)^{-1} \\ f_p^+ = 1 + f_p^- \end{cases} \quad (2.15)$$

عند تطبيق نظرية ويك مباشرة فإننا نجد في حالة  $n = 2$  أنه هناك 24 انقباض، بينما يزداد بشكل كبير جداً من أجل  $n = 10$  فنجد أن عدد الانقباضات في هذه الحالة  $2.4 \times 10^{18}$  وهذا من المستحيل حسابها جميعاً.

في غر العدد الكبير لصيغ الرياضية المعقدة للناشر (2.10) والمقادير الإحصائية (2.11) استوجب علينا التعامل مع كل هذه المقادير.

أهم هذه الطرق هي تحويل كل مقدار الى مخطط، يسمى مخطط فينمان [1]. للتبسيط، يمكننا تمثيل الرتبة  $n$  من سلسلة النشر (2.4) على شكل مجموعة من المخططات وذلك عن طريق رسم  $n$  قمة (رأس) نسميها  $(\tau_1, \dots, \tau_i, \dots, \tau_n)$  حيث يتم رسم اربع سطور في كل قمة  $\tau_i$  ، سطين واردين إلى هذه القمة يمثلان مؤثرات الإنشاء  $a_{ri}^+(\tau_i)$  و  $a_{si}^+(\tau_i)$  المعرفين في سلسلة النشر (2.4)، و سطين صادريين من هذه القمة يمثلان مؤثرات الهدم  $a_{li}(\tau_i)$  و  $a_{mi}(\tau_i)$  (شكل 1.2)، و يتم بعدها ربط جميع الخطوط الواردة  $a_{pi}^+(\tau_i)$  مع الخطوط الصادرة  $a_{pj}(\tau_j)$  بكل الطرق الممكنة للربط، بحيث في كل عملية ربط بين خطين  $i$  و  $j$  تتوافق مع الناشر  $g_{pi}(\tau_i - \tau_j)$ .



شكل 1.2. مخطط يمثل مؤثرات الإنشاء والهدم الواردة والصادرة في كل ذروة  $\tau_i$ .

عدد المخططات  $N_D$  الممكنة الناتجة من العلاقة (2.4) هو  $N_D = \frac{(2n)!}{2^n}$ ، هذا العدد كبير جداً وهو يحتوي

على كل المخططات المتصلة والمنفصلة

عند تطبيق الدالة اللوغاريتمية على (2.4) فإن عدد المخططات  $N_D$  ينقص ويختزل إلى المخططات

المتصلة فقط، هذا لان اللوغاريتم يعدم المخططات المنفصلة، ويمكن استخلاص جميع الخصائص

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \log(Z)$$

الترموديناميكية من دالة الطاقة الحرة



كما نلاحظ فهي تطبيق للدالة اللوغاريتمية على دالة القسمة، إذن من البديهي دراسة الطاقة الحرة  $\Omega$  بدلا من دالة القسمة  $Z$ .

نعبر عن الطاقة الحرة للنظام بدلالة المخططات كما يلي:

$$\Omega = \Omega_0 + \sum (All\ connected\ diagrams) \quad (2.16)$$

حيث:

$\Omega_0$  تمثل الطاقة الحرة للنظام الغير متفاعل  $\Omega_0 = -\frac{1}{\beta} \log(Z_0)$  يمكن حساب هذه الطاقة ببساطة [8]

فنجد قيمتها هي:

$$\Omega_0 = \frac{\epsilon}{\beta} \sum_k \log(1 - \epsilon e^{-\beta E_k}) \quad (2.17)$$

إذن عدد المخططات ينخفض إلى:  $N_D = \frac{(2)!}{2^n} - n_{dd}$

حيث  $n_{dd}$  يمثل عدد المخططات المنفصلة

ولكن هذا العدد كبير نبحث عن حل لتقليصه، حيث نقوم بتسمية المخططات المتصلة لها نفس القيمة العددية بالمخططات المتكافئة ونختار منهم مخطط واحد فقط نسميه بمخطط التمايز.

حيث نلاحظ في التكاملات على الأزمنة  $d\tau_1 \dots d\tau_n$  من علاقة النشر (2.4) لها نفس مجالات التكامل من 0 إلى  $\beta$ ، إذن هي تبديله على هذه الأزمنة (تبديله بين القيم  $\tau_1, \dots, \tau_i, \dots, \tau_n$  لبلغة المخططات) أي انه لا يغير نتيجة التكاملات.

لذلك عند تطبيق عملية المبادلة بين القيم لمجموعة من المخططات الناتجة من عملية النشر (2.4) فنجد مثلاً مجموعة منها عددها  $n_{ed}$  مكافئة لمخطط سابق، فمن اللازم تجاهلها وضرب قيمة المكاملة على المخطط السابق في  $n_{ed}$  فقط.

كما أننا نعلم أن عدد التبادلات الممكنة لمجموعة مكونة من  $n$  قيمة هو  $n!$ ، إذن فمن الطبيعي أننا نجد  $n!$  مخطط مكافئ لمخطط متمايز وحيد، وأحياناً عند القيام بعملية مبادلة معينة على هذا الأخير كفي في أننا نتحصل على نفس هذا المخطط، أي أن هذا المخطط لا يتشوه بواسطة عملية المبادلة. إذا كان عدد هذه المخططات التي لا تتشوه بواسطة عملية مبادلة معينة هو  $S$ ، ومنه فإن العدد الحقيقي للمخططات المتكافئة هو  $\frac{n!}{S}$ ، لذا من الضرورة إيجاد المخططات المتميزة من بين كل المخططات المتكافئة فهذه العملية تخفض بشكل كبير عدد المخططات.

$$\cdot N_D = \frac{(2n)! - n_{dd}}{\frac{n!}{S}} = \frac{S}{n!} \left( \frac{(2n)!}{2^n} - n_{dd} \right)$$

تعرف هذه المجموعة بالمخططات المتميزة الأساسية **Essentially Distinct Diagrams** نختصرها **EDD** ومنه الطاقة الحرة يمكن التعبير عنها بالعلاقة:

$$\Omega = \Omega_0 + \sum_i \frac{(EDD)_i}{S_i} \quad (2.18)$$

ومنه نبحت عن حل مشكلة المخططات المتميزة الأساسية **EDDs** عند رتبة نشر معينة  $n$  فقد اقترحت الكثير من الخوارزميات [20-26] مع اختلافات لحل هذه المشكلة.

التقنية المستخدمة لإيجاد **EDDs**: هي ترتيب كل القيم  $n$  في سلسلة متتالية من الأعداد الطبيعية، حيث تمثل كل قيمة  $\tau_i$  من مجموع القيم  $n$   $1 \leq i \leq n$  على شكل عددين طبيعيين متتاليين، حيث يمثلان مؤثري الإنشاء  $a_{r_i}^+(\tau_i)$  و  $a_{s_i}^+(\tau_i)$ ، بينما موضع العددين من السلسلة يمثلان مؤثري الهدم  $a_{l_i}(\tau_i)$  و  $a_{m_i}(\tau_i)$  أي أنه قبل أن نقوم بعملية الربط فإنه يمكن تمثيل كل مخطط على الشكل التالي:

$$D_0 = (1,2|3,4| \dots |2i - 1,2i| \dots |2n - 1,2n) \quad (2.19)$$

حيث مثلنا في المخطط (1.2) كل قيمة  $i$  بعددين متتاليين  $2i - 1, 2i$ ، أما عملية الربط بين مؤثري الإنشاء والهدم فيمكن إيجادها عن طريق عملية المبادلة بين الأعداد  $2i - 1$  أو  $2i$  مع  $2j - 1$  أو  $2j$  حيث  $i \neq j$  وكل تبديله يقابل مخطط مكافئ.

وهناك طريقة تعتمد على القيام بعملية المبادلة بين زوجي أعداد القمم  $\tau_i$  و  $\tau_j$  لكل مخطط مكافئ على

حدي ومقارنته مع المخططات المتميزة السابقة *EDDs*

لكن هذه الطريقة تأخذ وقتاً ومساحة كبيرين جداً، لأننا نحتاج فيها إلى حفظ جميع المخططات المتميزة السابقة في الذاكرة العشوائية (*RAM*) الخاصة بالكمبيوتر (مساحة كبيرة) ثم يجب علينا التنقل على جميع المخططات المتميزة السابقة *EDDs* في كل عملية مقارنة (وقت أكبر).

حيث عثرنا على طريقة جديدة مستخدمة في المرجع [27] مختلفة عن الطرق الكلاسيكية القديمة كما أنها لا تحتاج إلى أي مقارنة مع المخططات المتميزة السابقة *EDDs* (للتعرف على هذه الطريقة يمكن الإطلاع على المرجع [27]).

ونحن بصدد البحث عن كيفية إيجاد العبارة التحليلية لكل مخطط متميز *EDD* وطباعتها بطريقة آلية وذلك باستخدام خوارزميات مستحدثة.

## 2.2. حساب القيمة التحليلية للمخطط الغير قابل للاختزال من الدرجة الثاني

ولفهم طرق الحساب يمكننا البدء من أبسط حالة والمتمثلة في الوصول لعبارة التحليلية للمخطط الغير قابل للاختزال من الدرجة الثانية، الموضح في الشكل 2.2، حيث يمكن في البداية كتابة مساهمة الطاقة الحرة له على النحو التالي [16]:

$$\Omega_2 = \frac{1}{8} V_{p_3 p_4}^{p_1 p_2} V_{p_1 p_2}^{p_3 p_4} I_2 \quad (2.20)$$

حيث :

$$I_2 = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta \int_0^\beta g_{p_1}(\tau_1 - \tau_2) g_{p_2}(\tau_1 - \tau_2) g_{p_3}(\tau_2 - \tau_1) g_{p_4}(\tau_2 - \tau_1) d\tau_1 d\tau_2 \quad (2.21)$$

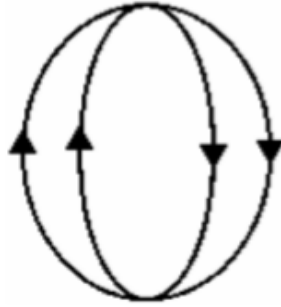
لتوضيح الطريقة المستخدمة لحساب قيمة التكامل  $I_2$  الموجودة في العبارة (2.17)، نقترح طريقتين أساسيتين: الطريقة المباشرة وكذلك طريقة المخططات.

### 1.2.2. الطريقة المباشرة

لحساب التكامل على المجال  $[0, \beta]$ ، فمن الضروري استخدام تحويل فوري نستخدم

تحويل الناشر (2.10)، أو ما يعرف بمجموع ما تشيبارا [29] Matsubara sum، يكتب على الشكل

التالي:



الشكل 2.2. المخطط غير المختزل للطاقة الحرة من الدرجة الثانية.

$$g_p(\tau - \tau') = \frac{1}{\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\zeta_m(\tau - \tau' - n\theta)}}{E_p - \zeta_m}, \quad (2.22)$$

في العلاقة (2.22)، المتغير المركب  $\zeta_m$  يميز لنا النظام المدروس حسب نوع الجسيمات، حيث  $\zeta_m =$

$i\frac{\pi}{\beta}(2m)$  إذا كانت الجسيمات المدروسة عبارة عن بوزونات إذا كانت الجسيمات عبارة

عن فرميونات  $\zeta_m = i\frac{\pi}{\beta}(2m - 1)$

الثابت  $\theta$  هو عدد عنصري موجب صغير جداً  $\theta \rightarrow 0^+$ ، أما  $n$  فهو عدد طبيعي عشوائي موجب غير معدوم، لقد اخترنا في العلاقة (2.22) الثابت العنصري  $\eta = n\theta$  وهذا لتجنب صعوبة بعض الحالات وذلك عندما نحسب النهاية  $\eta \rightarrow 0^+$ . يمكن كذلك كتابة المقادير الإحصائية (2.11) في تمثيل ما تشيبارا [29] على النحو التالي:

$$f_p^\pm = \frac{1}{\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{0 \pm \zeta_m}}{E_p - \zeta_m} \quad (2.23)$$

أما الآن نعوض مجموع ما تشيبارا (2.22) في التكامل (2.21)، ونكامل  $\tau$  على المجال الزمني  $[0, \beta]$ ، نتحصل على النتيجة:

$$I_2 = \frac{1}{\beta^3} \sum_{m_1 m_2 m_3 m_4} \delta_{\zeta_{m_1} + \zeta_{m_2}, \zeta_{m_3} + \zeta_{m_4}} \prod_{i=1}^4 \frac{e^{\zeta_{m_i} n_i \theta}}{(E_{p_i} - \zeta_{m_i})} \quad (2.24)$$

حيث  $\delta_{\zeta_{m_1} + \zeta_{m_2}, \zeta_{m_3} + \zeta_{m_4}}$  هيدلتا كرونكر و التيتمقلانو الإنحفاظ بين الخطوط الواردة  $\zeta_{m_1}, \zeta_{m_2}$  والخطوط الصادرة  $\zeta_{m_3}, \zeta_{m_4}$ . لحساب المجموع (2.20) فمن الواضح أنه من الضروري التخلص من الحفظ  $\delta_{\zeta_{m_1} + \zeta_{m_2}, \zeta_{m_3} + \zeta_{m_4}}$ ، لذلك نضرب العلاقة (2.20) بالكمية:

$$\frac{E_{p_1} + E_{p_2} - E_{p_3} - E_{p_4} + \zeta_{m_1} + \zeta_{m_2} - \zeta_{m_3} - \zeta_{m_4}}{E_{p_1} + E_{p_2} - E_{p_3} - E_{p_4}} \quad (2.25)$$

في الحقيقة الكمية (2.21) تساوي 1.

نقوم الآن باختصار كحد  $E_{p_i} - \zeta_{m_i}$  من بسط الكمية (2.21) مع ما يقابله من مقام العلاقة (2.20)، فنتحصل على أربعة حدود أولية:

$$I_2 = I_2^1 + I_2^2 + I_2^3 + I_2^4 \quad (2.26)$$

حيث:

$$\begin{aligned}
 I_2^1 &= \frac{1}{\beta^3(E_{p_1} + E_{p_2} - E_{p_3} - E_{p_4})} \sum_{m_2 m_3 m_4} \frac{e^{\zeta_{m_2} \theta(n_2 - n_1)} e^{\zeta_{m_3} \theta(n_3 + n_1)} e^{\zeta_{m_4} \theta(n_4 + n_1)}}{(E_{p_2} - \zeta_{m_2})(E_{p_3} - \zeta_{m_3})(E_{p_4} - \zeta_{m_4})}, \\
 I_2^2 &= \frac{1}{\beta^3(E_{p_2} + E_{p_1} - E_{p_3} - E_{p_4})} \sum_{m_1 m_3 m_4} \frac{e^{\zeta_{m_2} \theta(n_1 - n_2)} e^{\zeta_{m_3} \theta(n_3 + n_2)} e^{\zeta_{m_4} \theta(n_4 + n_2)}}{(E_{p_1} - \zeta_{m_1})(E_{p_3} - \zeta_{m_3})(E_{p_4} - \zeta_{m_4})}, \\
 I_2^3 &= \frac{1}{\beta^3(E_{p_3} + E_{p_4} - E_{p_1} - E_{p_2})} \sum_{m_1 m_2 m_4} \frac{e^{\zeta_{m_2} \theta(n_1 + n_3)} e^{\zeta_{m_3} \theta(n_2 + n_3)} e^{\zeta_{m_4} \theta(n_4 - n_3)}}{(E_{p_1} - \zeta_{m_1})(E_{p_2} - \zeta_{m_2})(E_{p_4} - \zeta_{m_4})}, \\
 I_2^4 &= \frac{1}{\beta^3(E_{p_4} + E_{p_3} - E_{p_1} - E_{p_2})} \sum_{m_1 m_2 m_3} \frac{e^{\zeta_{m_2} \theta(n_1 + n_4)} e^{\zeta_{m_3} \theta(n_2 + n_4)} e^{\zeta_{m_4} \theta(n_3 - n_4)}}{(E_{p_1} - \zeta_{m_1})(E_{p_2} - \zeta_{m_2})(E_{p_3} - \zeta_{m_3})}
 \end{aligned} \tag{2.27}$$

نختار قيم الأرقام  $n_i > 0$  بطريقة يكون فيها المجموع  $\sum_i n_i$  في الأس  $e^{\zeta_{m_i} \theta(\sum_i n_i)}$  لا يساوي الصفر. مثلا نختار القيم  $n_1 = 2, n_2 = 1, n_3 = 2, n_4 = 1$ ، بعد تطبيق النهاية  $\theta \rightarrow 0^+$ ، نجد ما يكافئ كل معامل إحصائي  $f_p^\pm$  من العلاقة (2.19).

وبالتالي، فالحدود الأربع من العلاقة (2.23) يمكن إعادة صياغتها على الشكل:

$$\begin{aligned}
 I_2^1 &= \frac{1}{(E_{p_1} + E_{p_2} - E_{p_3} - E_{p_4})} f_{p_2}^- f_{p_3}^- f_{p_4}^-, \\
 I_2^2 &= \frac{1}{(E_{p_2} + E_{p_1} - E_{p_3} - E_{p_4})} f_{p_1}^- f_{p_3}^- f_{p_4}^-, \\
 I_2^3 &= \frac{1}{(E_{p_3} + E_{p_4} - E_{p_1} - E_{p_2})} f_{p_1}^- f_{p_2}^- f_{p_4}^-, \\
 I_2^4 &= \frac{1}{(E_{p_4} + E_{p_3} - E_{p_1} - E_{p_2})} f_{p_1}^- f_{p_2}^- f_{p_3}^-.
 \end{aligned} \tag{2.28}$$

بسبب التناظر، جداء الكمون  $V_{p_3 p_4}^{p_1 p_2} V_{p_1 p_2}^{p_3 p_4}$  لا يتغير عند تطبيق التحويلات  $p_4 \rightarrow p_3, p_3 \rightarrow p_4$  في

$I_2^2$  والتحويل الأخير يطبق على المقدار  $I_2^3$  أو  $I_2^4$  في  $p_3 \rightarrow p_1, p_1 \rightarrow p_3, p_4 \rightarrow p_2, p_2 \rightarrow p_4$

$\frac{1}{2}$  للتحويلات  $p_3 \rightarrow p_2, p_2 \rightarrow p_3, p_4 \rightarrow p_1, p_1 \rightarrow p_4$ ، ومن العلاقة (2.16) نجد القيمة النهائية ل  $\Omega_2$  كما يلي:

$$\Omega_2 = \frac{1}{4} \frac{V_{p_3 p_4}^{p_1 p_2} V_{p_1 p_2}^{p_3 p_4} f_{p_1}^- f_{p_2}^- (f_{p_3}^+ + f_{p_3}^-)}{(E_{p_3} + E_{p_4} - E_{p_1} - E_{p_2})} \quad (2.29)$$

ملاحظة :

يمكننا إختيار قيم أخرى ل  $n_i$ ، على سبيل المثال:

$$n_1 = 1, n_2 = 4, n_3 = 2, n_4 = 3 \text{ أو } n_1 = 1, n_2 = 2, n_3 = 2, n_4 = 1$$

ولكن النتيجة تبقى نفسها مطابقة ل  $\Omega_2$  في (2.25).

### 2.2.2. طريقة المخططات

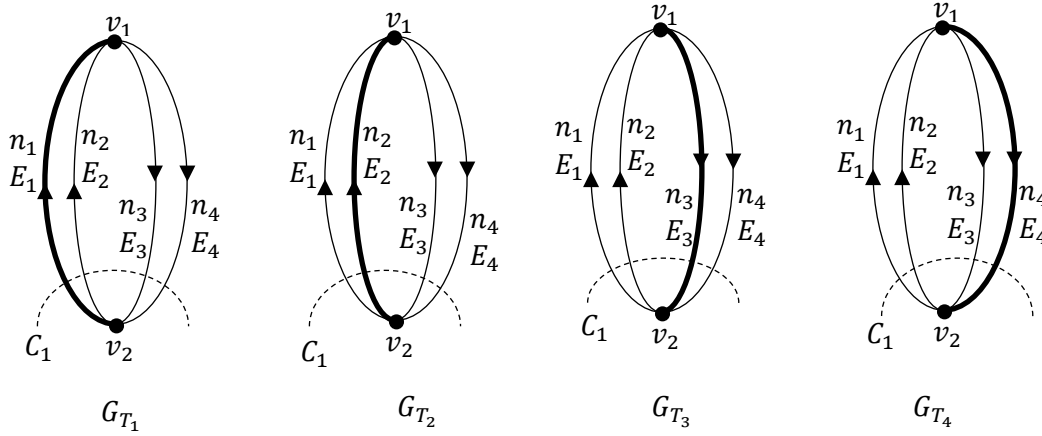
الفكرة الأساسية المعتمدة لطريقة المخططات هي تحليل جداء الناشر (2.10) المرتبط بالخطوط الداخلة أو الخارجة من قمم مخطط معين إلى كسور جزئية، حيث يساهم كل كسر في العبارة الكلية للطاقة الحرة. حيث نرسم على المخطط  $G_1$  من الشكل 2.2 جميع الأشجار الممكنة، أي نرسم جميع المخططات الممكنة التي تربط جميع قمم المخطط ولا تحوي حلقة (دورة).

فنلاحظ أن هناك أربعة أشجار ممكنة  $T_1, \dots, T_4$  للمخطط  $G_1$ . الشكل 3.2 يبين جميع الأشجار الممكنة للمخطط  $G_1$ .

حيث تمثل الخطوط السمكية الشجرة  $T_i$ ، بينما الخطوط الرفيعة تمثل الشجرة المكملة للمخطط  $G_1$ .

كما أننا نعلم أن الطاقة الحرة هي عبارة عن مجموعة من الكسور، كل كسر هو عبارة عن شجرة  $T_i$ ، حيث

يمثل مقام الكسر الخطوط السمكية للشجرة  $T_i$ ، بينما الشجرة المكملة فيمكن استخراج بسط الكسر منها.



الشكل 3.2. جميع الأشجار الممكنة لمخطط من الدرجة الثانية.

طريقة حساب مقدار مساهمة الشجرة  $T_1$  من الشكل 3.2 في كمية الطاقة الحرة للمخطط  $G_1$ . الخط السميك 1 يمكن استخراج مقام الكسر منه والمتعلق بالطاقة، حيث أن الخطوط الرفيعة 2، 3 و 4 فيمكن استخلاص بسط الكسر والمرتبب بالمعاملات الإحصائية  $f^+$  أو  $f^-$ .

حيث:

**مقام الكسر:** لتحديد المقام  $D_1 \perp T_1$ ، نقسم المخطط  $T_1$  إلى جزئين منفصلين بحيث يمر المقص عبر فرع واحد سميك فقط من فروع الشجرة كشرط الزامي من الشجرة، نرمز لعملية القص هذه بالرمز  $C$  في الشكل 3.2، يمكن حساب المقام مباشرة فنجده

$$D_1 = +E_1 + E_2 - E_3 - E_4$$

حيث وضعنا إشارة + على طاقة الخط الوحيد السميك 1 من الشجرة 1 التي مر عليها المقص، بينما إشارات الطاقات الأخرى 2، 3 و 4 فيمكن إيجادها نسبة إلى اتجاه الخط 1، حيث تكون موجبة في نفس اتجاه الخط 1 وتكون سالبة في الاتجاه العكسي للخط 1.



بسط الكسر:

هنا كل خط من الشجرة المكملة  $i$  يقابله معامل إحصائي  $f_i^+$  أو  $f_i^-$ . يبقى الآن، كيفية العثور على العلامة

$$sign_i \text{ (أو -) الموجودة في المعامل الإحصائي } f_i^{sign_i}.$$

بداية نلاحظ أن إضافة أي خط من الشجرة المكملة إلى خطوط الشجرة الممتدة  $T_i$  يشكل حلقة اساسية.

**تعريف 1:**

معامل الحافة  $n_i$ : هو رقم طبيعي غير معدوم  $n_i > 0$  مرتبط بالخط  $i$ .

**تعريف 2:**

نعرف الاتجاه الكلي  $O_i$  لكل حلقة كما يلي: وهو عدد صحيح غير معدوم، يمكن تمثيله عن طريق التجول

على الخطوط المشكلة الحلقة، حيث نقوم بجمع أو طرح قيمة معامل الحافة لكل خط، ثم نبدأ الحساب من

معامل الحافة  $n_i$  ونجمع معاملات الحواف للخطوط التي تكون في نفس اتجاه الخط  $i$ ، ونطرح معاملات

الحواف للخطوط المعاكسة للخط  $i$ . نتحصل في الأخير على:

$$O_i = n_i^+ - n_i^- \quad (2.30)$$

حيث  $n_i^+$  هو المجموع الكلي لمعاملات الحواف للخطوط المتجهة في نفس اتجاه الخط  $i$ ، و  $n_i^-$  يمثل

المجموع الكلي لمعاملات الحواف للخطوط المعاكسة للخط  $i$ .

ومنه يمكن تحديد العلامة  $sign_i$  كما يلي:

$$sign_i = [O_i] = -\frac{O_i}{|O_i|} \quad (2.31)$$

حيث استخدمنا الأقواس [ ] للدلالة على العلامة، وهذا لتسهيل الكتابة فقط.

إذن من التعريفين السابقين فإن الاتجاه الكلي لكل دورة (حلقة) في  $G_1$  من الشكل 3.2، وذلك لكل خط مكمل 2، 3 و 4 هم:

$$\text{بالنسبة للخط 2: } O_2 = n_2 - n_1;$$

$$\text{بالنسبة للخط 3: } O_3 = n_3 + n_1;$$

$$\text{بالنسبة للخط 4: } O_4 = n_4 + n_1.$$

وفي الاخير مما سبق فإن مساهمة الشجرة  $T_1$  هي:

$$I_2^1 = \frac{f_2^{[n_2-n_1]} f_3^{[n_3+n_1]} f_4^{[n_4+n_1]}}{(E_1 + E_2 - E_3 - E_4)} \quad (2.32)$$

وبنفس الطريقة يمكننا حساب مساهمات الأشجار الأخرى  $T_2$ ،  $T_3$  و  $T_4$ :

$$I_2^2 = \frac{f_1^{[n_1-n_2]} f_3^{[n_3+n_2]} f_4^{[n_4+n_2]}}{(E_2 + E_1 - E_3 - E_4)},$$

$$I_2^3 = \frac{f_1^{[n_1+n_3]} f_2^{[n_2+n_3]} f_4^{[n_4-n_3]}}{(E_3 + E_4 - E_1 - E_2)}, \quad (2.33)$$

$$I_2^4 = \frac{f_1^{[n_1+n_4]} f_2^{[n_2+n_4]} f_3^{[n_3-n_4]}}{(E_4 + E_3 - E_1 - E_2)}.$$

أخيراً نختار قيم معامل الحافة  $n_i > 0$  بحيث لا تتعدم كل الاتجاهات  $O_i$  لكل الأشجار  $T_i$ .

$$n_1 = 2, n_2 = 1, n_3 = 2, n_4 = 1$$

و منه فنحصل على نفس النتائج السابقة في (2.24) من الطريقة المباشرة.

ومنه فإننا نختار طريقة المخططات لأنها الأسهل والقابلة للبرمجة، لذلك نحن بحاجة لدراسة بعض المسائل المعروفة في نظرية المخططات.

ليكن  $G = (n, m)$  مخططاً متصلاً يحوي  $n$  قمة و  $m$  حافة (خط).

### تعريف 3:

الشجرة الممتدة  $T$  (Spanning tree) هيكل مخطط فرعي لـ  $G$  يتكون من جميع قمم  $G$  ولكن لا يحوي على دورات (حلقات) [44-46]، تسمى حواف الشجرة الممتدة  $T$  بالأغصان، العدد الكلي لأغصان الشجرة الممتدة يساوي  $n - 1$ .

### تعريف 4:

الشجرة المكملة \* (cotree) للشجرة الممتدة  $T$  في  $G$  وهي المخطط الذي يحوي كل حواف  $G$  باستثناء أغصان الشجرة الممتدة  $T$  [45-46] حواف الشجرة المكملة تسمى أوتار (الشجرة المكملة ممكن أن تحوي دورات (حلقات))، عدد أوتار الشجرة المكملة هو  $m - n + 1$ .

### تعريف 5:

القطع الأساسي هو عملية قطع لغصن واحد فقط من أغصان الشجرة الممتدة  $T$  وعدد معين من أوتار الشجرة المكملة  $T^*$ ، بحيث تؤدي هذه العملية إلى تقسيم المخطط  $G$  إلى جزئين هذه المجموعة من عمليات القطع والتي عددها  $n - 1$  تسمى مجموعة القطع الأساسية. يتم تحديد اتجاهات مجموعة القطع الأساسية وفق اتجاه غصن الشجرة المقطوع [46].

تعريف 6:

الحلقات الأساسية (الدورات الأساسية) هي حلقة تنتج بعد إضافة وتر واحد فقط من أوتار الشجرة المكاملة  $T^*$  إلى الشجرة الممتدة  $T$  [45,47]، عدد الحلقات الأساسية الناتجة من مخطط  $G$  هو  $m - n + 1$  حلقة.

الشكل 4.2 يشرح لنا مثلاً توضيحياً لمخطط متصل  $G(5,8)$  والذي يتكون من القمم  $v_i$ ،  $1 \leq i \leq 5$  والحواف  $E_j$ ،  $1 \leq j \leq 8$ ، هذا المخطط يحوي مثال على شجرة ممتدة  $T$  وشجرة مكاملة  $T^*$ ، حيث  $T$  محددة بالأغصان  $\{E_2, E_3, E_7, E_8\}$  (الخطوط السمكية)، وأما  $T^*$  فتتمثل بالأوتار  $\{E_1, E_4, E_5, E_6\}$  (الخطوط الرفيعة) مقام الكسر  $D$  يمكن حسابه مباشرة من مجموعة القطع الأساسية فنجد أن قيمته  $D = C_2 C_3 C_7 C_8$  الموضحة في الشكل بالخطوط المتقطعة.

كما نلاحظ في الشكل 4.2 ومن التعريف 5 فإن قيم القطع تساوي إلى:  $C_3 = E_3 + E_4 - E_5 - E_6$ ،  $C_2 = E_2 - E_1 - E_4$ ،  $C_7 = E_7 + E_4 - E_5 - E_6$ ،  $C_8 = E_8 + E_4 - E_5 - E_6$ .

يمكن تحديد بسط الكسر  $Nu$  من أوتار الشجرة المكاملة  $T^*$  فنجد من الشكل:  $Nu =$

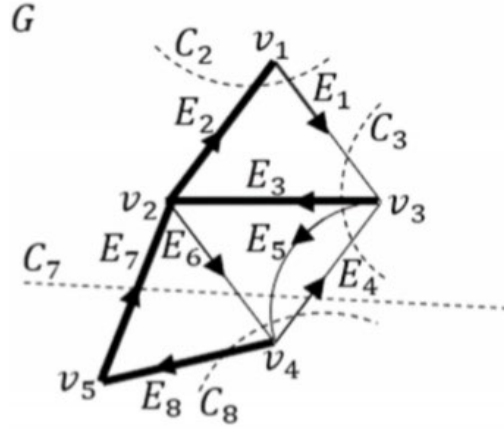
$$f_1^{[0_1]} f_4^{[0_4]} f_5^{[0_5]} f_6^{[0_6]}$$

كما أنه يمكن كذلك استخراج الاتجاهات الكلية  $O_j$ ؛  $j = 1, 4, 5, 6$  من الحلقات الأساسية (مفهوم 6)

$$O_6 = n_5 + n_7 + n_8 - n_3, \quad O_4 = n_4 + n_3 - n_7 - n_8, \quad O_1 = n_1 + n_3 + n_2 + n_6 + n_7 + n_8$$

وبذلك فمساهمة الشجرة الممتدة  $T$  من الشكل 4.2 في الطاقة الحرة  $I_5^T$  هي:

$$I_5^T = \frac{f_1^{[n_1+n_3+n_2]} f_4^{[n_4+n_3-n_7-n_8]} f_5^{[n_5+n_7+n_8-n_3]} f_6^{[n_6+n_7+n_8]}}{(E_2 - E_1)(E_3 + E_5 - E_1 - E_4)(E_7 + E_4 - E_5 - E_6)(E_8 + E_4 - E_5 - E_6)} \quad (2.34)$$



الشكل 4.2. مثال على مخطط متصل  $G$ : تمثل الخطوط السميكة مثلاً على شجرة ممتدة  $T$ ، حيث تمثل

الخطوط الرفيعة الشجرة المكملة  $T^*$  المرتبطة بـ  $T$ .

مجموعة القُطع الأساسية ممثلة بالخطوط المنقطعة. التشكيلات  $\{v_1, v_3, v_4\}$  و  $\{E_2, E_3, E_8\}$  تمثل على

التوالي: نهايات القمم وأغصان الشجرة الممتدة  $T$ .

الصيغة العامة  $\Omega_n^G$  لمساهمة مخطط متصل  $G(n, m)$  في الطاقة الحرة هي:

$$\Omega_n^G = \sum_{\text{All Spanning Trees}} \frac{\prod_{j=1}^{m-n+1} f_j^{[0_j]}}{\prod_{i=1}^{n-1} C_i} \quad (2.35)$$

حيث  $C_i, i = 1, n - 1$  تمثل مجموعة القُطع الأساسية (تعريف 5) للشجرة الممتدة  $T$  (تعريف 3)،

المكملة  $T^*$  (تعريف 4). نتيجة لذلك، طريقة المخططات لحساب الطاقة الحرة  $\Omega_n^G$  تم اختصارها في أربع

مسائل أساسية معروفة في نظرية المخططات وهي:

(1) إحصاء جميع حلقات (دورات) مخطط متصل، وذلك لإيجاد قيم معاملات الحواف  $n_i$  مرة واحدة

(تعريف 1).

(2) إحصاء جميع الأشجار الممتدة لمخطط متصل.

(أ) إيجاد مجموعة القَطع الأساسية لكل شجرة ممتدة  $T$ .

(ب) إيجاد الحلقات الأساسية لكل شجرة مكمل  $T^*$ .

### 3.2. إحصاء جميع الحلقات لمخطط متصل

من الضروري إيجاد القيم العشوائية لمعاملات الحافة  $O_i$  حيث  $i = 1, \dots, m$ ، ولكن المشكلة المطروحة هنا هي أننا لا يمكننا تحديد  $n_i$  لكل شجرة ممتدة على جدي، بل يجب إيجاد قيم معاملات الحافة لكل الأشجار الممتدة الناتجة من مخطط متصل.

وبعبارة أخرى، نظرًا لأن معاملات الحافة مرتبطة بإيجاد الحلقات (الدورات) الرئيسية، فمن الواضح أن هذا قد يؤدي إلى تحديد جميع حلقات (دورات) المخطط المتصل.

حيث يعد إحصاء جميع حلقات (دورات) مخطط متصل موضوعاً أساسياً آخر في نظرية المخططات. فهناك العديد من الخوارزميات [38-43] المقترحة لحل هذه المسألة بسرعة ومساحة مثاليين.

ففي هذا المجال، يمكننا أن نختار خوارزمية جيبس [38] لأنها تمكننا من إيجاد جميع الحلقات (الدورات) بترميز النظام الثنائي.

كما أن هناك مشكلة في خوارزمية جيبس وهي أنها تأخذ مساحة من الذاكرة كبيرة جداً، ولحل هذه المشكلة اقترح [28] تعديل على هذه الخوارزمية، حيث تتمحور الخطوات الأساسية لهذا التعديل في الخوارزمية على ما يلي:

(1) إيجاد جميع الحلقات (الدورات) الأساسية من شجرة ممتدة عشوائية.

(2) الدمج بين جميع الحلقات الأساسية التي تم الحصول عليها من الخطوة 1.

(3) تحديد الحلقات الصحيحة فقط من بين الحلقات الناتجة من الخطوة 2.

#### 4.2. إحصاء جميع الأشجار الممتدة لمخطط متصل

تم تطوير العديد من خوارزميات لإحصاء الأشجار لمخطط متصل [30-37]، في هذا الجزء سوف نتطرق إلى الخوارزمية الجديدة [29] والتي تختلف عن سابقتها، حيث تعتمد على طريقة الحذف والانكماش contraction-deletion. سنعرض تفاصيل هذه الخوارزمية في الإجراءات التالية:

#### 1.4.2. إجراءات التهيئة

قبل البدء في عملية إيجاد جميع الأشجار الممتدة لمخطط متصل  $G(n, m)$ ، يجب أن نهئى المخطط وذلك عن طريق الخطوات التالية:

- نحذف جميع حلقات هارترى-فوك (Hartree-Fock loops) أو اختصاراً HFL إذا وجدت في المخطط، أي تلك الحلقات التي تحوي قمة وحافة وحيدتين وتبدأ وتنتهي في نفس القمة.
- حيث مساهمة كل حلقة من حلقات HFL هي  $f_k^-$ ، حيث  $k$  هو رقم الحافة الخاص بهذه الحلقة، ويتم حسابها كعامل مشترك؛
- استخدم البحث العميق depth-first search، أو ما يعرف اختصاراً بـ DFS[48]، وذلك لإيجاد شجرة ممتدة عشوائية للمخطط المتصل  $G$ ؛

إعادة ترقيم قمم المخطط  $G$  وفقاً لترتيب القمم التي تمت مصادفتها أثناء عملية البحث العميق بـ DFS الخطوتين (2) و (3) تجعل من قمم المخطط  $G$  متصلة بشكل مرتب من 1 إلى  $n$  بحيث كل قمة  $v_i$  تكون متصلة بالقمة السابقة  $v_{i-1}$ . يوضح الشكل 5.2 (a) مثلاً لمخطط هيجنهولتز  $G_1$  من الدرجة الرابعة يحوي أربعة قمم  $v_1, v_2, v_3, v_4$  وثمانية حواف  $E_1, \dots, E_8$ ، بينما الشكل 5.2 (b) يمثل المخطط

$G_1$  بعد إجراء التهيئة عليه، حيث نلاحظ من خلال مخطط المهياً  $G_2$  أن القمة  $v_4$  متصلة مع القمة  $v_3$  بواسطة الحافة  $E_7$ ، القمة  $v_3$  متصلة مع القمة  $v_2$  بواسطة الحافة  $E_3$  والقمة  $v_2$  متصلة مع القمة  $v_1$  بواسطة الحافة  $E_1$  مساهمة حلقات هارترى-فوك  $E_2$ (HFL) و  $E_8$  الموضحة في الشكل 5.2 (a) هو  $f_2^- f_8^-$  وسنقوم بإضافة هذا المقدار في نهاية الحساب كعامل مشترك.

## 2.4.2. عملية الحذف والانكماش

طريقة الحذف والانكماش تعمل على تحليل المخطط المهياً  $G(n, m)$  إلى مخططات مقلصة متعددة المستويات  $G^{(k, l_k)}$ ، حيث  $k$  يمثل المستوى  $n, \dots, 1, k$ ، بينما  $l_k$  يمثل رقم المخطط  $1 \leq l_k \leq n_k$  و  $n_k$  هي عدد الحواف الخارجة من القمة  $v_k$ . بحيث في كل مستوى  $k$ ، نحذف كل حافة خارجة من القمة  $v_k$  ونكمش على طول هذه الحافة (أي نجمع القمة  $v_k$  مع القمة المجاورة لها والمتصلة بها بواسطة الحافة المحذوفة)

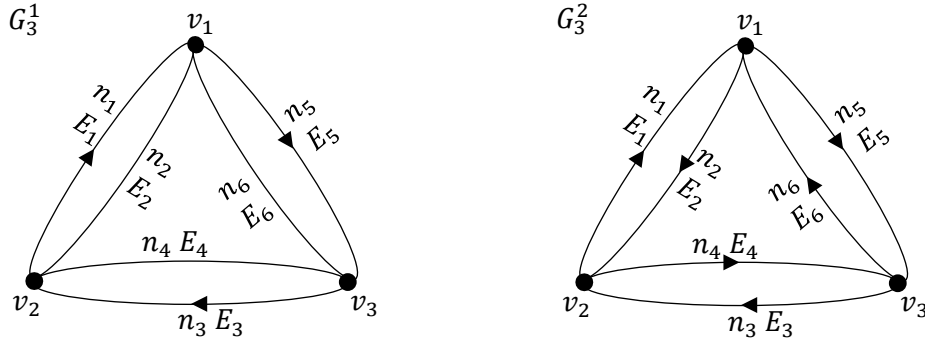
الشكل 6.2. يبين عملية الحذف والانكماش في المستوى  $k$ ، أثناء هذه العملية نتعرض أحياناً لحواف متوازية تربط بين القمة  $v_k$  وقمة مجاورة لها ومنه يجب حذفهم كلهم وكمشهم مثل حافة واحدة.

حيث نعيد هذه العملية بشكل متكرر بدءاً من المستوى  $n$  ووصولاً الى المستوى 1.

طريقة الحذف والانكماش تساعدنا على ضغط جميع الحواف المتوازية



### 8.2. حساب مساهمة مخططات الفراغ في الطاقة الحرة عند الحد الثالث



الشكل 12.2. مخططي هيجنهولتز من الدرجة الثالثة  $G_3^1$  و  $G_3^2$

يمكننا استنتاج كل حلقات المخطط  $G_3^2$  والممثلة بالمجموعة التالية:

$$CY = \left\{ \{E_1, E_2\}, \{E_3, E_4\}, \{E_5, E_6\}, \{E_1, E_3, E_5\}, \{E_1, E_3, E_6\}, \{E_1, E_4, E_5\}, \{E_1, E_4, E_6\}, \right. \\ \left. \{E_2, E_3, E_5\}, \{E_2, E_3, E_6\}, \{E_2, E_4, E_5\}, \{E_2, E_4, E_6\} \right\}$$

ومنه فالاتجاه الكلي  $OR$  الناتج من الحلقات  $CY$  يمكن حسابه مباشرة وذلك بتتبع كل اتجاه شعاع، فنجد العبارة التالية:

$$OR = \left\{ \begin{array}{l} \pm(n_1 + n_2), \pm(n_3 + n_4), \pm(n_5 + n_6), \pm(n_1 + n_5 + n_3), \pm(n_1 - n_6 + n_3), \\ \pm(n_1 + n_5 - n_4), \pm(n_1 - n_6 - n_4), \pm(n_2 - n_3 - n_5), \pm(n_2 - n_3 + n_6), \\ \pm(n_2 + n_4 - n_5), \pm(n_2 + n_4 + n_6) \end{array} \right\}$$

يمكننا بسهولة ملاحظة ان الشرط الأساسي لكي لا تتعدم الاتجاهات في  $OR$  هو:

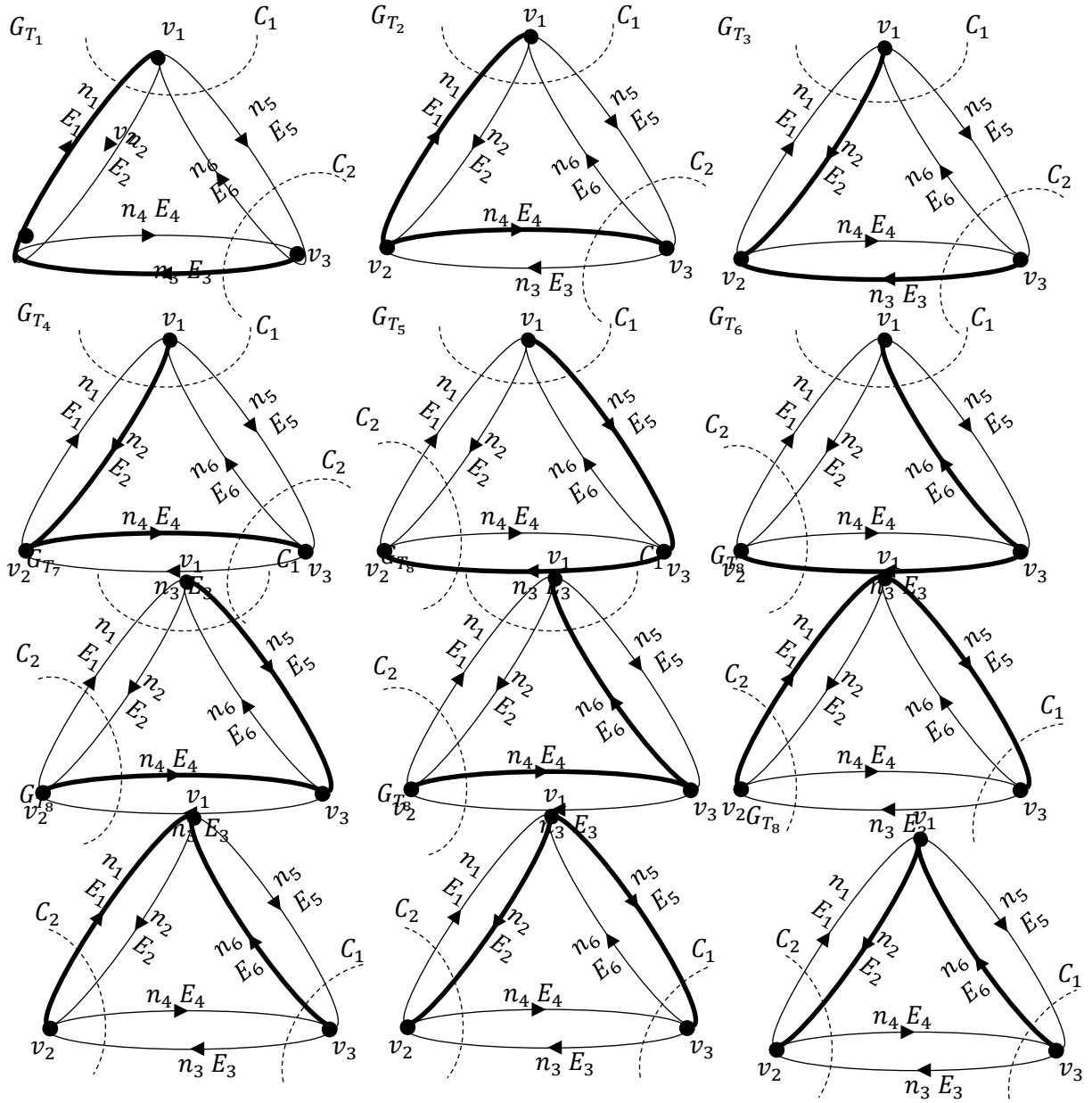
$$n_1 - n_6 + n_3 \neq 0, n_1 + n_5 - n_4 \neq 0, n_1 - n_6 - n_4 \neq 0$$

$$n_2 - n_3 - n_5 \neq 0, n_2 - n_3 + n_6 \neq 0, n_2 + n_4 - n_5 \neq 0$$

لذلك سنختار القيم التالية:

$$n_1 = n_2 = n_3 = n_4 = n_5 = n_6 = 1 \quad (2.36)$$

الخطوة الثانية هي ايجاد كل الأشجار الممتدة من المخطط البياني  $G_3^2$  والممثلة في الشكل 2.13



الشكل 13.2. مخططات كل الأشجار المتفرعة من المخطط البياني  $G_3^2$

نبحث الآن على مساهمة كل شجرة ممتدة في الطاقة الحرة.

في حالة المخطط البياني  $G_{T_1}$ ، نجد أن أغصان الشجرة الممتدة ممثلة بـ  $T_1 = \{E_1, E_3\}$ ، ومنه نجد أن هناك قاطعان أساسيان، ممثلان في الشكل  $G_{T_1}$  بـ  $C_1$  و  $C_2$ .

من أجل  $C_1$ ، نلاحظ أن غصن الشجرة الممتدة  $E_1$  والوتر  $E_6$  داخل الى القطع  $C_1$  ، أما باقي الأوتار  $E_2$  و  $E_5$  فهي خارجة من  $C_1$ ، ومنه المقام هو:

$$D_1 = E_1 + E_6 - E_2 - E_5$$

بنفس الطريقة نستنتج أن المقام الناتج من القطع  $C_2$  هو

$$D_2 = E_3 + E_6 - E_4 - E_5$$

إذن المقام النهائي يكون:

$$D_{T_1} = D_1 D_2 = (E_1 + E_6 - E_2 - E_5)(E_3 + E_6 - E_4 - E_5)$$

أما البسط  $N_{T_1^*}$  فهو بالتعريف:

$$N_{T_1^*} = f_2^{[O_2]} f_4^{[O_4]} f_5^{[O_5]} f_6^{[O_6]}$$

الحلقات الأساسية للشجرة الممتدة  $T_1$  هي:

$$FC_T = \{\{E_2, E_1\}, \{E_4, E_3\}, \{E_5, E_3, E_1\}, \{E_6, E_1, E_3\}\}$$

من قيم معاملات الحافة (2.31) يمكننا إيجاد إشارة الاتجاهات الكلية بكل سهولة:

$$[O_2] = -\text{Sign}[n_2 + n_1] = -\text{Sign}[2] = -$$

$$[O_4] = -\text{Sign}[n_4 + n_3] = -\text{Sign}[2] = -$$

$$[O_5] = -\text{Sign}[n_5 + n_3 + n_1] = -\text{Sign}[3] = -$$

$$[O_6] = -\text{Sign}[n_6 - n_1 - n_3] = -\text{Sign}[-1] = +$$

وأخيراً، مساهمة الشجرة الممتدة  $G_{T_1}$  في الطاقة الحرة هي:

$$\Omega_3^{G_{T_1}} = \frac{f_2^- f_4^- f_5^- f_6^+}{(E_1 + E_6 - E_2 - E_5)(E_3 + E_6 - E_4 - E_5)}$$

بنفس الطريقة يمكننا إيجاد المساهمات لباقي المخططات البيانية  $G_{T_2}, \dots, G_{T_{12}}$ .

وبالتالي، المساهمة الكلية للمخطط  $G_3^2$  في الطاقة الحرة  $\Omega_3^{G_2}$  هي:

$$\begin{aligned} \Omega_3^{G_2} = & \frac{f^-(E_5) f^+(E_6) (f^-(E_2) - f^-(E_1)) (f^-(E_4) - f^-(E_3))}{(E_6 - E_5 - E_2 + E_1)(E_6 - E_5 - E_4 + E_3)} \\ & + \frac{f^-(E_3) f^+(E_4) (f^-(E_2) - f^-(E_1)) (f^-(E_6) - f^-(E_5))}{(E_4 - E_3 - E_2 + E_1)(E_4 - E_3 - E_6 + E_5)} \\ & + \frac{f^-(E_1) f^+(E_2) (f^-(E_4) - f^-(E_3)) (f^-(E_6) - f^-(E_5))}{(E_2 - E_1 - E_4 + E_3)(E_2 - E_1 - E_6 + E_5)} \end{aligned}$$

### 1.3. مقدمة

في هذا الفصل سوف نتطرق الى كيفية حساب الطاقة الحرة لنموذج هيبارد في بعدين، وذلك باستخدام نظرية الاضطرابات المتعددة الأجسام في درجات الحرارة العالية، كذلك ندرس بعض الخصائص الترموديناميكية لنموذج هيبارد وذلك باستخدام نشر الطاقة الحرة.

### 2.3. نشر الطاقة الحرة عند درجات الحرارة العالية

وجدنا في الفصل الثاني أن نشر الطاقة الحرة في نظرية الاضطرابات يمكن كتابته على شكل مجموع الحد  $n$  للطاقة الحرة الجزئية  $\Omega_n$ :

$$\Omega = \Omega_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \Omega_n \quad (3.1)$$

حيث  $\Omega_0$  يمثل حد الطاقة الحرة لهاملتون الجملة دون تفاعل.

يحتوي كل حد  $\Omega_n$  على جميع الرسوم البيانية المتميزة بشكل أساسي (EDDs) (EDDs) هو الرسم البياني المختار من بين المخططات المكافئة، لمزيد من المعلومات، راجع [28]. من أجل التبسيط، نختار فقط المخططات التي لا تحتوي على أي من حلقة من حلقات هارترى-فوك، وهذا يعني أن أي خط من المخططات المولدة يمكن أن يحوي على طاقة هارترى-فوك الفرعية، لذلك نستبدل الطاقة  $E_k$  بالطاقة التالية:

$$E_{p,\sigma} = \varepsilon_{p,\sigma} - \mu - e_{p,\sigma}^{HF}(\beta) \quad (3.2)$$

حيث  $e_{p,\sigma}^{HF}(\beta)$  هي طاقة هارترى-فوك بدلالة معكوس درجة الحرارة  $\beta$ . هذه الطاقة يمكن حسابها بواسطة حل المعادلة التكاملية الغير خطية التالية:

$$e_{p,\sigma}^{HF}(\beta) = \frac{1}{V} \int V_{pq}^{pq} f^-(\varepsilon_{q,\sigma} + e_{q,\sigma}^{HF}(\beta)) dq \quad (3.3)$$

يمكن صياغة الحد  $\Omega_n$  على الشكل التالي:

$$\Omega_n = \sum_{i=1}^N \frac{(EDD)_i}{S_i} \quad (3.4)$$

حيث  $S_i$  معامل التناظر للمخطط  $(EDD)_i$ . العدد  $N$  يمثل عدد مخططات الفراغ لهيجنهولتز  $EDDs$ . الجدول 1 يوضح بعض قيم  $N$  لكل حد نشر  $n$  من 2 الى 10. الجدول 1. العدد الإجمالي لمخططات الفراغ من نوع هيجنهولتز المترابطة والتميزة أساساً دون المخططات الفرعية الخاصة ب هارترى-فوك.

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N	1	1	2	5	13	59	285	1987	16057	149430

يمكننا إيجاد المخططات  $(EDD)$  ومعامل تناظرها  $S_i$  باستخدام البرنامج [27]. كما يمكننا حساب مساهمة كل مخطط  $(EDD)_i$  في الطاقة الحرة باستخدام البرنامج [28]. حيث نجد أن عبارة كل حد هو عبارة عن مجموع كسور جزئية. كل كسر يحوي أساساً مقام يمثل الطاقة، وبسط يحوي على المعاملات الإحصائية  $f^+$  و  $f^-$ . كل مقام هو في الأساس جداء مجموعة القطع الأساسية  $C_i$ ، بينما البسط مرتبط بإيجاد الحلقات الأساسية واتجاهها الكلي  $O_j$ . حيث وجدنا أن مساهمة كل مخطط لهيجنهولتز في الطاقة الحرة يعطى من الشكل:

$$\Omega_n^G = \sum_{All \text{ Spanning Trees}} F^S \quad (3.5)$$

هنا مساهمة كل شجرة ممتدة  $F^S$  من العلاقة (3.1) تعطى بالكسر:

$$F^S = \frac{\prod_{j=1}^{m-n+1} f_j^{[O_j]}}{\prod_{i=1}^{n-1} C_i} \quad (3.6)$$

حيث  $[O_j] = \pm$  هو إشارة الاتجاه الكلي (تعريف (2.27)). مقدار القطع الأساسي يمثل مجموع الطاقات في الاتجاه الموجب  $E_i^{i+}$  لاتجاه غصن الشجرة ناقص مجموع الطاقات في الاتجاه المعاكس  $E_i^{i-}$  للغصن المكون الوحيد المار منه القطع، أي:

$$C_i = \sum_l E_l^{i+} - \sum_l E_l^{i-} \quad (3.7)$$

في هذا الجزء سوف نتطرق الى كيفية حساب المقدار (3.1) في درجات الحرارة العالية.

### 3.3. كتابة المساهمات في الطاقة الحرة على شكل تفاضلات كسرية (Divided differences)

سنناقش هذا الجزء كيفية اعادة صياغة النشر في العلاقة (3.6) على شكل تفاضل كسري.

سوف نوضح كيف تساعدنا عملية إعادة الصياغة الجديدة في العثور على نشر الطاقة الحرة في درجات الحرارة العالية بسهولة وكفاءة.

نطبق فقط في حالتنا على لفرميونات (  $\epsilon = -1$  ) (بالطبع يمكن تعميمها على البوزونات)

قبل الاستمرار في هذه الطريقة، دعونا نبدأ بمساهمة الدرجة الثانية.

مساهمة المخطط<sub>2</sub> (الشكل (2.6)) في الطاقة الحرة تعطى بالعلاقة (أنظر الفصل الثاني (2.27) و (2.28) هي:

$$\Omega_2 = - \frac{\left( f^-(x_2)(f^-(x_3) + f^+(x_4)) - f^-(x_3)f^-(x_4) \right) f^-(x_1)}{x_1 + x_2 - x_3 - x_4} + \frac{f^+(x_2)f^-(x_3)f^-(x_4)}{x_1 + x_2 - x_3 - x_4} \quad (3.8)$$

حيث  $x_i = E_{pi}$  ، نستبدل البسط الموجود في الطرف الثاني من المساهمة (3.8) بالعلاقة التالية:

$$\frac{f^+(x_2)f^-(x_3)f^-(x_4)}{f^-(-x_2 + x_3 + x_4)} = f^-(x_2)(f^-(x_3) + f^+(x_4)) - f^-(x_3)f^-(x_4). \quad (3.9)$$

ومنه فإنه يمكن كتابة  $\Omega_2$  على الشكل:

$$\Omega_2 = - \left( f^-(x_2)(f^-(x_3) + f^+(x_4)) - f^-(x_3)f^-(x_4) \right) \times f^-[x_1, -x_2 + x_3 + x_4]. \quad (3.10)$$

حيث المقدار  $f^-[x_1, -x_2 + x_3 + x_4]$  يمثل الدرجة الأولى للتفاضل الكسري والمعرف بالعلاقة:

$$f^-[x_1, -x_2 + x_3 + x_4] = \frac{f^-(x_1) - f^-(-x_2 + x_3 + x_4)}{x_1 + x_2 - x_3 - x_4} \quad (3.11)$$

العلاقة (3.10) تساعد على ايجاد النشر في درجات الحرارة العالية ل  $\Omega_2$  ، لأن النسبة في المعادلة (3.11) يمكن كتابتها على شكل سلسلة لانهائية من حيث درجة الحرارة العكسية  $\beta$

$$f^-[x, y] = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\beta^n}{n!} e_n \sum_{k=0}^{n-1} x^k y^{n-1-k} \quad (3.12)$$

حيث المعاملات  $e_n$  تمثل ثوابت أولر .

$$e_n = \frac{\partial^n}{\partial t^n} \left( \frac{2}{1+e^t} \right)_{t=1} ; n \geq 1. \quad (3.13)$$

الكتابة السابقة لـ  $\Omega_2$  في المعادلة (3.10) يمكن استنتاجها عبر تطبيق القسمة الاقليدية للمقدار  $\frac{f^-(x_1)}{(x_1+x_2-x_3-x_4)}$  حيث العامل  $E_{p1} = x_1$  هو المقسوم. في هذه العملية، نحتاج فقط حاصل القسمة بينما الباقي يختفي تلقائيا مع الطرف الثاني من العلاقة (3.8). في حالة النشر عند الرتبة  $n = 3$  ، فالمساهمة  $\Omega_3^2$  للمخطط  $G_3^2$  (الشكل 2.12) تعطى بـ (انظر الفصل الثاني العلاقة (2.32))

$$\Omega_3^{(2)} = \frac{f^-(x_5)f^+(x_6)(f^-(x_2) - f^-(x_1))(f^-(x_4) - f^-(x_3))}{(x_6 - x_5 - x_2 + x_1)(x_6 - x_5 - x_4 + x_3)} + \frac{f^-(x_3)f^+(x_4)(f^-(x_2) - f^-(x_1))(f^-(x_6) - f^-(x_5))}{(x_4 - x_3 - x_2 + x_1)(x_4 - x_3 - x_6 + x_5)} + \frac{f^-(x_1)f^+(x_2)(f^-(x_4) - f^-(x_3))(f^-(x_6) - f^-(x_5))}{(x_2 - x_1 - x_4 + x_3)(x_2 - x_1 - x_6 + x_5)} \quad (3.14)$$

من أجل إعادة صياغة المساهمة (3.14) على شكل تفاضل كسري، نختار أحد الأشجار الممتدة (لاحظ الشكل) فلتكن على سبيل المثال الشجرة  $x_3; x_1; E_3; E_1 = T_1$  ، الآن نقوم بالقسمة الاقليدية للمساهمة (3.14) على المتغير  $x_1$  ثم على  $x_3$  على الترتيب (أو العكس). لاحظ أننا نحتاج فقط الحاصل بينما الباقي سيختفي بعد عملية القسمة لأنه في درجات الحرارة العالية من المستحيل أن نجد مساهمة على شكل كسر . عملية القسمة تكون بسيطة في الجزء الأول والأخير تتجلى المشكلة حين نقوم بالقسمة على الجزء الثاني

$$(x_4 - x_3 - x_2 + x_1)(x_4 - x_3 - x_6 + x_5)$$

بسبب أن العبارة تحتوي المتغير  $x_3$  والتي سنجري عليها عملية القسمة لاحقا. لهذا سنقوم بتحليل هذا الجزء كالتالي:

$$\frac{1}{(x_4 - x_3 - x_2 + x_1)(x_4 - x_3 - x_6 + x_5)} = \frac{1}{(x_6 - x_5 - x_2 + x_1)(x_6 - x_5 - x_4 + x_3)} = \frac{1}{(x_2 - x_1 - x_4 + x_3)(x_2 - x_1 - x_6 + x_5)} \quad (3.15)$$

إذن بالتعويض نجد:

$$\Omega_3^{(2)} = \frac{(f^-(x_2) - f^-(x_1))N_1}{(x_1 - x_2 - x_5 + x_6)(x_3 - x_4 - x_5 + x_6)} + \frac{(f^-(x_6) - f^-(x_5))N_2}{(x_1 - x_2 - x_3 + x_4)(x_1 - x_2 - x_5 + x_6)} \quad (3.16)$$

حيث

$$N_1 = f^-(x_5)f^+(x_6)(f^-(x_4) - f^-(x_3)) - f^-(x_3)f^+(x_4)(f^-(x_6) - f^-(x_5)) \quad (3.17)$$

$$N_2 = f^-(x_1)f^+(x_2)(f^-(x_4) - f^-(x_3)) - f^-(x_3)f^+(x_4)(f^-(x_2) - f^-(x_1)) \quad (3.18)$$

يمكن تحويل الجزء الأول من العلاقة (3.16) إلى الصيغة التالية:

$$\frac{(f^-(x_2) - f^-(x_1))N_1}{(x_1 - x_2 - x_5 + x_6)(x_3 - x_4 - x_5 + x_6)} \rightarrow (f^-(x_5)f^+(x_6) + f^+(x_4)(f^-(x_6) - f^-(x_5))) \times \left( \frac{f^-(x_1)}{(x_1 - x_2 - x_5 + x_6)} \right) \left( \frac{f^-(x_3)}{(x_3 - x_4 - x_5 + x_6)} \right) \quad (3.19)$$

حاصل البسط  $f^-(x_1)$  على  $(x_1 - x_2 - x_5 + x_6)$  ببساطة يساوي  $\frac{f^-(x_1) - f^-(x_2 + x_5 - x_6)}{(x_1 - x_2 - x_5 + x_6)}$  ، والذي هو التفاضل الكسري من الدرجة الأولى:  $f^- [x_1, -x_2 + x_3 + x_4]$  كذلك لدينا  $\frac{f^-(x_3)}{(x_3 - x_4 - x_5 + x_6)} = f^- [x_3, -x_4 + x_5 + x_6]$

يحتوي الكسر الثاني في العلاقة (3.16) على المتغير  $x_1$  مرتين في مقامه، لذا نحتاج فقط لقسمة  $f^-(x_1)$  مع الحد  $(x_1 - x_2 - x_3 + x_4)(x_1 - x_2 - x_5 + x_6)$  ، وبالتالي فإن حاصل عملية القسمة في هذا الكسر هو مجرد التفاضل الكسري من الدرجة الثانية

$f^- [x_1, x_2 + x_3 - x_4, x_2 + x_5 - x_6]$  مضروباً بالعوامل  $f^-(x_1)$  في هذا الكسر. النتائج النهائية المطلوبة للمساهمة هي:



$$\begin{aligned} \Omega_3^{(2)} = & G(x_5, x_6, x_5, x_4) f^- [x_1, x_2 + x_5 - x_6] \times f^- [x_3, -x_4 + x_5 + x_6] \\ & + (f^-(x_6) - f^-(x_5)) G(x_3, x_4, x_2) f^- [x_1, x_2 + x_3 \\ & - x_4, x_2 + x_5 - x_6] \end{aligned} \quad (3.1)$$

حيث

$$G(x, y, z) = f^-(x) f^+(y) + f^+(z) (f^-(y) - f^-(x)) \quad (3.2)$$

قبل البدء في معالجة رتب نشر أعلى في  $\Omega_n$ ، نلاحظ أن البسط في العلاقة (3.6)، يحتوي البسط على العوامل الإحصائية  $f^-$  أو  $f^+$  والتي هي بدلالة  $\beta$  عند نشر هذه المعاملات الإحصائية في درجات حرارة عالية  $\beta$  إلى رتبة معينة  $R$ ، فإن البسط  $N_{T^*}$  سيكون كثير حدود درجته  $R$  من حيث المتغير  $\beta$  والطاقات  $E_j$ . لذلك، يمكن كتابة نشر تايلور لـ  $N_{T^*}$  كتعدد المتغيرات للطاقات على الشكل

$$N_{T^*} = \sum_{K=0}^R \left(\frac{-\beta}{2}\right)^k \prod_{j=1}^{n+1} \frac{E_j^{k_j}}{K_j!} e_{k_j}. \quad (3.3)$$

حيث يتم اختيار المعاملات  $K_j$ ، والتي هي أعداد صحيحة موجبة، عن طريق حل المعادلة

$$\sum_{j=1}^{n+1} K_j = k$$

في الحالة  $K_j = 0$ ، معامل  $e_0(0)$  يساوي إشارة الاتجاه الكلي  $e_0 = -[O_j]$ .

كما هو موضح في العلاقة (3.6)، فإن البسط في العلاقة (3.22) يجب أن يكون ضمن حدود مقام المساهمة (3.6) من حيث درجة كثير الحدود متعدد المتغيرات. بمعنى آخر، يجب أن تكون درجة  $N_{T^*}$  أكبر من  $n - 2$ ، في حين يجب أن يكون المجموع على جميع الأشجار المتفرعة الممتدة  $K$  التي تقل عن  $n - 1$ ، مساوية للصفر:

$$\sum_T \frac{\prod_{j=1}^{n+1} \frac{E_j^{K_j}}{K_j!} e_{k_j}}{\prod_{i=1}^{n-1} D_i} = 0; 0 \leq K \leq n - 2. \quad (3.4)$$

انطلاقاً، من العلاقة (3.22) و(3.23)، نجد أنه يمكن كتابة المساهمة (3.6) في درجة الحرارة العالية على شكل مجموع كسور جزئية:

$$\Omega_n^{G_i} = \sum_{k=n-1}^R \beta^k \sum_T \frac{P_K(E_1, \dots, E_{n+1})}{P_{n-1}(E_1, \dots, E_{n-1})}. \quad (3.5)$$

حيث يتم كتابة كثيرات الحدود المتعددة المتغيرات  $P_K(E_1, \dots, E_{n+1})$  و  $P_{n-1}(E_1, \dots, E_{n-1})$  على الشكل التالي:

$$P_K(E_1, \dots, E_{n+1}) = \prod_{j=1}^{n+1} \frac{E_j^{K_j}}{K_j!} e_{K_j}. \quad (3.6)$$

$$P_{n-1}(E_1, \dots, E_{n-1}) = \prod_{i=1}^{n-1} D_i. \quad (3.7)$$

التطبيق المباشر للعلاقة (3.24) يستغرق وقت كبير لأنه يجب أن نقوم بتبسيط جميع الكسور. تصبح هذه العملية أكثر تعقيداً في حالات المخططات التي تحتوي على العديد من الأشجار الممتدة. بما أن بسط ومقام العلاقة (3.24) هي كثيرات حدود متعددة المتغيرات من حيث الطاقات، لذلك، نحن سنقوم بإجراء عملية القسمة الإقليدية لكثيرات الحدود. بالإضافة إلى ذلك، يجب أن تكون العبارة النهائية للطاقة الحرة  $\frac{G_i}{n}$  هي كذلك كثير حدود متعدد المتغيرات من حيث الطاقات، ويجب أن لا تحوي أي كسر.

في هذه الحالة، نحتاج فقط إلى حاصل عملية القسمة الإقليدية (نجد تلقائياً أن مجموع كل بواقي القسمة على كل الأشجار الممتدة  $T$  مساوي الصفر). وبهذه الطريقة، نأخذ متغيراً تلقائياً للطاقة، على سبيل المثال  $E_R$ ، ثم نقوم بإيجاد حاصل القسمة لكثير الحدود  $P_K(E_R)/P_{n-1}(E_R)$  على جميع الأشجار الممتدة  $T$ . إذا كان حاصل القسمة لا يزال يحتوي على كثير حدود، على سبيل المثال  $P_K(E_S)/P_{n-1}(E_S)$ ، فإننا نكرر عملية القسمة على المتغير  $E_S$ ، وهكذا حتى نحصل على عبارة الطاقة الحرة على شكل كثير حدود متعدد المتغيرات للطاقات دون أي كسر.

الطريقة السابقة تساعدنا في اقتراح خوارزمية حسابية. نسميها هذه الطريقة خوارزمية النشر في درجات الحرارة المرتفعة.

### 4.3. طريقة خوارزمية النشر في درجات الحرارة المرتفعة

خطوات هذه الخوارزمية لحساب الطاقة الحرة في درجات الحرارة العالية يمكن شرحها عبر الخطوات التالية:

- 1- إيجاد جميع المخططات المتميزة المتصلة عند رتبة النشر  $n$ ، في هذه الحالة يمكننا الاستعانة بالتطبيق [11]. العدد الاجمالي للقمم  $N_V$  والحواف  $N_E$  لكل مخطط  $G(E, V)$  هو  $N_V = n$  و  $N_E = 2n$ ، حيث أن حواف المخطط  $G(E, V)$  عبارة عن أعداد صحيحة موجبة تماماً،

- 2- نجري عملية البحث العميق (أو ما يعرف ب  $DFS$ )، وذلك من أجل العثور على شجرة ممتدة عشوائية  $E_{S_1}, E_{S_2}, \dots, E_{S_{n-1}}$  للمخطط  $G$ ، تسمى هذه الشجرة: شجرة القاسم  $DT$ . يتم ترتيب حواف  $DT$  ترتيباً تصاعدي  $S_1 < S_2 < \dots < S_{n-1}$ ،
- 3- نعيد ترتيب قمم المخطط  $G$  حسب ترتيب قمم الشجرة الممتدة  $DT$ ، هذه العملية تساعدنا على التأكد من أن كل قمة  $v_i$  للمخطط  $G$  متصلة بأحد القمم السابقة  $v_{i-1}$ ،
- 4- نمثل كل حافة من المخطط  $G(E, V)$  على شكل عدد في الأساس 2 أي  $E_k = 2^{k-1}$ ،
- 5- نحدد الفرع الأول  $S_1$  من  $DT$  ثم نبحث على جميع الأشجار الممتدة التي فروعها لا تحتوي على  $S_1$  ولكن حسب الشرط التالي: إذا كانت الأشجار الممتدة تحتوي على بعض الفروع  $DT$  فيجب ان يتقاطع القطع الاساسي لتلك الفروع مع فرع واحد او اكثر مع الحبال المتبقية ل  $DT$  ،
- 6- نستخدم عملية تقسيم للكسور الجزئية في المجموعات التي مقاماتها  $D_1, \dots, D_{k_1}$  والتي تحتوي الفرع  $S_1$  والمقامات  $D_{k_1+1}, \dots, D_{k_2}$  التي تحتوي على الفرع  $S_2, \dots$  الخ .

مساهمة كل شجرة ممتدة من  $G$  يمكن صياغتها كالتالي

$$\Omega_n^G = f^{[0_1]}(E_1) \dots f^{[0_s]}(E_s) \prod_{k=1}^M f^{-1}[E_{S_k}, d_1, \dots, d_{r_k}] \quad (3.8)$$

العدد الصحيح  $r_k = n_k - m_k$  هو رتبة فرع الطاقة  $E_{S_k} \in DT$  بحيث  $n_k$  هو عدد ظهور الطاقة  $E_S$  في المقام  $D = D_1 D_2 \dots D_{n-1}$  حيث  $m_k$  هو عدد ظهور  $E_S$  في أحد الفروع السابقة  $E_{S_1}, E_{S_2}, \dots, E_{S_{k-1}}$  في نفس المقام  $D_i$ . جميع الرتب  $r_k$  يمكن ايجادها وذلك بحل المعادلة الصحيحة التالية:

$$\sum_{K=1}^{n-1} r_k = n - 1. \quad (3.9)$$

المقدار  $\Omega_n^G$  هو التفاضل الكسري [24] وهي اداة رياضية تستعمل عادة لحساب المعاملات في كثيرات الحدود في صيغة نيوتن.

تعرف علاقة التفاضلات الكسرية بالعلاقات التالية:

$$f^{-}[e_s] = f^{[0]}(e_s) \quad (3.10)$$

$$f^{-}[e_s, d_1] = \frac{f^{-}(e_s) - (d_1)}{e_s - d_1} = \frac{1}{2} \left( \frac{\tanh\left(\frac{\beta}{2} e_s\right) - \tanh\left(\frac{\beta}{2} d_1\right)}{e_s - d_1} \right) \quad (3.11)$$

ومن أجل  $r \geq 2$

$$f^{-}[e_s, \dots, d_r] = \frac{f^{-}[e_s, \dots, d_{r-1}] - [d_1, \dots, d_r]}{e_s - d_1} \quad (3.12)$$

الآن يمكننا إيجاد نشر التفاضل الكسري (3.31) في درجات الحرارة العالية على شكل مجموع لا نهائي للمتغير  $\beta$  مباشرة كما يلي:

$$f^{-}[e_s, \dots, d_r] = -\frac{1}{2} \sum_{n=r}^{\infty} \frac{\beta^n}{n!} e_n \sum_{k_0 k_1 \dots k_r} e_s^{k_0} d_1^{k_1} \dots d_r^{k_r} \quad (3.13)$$

حيث  $d_j$  هو المقام  $D_j$  بدون  $e_s$  معناه  $d_j = e_s \mp D_j$  , حيث الإشارة - ( + ) يقصد بها أن  $e_s$  في نفس الاتجاه ( الاتجاه المعاكس) للفرع  $e_s$ . المعاملات  $e_n$  هي اعداد أولر المعرفة بالمعادلة (3.13) اخيرا، الاعداد الصحيحة  $k_i > 0$  يمكن تحديدها حسب العلاقة التالية :

$$\sum_{i=0}^r k_i = n - r \quad (3.14)$$

يمكننا التطبيق المباشر للعلاقة (3.32) في المساهمة (3.27) من إيجاد كل المساهمات في الطاقة الحرة عند درجات الحرارة العالية وكذلك المحدودة.

بتطبيق الخوارزمية المقترحة نستطيع إيجاد اي نشر إلى رتبة معينة للطاقة الحرة  $\Omega$  على شكل تفاضلات كسرية.

من أكبر الفوائد التي يمكن ايجادها عند تطبيق الطريقة السابقة هي عندما يمكننا صياغة بعض انواع المخططات على شكل علاقة تكرارية واحدة، لهذا وجدنا ان مساهمة المخططات من نوع سلم و مساهمة المخططات من نوع حلقة يمكن كتابتها على النحو التالي :

$$\Omega^{LO} = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n} \int_p V_n^+ \Omega_n^+ dP_n + \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n} \int_p V_n^- \Omega_n^- dP_n \quad (3.15)$$

الصيغة العامة لكمون السلم  $V_n^+$  وكمون الحلقة  $V_n^-$  يمكن تعميمها على الشكل التالي:

$$V_n^+ = \frac{1}{4^n} V_{p_1, p_2}^{p_{2n-1}, p_{2n}} \prod_{i=1}^{n-1} V_{p_{2i+1}, p_{2i+2}}^{p_{2i}, p_{2i}} \quad (3.16)$$

$$V_n^- = \frac{1}{2^n + 1} V_{p_1, p_{2n}}^{p_{2i}, p_2} \prod_{i=1}^{n-1} V_{p_{2i+1}, p_{2i}}^{p_{2i}, p_{2i+2}} \quad (3.17)$$

مساهمة السلم  $\Omega_n^+$  ومساهمة الحلقة  $\Omega_n^-$  في الطاقة الحرة يمكن صياغتها على النحو التالي:

$$\Omega_n^\mp = \prod_{i=1}^n \left( \tanh\left(\frac{\beta}{2} E_{p_{2i-1}}\right) \mp \tanh\left(\frac{\beta}{2} E_{p_{2i}}\right) \right) B[x_1^\mp, x_2^\mp, \dots, x_n^\mp] \quad (3.18)$$

حيث المتغير:  $x_n^\mp$  يعرف بالعلاقة التالية:  $1 \leq i \leq n$

$$x_i^\mp = E_{p_{2i}} \mp E_{p_{2i-1}} \quad (3.19)$$

الصيغة العامة للتفاضلات الكسرية  $B(x)$  تعرف على شكل توزيع بوز أينشتاين.

$$B(x) = \frac{1}{e^{\beta x} - 1} \quad (3.20)$$

التكامل في العلاقة (3.34) يعرف بالمتغيرات  $.dP_n = dp_1 dp_2 \dots dp_{2n}$

### 5.3. نشر الطاقة الحرة لنموذج هيبارد في بعدين عند درجة حرارة مرتفعة

بعد استخدام الطرق السابقة نجد عبارة الطاقة الحرة في درجات الحرارة المرتفعة حتى الحد العاشر  $\beta^{10}$  كما

يلي:

$$\begin{aligned} \Omega = & -\frac{2\text{Log}[2]}{\beta} + \frac{1}{2}(c1 - U) + \frac{\beta}{2!4}(-c1^2 - 4t^2 - U^2) + \frac{\beta^2}{2!4}c2U + \frac{\beta^3}{4!8}(c1^4 + 12c1^2t^2 + 12t^4 \\ & + 16t^2U^2 + U^4) - \frac{\beta^4}{4!4}c2U(c1^2 + 12t^2 + U^2) + \frac{\beta^5}{6!8}(45c2^2U^2 - 2(c1^6 \\ & + 30c1^4t^2 + 40t^6 + 153t^4U^2 + 36t^2U^4 + U^6 + 15c1^2t^2(6t^2 + U^2))) \\ & + \frac{\beta^6}{6!8}c2U(6c1^4 + 5c2^2 + 5c1^2(30t^2 + U^2) + 6(90t^4 + 30t^2U^2 + U^4)) \\ & + \frac{\beta^7}{8!16}(17(c1^8 + 56c1^6t^2 + 420c1^4t^4 + 560c1^2t^6 + 140t^8) + 8(-105c1^2c2^2 \\ & + 70(c1^4 - 30c2^2)t^2 + 756c1^2t^4 + 2480t^6)U^2 + 24(-35c2^2 + 14c1^2t^2 \\ & + 442t^4)U^4 + 1088t^2U^6) + \frac{\beta^8}{8!12}c2U(-51c1^6 + 280c2^2(-6t^2 + U^2) \\ & - 42c1^4(57t^2 + U^2) - 42c1^2(c2^2 + 405t^4 + 60t^2U^2 + U^4) - 42(700t^6 \\ & + 546t^4U^2 + 68t^2U^4 + 3U^6)) + \frac{\beta^9}{10!8}(-62(c1^{10} + 90c1^8t^2 + 1260c1^6t^4 \\ & + 4200c1^4t^6 + 3150c1^2t^8 + 504t^{10}) - 5(714c1^6t^2 + 63c1^4(-17c2^2 + 234t^4) \\ & + 90c1^2t^2(-469c2^2 + 664t^4) - 28(45c2^4 + 8829c2^2t^4 - 3455t^8))U^2 \\ & - 20(-315c1^2c2^2 + 126(c1^4 - 96c2^2)t^2 + 2754c1^2t^4 + 23864t^6)U^4 \\ & + 15(357c2^2 - 102c1^2t^2 - 7130t^4)U^6 + 3780c1^2U^8) + \frac{\beta^{10}}{10!8}c2U(310c1^8 \\ & + 15c1^6(1590t^2 + 17U^2) + 105c1^2(9800t^6 + 3648t^4U^2 + 238t^2U^4 + 66U^6 \\ & + c2^2(150t^2 - 43U^2)) + 3c1^4(85c2^2 + 84(1215t^4 + 105t^2U^2 + U^4)) \\ & + 3(84c2^4 + 35c2^2(1980t^4 - 1080t^2U^2 - 43U^4) + 10(34860t^8 + 50944t^6U^2 \\ & + 14004t^4U^4 + 1782t^2U^6 - 189U^8))); \end{aligned}$$

حيث

$$c1^p = (\lambda - \mu + U)^p + (-\lambda - \mu + U)^p$$

$$c2^p = ((U - \mu)^2 - \lambda^2)^p$$

### خاتمة عامة

درسنا في هذه المذكرة مبادئ التكميم الثاني وكيفية كتابة هاملتون الجملة باستخدام مؤثرات البناء والهدم. وكتابة نموذج هيبارد لتفاعل سبين الجسيمات المحلية والغير محلية في بعدين في التكميم الثاني وهذا من أجل دراسته في مذكرتنا. درسنا بواسطة نظرية الاضطرابات المتعددة الأجسام عند درجة حرارة مرتفعة كيفية إيجاد مساهمة مخطط فينمان أو هيجنهولتز في الطاقة الحرة، كذلك باستخدام بعض الخوارزميات الأساسية في نظرية المخططات كمسألة إيجاد كل الأشجار الممتدة والحلقات الأساسية والكلية في مخطط معين.

في مذكرتنا هذه قمنا بتطبيق عملي على نموذج هيبارد في بعدين، حيث قمنا بحساب الطاقة الحرة لهذا النموذج في درجات الحرارة المرتفعة وذلك باستخدام عمليات الاشتقاق وكذلك القسمة الاقليدية لكثيرات الحدود.

وفي الأخير وجدنا ان نشر الطاقة الحرة لنموذج هيبارد في درجة الحرارة المرتفعة عند الرتبة العاشرة من عملية النشر،

---

## المراجع

1. P. A. M. Dirac, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. **114**, 767 (1927).
2. J. W. Negele and H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems* (Addison-Wesley Publishing Company, New York, 1988).
3. V. Fock, *Zeitschrift für Physik*, Springer Science and Business Media LLC. **75**, 622–647 (1932).
4. A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (Dover Publications, Mineola, NY, 2003).
5. W. Heisenberg, *Zeitschrift für Physik*. **49**, 619-636 (1928).
6. E. Ising, *Z. Phys.* **31** (1), 253–258 (1925).
7. P. Jordan and E. Wigner, *Zeitschrift für Physik*. **47**, 631 (1928).
8. P. Coleman, *Introduction to Many-Body Physics* (Cambridge University Press, UK, 2015).
9. R. P. Feynman, *Phys. Rev.* **76**, 749 (1949), 769 (1949).
10. K. A. Brueckner, *Phys. Rev.* **97**, 1353 (1955).
11. N. M. Hugenholtz, *Physica* **23**, 481 (1957).
12. J. Goldstone, *Proc. Roy. Soc. A* **239**, 267 (1957).
13. J. M. Luttinger and J. C. Ward, *Phys. Rev.* **118**, 5 (1960).
14. C. Bloch, On the many body problem at non-zero temperature, in *Lectures on the Many body Problems*, ed. E. Ciniello (Academic Press, 1961), pp. 241–265.
15. M. Gaudin, *Nuclear Physics* **20**, 513 (1960).
16. J. W. Negele and H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems* (Addison-Wesley Publishing Company, New York, 1988).
17. A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (Dover Publications, Mineola, NY, 2003).
18. R. D. Mattuck, *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem* (Dover Publications, New York, 1992).
19. G. C. Wick, *Phys. Rev.* **80**, 268 (1950).
20. J. Paldus and H. C. Wong, *Comput. Phys. Commun.* **6**, 1 (1973), 9 (1973).
21. G. Rosensteel, E. Ihrig and L. E. H. Trainor, *Proc. R. Soc. A* **344**, 387 (1975).



- 
22. V. Kvasnicka, *Int. J. Quantum Chem.* 21, 1003 (1982).
  23. A. E. Jacobs, *Phys. Rev. D* 23, 1760 (1981).
  24. Z. Csepes and J. Pipek, *J. Comput. Phys.* 77, 1 (1988).
  25. U. Kaldor, *J. Comput. Phys.* 20, 432 (1976).
  26. P. D. Stevenson, *Int. J. Mod. Phys. C* **14**, 1135 (2003).
  27. M. A. Tag and S. Khène, *Int. J. Mod. Phys. C* **28**, 9 (2017).
  28. M. A. Tag and M.E. Mansour, *Int. J. Mod. Phys. C* **30**, 11 (2019).
  29. T. Matsubara, *Prog. Theor. Phys.* 14, 351 (1955).
  30. S. L. Hakimi, *J. Franklin Inst.* 5, 347359 (1961).
  31. W. Mayeda and S. Seshu, *IEEE Trans. Circuit Theory* 12, 181185 (1965).
  32. J. P. Char, *IEEE Trans. Circuit Theory* 15, 228238 (1968).
  33. P. Winter, *BIT Numer. Math.* 26, 4462 (1986).
  34. A. Shioura, A. Tamura and T. Uno, *SIAM J. Comput.* 26, 678692 (1997).
  35. M. J. Smith, *Generating Spanning Trees*, MS Thesis, University of Victoria (1997).
  36. T. Matsui, An algorithm for finding all the spanning trees in undirected graphs, in METR93-08 (University of Tokyo, 1993), pp. 237-252.
  37. M. Chakraborty, R. Mehera and R. K. Pal, A divide-and-conquer algorithm for all spanning tree generation, in *Advanced Computing and Systems for Security* (Springer, Singapore, 2017), pp. 19-36.
  38. N. E. Gibbs, *J. Appl. Comput. Mech.* 16, 564 (1969).
  39. J. T. Welch, *J. Appl. Comput. Mech.* 13, 205 (1966).
  40. L. M. Maxwell and G. B. Reed, Subgraph identification-segs, *Circuits and Paths*, in 8<sup>th</sup> Midwest Symp. on Circuit Theory (Colorado State U., Fort Collins, Colorado, 1965), pp. 10-13.
  41. P. Mateti and N. Deo, *SIAM J. Comput.* 5, 90 (1976).
  42. H. T. Hsu and P. A. Honkanen, A fast minimal storage algorithm for determining all the elementary cycles of a graph, Computer Science Dept. (Pennsylvania State Univ, University Park, 1972).
  43. D. B. Johnson, *SIAM J. Comp.* 4, 77 (1975).
  44. G. Kirchho, *Ann. Phys. Chem.* 72, 497 (1847).
  45. F. Harary, *Graph Theory and Theoretical Physics* (Academic Press, 1967).
  46. W. K. Chen, *Graph Theory and Its Engineering Applications* (World Scientific, 1997).

---

47. K. Paton, *Comm. ACM* 12, 514 (1969).

48. S. Robert, *Algorithms in C, Part 5: Graph Algorithms* (Addison-Wesley, 2002).