

قسم: علوم المادة

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

الموضوع

دراسة نموذج هيزنبرغ في بعدين بواسطة نظرية
الاضطرابات المتعددة الأجسام

من تقديم:

لقرع صورية

قاسمي خولة

أمام اللجنة المناقشين المكونة من:

رئيسا	جامعة العربي التبسي-تبسة	أستاذ محاضر أ	بوخالفة راضية
مؤظرا	جامعة العربي التبسي-تبسة	أستاذ محاضر أ	طق محمد أمين
ممتحنا	جامعة العربي التبسي-تبسة	أستاذ محاضر أ	عون الله حسين

تاريخ المناقشة: 2022/06/...

شكر و عرفان

الحمد لله السميع العليم ذي العزة والفضل العظيم والصلاة والسلام على المصطفى
الهادي الكريم وعلى آله وصحبه أجمعين. وبعد صدقاً لقوله تعالى " ولئن شكرتم
لأزيدنكم ". اشكر الله العليّ القدير الذي انار لنا درب العلم والمعرفة وأماننا على إتمام هذا
العمل

كما أتقدم بجزيل الشكر والامتنان إلى:

- للدكتور طق محمد أمين لقبوله الاشراف على هذه المذكرة والذي لم يبخل عليا أبدا
في نصائحه وتوجيهاته لنا طيلة مدة هذه الدراسة من خلال الارشادات القيمة في كل
خطواتنا فله أخلص التحية وأعظم التقدير.
- أعضاء لجنة المناقشة الدكتور عمون الله حسن والدكتورة بوخالفة راضية تفضلهم
بمناقشة مذكرتنا وبذلهم الجهد والوقت في التدقيق واثراء هذا البحث شكلاً
ومضموناً.

▪ كل من ساعدنا من قريب أو من بعيد.

إهداء

أتقدم أولاً وأخيراً بالشكر لله عز وجل والذي بنعمته تتم الصالحات. فالحمد لله حتى يرضى
وله الحمد إذا رضى وله الحمد بعد الرضى.

نَحْنُ لَهَا وَإِنْ أَبَتْ رُغْمًا عَنْهَا أَتَيْنَا بِهَا

أهدي عملي المتواضع هذا إلى:

- أبي فلذة كبدي واستقامة ظهري وبطلي الأوجد دائماً وأبداً.
- أمي التي وهبتني الحياة ليس مرة واحدة بل مرات لا تحصى ولا تعد صديقتي
العظيمة في كل خيباتي قبل نجاحاتي رفيقة الدرب الحقيقية.
- الكتف التي استندت عليهما حين خانتني قدماي حبيباتي اخواتي
- وحدي أنا أحق بهذا من الناس.
- حنان ملاكي المنقذ من أول يوم خطت قدامي فيه الجامعة.
- كل من يتكبد عناء قراءته سواء لتقييمه أو لزيادة علمه أو لنقده أو إشباعاً لفضوله

...

لقرع صوية

ملخص

نتطرق في هذه المذكرة الى دراسة الكمون الأعظمي باستخدام نظرية الاضطرابات المتعددة الاجسام في درجة الحرارة المرتفعة، وذلك بواسطة الخوارزميات المستحدثة في نظرية المخططات، حيث تمكننا من إيجاد مساهمة كل مخطط فراغ لهيجنهولتز في الكمون الأعظمي. كما قمنا باستخدام هذه الطريقة في ايجاد الطاقة الحرة في درجة الحرارة المرتفعة لنموذج هيزنبرغ في بعدين حتى الحد السادس.

Abstract

In this work, we study of the grand potential using the many-body perturbation theory (MBPT) at high temperature, by using the algorithms developed in the graph theory, where we were able to find the contribution of each Hugenholtz vacuum diagram to the grand potential. We also used this method to find the free energy at the high temperature of the Heisenberg model in two dimensions up to the sixth term.

Résumé

Dans ce travail, nous abordons l'étude du grand potentiel en utilisant la théorie des perturbations multi-corps à haute température, en utilisant les algorithmes développés dans la théorie des graphes, où nous avons pu trouver la contribution de chaque diagramme de vide de Hugenholtz au grand potentiel. Nous avons également utilisé cette méthode pour trouver l'énergie libre à haute température du modèle de Heisenberg en deux dimensions jusqu'au sixième terme.

فهرس

1 مقدمة عامة

الفصل الأول: التكميم الثاني ونموذج هيزنبرغ في بعدين

2 التكميم الثاني

2 هاملتون مجموعة من الجسيمات المتماثلة

5 نموذج هيزنبرغ لتفاعل سبين سبين

6 نموذج هيزنبرغ XXZ ذو سبين 1/2 في بعدين

الفصل الثاني: نظرية الاضطرابات

11 مقدمة

11 نظرية الاضطرابات المتعددة الاجسام

17 حساب القيمة التحليلية للمخطط الغير قابل للاختزال من الدرجة الثانية

17 الطريقة المباشرة

19 طريقة المخططات

22 تعاريف

24 قيم معاملات الحافة

25 إحصاء الأشجار الممتدة

25 إجراءات التهيئة

25 عملية الحذف والانكماش

27 حساب مساهمة مخططات الفراغ في الطاقة الحرة عند الحد الثالث

الفصل الثالث: النتائج

31 مقدمة

31 نشر الطاقة الحرة عند درجات الحرارة العالية

33 كتابة المساهمات في الطاقة الحرة على شكل تفاضلات كسرية (Divided differences)

38 خوارزمية النشر في درجات الحرارة المرتفعة
40 نشر الطاقة الحرة لنموذج هيزنبرغ حتى الدرجة 6
41 خاتمة عامة
42 مراجع

قائمة الجداول

العنوان	رقم الصفحة
عدد المخططات المتميزة الأساسية (EDD) حتى $n=10$.	15
العدد الإجمالي لمخططات الفراغ من نوع هيجنهولتز المترابطة والمتميزة أساسًا دون المخططات الفرعية الخاصة ب هارتري-فوك.	32

قائمة الأشكال

رقم الصفحة	عنوان الشكل	رقم الشكل
13	مخطط يمثل مؤثرات الانشاء والهدم الواردة والصادرة في كل ذرورة τ_i .	1.2
15	المخطط المتمايز الأساسي عند $n=1$	2.2
15	المخططات المتمايز الأساسية عند $n=2$	3.2
16	المخططات المتمايز الأساسية عند $n=3$	4.2
16	المخططات المتمايز الأساسية عند $n=4$	5.2
17	المخطط غير المختزل للطاقة الحرة من الدرجة الثانية.	6.2
20	جميع الأشجار الممكنة لمخطط من الدرجة الثانية.	7.2
23	مثال على المخطط المتصل: تمثل الخطوط السميكة 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 .	8.2
26	عملية الحذف والانكماش في المستوى k .	9.2
26	عملية الحذف والانكماش للمخطط G_2 .	10.2
27	مخطط الشجرة (الشجرة المضغوطة) للمخطط G_2 .	11.2
27	مخططي هيوكن-هولتز من الدرجة الثالثة G_3^1 و G_3^2	12.2
28	مخططات كل الأشجار المتفرعة من المخطط البياني G_3^2	13.2

مقدمة عامة

دراسة الخواص الترموديناميكية للمواد من أهم المسائل الفيزيائية التي تم دراستها بطرق مختلفة منذ بداية ظهور ميكانيك الكم، وبسبب أن المواد تتكون من عدد هائل من الالكترونات (جسيمات في الحالة العامة) فإنه من الصعب إيجاد الخصائص الفيزيائية لهذه المواد بالطرق الحسابية الكوانتية العادية، لذلك تم استخدام طرق عددية وبرمجيات مخصصة لهذا الغرض. من أهم الطرق المستخدمة هي طريقة الاضطرابات المتعددة الأجسام.

تعتبر نظرية الاضطرابات المتعددة الأجسام من أهم الطرق الأساسية لدراسة نظام فيزيائي مكون من N جسيم متشابه (فرميون أو بوزون)، ويتم ذلك عن طريق وصف النظام عن طريق هاملتون مكون من جزء قابل للحل وجزء غير قابل للحل تحليلاً، غالباً ما نستخدم هذه الطريقة عندما لا نجد حل نظري لهذه الأنظمة. اقترحت طرق متعددة لتسهيل التعامل مع نظرية الاضطرابات، من أهمها طريقة المخططات والتي ابتكرها لأول مرة العالم فينمان سنة 1949 لتبسيط التفاعلات بين اشباه الجسيمات والفوتونات، وفي سنة 1955 تم تطبيق هذه الطريقة على الأنظمة المتعددة الأجسام بواسطة العلماء بريكينار سنة 1955 ثم هيجنهولتز و قولدستون سنة 1957 في الأنظمة الخاصة بالجسم الصلب. بالرغم من وجود عدة كتب تدرس نظرية الاضطرابات، إلا أنه بسبب العدد الأسي للمخططات حيث أنه نجد كلما زادت درجة النشر n زاد عدد المخططات بمقدار $(2n)!$ ، وهذا ما يؤكد أن هذه الطريقة صعبة وغير ممكن ان نحسب كل المخططات بالطريقة اليدوية أو حتى بأجهزة الكمبيوتر، لذلك سنطرق في هذه المذكرة الى أهم الطرق المستخدمة في التعامل مع العدد الكبير من المخططات، وذلك عن طريق دراسة أهم الخوارزميات البرمجية السريعة الأداء.

نتطرق في هذه المذكرة إلى دراسة نظام تفاعل بين سبين الجسيمات والمعروف بنموذج هيزنبرغ، وسنتطرق الى كيفية التعامل مع هذا النموذج في بعدين وذلك بكتابته في التكميم الثاني. كما سندرس الخصائص الترموديناميكية لهذا النموذج في درجات الحرارة المرتفعة باستخدام نظرية الاضطرابات المتعددة الاجسام، وإيجاد قيمة الطاقة الحرة والحساسية المغناطيسية الدرجة السادسة من النشر.

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

1. التكميم الثاني

لدراسة مجموعة من الأنظمة المكونة من عدد كبير من الجزيئات في ميكانيك الكم نحتاج الى دالة موجة مرتبطة بمواقع الجسيمات وكذلك نوعية هذه الجسيمات، لذلك فإن دالة الموجة تصبح دالة الموجة معقدة للغاية بشكل رئيسي بسبب خصائصها التناظرية. أحد المبادئ الأساسية لميكانيكا الكم هو أن دالة الموجة لمجموعة من الجسيمات إما غير متناظرة (فرميونات) أو متناظرة (بوزونات). وبالتالي ، حتى بالنسبة لمجموعة من الجسيمات المستقلة ، لا يتم اختزال دالة الموجة للنظام إلى جداء بسيط لدوال الموجة ولكنها تتضمن مجموع هذه الجداءات على مجموعة التبادلات المحتملة.

لذلك تم تطوير ما يسمى نظرية "التكميم الثاني" من طرف العالم شرودينغر [1].
في هذه نظرية التكميم تصبح الدالة الموجية $\Psi(x)$ عبارة عن حقل يسمى "حقل المادة".

1.1. هاميلتون مجموعة من الجسيمات المتماثلة

في حالة مجموعة مكونة من N جسيم متشابه تحت تأثير كمون $V(x)$ فإن هاميلتون هذه الجسيمات هو مجموع هاميلتون كل جسيم، أي:

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

حيث h_i هو هاميلتون الجسيم i ، حيث يصف جسيماً متأثراً بالكمون $V(x)$ و يكتب على الشكل:

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

في التعريف (1.2) $h(x)$ يسمى كذلك مؤثر جسم واحد.

نفرض أن الأشعة الذاتية $\phi_\alpha(x)$ والقيم الذاتية ε_α لهاميلتون الجسيم α (2.2) معروفة، حيث تحدد عن طريق معادلة القيم الذاتية لمؤثر كما يلي:

$$h\phi_\alpha(x) = \varepsilon_\alpha\phi_\alpha(x) \quad (1.3)$$

تحت هذه الشروط، صيغة التكميم الثاني تسمح بوصف هذه المجموعة من الجسيمات بواسطة مؤثر حقل المادة $\Psi(x)$. يعبر عن هاملتون الجملة H_0 ببساطة على أنه "القيمة المتوسطة تحت تأثير حقل المادة" لهاملتون جسيم وحيد h كما يلي:

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

حيث $\Psi(x)$ مؤثر الحقل الذي يدمر جسيمًا عند النقطة x ، و $\Psi^+(x)$ يُنشئ جسيمًا عند النقطة x . يمكن نشر مؤثر الحقل $\Psi(x)$ باستخدام قاعدة الأشعة الذاتية لجسيم وحيد كما يلي:

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

حيث a_{α} ، a_{α}^+ تمثل مؤثرات الهدم و الإنشاء، بوزونية أو فيرميونية اعتمادًا على النظام المدروس. يحقق هذان المؤثران علاقات التبادل التالية:

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

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

المؤثرات a_{α} و a_{α}^+ تعمل على هدم أو إنشاء جسيمات لدالة الموجة $\phi_{\alpha}(x)$ في الحالة الفردية. وبالتالي هذه المعاملات لا تؤثر على إحداثيات الجسيمات x لكنها تغير عدد الجسيمات الموجودة في هذه أو تلك الحالة الفردية. بتعبير أدق، إنها تؤثر على الأشعة $|n_{\alpha}, n_{\beta}, \dots\rangle$ ، المسماة عدد الحالات، تنتمي هذه الأشعة إلى فضاء شعاعي يسمى فضاء فوك Fock. إذن الحالة $|n_{\alpha}, n_{\beta}, \dots\rangle$ تصف الوضعية التي فيها n_{α} جسيم (بوزون أو فرميون) متواجدين في الحالة الفردية $\phi_{\alpha}(x)$ ، و n_{β} جسيم متواجدين في الحالة الفردية $\phi_{\beta}(x)$ ، ... إلخ. تأثير مؤثرات الإنشاء والهدم على مثل هذه الحالات يعرف ب:

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

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

التمثيل بواسطة فضاء فوك له أوجه نظر مختلفة: لا نهتم بالحالة حيث تتواجد الجسيمات لكن بعدد الحالات المشغولة التي تميز حالة النظام. من أجل بوزونات من نفس النوع، عدد الحالات المشغولة يكون كافيًا. 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 وهو ما يمثل الثنائية موجة/جسيم في ميكانيك الكم .

أخيرًا ، هاميلتون الجملة للجسيمات يمكن كتابته على الشكل التالي وذلك بتعويض حقل المادة المعرف بالعلاقة (1.5) في القيمة المتوسطة (1.4) نجد:

$$H_0 = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} a_{\alpha}^{+} a_{\alpha} \quad (1.9)$$

حتى الآن، تم إهمال التفاعلات بين الجسيمات. لذلك نفرض أن الجسيمات تتفاعل فيما بينها عن طريق كمون ثنائي الجسم $V(x, x')$. في هذه الحالة هاميلتون 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 هاميلتون الجملة في حالة وجود تفاعل بين الجسيمات يكتب على الشكل النهائي التالي:

$$H = H_0 + H_I = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} a_{\alpha}^{+} a_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle a_{\alpha}^{+} a_{\beta}^{+} a_{\delta} a_{\gamma} \quad (1.11)$$

حيث أن ε_{α} و عناصر المصفوفة $\langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle$ يكتبان على الشكل:

$$\varepsilon_{\alpha} = \langle \alpha | h | \alpha \rangle = \int \phi_{\alpha}^{*}(x) h(x) \phi_{\alpha}(x) dx \quad (1.12)$$

$$\langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle = \int \int \phi_{\alpha}^{*}(x') \phi_{\beta}^{*}(x) V(x, x') \phi_{\gamma}(x') \phi_{\delta}(x) dx dx' \quad (1.13)$$

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

2. نموذج هيزنبرغ لتفاعل سبين سبين

نموذج هيزنبرغ، تم تطويره بواسطة ورنر هيزنبرغ وهو نموذج ميكانيكي إحصائي يستخدم في دراسة النقاط الحرجة وتحولات الطور للأنظمة المغناطيسية، بحيث يتم التعامل مع سبينات الأنظمة المغناطيسية باستخدام ميكانيك الكم وهو نموذج مرتبط بنموذج إيزينغ Ising، بحيث في كل موقع k من الشبكة لدينا سبين $S_k \in \left\{ \pm \frac{1}{2} \right\}$ الذي يمثل ثنائي القطب المغناطيسي المجهري والذي يكون فيه العزم المغناطيسي إما إلى أعلى up أو إلى الأسفل down.

باستخدام ميكانيك الكم، عند حصر التفاعل بين الجيران الأقرب نحصل على أقل طاقة بسبب الاقتران السائد بين ثنائي القطبين.

بفرض أنه لدينا بنية شبكة دورية أحادية البعد (بحيث تحدث التفاعلات المغناطيسية فقط بين ثنائيات القطب المجاورة)، يمكن كتابة الهاملتون على الشكل:

$$H = -J \sum_{k=1}^N \vec{S}_k \vec{S}_{k+1} - h \sum_{k=1}^N S_k^z \quad (1.14)$$

حيث J هو ثابت التبادل.

إذا كان $J < 0$ نسمي الحالة هنا مغناطيسية حديدية متضادة antiferromagnetic. أما إذا كان $J > 0$ فنسمي الحالة هنا مغناطيسية حديدية.

ويتم تمثيل ثنائيات القطب بالأشعة الكلاسيكية (أو "السبينات") \vec{S}_k . سبين الجسيمات يخضع للشروط الحدود الدورية $\vec{S}_{N+1} = \vec{S}_1$. يعد نموذج هيزنبرغ نموذجًا أكثر واقعية لأنه يتعامل مع السبينات بالطريقة الكمية.

يمكن تعميم الهاملتون (1.14) وذلك باختيار ثوابت التبادل الغير متماثلة J_x, J_y, J_z وكذلك في وجود حقل مغناطيسي خارجي h ، يتم اعطاء الهاملتون H في الحالة العامة على الشكل:

$$H = - \sum_{k=1}^N (J_x S_k^x S_{k+1}^x + J_y S_k^y S_{k+1}^y + J_z S_k^z S_{k+1}^z) - h \sum_{k=1}^N S_k^z \quad (1.15)$$

الهدف من دراسة نموذج هيزنبرغ هو ايجاد القيم الذاتية للهاملتون (طيف الطاقة)، والذي يمكن من خلاله حساب دالة القسمة، والتي تمكنا من ايجاد الخواص الترموديناميكية للنظام في درجات حرارة معينة وكذلك ايجاد الطاقة الدنيا (الأرضية) للنظام.

اعتمادا على قيم J_x, J_y, J_z يمكن تسمية نموذج هيزنبرغ وذلك حسب الحالات التالية:

- اذا كان $J_x \neq J_y \neq J_z$ يسمى نموذج هيزنبرغ XYZ،
- في حالة $J_x = J_y = J; J_z = J\Delta$ يسمى نموذج هيزنبرغ XXZ،
- أما إذا كان $J_x = J_y = J_z = J$ يسمى نموذج هيزنبرغ XXX.

تم حل نموذج هيزنبرغ في حالة سبين 1/2 وفي بعد واحد بشكل دقيق باستخدام جبر Bethe ansatz (R). لكن هذا الحل مرتبط بمعادلة تكاملية ليس لها حل. لذلك تعتمد طرق تقريبية لحلها في درجات الحرارة العالية والدنيا.

1.2. نموذج هيزنبرغ XXZ ذو سبين 1/2 في بعدين

نتطرق هنا الى اعادة كتابة نموذج هيزنبرغ XXZ ذو سبين 1/2 وفي بعدين وذلك باستخدام طرق التكميم الثاني. في الحالة العامة هاملتون نموذج XXZ يكتب على الشكل:

$$H_{XXZ} = -J \sum_{k=1}^N (S_k^x S_{k+1}^x + S_k^y S_{k+1}^y + \Delta S_k^z S_{k+1}^z) - h \sum_{k=1}^N S_k^z \quad (1.16)$$

نستخدم التعريف التالي للمؤثرات S_k^\pm التالي

$$\begin{aligned} S_k^+ &= S_k^x + iS_k^y \\ S_k^- &= S_k^x - iS_k^y \end{aligned} \quad (1.17)$$

العلاقة (1.17) يمكن من خلالها كتابة S_k^x و S_k^y كما يلي:

$$\begin{aligned} S_k^x &= \frac{1}{2} (S_k^+ + S_k^-) \\ S_k^y &= \frac{1}{2i} (S_k^+ - S_k^-) \end{aligned} \quad (1.18)$$

بتعويض بقيم S_k^x و S_k^y من العلاقة (1.18) في الهاملتون (1.16) نجد أن هاملتون الجملة يمكن كتابته على الشكل

$$H_{XXZ} = -\frac{J}{2} \sum_{k=1}^N (S_k^+ S_{k+1}^- + S_k^- S_{k+1}^+) - J\Delta \sum_{k=1}^N S_k^z S_{k+1}^z - h \sum_{k=1}^N S_k^z \quad (1.19)$$

صيغة الهاملتون (1.19) بهذه الطريقة تبقى صعبة التعامل معها خاصة في ايجاد طيف الطاقة ودراسة الخواص الترموديناميكية للنظام، لذلك اعتمدت كتابة أخرى لتسهيل التعامل مع هذا الهاملتون، حيث أنه في حالة البعد الواحد يمكن استخدام تحويل جوردان-ويغنز Jordan-Wigner (R)، وهو تحويل يقوم على كتابة مؤثرات سبين $\frac{1}{2}$ إلى مؤثرات الهدم a_k والبناء a_k^+ الفرميونية. كما نلاحظ أن علاقات التبادل لمؤثرات السبين في نفس الموقع لها نفس شكل علاقات التبادل للفرميونات التالية:

$$\{S_k^+, S_k^-\} = S_k^+ S_k^- + S_k^- S_k^+ = 1 \quad (1.20)$$

ولكن علاقات التبادل تكون مختلفة في حالة اختلاف الموقع، حيث لدينا:

$$[S_j^+, S_k^-] = S_j^+ S_k^- - S_k^- S_j^+ = 0 \quad (1.21)$$

العلاقة (1.21) مختلفة عن علاقة التبادل الفرميونية (1.6).

لذلك وجد جوردان وويغنز طريقة تحويل معرفة كما يلي

$$S_k^+ = \exp\left(i\pi \sum_{j=1}^{k-1} a_j^+ a_j\right) a_k^+$$

$$S_k^- = \exp\left(-i\pi \sum_{j=1}^{k-1} a_j^+ a_j\right) a_k \quad (1.22)$$

$$S_k^z = a_k^+ a_k - \frac{1}{2}$$

$$n_k = a_k^+ a_k$$

بتعويض قيم S_k^z و S_k^\pm من العلاقات (1.22) في هاملتون الجملة (1.19) نجد أنه يمكن كتابة هاملتون الجملة على الشكل التالي:

$$H_{XXZ} = \frac{N}{2} \left(h - \frac{J\Delta}{2} \right) - \frac{J}{2} \sum_{k=1}^N (a_k^+ a_{k+1} + a_{k+1}^+ a_k) - J\Delta \sum_{k=1}^N n_k n_{k+1} \quad (1.23)$$

$$+ (J\Delta - h) \sum_{k=1}^N n_k$$

الكتابة (1.23) تسمى الكتابة الفرميونية لنموذج هيزنبرغ XXZ. نستخدم الآن في دراستنا في هذه المذكرة تحويل فوريي من أجل كتابة الهاملتون (1.23) في صيغة التكميم الثاني، حيث أنه يمكن كتابة مؤثرات الهدم a_k والانشاء a_k^+ الفرميونية على شكل تحويل فوريي لمؤثرات هدم وانشاء فرميونية شبه جزيئية جديدة كما يلي:

$$a_k^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p e^{ipR_k} a_p^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p e^{i\frac{2\pi}{N} pka} a_p^+ \quad (1.24)$$

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p e^{-ipR_k} a_p = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p e^{-i\frac{2\pi}{N} pka} a_p$$

حيث يمثل a البعد بين موقعين متتاليين من سلسلة سبين هيزنبرغ. بتعويض قيم مؤثري الهدم والانشاء من العلاقة (1.24) في الهاملتون (1.23)، واستخدام علاقات التبادل الفرميونية الممثلة في العلاقة (1.6) (مع الأخذ بطبيعة الحال $\epsilon = -1$)، كذلك نأخذ $a = 1$ للتسهيل فقط، فإن هاملتون نموذج هيزنبرغ XXZ يكتب على الشكل المتجانس التالي:

$$H_{XXZ} = \frac{N}{2} \left(h - \frac{J\Delta}{2} \right) + \sum_p \epsilon_p a_p^+ a_p - \frac{J\Delta}{N} \sum_{q,p,p'} \cos(q) a_{p-q}^+ a_{p'+q}^+ a_{p'} a_p \quad (1.25)$$

$$\epsilon_p = J\Delta - h - J \cos(p)$$

الكتابة (1.25) تمثل هاملتون نموذج هيزنبرغ XXZ لسبين $\frac{1}{2}$ في بعدين باستخدام التكميم الثاني، وهي الكتابة التي سنعتمدها في هذه المذكرة مع الأخذ بتغييرات بسيطة، حيث سوف نقوم بالجمع على معاملات جديدة معرفة كما يلي:

$$\alpha = p - q$$

$$\beta = p' + q \quad (1.26)$$

$$\gamma = p$$

$$\delta = p'$$

نعوض بمعاملات الجمع (1.26) في هاملتون الجملة (1.25)، مع أخذ الثابت $\theta = \frac{2\pi}{N}$ ، حيث أنه لدينا من العلاقات (1.26) أن معاملات الجمع تحقق المساوات $\alpha + \beta = \gamma + \delta$ ، إذن نجد في الأخير هاملتون الجملة يكتب على الشكل المبسط التالي:

$$H_{XXZ} = \sum_p \varepsilon_p a_p^+ a_p + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta|V|\gamma\delta \rangle a_\alpha^+ a_\beta^+ a_\delta a_\gamma \quad (1.27)$$

حيث قمنا بإهمال الحد $\frac{N}{2} \left(h - \frac{J\Delta}{2} \right)$ في الهاملتون (1.27) لأنه ثابت، حيث نلاحظ التشابه مع الكتابة (1.11) الممثلة للتكميم الثاني، حيث عرفنا المقادير الموجودة في الهاملتون (1.27) والمتمثلة في طاقة أشباه الجسيمات ε_p وكمون اتفاعل $\langle \alpha\beta|V|\gamma\delta \rangle$ كما يلي:

$$\varepsilon_p = J\Delta - h - J \cos(p) \quad (1.28)$$

$$\langle \alpha\beta|V|\gamma\delta \rangle = -\frac{2J\Delta}{N} \cos\left(\frac{1}{2}(\beta - \alpha + \gamma - \delta)\right) \delta_{\alpha+\beta,\gamma+\delta} \quad (1.29)$$

حيث $\delta_{\alpha+\beta,\gamma+\delta}$ يمثل دلتا كرونيكار.

يمكننا كتابة الهاملتون السابق وذلك بدمج مصفوفة الكمون المباشر $\langle \alpha\beta|V|\gamma\delta \rangle$ ومصفوفة كمون التبادل $\langle \alpha\beta|V|\delta\gamma \rangle$ كما يلي:

$$V_{\gamma,\delta}^{\alpha,\beta} = \langle \alpha\beta|V|\gamma\delta \rangle - \langle \alpha\beta|V|\delta\gamma \rangle \quad (1.30)$$

الإشارة ناقص ناتجة من تبديل بين مؤثرات الفرميون a_γ و a_δ .

أي أن مصفوفة الكمون الجديدة يمكن كتابتها على الشكل المختصر التالي، وذلك باستخدام عبارة مصفوفة الكمون المعرفة بالعلاقة (1.29):

$$V_{\gamma,\delta}^{\alpha,\beta} = -\frac{4J\Delta}{N} \sin\left(\frac{\beta - \alpha}{2}\right) \sin\left(\frac{\delta - \gamma}{2}\right) \delta_{\alpha+\beta,\gamma+\delta} \quad (1.31)$$

بينما هاملتون التفاعل يكتب على الشكل التالي:

$$H_{XXZ} = \sum_p \varepsilon_p a_p^+ a_p + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\gamma,\delta}^{\alpha,\beta} a_\alpha^+ a_\beta^+ a_\delta a_\gamma \quad (1.32)$$

تعرف هذه الكتابة الأخيرة لهاملتون الجملة بتمثيل هيجنهولتز للجسيمات المتشابهة

سوف نعتمد الكتابة (1.32) في مذكرتنا وخاصة في دراسة نموذج هيزنبرغ XXZ في بعدين وفي درجات الحرارة المرتفعة والتي سوف نتطرق لها بالتدقيق في الفصل الثالث.

1.2. مقدمة

سوف نتطرق في هذا الفصل إلى كيفية إيجاد العبارة التحليلية لمساهمة كل مخطط فينمان Feynmann في الطاقة الحرة، حيث سنستخدم بعض الخوارزميات المستحدثة لحساب المخططات المتميزة المولدة عن طريق الخوارزمية [2] بطريقة آلية وطباعة العبارة التحليلية لها مباشرة. الخوارزميات المستخدمة في هذا الفصل هي أساسيات في نظرية المخططات Graph theory، بالإضافة إلى ذلك سنقدم نسخ جديدة عن بعض من هذه الخوارزميات، خاصة المستخدمة في المرجع [3].

2.2. نظرية الاضطرابات المتعددة الأجسام

إن هاملتون نظام مكون من عدة جسيمات متشابهة تتفاعل مع بعضها والذي تم التطرق إليه في الفصل الأول بتوسع يمكن أيضا التعبير عنه باستخدام التكميم الثاني كالتالي :

$$H = H_0 + H_1 = \sum_k (\epsilon_k + \mu) a_k^+ a_k + \frac{1}{4} \sum_{rsml} V_{ml}^{rs} a_r^+ a_s^+ a_l a_m \quad (2.1)$$

حيث أن :

a_k و a_k^+ هما مؤثرا الإنشاء والهدم على التوالي.

أما بالنسبة إلى عناصر مصفوفة كمون التفاعل V_{ml}^{rs} فهي تحوي مصفوفة كمون التفاعل المباشر $\langle rs|V|ml \rangle$ ومصفوفة كمون التبادل $\langle rs|V|lm \rangle$ ، والتي تكتب على شكل مختصر كالتالي :

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

لقد تطرقنا في الفصل الأول إلى تعريف الثابت ϵ حيث :

$$\left. \begin{array}{l} \epsilon = 1 \text{ يعبر عن الجسيمات التي من نوع بوزون} \\ \epsilon = -1 \text{ يعبر عن الجسيمات التي من نوع فرميون} \end{array} \right\}$$

أما بالنسبة إلى ϵ_k فهي تمثل طاقة أشباه الجسيمات للنظام، و μ يعبر عن الكمون الكيميائي إن نظرية FT-MBPT التي تعتمد على نشر دالة القسمة المعرفة بـ :

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

وذلك باستخدام النشر العادي لتايور للدالة الأسية مع الأخذ بعين الاعتبار مؤثر الهاملتون H . في العلاقة

$$(3.3) \quad \beta \text{ تمثل معكوس درجة الحرارة } \beta = \frac{1}{k_B T} \text{ (} T \text{ تمثل درجة الحرارة و } k_B \text{ ثابت بولتزمان)، حيث}$$

تنشر على الشكل (R):

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

يمثل O_t مؤثر الترتيب الزمني.

المقدار $\langle A \rangle_0$ يمثل المتوسط الحراري في الديناميكا الإحصائية للمؤثر A في الفراغ ويعرف رياضياً بـ:

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

إن مؤثرات الإنشاء $a_i^+(\tau)$ والهدم $a_i(\tau)$ المتعلقة بالزمن التخيلي τ والمبينة في العلاقة (2.4) معرفة على الشكل:

$$\begin{cases} a_i^+(\tau) = a_i^+ e^{\tau E_i} \\ a_i(\tau) = a_i e^{-\tau E_i} \end{cases} \quad (2.6)$$

في هذه المذكرة نعرف الطاقة E_i على الشكل:

$$E_i = \varepsilon_i - \mu \quad (2.7)$$

حيث: ε_i يمثل المقدار Z_0 يمثل دالة القسمة للنظام الغير متفاعل أي:

$$Z_0 = \text{Tr}(e^{-\beta H_0}) \quad (2.8)$$

يمكننا نظرياً تعداد جميع الانقباضات contractions بين مؤثرات الهدم والانشاء لكل رتبة من سلسلة النشر (2.4) وذلك باستخدام نظرية ويك Wick [4] ، يمكننا حساب قيمة المتوسط الحراري لكل انقباض ونجد عبارته كالتالي [5].

$$\langle a_p(\tau) a_q^+(\tau') \rangle_0 = \varepsilon \langle a_q^+(\tau') a_p(\tau) \rangle_0 = \delta_{pq} g_p(\tau - \tau'), \quad (2.9)$$

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

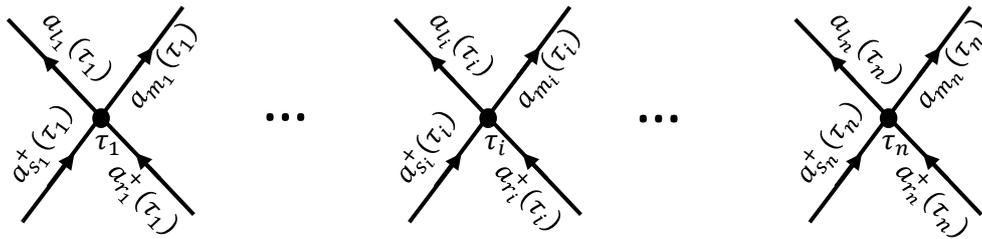
$$g_p(\tau - \tau') = e^{-(\tau - \tau') E_p} [f_p^+ \theta(\tau - \tau' - \eta) + f_p^- \theta(\tau' - \tau + \eta)] \quad (2.10)$$

والثابت العنصري $0^+ \rightarrow \eta$ 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:

$$\begin{cases} f_p^- = \epsilon(e^{\beta E_p} - \epsilon)^{-1} \\ f_p^+ = 1 + f_p^- \end{cases} \quad (2.11)$$

عند تطبيق نظرية Wick في رتبة معينة فإن عدد مقادير المتوسطات الحرارية (2.9) تزداد بشكل هائل، كذلك تزداد معها الصيغ الرياضية المعقدة للناشر (2.10) والمقادير الإحصائية (2.11)، لذلك أصبح من اللازم التعامل مع كل هذه المقادير بطرق أخرى، لذلك وجد العلماء بريكينار [6]، هيجنهولتز [7] وقولدستون [8] وآخرون أنه من الممكن تطبيق فكرة فينمان [1] وذلك باختصار كل مقادير المتوسط الحراري بواسطة المخططات. للتبسيط، يمكننا تمثيل الرتبة n من سلسلة النشر (2.4) على شكل مجموعة من المخططات وذلك عن طريق رسم n قمة نسميها $(\tau_1, \dots, \tau_i, \dots, \tau_n)$ حيث يتم رسم اربع سطور في كل قمة τ_i ، سطرين واردين إلى هذه القمة يمثلان مؤثرات الانشاء $a_{ri}^+(\tau_i)$ و $a_{si}^+(\tau_i)$ المعرفين في سلسلة النشر (2.4)، و سطرين صادرين من هذه القمة يمثلان مؤثرات الهدم $a_{ri}(\tau_i)$ و $a_{si}(\tau_i)$ (شكل 1.2)، ويتم 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 الانشاء والهدم الواردة والصادرة في كل ذروة τ_i

إن عدد المخططات N_D الممكنة الناتجة من العلاقة (2.4) هو $N_D = \frac{(2n)!}{2^n}$ ، هذا العدد كبير جداً و يحوي كل المخططات المتصلة والمنفصلة، لكن عند تطبيق الدالة اللوغاريتمية على (2.4) فإن عدد المخططات N_D يقل ويختزل إلى المخططات المتصلة فقط، هذا بسبب اللوغاريتم الذي يعدم المخططات المنفصلة، نعلم أنه يمكن استخلاص جميع الخصائص الترموديناميكية من دالة الطاقة الحرة

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

وهي تطبيق للدالة اللوغاريتمية على دالة القسمة.

و عليه نستنتج انه من البديهي دراسة الطاقة الحرة Ω بدلا من دالة القسمة Z و يمكننا أن نعبر عن الطاقة الحرة للنظام بدلالة المخططات كما يلي:

$$\Omega = \Omega_0 + \sum (\text{All connected diagrams}) \quad (2.12)$$

حيث Ω_0 تمثل الطاقة الحرة للنظام الغير متفاعل $-\frac{1}{\beta} \log(Z_0)$.

يمكن حساب هذه الطاقة ببساطة [8] فنجد أن قيمتها تساوي :

$$\Omega_0 = \frac{\epsilon}{\beta} \sum_k \log(1 - \epsilon e^{-\beta E_k}) \quad (2.13)$$

إذن عدد المخططات في هذه الحالة ينخفض إلى $N_D = \frac{(2n)!}{2^n} - n_{dd}$ ، حيث n_{dd} يمثل عدد المخططات المنفصلة، ولكن هذا العدد لا يزال كبيرا جدا، و عليه فمن المهم إيجاد طريقة لخفض هذا العدد.

هنالك العديد من المخططات المتصلة لها نفس القيمة العددية والتي تسمى المخططات المتكافئة، إذن من الضروري اختيار مخطط واحد فقط من بين هذه المخططات المتكافئة والذي يسمى المخطط المتميز، حيث كما نلاحظ في التكمالات على الأزمنة الخيالية $d\tau_1 \dots d\tau_n$ من علاقة النشر (2.4) أنه لديها نفس مجالات التكامل من 0 إلى β ، لذلك فإن أي تبديله على هذه الأزمنة (تبديله بين القمم $\tau_1, \dots, \tau_i, \dots, \tau_n$ بلغة المخططات) لا يغير نتيجة التكمالات. أي أنه عند تطبيق عملية المبادلة بين القمم لمجموعة من المخططات الناتجة من عملية النشر (2.4) فإننا نجد مثلاً مجموعة منها عددها n_{ed} مكافئة لمخطط سابق، إذن من الضروري تجاهلها وضرب قيمة المكاملة على المخطط السابق في n_{ed} فقط.

كما نعلم أن عدد التبادلات الممكنة لمجموعة مكونة من n قيمة هو $n!$ ، إذن فمن الطبيعي أن نجد $n!$ مخطط مكافئ لمخطط متميز وحيد، لكن أحيانا عند القيام بعملية مبادلة معينة على مخطط كافي فسنجد نفس هذا المخطط، إذن نستنتج أن هذا المخطط لا يتشوه بواسطة عملية المبادلة هذه، فإذا كان عدد هذه المخططات التي لا تتشوه بواسطة عملية مبادلة معينة هو S ، فالعدد الحقيقي للمخططات المتكافئة هو $\frac{n!}{S}$ ، يسمى العدد الطبيعي S بمعامل التناظر، و من المهم إيجاد المخططات المتميزة من بين كل المخططات المتكافئة فهذه العملية تخفض بشكل كبير عدد المخططات.

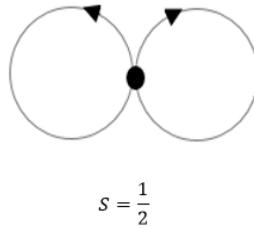
إذن فعدد المخططات الآن ينخفض إلى $N_D = \frac{(2n)!}{n!} - n_{dd} = \frac{(2n)!}{n!} - n_{dd}$ ، وتسمى هذه المجموعة من المخططات بالمخططات المتميزة الأساسية **Essentially Distinct Diagrams** أو اختصاراً بـ EDD (هذه التسمية مستخلصة من المرجع (R)). و عليه فالطاقة الحرة يمكن التعبير عنها بالعلاقة:

$$\Omega = \Omega_0 + \sum_i \frac{(EDD)_i}{S_i} \quad (2.14)$$

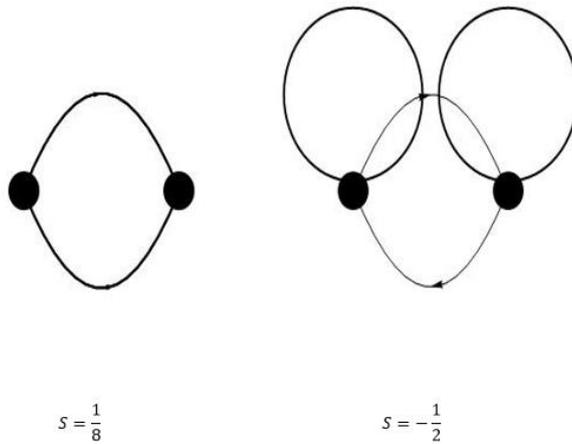
الجدول 1 يمثل عدد المخططات المتميزة الأساسية (EDD) حتى $n=10$. وكما نلاحظ انه يوجد اختصار كبير في عدد المخططات الواجب حسابها.

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
<i>Number of diagrams</i>	1	2	5	14	50	265	1601	11 984	101 884	973 934
<i>Wick direct (2n)!</i>	2	24	720	40320	3628800	47001600	8.72×10^{10}	2.09×10^{13}	$2,40 \times 10^{15}$	$2,43 \times 10^{18}$

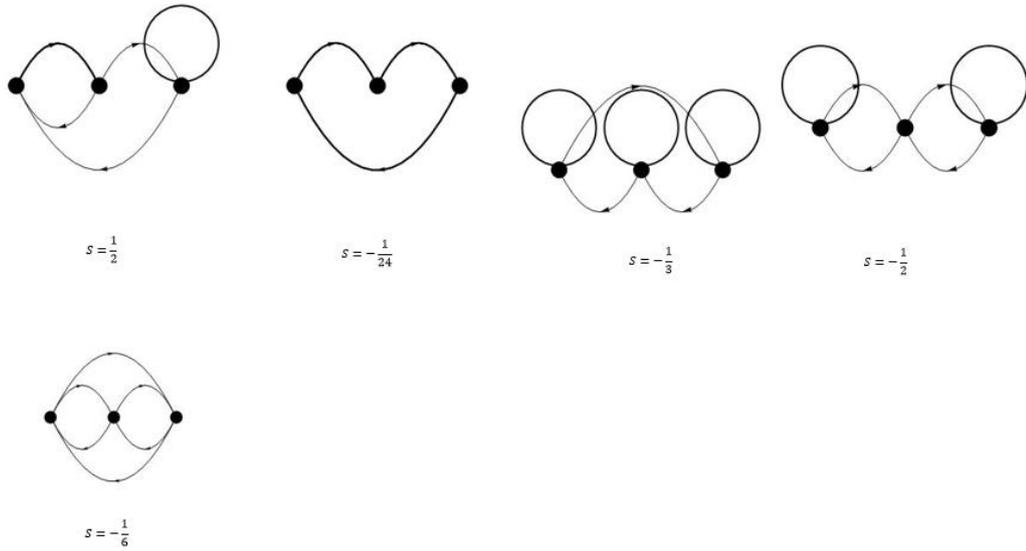
توضح الاشكال التالية المخططات المتميزة الأساسية من $n=1$ إلى غاية $n=4$



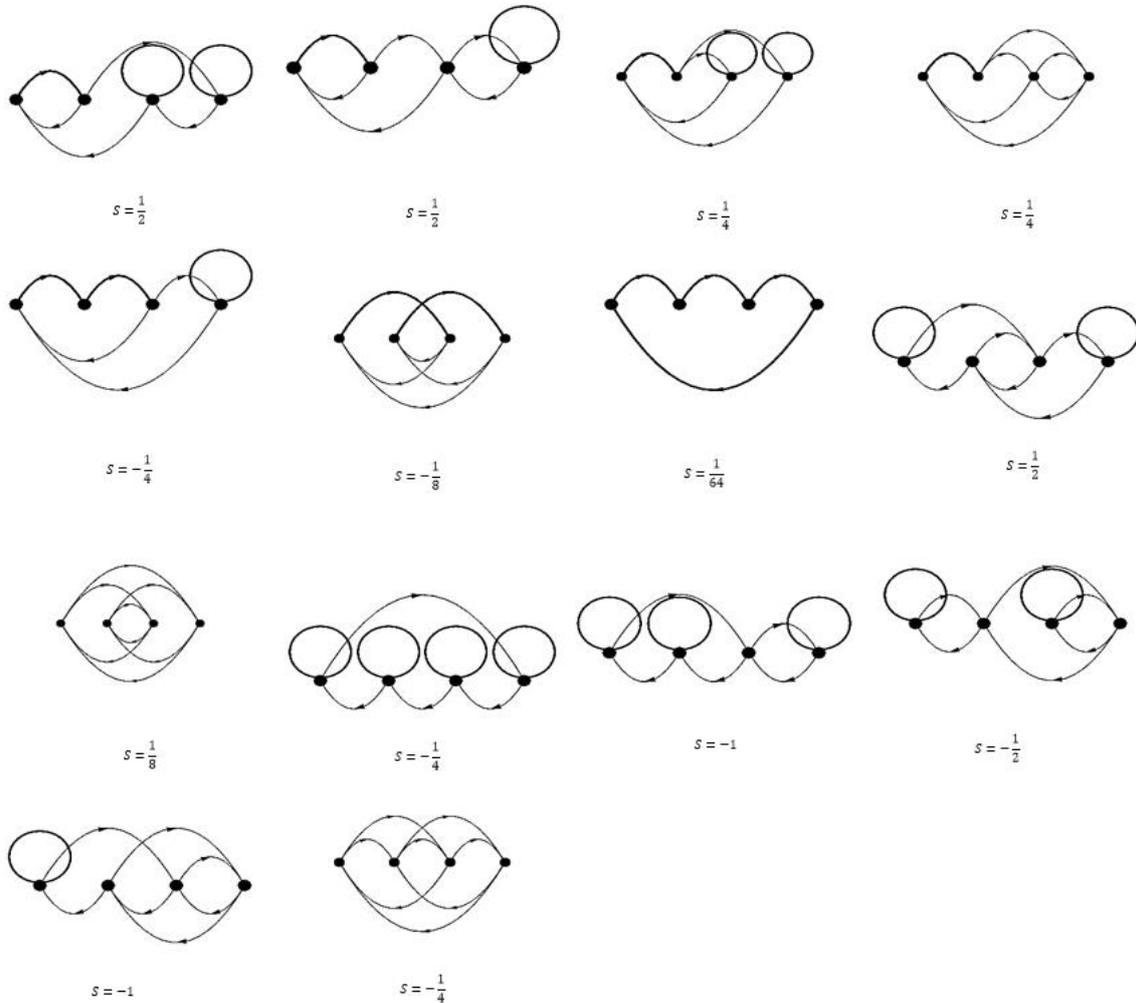
الشكل 2.2. المخطط المتميز الأساسي عند $n=1$



الشكل 3.2. المخططات المتميز الأساسية عند $n=2$



الشكل 4.2. المخططات المتمايز الأساسية عند $n=3$



الشكل 5.2. المخططات المتمايز الأساسية عند $n=4$

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

لاستيعاب طرق الحساب المستخدمة في هذه المرحلة، نبدأ من أبسط حالة والمتمثلة في إيجاد العبارة التحليلية للمخطط الغير قابل للاختزال من الدرجة الثانية، المبين في الشكل 2.2، حيث يمكن في البداية كتابة مساهمة الطاقة الحرة له على النحو التالي [5]:

$$\Omega_2 = \frac{1}{8} V_{p_3 p_4}^{p_1 p_2} V_{p_1 p_2}^{p_3 p_4} I_2 \quad (2.15)$$

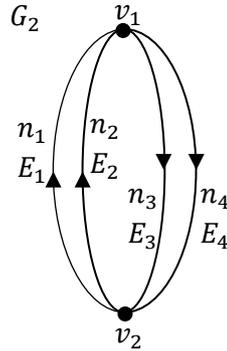
حيث

$$I_2 = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta \int_0^\beta g_{p_1}(\tau_1 - \tau_2) g_{p_2}(\tau_1 - \tau_2) g_{p_3}(\tau_2 - \tau_1) g_{p_4}(\tau_2 - \tau_1) d\tau_1 d\tau_2 \quad (2.16)$$

لفهم الطريقة المستخدمة لحساب قيمة التكامل I_2 الموجودة في العبارة (2.17)، فسنترح طريقتين أساسيتين: الطريقة المباشرة وطريقة المخططات.

4.2. الطريقة المباشرة

من المهم استخدام تحويل فوريي للتحويل من الزمن التخيلي τ إلى الترددات وذلك لحساب التكامل على المجال $[0, \beta]$. لتحويل الناشر (2.10) نستخدم ما يعرف ب مجموع ماتشيبارا Matsubara sum [9]، والذي يكتب على الشكل التالي:



الشكل 6.2. المخطط غير المختزل للطاقة الحرة من الدرجة الثانية.

$$g_p(\tau - \tau') = \frac{1}{\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\zeta_m(\tau - \tau' - n\theta)}}{E_p - \zeta_m}, \quad (2.17)$$

في العلاقة (2.18)، المتغير المركب ζ_m يميز لنا النظام المدروس، حيث $\zeta_m = i \frac{\pi}{\beta} (2m)$ إذا كانت الجسيمات المدروسة عبارة عن بوزونات و $\zeta_m = i \frac{\pi}{\beta} (2m - 1)$ إذا كانت الجسيمات عبارة عن

فرميونات، أما الثابت θ فهو عدد عنصري موجب صغير جداً $\theta \rightarrow 0^+$ ، و n هو عدد طبيعي عشوائي موجب غير معدوم .

إخترنا في العلاقة (2.18) الثابت العنصري $\eta = n\theta$ فقط لتجنب صعوبة بعض الحالات عند حساب النهاية $\eta \rightarrow 0^+$. يمكن كذلك كتابة المقادير الإحصائية (2.11) في تمثيل ماتشيبارا [9] على النحو التالي:

$$f_p^\pm = \frac{1}{\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{0\mp}}{E_p - \zeta_m} \quad (2.18)$$

نعوض في هذه الحالة مجموع ماتشيبارا (2.18) في التكامل (2.17)، ونكامل τ على المجال الزمني $[0, \beta]$ ، فنحصل على النتيجة:

$$I_2 = \frac{1}{\beta^3} \sum_{m_1 m_2 m_3 m_4} \delta_{\zeta_{m_1} + \zeta_{m_2}, \zeta_{m_3} + \zeta_{m_4}} \prod_{i=1}^4 \frac{e^{\zeta_{m_i} n_i \theta}}{(E_{p_i} - \zeta_{m_i})} \quad (2.19)$$

حيث $\delta_{\zeta_{m_1} + \zeta_{m_2}, \zeta_{m_3} + \zeta_{m_4}}$ هي دلتا كرونكر والتي تمثل قانون الانحفاظ بين الخطوط الواردة ζ_{m_1}, ζ_{m_2} والخطوط الصادرة ζ_{m_3}, ζ_{m_4} . لحساب المجموع (2.20) من الضروري التخلص من الحفظ $\delta_{\zeta_{m_1} + \zeta_{m_2}, \zeta_{m_3} + \zeta_{m_4}}$ ، لذلك نضرب العلاقة (2.20) بالكمية:

$$\frac{E_{p_1} + E_{p_2} - E_{p_3} - E_{p_4} + \zeta_{m_1} + \zeta_{m_2} - \zeta_{m_3} - \zeta_{m_4}}{E_{p_1} + E_{p_2} - E_{p_3} - E_{p_4}} \quad (2.20)$$

إن الكمية (2.21) في الحقيقة تساوي 1 و نقوم في هذه الحالة باختصار كل حد $E_{p_i} - \zeta_{m_i}$ من بسط الكمية (2.21) مع ما يقابله من مقام العلاقة (2.20)، فنحصل على أربعة حدود أولية:

$$I_2 = I_2^1 + I_2^2 + I_2^3 + I_2^4 \quad (2.21)$$

حيث:

$$\begin{aligned} I_2^1 &= \frac{1}{\beta^3 (E_{p_1} + E_{p_2} - E_{p_3} - E_{p_4})} \sum_{m_2 m_3 m_4} \frac{e^{\zeta_{m_2} \theta (n_2 - n_1)} e^{\zeta_{m_3} \theta (n_3 + n_1)} e^{\zeta_{m_4} \theta (n_4 + n_1)}}{(E_{p_2} - \zeta_{m_2})(E_{p_3} - \zeta_{m_3})(E_{p_4} - \zeta_{m_4})}, \\ I_2^2 &= \frac{1}{\beta^3 (E_{p_2} + E_{p_1} - E_{p_3} - E_{p_4})} \sum_{m_1 m_3 m_4} \frac{e^{\zeta_{m_2} \theta (n_1 - n_2)} e^{\zeta_{m_3} \theta (n_3 + n_2)} e^{\zeta_{m_4} \theta (n_4 + n_2)}}{(E_{p_1} - \zeta_{m_1})(E_{p_3} - \zeta_{m_3})(E_{p_4} - \zeta_{m_4})}, \\ I_2^3 &= \frac{1}{\beta^3 (E_{p_3} + E_{p_4} - E_{p_1} - E_{p_2})} \sum_{m_1 m_2 m_4} \frac{e^{\zeta_{m_2} \theta (n_1 + n_3)} e^{\zeta_{m_3} \theta (n_2 + n_3)} e^{\zeta_{m_4} \theta (n_4 - n_3)}}{(E_{p_1} - \zeta_{m_1})(E_{p_2} - \zeta_{m_2})(E_{p_4} - \zeta_{m_4})}, \end{aligned} \quad (2.22)$$

$$I_2^4 = \frac{1}{\beta^3(E_{p_4} + E_{p_3} - E_{p_1} - E_{p_2})} \sum_{m_1 m_2 m_3} \frac{e^{\zeta_{m_2} \theta(n_1+n_4)} e^{\zeta_{m_3} \theta(n_2+n_4)} e^{\zeta_{m_4} \theta(n_3-n_4)}}{(E_{p_1} - \zeta_{m_1})(E_{p_2} - \zeta_{m_2})(E_{p_3} - \zeta_{m_3})}.$$

نقوم باختيار 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 $n_1 = 3, n_2 = 1, n_3 = 5, n_4 = 11$ ، 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:

$$\begin{aligned} I_2^1 &= \frac{1}{(E_{p_1} + E_{p_2} - E_{p_3} - E_{p_4})} f_{p_2}^+ f_{p_3}^- f_{p_4}^-, \\ I_2^2 &= \frac{1}{(E_{p_2} + E_{p_1} - E_{p_3} - E_{p_4})} f_{p_1}^- f_{p_3}^- f_{p_4}^-, \\ I_2^3 &= \frac{1}{(E_{p_3} + E_{p_4} - E_{p_1} - E_{p_2})} f_{p_1}^- f_{p_2}^- f_{p_4}^-, \\ I_2^4 &= \frac{1}{(E_{p_4} + E_{p_3} - E_{p_1} - E_{p_2})} f_{p_1}^- f_{p_2}^- f_{p_3}^+. \end{aligned} \quad (2.23)$$

بسبب التناظر فإن 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

$$I_2^3 \text{ في } p_4 \rightarrow p_3, p_3 \rightarrow p_4$$

$$\text{و } I_2^2 \text{ في } p_3 \rightarrow p_1, p_1 \rightarrow p_3, p_4 \rightarrow p_2, p_2 \rightarrow p_4$$

والتحويل الأخير يطبق على المقدار I_2^1 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 أن القيمة النهائية ل Ω_2 كما يلي:

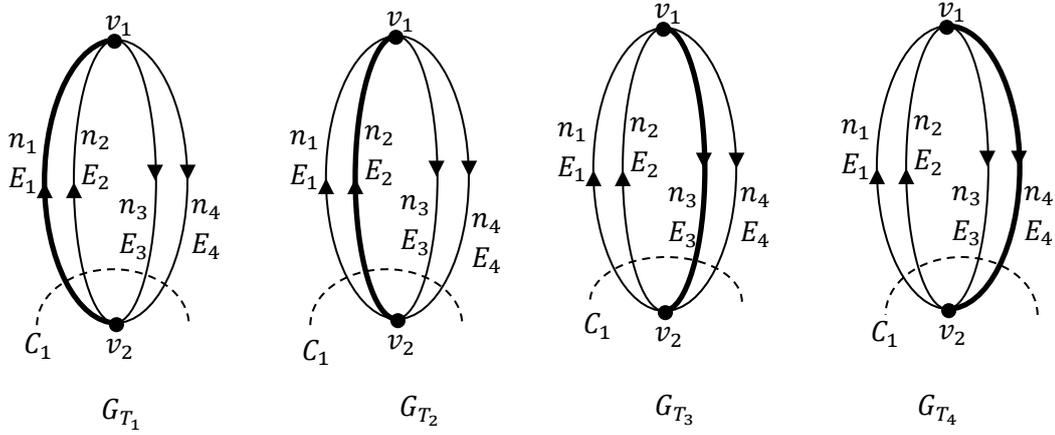
$$\Omega_2 = \frac{1}{4} \frac{V_{p_3 p_4}^{p_1 p_2} V_{p_1 p_2}^{p_3 p_4} f_{p_1}^- f_{p_2}^- (f_{p_3}^+ + f_{p_3}^-)}{(E_{p_3} + E_{p_4} - E_{p_1} - E_{p_2})} \quad (2.24)$$

ملاحظة: يمكننا اختيار قيم أخرى ل n_i ، على سبيل المثال: $n_1 = 2, n_2 = 3, n_3 = 3, n_4 = 2$ أو $n_1 = 2, n_2 = 5, n_3 = 3, n_4 = 4$ ولكن النتيجة تبقى نفسها مطابقة ل Ω_2 في (2.25).

4.2. طريقة المخططات

إن الفكرة الأساسية المستخدمة 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. في البداية نرسم على المخطط G_1 من الشكل 6.2. جميع الأشجار الممكنة، أي نرسم جميع المخططات الممكنة التي تربط جميع قمم المخطط ولا تحوي دورة (حلقة)، وكما نلاحظ فإنه يوجد أربعة أشجار ممكنة

الشكل 3.2 يظهر جميع الأشجار الممكنة للمخطط G_1 . حيث تمثل الخطوط السميكة الشجرة T_i ، بينما الخطوط الرفيعة تمثل الشجرة المكملة للمخطط G_1 . وكما نعلم أن الطاقة الحرة هي عبارة عن مجموعة من الكسور، كل كسر هو عبارة عن شجرة T_i ، حيث يمثل مقام الكسر الخطوط السميكة للشجرة T_i ، بينما الشجرة المكملة فيمكن استخراج بسط الكسر منها.



الشكل 7.2. جميع الأشجار الممكنة لمخطط من الدرجة الثاني

بينما طريقة حساب مقدار مساهمة الشجرة T_1 من الشكل 7.2. في كمية الطاقة الحرة للمخطط G_1 . فيبين الخط السميك 1 أنه يمكن استخراج مقام الكسر منه والمتعلق بالطاقة، بينما الخطوط الرفيعة 2، 3، 4 فيمكن استخلاص بسط الكسر والمرتبب بالمعاملات الإحصائية f^+ أو f^- ، حيث:

(1) مقام الكسر: لتحديد المقام D_1 لـ T_1 ، نقسم المخطط T_1 إلى جزئين منفصلين بحيث يمر المقص عبر فرع واحد فقط (شرط إلزامي أن يمر المقص على فرع واحد سميك من فروع الشجرة) من الشجرة (الخط السميك)، نرسم لعملية القص هذه بالرمز C في الشكل 7.2، 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 T_1 التي مر عليها المقص، بينما إشارات الطاقات الأخرى 2، 3 و 4 فيمكن إيجادها نسبياً إلى اتجاه الخط 1، حيث تكون موجبة إذا كانت في نفس اتجاه الخط 1 وتكون سالبة إذا كانت في الاتجاه العكسي للخط 1.

(2) بسط الكسر: في هذه الحالة كل خط من الشجرة المكملة i يقابله معامل إحصائي f_i^+ أو f_i^- . يبقى الآن، كيفية العثور على العلامة $sign_i$ (+ أو -) الموجودة في المعامل الإحصائي $f_i^{sign_i}$ في البداية نلاحظ أن إضافة أي خط من الشجرة المكملة إلى خطوط الشجرة الممتدة T_i يشكل دورة أساسية (حلقة أساسية).

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 دورة (حلقة) كما يلي: وهو عدد صحيح غير معدوم، يمكن تعيينه عن طريق التجول على الخطوط المشكلة للدورة (الحلقة)، حيث نقوم في كل مرة بجمع أو طرح في كل مرة قيمة معامل الحافة لكل خط، 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:

$$O_i = n_i^+ - n_i^- \quad (2.25)$$

- يمثل n_i^+ هو المجموع الكلي لمعاملات الحواف للخطوط المتجهة في نفس اتجاه الخط i
 - يمثل n_i^- يمثل المجموع الكلي لمعاملات الحواف للخطوط المعاكسة للخط i .
- و تحدد العلامة $sign_i$ كما يلي:

$$sign_i = [O_i] = \frac{O_i}{|O_i|} \quad (2.26)$$

حيث تم استخدام الأقواس [] للدلالة على العلامة، وهذا لتبسيط الكتابة لا أكثر. ونستنتج من التعريفين السابقين أن الاتجاه الكلي لكل دورة (حلقة) في T_1 من الشكل (3.2)، وذلك لكل خط مكمل 2، 3 و 4 هم:

$$O_2 = n_2 - n_1$$

$$O_3 = n_3 + n_1$$

$$O_4 = n_4 + n_1$$

وفي النهاية نجد مما سبق أن مساهمة الشجرة T_1 هي:

$$I_2^1 = \frac{f_2^{[n_2-n_1]} f_3^{[n_3+n_1]} f_4^{[n_4+n_1]}}{(E_1 + E_2 - E_3 - E_4)} \quad (2.27)$$

و نواصل بنفس الطريقة، حساب مساهمات الأشجار الأخرى T_2 ، T_3 و T_4 :

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

$$I_2^3 = \frac{f_1^{[n_1+n_3]} f_2^{[n_2+n_3]} f_4^{[n_4-n_3]}}{(E_3 + E_4 - E_1 - E_2)}, \quad (2.28)$$

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

أخيراً، نختار قيم معامل الحافة $n_i > 0$ بحيث لا تنعدم كل الاتجاهات O_i لكل الأشجار T_i . نأخذ الاختيار الكيفي: $n_1 = 2, n_2 = 1, n_3 = 2, n_4 = 1$ ، وبذلك نحصل على نفس النتائج السابقة في (2.24) من الطريقة المباشرة.

إذن سنختار طريقة المخططات لأنها الأنجع والأسهل والأهم أنها قابلة للبرمجة، لذلك نحن بحاجة لدراسة بعض المسائل المعروفة في نظرية المخططات.

5.2. تعاريف

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

تعريف 3: الشجرة الممتدة T (*Spanning tree*) هي كل مخطط فرعي لـ G يتكون من جميع قمم G ولكن لا يحوي على دورات (حلقات) [36-38]، تسمى حواف الشجرة الممتدة T بالأغصان، العدد الكلي لأغصان الشجرة الممتدة يساوي $n - 1$.

تعريف 4: الشجرة المكتملة T^* (*cotree*) للشجرة الممتدة T في G وهي المخطط الذي يحوي كل حواف G باستثناء أغصان الشجرة الممتدة T [10-11] حواف الشجرة المكتملة تسمى أوتار (الشجرة المكتملة ممكن أن تحوي دورات (حلقات))، عدد أوتار الشجرة المكتملة هو $m - n + 1$.

تعريف 5: القَطع الأساسي هو عملية قَطع لغصن واحد فقط من أغصان الشجرة الممتدة T وعدد معين من أوتار الشجرة المكتملة T^* ، بحيث تؤدي هذه العملية إلى تقسيم المخطط G إلى قسمين. هذه المجموعة من عمليات القَطع والتي عددها $n - 1$ تسمى مجموعة القَطع الأساسية. يتم تحديد اتجاهات مجموعة القَطع الأساسية وفقاً لاتجاه خصن الشجرة المقطوع [11].

تعريف 6: الحلقات الأساسية (الدورات الأساسية) هي حلقة تنتج بعد إضافة وتر واحد فقط من أوتار الشجرة المكملية T^* إلى الشجرة الممتدة T [10-12]، عدد الحلقات الأساسية الناتجة من مخطط G هو $m - n + 1$ حلقة.

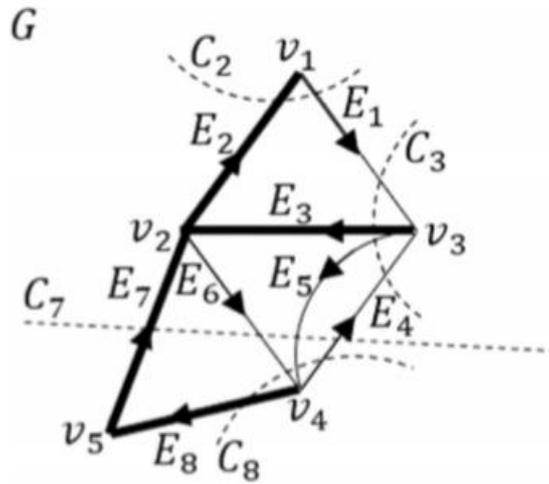
إن الشكل 4.2 يجسد مثلاً توضيحياً لمخطط متصل $G(5,8)$ والذي يتكون من القمم v_i ، $1 \leq i \leq 5$ والحواف E_j ، $1 \leq j \leq 8$ ، هذا المخطط يحوي مثال على شجرة ممتدة T وشجرة مكملية T^* ، حيث $\{E_1, E_4, E_5, E_6\}$ فممثلة بالأوتار $\{E_2, E_3, E_7, E_8\}$ (الخطوط السمكية)، وأما T^* فممثلة بالأوتار $\{E_1, E_4, E_5, E_6\}$ (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، وكما نلاحظ في الشكل 4.2 ومن التعريف 5 فإن قيم القطع تساوي إلى: $C_2 = E_2 - E_1$ ، $C_3 = E_3 + E_5 - E_1 - E_4$ ، $C_7 = E_7 + E_4 - E_5 - E_6$ ، $C_8 = E_8 + E_4 - E_5 - E_6$.

كما يمكننا تحديد بسط الكسر Nu من أوتار الشجرة المكملية T^* فنجد من الشكل:

$$Nu = f_1^{[O_1]} f_4^{[O_4]} f_5^{[O_5]} f_6^{[O_6]}$$

حيث يمكن كذلك استخراج الاتجاهات الكلية O_j ، $j = 1, 4, 5, 6$ من الحلقات الأساسية (تعريف 6) المرتبطة بالشجرة المكملية T^* وباستخدام التعريف 2 للاتجاه الكلي نجد أنها تساوي إلى: $O_1 = n_1 + n_2 + n_3 + n_4 + n_5 + n_6 + n_7 + n_8$ ، $O_4 = n_4 + n_3 - n_7 - n_8$ ، $O_5 = n_5 + n_7 + n_8 - n_3$ ، $O_6 = n_6 + n_7 + n_8$. إذن فمساهمة الشجرة الممتدة T من الشكل 4.2 في الطاقة الحرة I_5^T هي:

$$I_5^T = \frac{f_1^{[n_1+n_3+n_2]} f_4^{[n_4+n_3-n_7-n_8]} f_5^{[n_5+n_7+n_8-n_3]} f_6^{[n_6+n_7+n_8]}}{(E_2 - E_1)(E_3 + E_5 - E_1 - E_4)(E_7 + E_4 - E_5 - E_6)(E_8 + E_4 - E_5 - E_6)} \quad (2.29)$$



الشكل 8.2. مثال على مخطط متصل

G : تمثل الخطوط السميكة مثلاً على شجرة ممتدة T ، بينما تمثل الخطوط الرفيعة الشجرة المكملة T^* المرتبطة بـ T . مجموعة القُطع الأساسية ممثلة بالخطوط المتقطعة. 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 Ω_n^G لمساهمة مخطط متصل $G(n, m)$ في الطاقة الحرة هي:

$$\Omega_n^G = \sum_{\text{All Spanning Trees}} \frac{\prod_{j=1}^{m-n+1} f_j^{[0_j]}}{\prod_{i=1}^{n-1} C_i} \quad (2.30)$$

حيث $C_i; i = 1, n - 1$ تمثل مجموعة القُطع الأساسية (تعريف 5) للشجرة الممتدة T (تعريف 3)، و $[0_j]$ يمثل اشارة الاتجاه الكلي (تعريف 2) لكل حلقة أساسية (تعريف 6) z من الشجرة المكملة T^* (تعريف 4). و منه فإن طريقة المخططات لحساب الطاقة الحرة Ω_n^G تم اختصارها في أربع مسائل أساسية معروفة في نظرية المخططات وهي:

(1) إحصاء جميع الأشجار الممتدة لمخطط متصل.

(أ) إيجاد مجموعة القُطع الأساسية لكل شجرة ممتدة T .

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

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

واحدة (تعريف 1).

6.2. قيم معاملات الحافة

من المهم جدا إيجاد القيم العشوائية لمعاملات الحافة n_i حيث $i = 1, \dots, m$ ، و يجب إيجاد قيم معاملات الحافة لكل الأشجار الممتدة الناتجة من مخطط متصل. هذا بسبب المشكلة المطروحة التي جعلنا عاجزين عن تحديد n_i لكل شجرة ممتدة على حِدَةٍ، بعبارة أخرى نظراً لأن معاملات الحافة مرتبطة بإيجاد الحلقات (الدورات) الأساسية، فمن البديهي أن هذا يؤدي إلى تحديد جميع حلقات (دورات) المخطط المتصل. يعد إحصاء جميع حلقات (دورات) مخطط متصل موضوعاً مهماً من جهة أخرى في نظرية المخططات. حيث يوجد العديد من الخوارزميات [13-14] المقترحة لحل هذه المسألة بسرعة ومساحة مثاليين. في هذا المجال، و سنختار خوارزمية جيبس Gibbs [13] لأنها الخوارزمية التي تمكننا من إيجاد جميع الحلقات (الدورات) بترميز النظام الثنائي. ولكن هناك مشكلة في خوارزمية جيبس وهي أنها تأخذ مساحة شاسعة من الذاكرة، واقترح لحل هذه المشكلة [15] إجراء تعديل على هذه الخوارزمية، حيث تم وضع خطوات أساسية ومهمة لهذا التعديل فيها كما 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.

7.2. إحصاء الأشجار الممتدة

تم تطوير العديد من خوارزميات لإحصاء الأشجار لمخطط متصل [16-17]، في هذا الفصل سوف نتطرق إلى الخوارزمية الجديدة [15] والتي تختلف عن سابقتها، حيث تعتمد على طريقة الحذف والانكماش contraction-deletion. سنعرض تفاصيل هذه الخوارزمية في الإجراءات التالية.

7-1- إجراءات التهيئة

قبل البدء في عملية إيجاد جميع الأشجار الممتدة لمخطط متصل $G(n, m)$ ، يجب أن نهئ 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. مساهمة كل حلقة من حلقات HFL هي f_k^- ، حيث k هو رقم الحافة الخاص بهذه الحلقة، ويتم حسابها كعامل مشترك؛

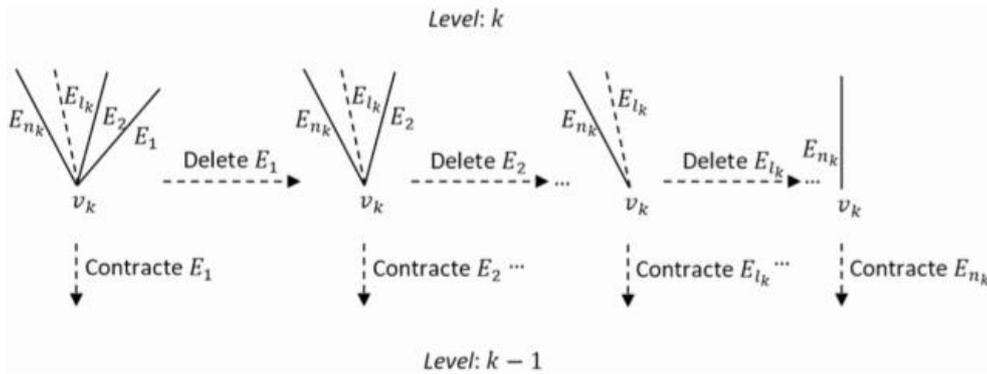
✓ استخدم البحث العميق depth-first search، أو ما يعرف اختصاراً بـ DFS [18]، وذلك لإيجاد شجرة ممتدة عشوائية للمخطط المتصل G ؛

✓ إعادة ترقيم قمم المخطط G وفقاً لترتيب القمم التي تمت مصادفتها أثناء عملية البحث العميق بـ DFS.

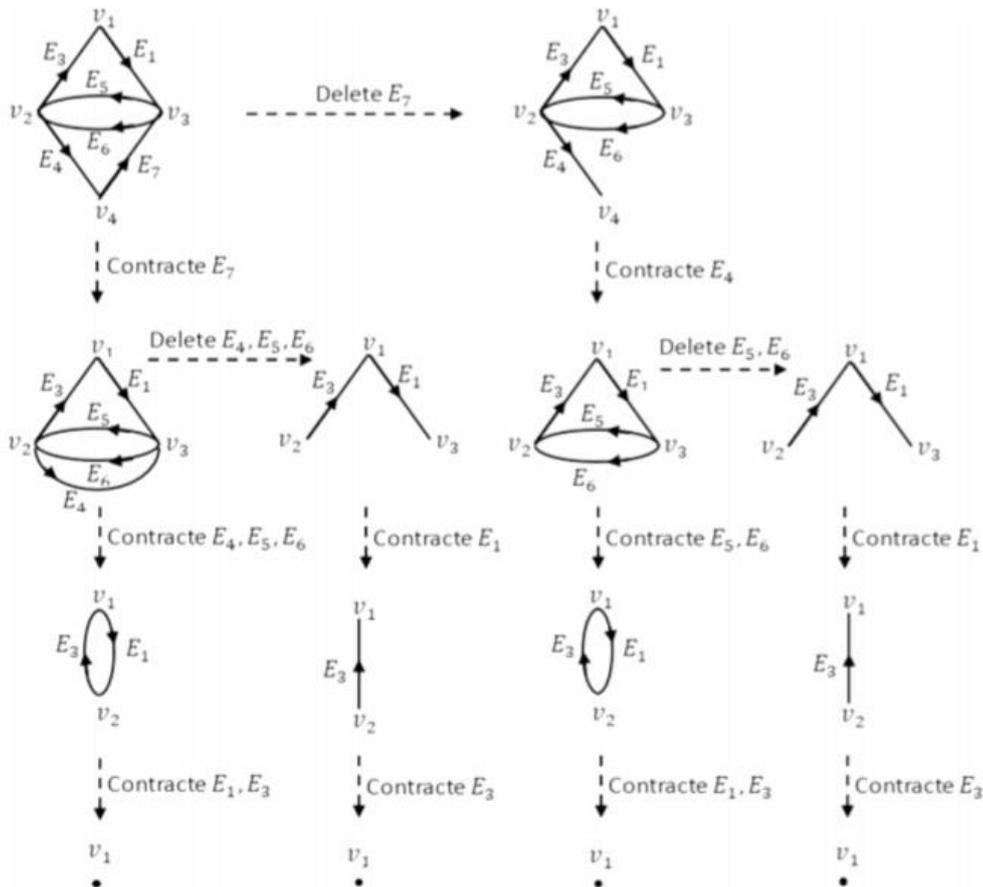
7-2- عملية الحذف والانكماش

طريقة الحذف والانكماش هي طريقة تعمل على تحليل المخطط المهياً $G(n, m)$ إلى مخططات مقلصة متعددة المستويات $G^{(k, l_k)}$ ، حيث k يمثل المستوى $k = 1, \dots, n$ ، 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 يوضح عملية الحذف والانكماش في المستوى k ، أثناء هذه العملية نصادف أحياناً حواف متوازية تربط بين القمة v_k وقمة مجاورة لها فيجب حذفهم وكلهم وكذلك كلهم مثلهم مثل حافة واحدة. نعيد هذه العملية بشكل متكرر

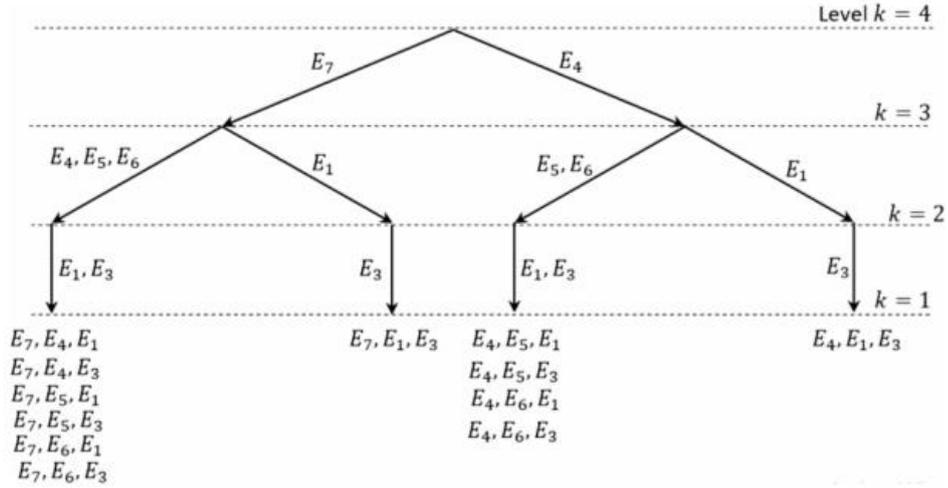
بدءاً من المستوى n ووصولاً إلى المستوى 1. طريقة الحذف والانكماش تساعدنا على ضغط جميع الحواف المتوازية، يوضح الشكل 7.2 عمليات الحذف والانكماش للمخطط المهيأ G_2 والموضح سابقاً في الشكل 5.2 (b)، شجرة تدفق الحساب السابق موضحة في الشكل 8.2 (الأشجار المضغوطة) حيث يمثل كل سهم مجموعة من الحواف المتوازية.



الشكل 9.2. عملية الحذف والانكماش في المستوى k .

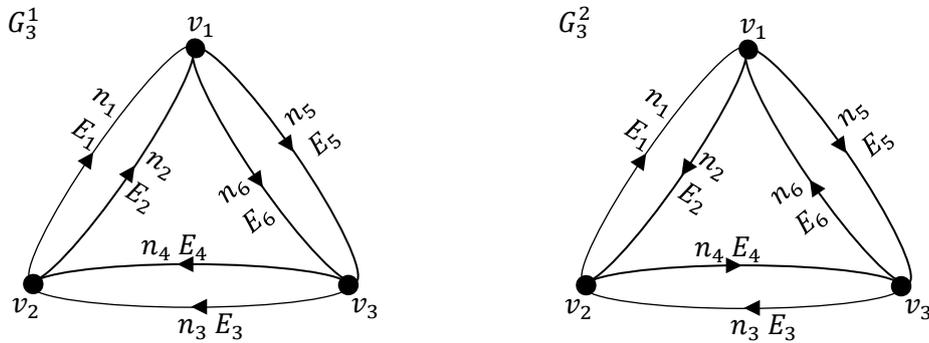


الشكل 10.2. عملية الحذف والانكماش للمخطط G_2 .



الشكل 11.2. مخطط الشجرة (الشجرة المضغوطة) للمخطط G_2

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

$$= \left\{ \pm(n_1 + n_2), \pm(n_3 + n_4), \pm(n_5 + n_6), \pm(n_1 + n_5 + n_3), \pm(n_1 - n_6 + n_3), \right. \\ \left. \pm(n_1 + n_5 - n_4), \pm(n_1 - n_6 - n_4), \pm(n_2 - n_3 - n_5), \pm(n_2 - n_3 + n_6), \right. \\ \left. \pm(n_2 + n_4 - n_5), \pm(n_2 + n_4 + n_6) \right\}$$

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

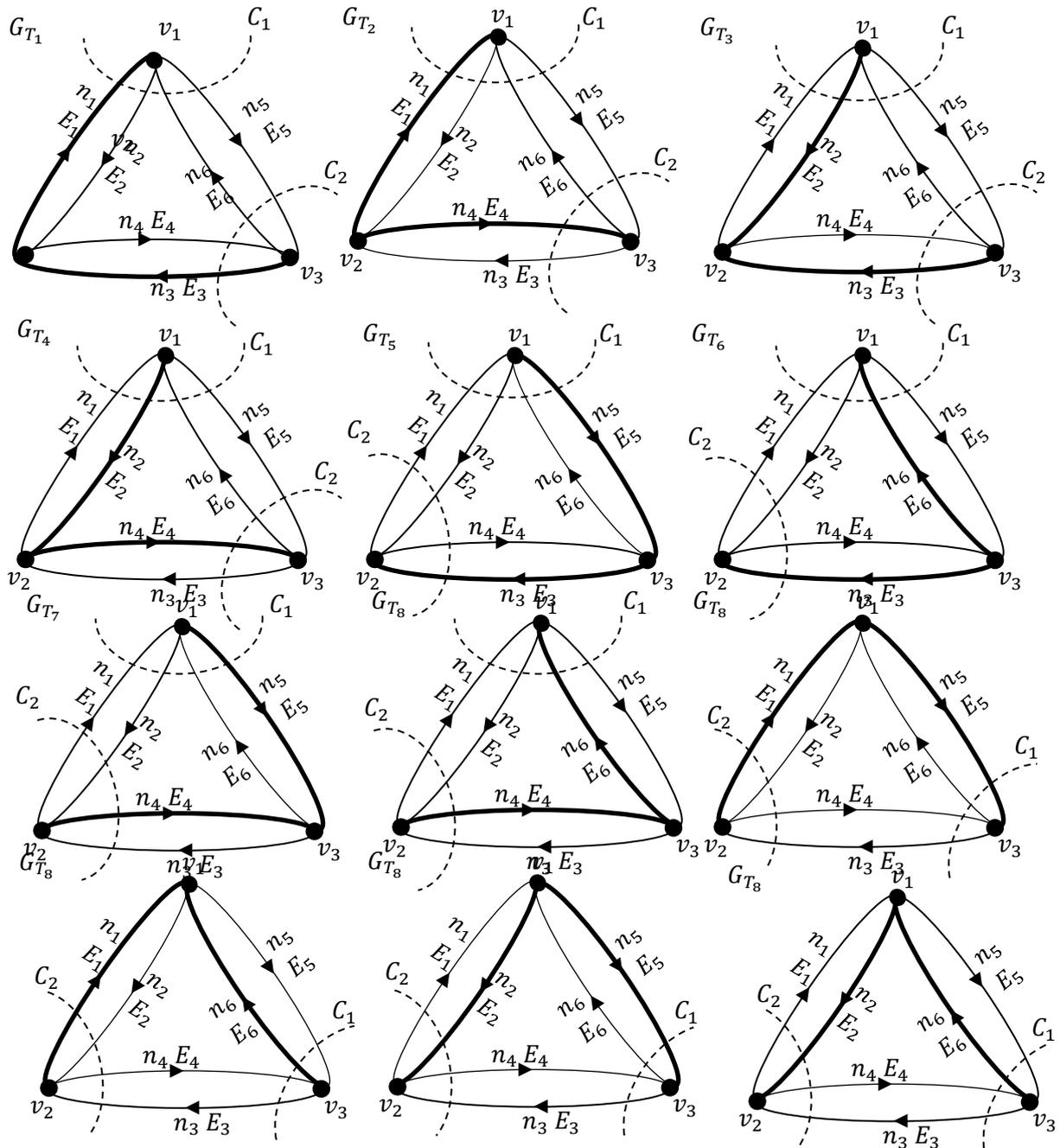
$$n_1 - n_6 + n_3 \neq 0, n_1 + n_5 - n_4 \neq 0, n_1 - n_6 - n_4 \neq 0$$

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

لذلك سنختار القيم التالية:

$$n_1 = n_2 = n_3 = n_4 = n_5 = n_6 = 1 \quad (2.31)$$

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 هيزنبرغ في بعدين، وذلك باستخدام نظرية الاضطرابات المتعددة الأجسام في درجات الحرارة العالية، كذلك ندرس بعض الخصائص الترموديناميكية لنموذج هيزنبرغ 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 للطاقة الحرة الجزئية Ω_n :

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

حيث Ω_0 يمثل حد الطاقة الحرة لهاملتون الجملة دون تفاعل. يحتوي كل حد Ω_n على جميع المخططات المتميزة بشكل أساسي (EDDs) (EDDs) هو المخطط المختار من بين المخططات المكافئة، لمزيد من المعلومات، راجع [19]. 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:

$$E_p = \varepsilon_p - \mu - e_p^{HF}(\beta) \quad (3.2)$$

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

$$e_p^{HF}(\beta) = \frac{1}{V} \int V_{pq}^{pq} f^-(\varepsilon_q + e_q^{HF}(\beta)) dq \quad (3.3)$$

يمكن صياغة الحد Ω_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 2. العدد الإجمالي لمخططات الفراغ من نوع هيجنهولتز المترابطة والتميزة أساساً دون المخططات الفرعية الخاصة ب هارترتي-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 $(EDD)_i$ ومعامل تناظرها S_i باستخدام البرنامج [20]. كما يمكننا حساب مساهمة كل مخطط $(EDD)_i$ في الطاقة الحرة باستخدام البرنامج [19] 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:

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

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

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

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 (3.6) في درجات الحرارة العالية.

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

سنناقش هذا الجزء كيفية إعادة 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 ($\epsilon = -1$) في المعادلة (04) (بالطبع يمكن تعميمها على البوزونات)

قبل الاستمرار في هذه الطريقة، دعونا نبدأ بمساهمة الدرجة الثانية. مساهمة المخطط G_2 (الشكل (2.6)) في الطاقة الحرة تعطى بالعلاقة (أنظر الفصل الثاني (2.27) و (2.28)) هي:

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

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 Ω_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 إيجاد النشر في درجات الحرارة العالية ل Ω_2 ، لأن النسبة في المعادلة (3.11) يمكن كتابتها على شكل سلسلة لانهائية من حيث درجة الحرارة العكسية β

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

حيث المعاملات e_n تمثل ثوابت أولر.

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

الكتابة السابقة لـ Ω_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 Ω_3^2 للمخطط G_3^2 (الشكل 2.12) تعطى بـ (انظر الفصل الثاني العلاقة (2.32))

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

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:

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

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:

$$\Omega_3^{(2)} = G(x_5, x_6, x_5, x_4)f^-[x_1, x_2 + x_5 - x_6] \times f^-[x_3, -x_4 + x_5 + x_6] + (f^-(x_6) - f^-(x_5))G(x_3, x_4, x_2)f^-[x_1, x_2 + x_3 - x_4, x_2 + x_5 - x_6] \quad (3.20)$$

حيث

$$G(x, y, z) = f^-(x)f^+(y) + f^+(z)(f^-(y) - f^-(x)) \quad (3.21)$$

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

$$N_{T^*} = \sum_{K=0}^R \left(\frac{-\beta}{2}\right)^k \prod_{j=1}^{n+1} \frac{E_j^{K_j}}{K_j!} e_{k_j}. \quad (3.22)$$

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:

$$\sum_T \frac{\prod_{j=1}^{n+1} \frac{E_j^{K_j}}{K_j!} e_{k_j}}{\prod_{i=1}^{n-1} D_i} = 0; 0 \leq K \leq n - 2. \quad (3.23)$$

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

$$\Omega_n^{G_i} = \sum_{k=n-1}^R \beta^k \sum_T \frac{P_K(E_1, \dots, E_{n+1})}{P_{n-1}(E_1, \dots, E_{n-1})}. \quad (3.24)$$

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:

$$P_K(E_1, \dots, E_{n+1}) = \prod_{j=1}^{n+1} \frac{E_j^{K_j}}{K_j!} e_{k_j}. \quad (3.25)$$

$$P_{n-1}(E_1, \dots, E_{n-1}) = \prod_{i=1}^{n-1} D_i. \quad (3.26)$$

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 $\Omega_n^{G_i}$ 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 بـ 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 الاول S_1 من DT ثم نبحث على جميع الأشجار الممتدة التي فروعها لا تحتوي على S_1 ولكن حسب الشرط التالي: إذا كانت الاشجار 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

$$\Omega_n^G = f^{[0_1]}(E_1) \dots f^{[0_s]}(E_s) \prod_{k=1}^M f^{-1}[E_{SK}, d_1, \dots, d_{r_k}] \quad (3.27)$$

العدد الصحيح $r_k = n_k - m_k$ هو رتبة فرع الطاقة $E_{SK} \in DT$ 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 في $E_{S1}, E_{S2}, \dots, E_{Sk-1}$ نفس المقام D_i . جميع الرتب r_k يمكن ايجادها وذلك بحل المعادلة الصحيحة التالية:

$$\sum_{k=1}^{n-1} r_k = n - 1. \quad (3.28)$$

المقدار Ω_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:

$$f^{-}[e_s] = f^{[0_1]}(e_s) \quad (3.29)$$

$$f^{-}[e_s, d_1] = \frac{f^{-}(e_s) - (d_1)}{e_s - d_1} = \frac{1}{2} \left(\frac{\tanh\left(\frac{\beta}{2} e_s\right) - \tanh\left(\frac{\beta}{2} d_1\right)}{e_s - d_1} \right) \quad (3.30)$$

ومن أجل $r \geq 2$

$$f^{-}[e_s, \dots, d_r] = \frac{f^{-}[e_s, \dots, d_{r-1}] - [d_1, \dots, d_r]}{e_s - d_1} \quad (3.31)$$

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

$$f^{-}[e_s, \dots, d_r] = -\frac{1}{2} \sum_{n=r}^{\infty} \frac{\beta^n}{n!} e_n \sum_{k_0 k_1 \dots k_r} e_s^{k_0} d_1^{k_1} \dots d_r^{k_r} \quad (3.32)$$

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 نفس الاتجاه (الاتجاه المعاكس) للفرع e_s . المعاملات e_n هي اعداد أولر المعرفة بالمعادلة (3.13) اخيراً، الاعداد الصحيحة $k_i > 0$ يمكن تحديدها حسب العلاقة التالية :

$$\sum_{i=0}^r k_i = n - r \quad (3.33)$$

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 Ω 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 :

$$\Omega^{LO} = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n} \int_p V_n^+ \Omega_n^+ dP_n + \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n} \int_p V_n^- \Omega_n^- dP_n \quad (3.34)$$

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

$$V_n^+ = \frac{1}{4^n} V_{P_1, P_2}^{p_{2n-1}, p_{2n}} \prod_{i=1}^{n-1} V_{p_{2i}+1, p_{2i}+2}^{p_{2i}, p_{2i}} \quad (3.35)$$

$$V_n^- = \frac{1}{2^n + 1} V_{p_1, p_{2n}}^{p_{2i}, p_2} \prod_{i=1}^{n-1} V_{p_{2i+1}, p_{2i}}^{p_{2i}, p_{2i+2}} \quad (3.36)$$

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

$$\Omega_n^\mp = \prod_{i=1}^n \left(\tanh\left(\frac{\beta}{2} E_{p_{2i-1}}\right) \mp \tanh\left(\frac{\beta}{2} E_{p_{2i}}\right) \right) B[x_1^\mp, x_2^\mp, \dots, x_n^\mp] \quad (3.37)$$

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

$$x_i^\mp = E_{p_{2i}} \mp E_{p_{2i-1}} \quad (3.38)$$

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

$$B(x) = \frac{1}{e^{\beta x} - 1} \quad (3.39)$$

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

5.3. نشر الطاقة الحرة لنموذج هيزنبرغ حتى الرتبة 6

بعد استخدام الطرق السابقة نجد عبارة الطاقة الحرة في درجات الحرارة المرتفعة لنموذج هيزنبرغ حتى الحد

السادس β^6 كما يلي:

$$\begin{aligned} \Omega = & -\frac{1}{2\beta} \ln(2) + \frac{1}{8} J\Delta - \frac{\beta}{6} \left(\frac{J^2}{16} (\Delta^2 + 2) + h^2 \right) + \beta^2 \frac{J\Delta}{4} \left(\frac{J^2}{32} - \frac{h^2}{12} \right) \\ & + \frac{\beta^3}{8} \left(\frac{J^4}{952} (\Delta^4 + 8\Delta^2 + 6) - \frac{J^2 h^2}{8} (\Delta^2 - 2) + \frac{h^4}{3} \right) \\ & - \beta^4 \frac{J\Delta}{6} \left(\frac{J^4}{512} (\Delta^2 + 2) + \frac{h^2 J^2}{48} (\Delta^2 - 3) - \frac{h^4}{3} \right) \\ & - \frac{\beta^5}{8} \left(\frac{1}{45} h^6 - \frac{J^2}{96} h^4 (13\Delta^2 - 4) - \frac{J^4}{768} h^2 (-2\Delta^2 + \Delta^4 + 6) \right. \\ & \left. + \frac{J^4}{368640} (15\Delta^2 + 36\Delta^4 + \Delta^5 + 40) \right) \end{aligned} \quad (3.40)$$

النتيجة (3.40) هي نتيجة جديدة حسب علمنا ويمكن القول أنها مرجع لأعمال أخرى في المستقبل.

خاتمة عامة

تطرقنا في هذه المذكرة الى كيفية تطبيق نظرية الاضطرابات المتعددة الأجسام على نموذج هيزنبرغ في بعدين. حيث قمنا بكتابة هاملتون هذا النظام في التكميم الثاني باستخدام مؤثرات الهدم والبناء. درسنا بواسطة نظرية الاضطرابات المتعددة الأجسام كيفية إيجاد مساهمة مخطط فينمان أو هيجنهولتز في الطاقة الحرة لنظام تفاعل عدة جسيمات متشابهة، كذلك قمنا باستخدام بعض الخوارزميات الأساسية في نظرية المخططات لإيجاد كل مساهمات الأشجار الممتدة والحلقات الأساسية والكلية في مخطط معين.

في مذكرتنا هذه قمنا بتطبيق عملي على نموذج هيزنبرغ في بعدين، حيث قمنا بحساب الطاقة الحرة والحساسية المغناطيسية 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 السادسة من عملية النشر، هذه النتائج جديدة ويمكن استعمالها كمرجع لدراسات مستقبلية.

المراجع

1. P. A. M. Dirac, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences.* **114**, 767 (1927).
2. G. C. Wick, *Phys. Rev.* 80, 268 (1950).
3. J. Paldus and H. C. Wong, *Comput. Phys. Commun.* 6, 1 (1973), 9 (1973).
4. N. M. Hugenholtz, *Physica* 23, 481 (1957).
5. P. Coleman, *Introduction to Many-Body Physics* (Cambridge University Press, UK, 2015).
6. J. W. Negele and H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems* (Addison-Wesley Publishing Company, New York, 1988).
7. V. Fock, *Zeitschrift für Physik*, Springer Science and Business Media LLC. **75**, 622–647 (1932).
8. A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (Dover Publications, Mineola, NY, 2003).
9. G. Rosensteel, E. Ihrig and L. E. H. Trainor, *Proc. R. Soc. A* 344, 387 (1975).
10. 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.
11. N. E. Gibbs, *J. Appl. Comput. Mech.* 16, 564 (1969).
12. J. T. Welch, *J. Appl. Comput. Mech.* 13, 205 (1966).
13. S. L. Hakimi, *J. Franklin Inst.* 5, 347359 (1961).
14. M. J. Smith, *Generating Spanning Trees*, MS Thesis, University of Victoria (1997).
15. J. Paldus and H. C. Wong, *Comput. Phys. Commun.* 6, 1 (1973), 9 (1973).
16. V. Kvasnicka, *Int. J. Quantum Chem.* 21, 1003 (1982).
17. T. Matsubara, *Prog. Theor. Phys.* 14, 351 (1955).
18. L. M. Maxwell and G. B. Reed, Subgraph identification-segs, *Circuits and Paths*, in 8th Midwest Symp. on Circuit Theory (Colorado State U., Fort Collins, Colorado, 1965), pp. 10-13.
19. M. A. Tag and M.E. Mansour, *Int. J. Mod. Phys. C.* **30**, 11 (2019).
20. M. A. Tag and S. Khène, *Int. J. Mod. Phys. C.* **28**, 9 (2017).