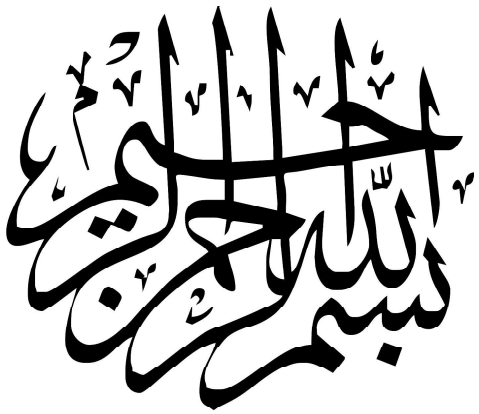
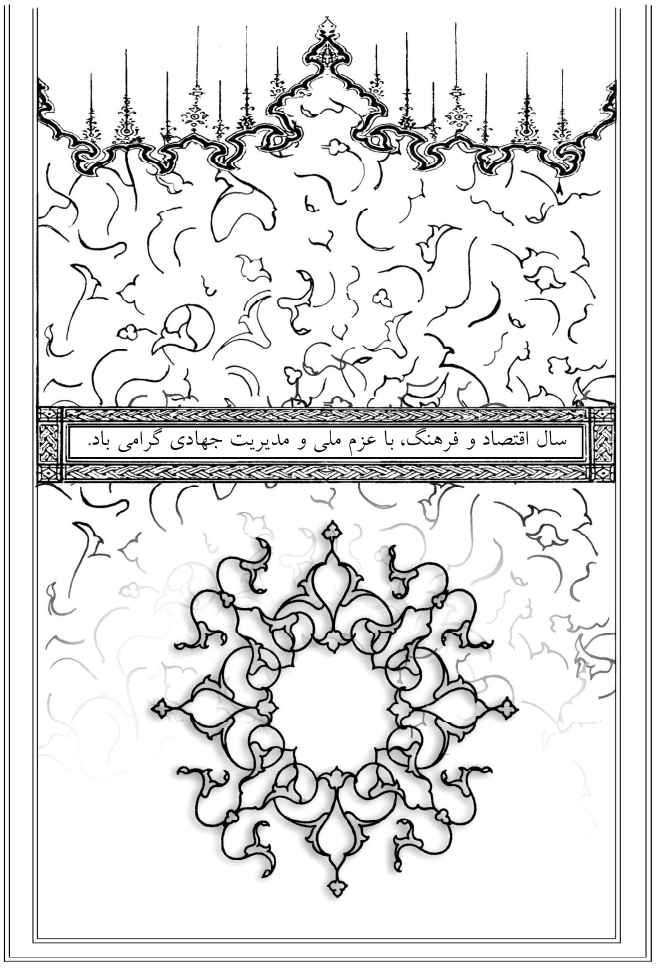

بسم الله الرحمن الرحيم


سال اقتصاد و فرهنگ، با عزم ملی و مدیریت جهادی گرامی باد.

تابع گرین و کاربردهای آن در تجزیه‌وتحلیل سیستم‌های با ابعاد نانو

نگارنده:

دکتر داود فتحی

عضو هیأت علمی دانشگاه تربیت مدرس

۱۳۹۳

سرشناسه: فتحی، داود، ۱۳٤۷-
عنوان و نام پدیدآور: تابع گرین و کاربردهای آن در تجزیه و تحلیل سیستم‌های با ابعاد نانو
مشخصات نشر: تهران: دانشگاه تربیت مدرس، مرکز نشر آثار علمی، ۱۳۹۳ .
مشخصات ظاهری: ١٦٥ ص.: مصور .؛ ۱۷×۲٤س‌م.
شابک: 978-600-7589-08-3
وضعیت فهرست نویسی: فیپای مختصر
یادداشت: فهرستنویسی کامل این اثر در نشانی: http://opac.nlai.ir قابل دسترسی است
شناسه افزوده: دانشگاه تربیت مدرس. مرکز نشر آثار علمی
شناسه افزوده:Tarbiat Modares University. TMU Press
شماره کتابشناسی ملی: ۳۷۸۰۸۷۱

تابع گرین و کاربردهای آن در تجزیه‌وتحلیل سیستم‌های با ابعاد نانو

نگارنده: دکتر داود فتحی

ویراستار ادبی و فنی: زهرا نابع

طراح جلد: ترنج

حروفچینی: سمیه زهانی

شماره انتشار: ١٨٦

شماره پیاپی: ۲۱۲

تاریخ انتشار: ۱۳۹۳

شمارگان

شابک: ۳-۰۸-۷۵۸۹-٦۰۰-۹۷۸ **شابک الکترونیکی:** ۳-۸۱-۸۳۷٦-٦۲۲-۹۷۸

ناشر: مرکز نشر آثار علمی دانشگاه تربیت مدرّس

نوبت چاپ: اول

کارشناس اجرایی: لیلا نجفی زمان

ناظر چاپ: مصطفی جانجانی

لیتوگرافی: ایران گرافیک

چاپ و صحافی: آفتاب

مرکز پخش: تقاطع بزرگراه‌های آل‌احمد و دکتر چمران،
دانشگاه تربیت مدرّس، مرکز نشر آثار علمی، صندوق پستی: ۳۱۸-۱٤۱۱۵
تلفن: ۸۲۸۸۳۰۹٦ **دورنگار:** ۸۲۸۸۳۰۳۲

صحت مطالب کتاب بر عهدهٔ نگارنده است.

تمام حقوق این اثر برای مرکز نشر آثار علمی دانشگاه تربیت مدرس محفوظ است و تکثیر کتاب به هر روشی بدون اجازه کتبی ناشر موجب پیگرد قانونی می شود.

تقدیم به

همسرم

و

دو دخترم

فهرست مطالب

فهرست نشانه‌ها ..... **ج**
پیشگفتار ..... **ط**
فصل اول: مقدمه **۱**
مراجع ٦

فصل دوم: تابع گرین: مفاهیم، مزایا،کابردها و انواع **۹**
۲-۱ هدایت الکترونی در سیستم‌های مزوسکوپیک ۱۰
۲-۲ تعریف و مزایای تابع گرین ۱۹
۲-۲-۱ تعریف تابع گرین ۱۹
۲-۲-۲ مزایای استفاده از تابع گرین ۲۰
۲-۳ حل معادله پواسن با استفاده از تابع گرین ۲۱
۲-٤ استفاده از تابع گرین برای بررسی هدایت در یک هادی ۲۳
۲-۵ توابع گرین پسرو و پیشرو ۲٤

فصل سوم: تابع گرین در سیستم‌های بس‌ذره‌ای **۳۱**
۳-۱ توابع گرین تک‌ذره‌ای در سیستم‌های بس‌ذره‌ای ۳۲
۳-۲ عملگرهای کوانتش دوم ۳۸
۳-۲-۱ عملگرهای خلق و فنای بوزونی و فرمیونی ۳۹
۳-۲-۲ تغییر پایه در کوانتش دوم ٤۲

۳-۳ تحول زمانی در کوانتش دوم ٤٢
۳-۳-۱ تصویر شرودینگر ٤٣
۳-۳-۲ تصویر هایزنبرگ ٤٤
۳-۳-۳ تصویر برهم‌کنش (بینابینی) ٤٤
۳-۳-٤ عملگرهای خلق و فنا وابسته به زمان ٤٧
۳-٤ عملگرهای میدان کوانتومی ٤٨
۳-٥ تابع گرین الکترون آزاد ٥٠
۳-٦ تابع گرین «زمان-موهومی» (ماتسوبارا) ٥٢
۳-٦-۱ تعریف تابع گرین ماتسوبارا ٥٥
۳-٦-۲ تبدیل فوریه تابع گرین ماتسوبارا ٥٦
۳-٦-۳ تابع گرین ماتسوبارای تک‌ذره‌ای ٥٧
۳-۷ تابع گرین چندذره‌ای ٥٩
مراجع ٦٠

فصل چهارم: تجزیه‌وتحلیل ترابرد الکترونی با استفاده از تابع گرین ٦۳
٤-۱ تجزیه‌وتحلیل سیستم مرکب از کانال و اتصال(ها) ٦٤
٤-۲ محاسبه تابع عبور الکترونی با استفاده از توابع گرین ۸۰
مراجع ۸۱
فصل پنجم: تجزیه‌وتحلیل ترابرد الکترونی در نانولوله کربنی با استفاده از تابع گرین ۸۳
٥-۱ اهمیت نانولوله کربنی ۸٥
٥-۲ ساختار انرژی مربوط به گرافین و نانولوله کربنی ۸۷
٥-۲-۱ ساختار و تغییرات انرژی مربوط به گرافین ۸۸
٥-۲-۲ ساختار و تغییرات انرژی مربوط به نانولوله کربنی ۹۷
٥-۳ محاسبه تابع عبور الکترونی در نانولوله کربنی با استفاده از تابع گرین ۱۰۰
٥-٤ ارائه مدل مداری برای نانولوله کربنی معیوب با استفاده از تابع گرین ۱۱۸
واژه‌نامه فارسی به انگلیسی ۱۲۷
واژه‌نامه انگلیسی به فارسی ۱۳٥
نمایه ۱٤۳

فهرست نشانه‌ها

اختلال در تصویر برهم‌کنش	$V_I(t)$
امپدانس مشخصه، امپدانس معادل خروجی	z_0
انرژی (سطح) فرمی	E_f
انرژی انتقال	t_0
بار الکترون	e
بردار پیچش (کایرالیته) نانولوله کربنی	$\vec{C}_h$
بردار موج	$\vec{k}$
بردارهای کوپلینگ بین کانال و اتصال‌ها	$\vec{q}_1; \vec{q}_2; \vec{q}_3; \vec{q}_4$
پتانسیل الکترواستاتیک	$\phi(\mathrm{r})$
تابع پله واحد	$\theta(\ldots)$
تابع تبدیل خروجی به ورودی	$H(s); H(i\omega); H(i\omega_0)$
تابع دلتا دیراک	$\delta(\ldots); \delta_{\mathrm{i\,j}}$
تابع عبور الکترونی (در حوزه انرژی)	$T(E)$
تابع عبور الکترونی در حوزه زمان	$T(t)$
تابع گرین	$G(x, x'); G(\mathrm{r}, \mathrm{r}')$
تابع گرین پسرو	$G^R(\ldots)$
تابع گرین پسرو الکترون آزاد در حوزه زمان	$G_0^R(\mathrm{k}\sigma, t - t')$
تابع گرین پسرو الکترون آزاد در حوزه فرکانس	$G_0^R(\mathrm{k}\sigma, \omega)$

د تابع گرین و کاربردهای آن در تجزیه‌وتحلیل سیستم‌های با ابعاد نانو

تابع گرین پسرو تک‌ذره‌ای (در یک سیستم بس‌ذره‌ای)	$G^R(\mathrm{r}\sigma t, \mathrm{r}'\sigma' t')$
تابع گرین پسرو مربوط به اتصال	$G_R; G_R(E)$
تابع گرین پسرو مربوط به کانال	$G; G(E)$
تابع گرین پیشرو	$G^A(\ldots)$
تابع گرین پیشرو الکترون آزاد در حوزه زمان	$G_0^A(\mathrm{k}\sigma, t - t')$
تابع گرین پیشرو الکترون آزاد در حوزه فرکانس	$G_0^A(\mathrm{k}\sigma, \omega)$
تابع گرین پیشرو تک‌ذره‌ای (در یک سیستم بس‌ذره‌ای)	$G^A(\mathrm{r}\sigma t, \mathrm{r}'\sigma' t')$
تابع گرین پیشرو مربوط به کانال (در حوزه انرژی)	$G^+(E)$
تابع گرین ترتیب‌یافته زمانی	$G^c(t, t')$
تابع گرین تک‌ذره‌ای بدون اختلال	$G_0(\mathrm{r}t, \mathrm{r}'t')$
تابع گرین تک‌ذره‌ای کامل (با اختلال)	$G(\mathrm{r}t, \mathrm{r}'t')$
تابع گرین چندذره‌ای (در یک سیستم بس‌ذره‌ای)	$G(x_1, x_2, \ldots x_n; x_1', x_2', \ldots x_n')$
تابع گرین زمان–موهومی (ماتسوبارا)	$\vartheta_{AB}(\tau, \tau')$
تابع گرین سطحی	g_R
تابع گرین ماتسوبارای بوزونی (بوزون‌های آزاد)	$\vartheta_{0,B}(v, \tau - \tau')$
تابع گرین ماتسوبارای بوزونی در حوزه فرکانس	$\vartheta_{0,B}(v, iq_n)$
تابع گرین ماتسوبارای تک‌ذره‌ای	$\vartheta(\mathrm{r}\sigma\tau, \mathrm{r}'\sigma'\tau')$
تابع گرین ماتسوبارای فرمیونی (فرمیون‌های آزاد)	$\vartheta_{0,F}(v, \tau - \tau')$
تابع گرین ماتسوبارای فرمیونی در حوزه فرکانس	$\vartheta_{0,F}(v, ik_n)$
تابع موج	$\psi(\mathrm{r}, t)$
تابع هم‌بستگی	$C_{AB}(t, t')$
تابع هم‌بستگی برحسب (در فضای) زمان موهومی	$C_{AB}(\tau, \tau')$
تبدیل فوریه تابع گرین ماتسوبارا	$\vartheta_{AB}(i\omega_n)$
تغییرات مقادیر ویژه انرژی	$\Delta\varepsilon_1(k); \Delta\varepsilon_2(k)$
تغییرات مقدار ویژه انرژی	$\Delta\varepsilon; \Delta\varepsilon(k)$
توابع کار مربوط به اتصال	$\{\Phi_R\}$
توابع کار مربوط به کانال	$\{\psi\}$
توابع گرین پسرو مربوط به اتصال‌ها	$G_1(E); G_2(E)$

توابع موج پراکنده شده در داخل اتصال	$\{\chi\}$
توزیع چگالی بار	$\rho_e(\mathrm{r})$
ثابت پلانک	h
جابجاگر بوزونی (پادجابجاگر فرمیونی)	$[\ldots,\ldots]_{B,F}$
جمع عناصر روی قطر اصلی ماتریس مربوطه	$\mathrm{Tr}[\ldots];\ \mathrm{Trace}[\ldots]$
چگالی حالات	$D(E)$
چگالی حالات در کانال	$D(d;E)$
چگالی حالات در هر نقطه $\vec{r}$	$D(\vec{r};E)$
حالت در تصویر برهم‌کنش	$\lvert\psi_I(t)\rangle$
حالت در تصویر شرودینگر	$\lvert\psi_S(t)\rangle$
حالت در تصویر هایزنبرگ	$\lvert\psi_H\rangle$
دانسیته (الکترون‌ها)	$n(\vec{r})$
زمان استراحت تکانه	τ_m
سرعت فرمی	v_f
عدد موج فرمی	k_f
عملگر ترتیب زمانی	$T\big(A(t)\,B(t)\big)$
عملگر ترتیب زمانی برحسب زمان موهومی	$T_\tau\big(A(\tau)\,B(\tau)\big)$
عملگر تکانه	$\hat{p}$
عملگر خلق بوزونی	$b^\dagger{}_{v_j}$
عملگر خلق در فضای تکانه	$a^\dagger{}_{\mathrm{k}}$
عملگر خلق فرمیونی	$c^\dagger{}_{v_j}$
عملگر خلق میدان کوانتومی	$\Psi^\dagger_{\sigma'}(\mathrm{r}'t')$
عملگر خلق وابسته به زمان در تصویر هایزنبرگ	$a^\dagger{}_v(t)$
عملگر در تصویر برهم‌کنش	$O_I(t)$
عملگر در تصویر شرودینگر	O_S
عملگر در تصویر هایزنبرگ	$O_H(t)$
عملگر فنا در فضای تکانه	a_{k}
عملگر فنا وابسته به زمان در تصویر هایزنبرگ	$a_v(t)$

عملگر فنای بوزونی	b_{v_j}
عملگر فنای فرمیونی	c_{v_j}
عملگر فنای میدان کوانتومی	$\Psi_\sigma(\mathrm{r}t)$
عملگر مختصات	$\hat{x}$
عملگر همیلتونی	H_{op}
فاصله بین دو اتم کربن مجاور در صفحه گرافین	a_0
فرکانس ماتسوبارا	ω_n
فرکانس ماتسوبارا برای بوزون‌های آزاد	iq_n
فرکانس ماتسوبارا برای فرمیون‌های آزاد	ik_n
فرکانس مختلط	s
قسمت موهومی (ماتریس) خود-انرژی	$\mathrm{Im}\sum(E)$
ماتریس پهن‌شدگی	$\Gamma;\Gamma(E)$
ماتریس تابع گرین پسرو مربوط به کانال در حوزه انرژی	$[G(E)]$
ماتریس تابع گرین پسرو مربوط به کانال در حوزه زمان	$[\widetilde{G}^R(t)]$
ماتریس تابع گرین پیشرو مربوط به کانال در حوزه انرژی	$[G^+(E)]$
ماتریس تابع گرین پیشرو مربوط به کانال در حوزه زمان	$[\widetilde{G}^A(t)]$
ماتریس خود-انرژی	$[\sum]$
ماتریس کوپلینگ بین کانال و اتصال	$[\tau]$
ماتریس همیلتونی (مربوط به کانال)	$[H]$
ماتریس همیلتونی شبکه گرافین	$[h(\vec{K})]$
ماتریس همیلتونی مربوط به اتصال	$[H_R]$
ماتریس‌های پهن‌شدگی مربوط به اتصال‌ها	$\Gamma_1(E);\Gamma_2(E)$
ماتریس‌های کوپلینگ بین کانال و اتصال‌ها	$[\tau_1];[\tau_2]$
متوسط حرارتی	$\langle\ldots\rangle$
مزدوج مختلط ماتریس‌های خود-انرژی مربوط به اتصال‌ها	$\sum^+{}_1(E);\sum^+{}_2(E)$
مزدوج مختلط ماتریس‌های کوپلینگ بین کانال و اتصال‌ها	$[\tau_1]^+;[\tau_2]^+$
مسافت آزاد متوسط	L_m
مشتق زمانی عملگر در تصویر هایزنبرگ	$\dot{O}_H(t)$

مقادیر ویژه انرژی مربوط به ناحیه معیوب نانولوله کربنی	$\varepsilon_1(k);\varepsilon_2(k)$
مقادیر ویژه انرژی مربوط به نانولوله کربنی	$\varepsilon_1'(k);\varepsilon_2'(k)$
مقدار ویژه انرژی	E
همیلتونی (با اختلال)	H
همیلتونی (بدون اختلال)	H_0
(تابع) احتمال عبور (الکترونی)	$P(k)$
(رابطه) تغییرات انرژی نانولوله کربنی	$E_{CNT};E_{CNT}(\vec{k})$
(شکل همیلتونی) ماتریس تابع طیفی	$[A(E)]$
(شکل همیلتونی) ماتریس دانسیته	$[\rho]$
(عناصر) ماتریس تابع طیفی	$A(\vec{r},\vec{r}';E)$
(عناصر) ماتریس دانسیته	$\rho(\vec{r},\vec{r}')$
(ماتریس) خود-انرژی	$\sum(E)$
(ماتریس‌های) خود-انرژی مربوط به اتصال‌ها	$\sum_1(E);\sum_2(E)$
(مقادیر) درصد تغییر در راستای طولی و پیچش نانولوله کربنی	$\Delta_x;\Delta_y$
(مؤلفه) بردار موج نانولوله کربنی در راستای پیچش نانولوله	$k_\perp$
(مؤلفه) بردار موج نانولوله کربنی در راستای طولی نانولوله	$k_\parallel$

پیشگفتار

استفاده از ابزارهای ریاضی در تجزیه‌وتحلیل و حل سیستم‌های فیزیکی، همواره مورد توجه محققان بوده است. معمولاً رفتار این‌گونه سیستم‌ها با معادلات دیفرانسیل بیان می‌شود که ممکن است غیرخطی باشد و بسته به شرایط مرزی و اولیه گوناگون، پاسخ‌های متفاوتی داشته باشند.

طی سالیان اخیر که اینجانب با دانشجویان و اساتید رشته‌های گوناگون مهندسی و علوم سروکار داشته و تدریس دروس گوناگون را در مقاطع مختلف کارشناسی، کارشناسی ارشد و دکتری برعهده داشته‌ام، نیاز جدی به تدوین کتابی درخصوص استفاده از روش‌های عددی و محاسباتی برای حل سیستم‌های فیزیکی مشهود و احساس شده است.

یکی از روش‌های مرسوم برای حل معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی (که شرایط مرزی و شرایط اولیه گوناگون دارند)، استفاده از تابع گرین[1] است.

علت اهتمام به نگارش کتابی در زمینه تابع گرین این است که در تحلیل رفتار سیستم‌های فیزیکی و پدیده‌هایی که در عمل ظاهر می‌شوند، فعل‌وانفعال و آثار متقابل بین اجزای سیستم از عوامل مهم و تأثیرگذار به‌شمار می‌روند که بدون درنظرگرفتن آن‌ها، نمی‌توان درک صحیح و کاملی از نتایج مشاهدات ارائه کرد. در این راستا، همان‌گونه‌که در فصل‌های مختلف کتاب حاضر پرداخته خواهد شد، توانایی روش تابع گرین در تحلیل رفتار و استخراج مشخصات سیستم‌های فیزیکی، با درنظرگرفتن برهم‌کنش بین ذرات گوناگون تشکیل‌دهنده سیستم، به اثبات رسیده است.

---

1. Green's function

ازآنجاکه کتاب جامع فارسی در زمینه مفاهیم و روش‌های مربوط به تابع گرین، به‌ویژه به‌گونه‌ای که برای دانشجویان رشته‌های مهندسی قابل استفاده باشد، وجود ندارد، نگارش کتابی در این زمینه بسیار ضروری به‌نظر می‌رسید. کتاب حاضر، نگاهی جامع در خصوص اهمیت و قابلیت‌های این ابزار مهم ریاضی ارائه می‌دهد و با روشی قابل فهم و روان که مبتنی بر مطالعات و توانمندی‌های نویسنده از یک‌سو و منابع معتبر علمی از سوی دیگر است، ذهن خواننده را در به‌کارگیری این ابزار سودمند برای حل مسائل فیزیکی آماده می‌سازد.

کتاب حاضر به موضوع تابع گرین و کاربردهای آن در تجزیه‌وتحلیل سیستم‌های با ابعاد کوچک می‌پردازد. این کتاب برای دانشجویان و همچنین اساتید رشته‌های گوناگون مهندسی و فیزیک، به‌ویژه آن‌هایی که به تحقیقات در زمینه نانوالکترونیک مشغول هستند، قابل استفاده خواهد بود. در نگارش کتاب سعی شده است مطالب به‌گونه‌ای نسبتاً ساده و روان بیان شود تا خواننده بدون نیاز به مفاهیم پیچیده فیزیک و ریاضیات پیشرفته بتواند از آن بهره‌مند شود. درعین‌حال، چون برای درک بهتر و دستیابی به اهداف موردنظر نویسنده، ممکن است به دانستن پیش‌نیازهایی از اصول مکانیک کوانتوم و مفاهیم فیزیکی نسبتاً پیشرفته نیاز باشد، در بخش‌های مختلف کتاب مانند فصل‌های ۲، ۳ و ٤، اطلاعات ضروری در این‌باره ارائه شده است.

توجه به این نکته را ضروری می‌دانم که سطح مطالب کتاب به‌گونه‌ای تنظیم شده است تا از یک‌سو خیلی تخصصی نباشد و برای تمامی افراد علاقه‌مند قابل استفاده باشد، و از سوی دیگر پیش‌نیازهای لازم را برای کسانی فراهم کند که می‌خواهند تحقیقات تخصصی را در این زمینه آغاز کنند. بدین‌منظور در فصل ۵ کتاب، با استفاده از آموخته‌های حاصل از فصل‌های قبل، تجزیه‌وتحلیل ترابرد الکترونی در یک نانولوله کربنی با استفاده از روش تابع گرین بحث و بررسی شده است. علت انتخاب نانولوله کربنی برای پیاده‌سازی مطالب یادگرفته‌شده، این بوده است که عمومی‌ترین ساختار مورداستفاده در نانوفناوری، به‌ویژه نانوالکترونیک، به‌شمار می‌رود.

دکتر داود فتحی

زمستان ۱۳۹۳