وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
دانشگاه تربیت معلّم آذربایجان
دانشکده علوم پایه
گروه فیزیک

پایان نامه مقطع کارشناسی ارشد

رشته فیزیک گرایش حالت جامد

عنوان:

ترابرد کوانتومی در نانوحلقه‌های گرافن

استاد راهنما:
دکتر آرش فیروزنیا

پژوهشگر:
سیمین مهنیا

بهمن ماه ۱۳۹۰

تبریز- ایران

سپاس‌گزاری

پروردگارا به حرمت آن نام که تو آنی و به حرمت آن صفات که چنانی، یاری‌ام کن که عمر به نادانی به آخر نرسانم، بیاموزم و بیاموزانم.

بر خود لازم می‌دانم که قدردان زحمات کسانی باشم که به نوعی در پیشبرد این پایان‌نامه مرا یاری نموده‌اند.

از استاد گرانقدرم جناب آقای دکتر فیروزنیا که راهنمایی‌های ارزنده‌ی ایشان راه‌گشای تمام مراحل انجام این پروژه بود کمال تقدیر و تشکر را دارم.

گرچه این پایان‌نامه "اثری" کوچک است خیلی کوچک و شاید هیچ!

اما به عهد قدیم و رسم ادب تقدیم می‌کنم به:

پدر و مادر عزیزم

انجام این پروژه جز در سایه‌ی حمایت‌های پدری دلسوز و مادری مهربان امکان‌پذیر نبوده، آنان که همواره با تشویق‌هایشان مرا به ادامه‌ی کار و غلبه بر سختی‌ها دلگرم می‌کردند. بر دست‌های پدر و مادر نازنینم بوسه می‌زنم و امیدوارم فرزند صالحی برای آن‌ها باشم. از خواهر و برادر عزیزم که دلسوزانه پیشرفت کاری مرا جویا می‌شدند و مشوقم بودند نیز تشکر می‌کنم. در نهایت از همه‌ی دوستانم که در این مدت همواره از کمک‌های بی‌دریغ‌شان بهره‌مند گشتم کمال تشکر را دارم.

امید آنکه این اقدام بسیار ناچیز که تلاشی در راستای اعتلای جامعه‌ی علمی این آب و خاک است، مورد استقبال اساتید، دانش‌پژوهان و علاقه‌مندان قرار گرفته و رضایت خداوند سبحان را فراهم آورد.

سیمین مهنیا ۱۳۹۰/ ۱۱

تبریز– ایران

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

چکیده..... vi
مقدمه..... vii

فصل اول : تابع گرین غیرتعادلی **۱**

مقدمه..... ۲
۱-۱ تابع عبور و ماتریس پراکندگی..... ۲
۱-۲ مفاهیم پایه‌ای در مورد تابع گرین..... ٤
۱-۳ توابع گرین تقدّمی و تأخیری..... ٥
۱-٤ مدل تنگ بست قوی (روش تفاضلات محدود)..... ۱۰
۱-٤-۱ نمایش ماتریسی عملگر هامیلتونین در یک بعد..... ۱۰
۱-٤-۱ نمایش ماتریسی عملگر هامیلتونین در دو بعد..... ۱۲
۱-٥ خود انرژی..... ۱۳
۱-٦ تابع گرین غیر تعادلی..... ۱٦
۱-٦-۱ توابع همبستگی و پراکندگی..... ۱٦
۱-۱-٦-۱ تابع همبستگی الکترون (G^n یا $-iG^<$)..... ۱۷
۱-۱-٦-۲ تابع همبستگی حفره (G^p یا $+iG^>$)..... ۱۸
۱-۱-٦-۳ توابع پراکندگی..... ۱۹
۱-٦-۲ نکته ای در مورد نماد گذاری‌ها..... ۱۹

۱-٦-۳ تابع طیفی A ۲۰
۱-٦-٤ معادله‌ی جنبشی ۲۱
۱-٦-٥ حل تعادلی ۲۳
۱-٦-٦ رابطه‌ی بین تابع گرین و ضرایب گذار ۲٤

فصل دوم : ترابرد همدوس ۲٥

مقدمه ۲٦
۲-۱ مشخصه‌های طولی در ترابرد همدوس ۲٦
۲-۲ رسانندگی در سیستم‌های مزوسکوپیک ۲۷
۲-۲-۱ تابع توزیع فرمی ۲۸
۲-۲-۲ چه چیزی باعث شارش الکترون‌ها می‌شود؟ ۲۸
۲-۳ مدل تک ترازی ۲۹
۲-۳-۱ معادلات آهنگ در مدل تک ترازی ۲۹
۲-۳-۲ جریان در مدل تک ترازی ۳۰
۲-٤ کوانتیدگیِ رسانش ۳۱
۲-٥ رسانندگی کوانتومی در رساناهای چند ترازه ۳٤
۲-٦ سیستم تک اتصالی ۳٥
۲-٦-۱ چگالی موضعی حالات در سیستم تک اتصالی ۳۸
۲-٦-۲ جریان‌های ورودی و خروجی در سیستم تک اتصالی ٤۱
۲-۷ سیستم دو اتصالی ٤۳

۲-۷-۱ ماتریس چگالی در سیستم دو اتصالی..... ٤٤
۲-۷-۲ جریان ورودی و خروجی در سیستم دو اتصالی..... ٤٦
۲-۸ فرمالیسم عبور..... ٤٨
۲-۸-۱ فرمول لاندائو..... ٤٩
۲-۸-۲ فرمول لاندائو در دمای غیر صفر..... ٥٢
۲-۸-۳ فرمول بوتیکر..... ٥٥
۲-۹ محاسبه‌ی جریان در سیستم‌های چند ترمیناله..... ٥٦

فصل سوم : گرافین **٥٩**

مقدمه..... ٦٠
۳-۱ انواع ساختارهای کربنی..... ٦٠
۳-۲ تاریخچه‌ی گرافین..... ٦٢
۳-۳ روش‌های جداسازی گرافینِ تک لایه..... ٦٤
۳-٤ ساختار شبکه‌ی منظم..... ٦٦
۳-٤-۱ اتم‌های کربن..... ٦٦
۳-٤-۲ شبکه‌ی لانه زنبوری..... ٦٧
۳-٥ ساختار نوار انرژی در گرافین..... ٦٨
۳-٥-۱ مدل تنگ‌بست قوی..... ٦٩
۳-٥-۲ حد پایین انرژی: الکترون‌های دیراک..... ٧١

۳-٦ خواص جالبی از گرافین..... ۷٤
۳-۷ کاربردهای گرافین..... ۷٦
۳-۸ مشکلات و معایب گرافین..... ۷۷
۳-۹ روش‌های پیشنهادی برای ایجاد گاف انرژی در گرافین..... ۷۷
۳-۱۰ نانو کانال‌های گرافین..... ۸۰
۳-۱۰-۱ هندسه‌ی نانوکانال‌های آرمیچر و زیگزاگ در گرافین..... ۸۱
۳-۱۰-۲ ساختار نوار انرژی در نانوکانال‌های آرمیچر و زیگزاگ..... ۸۲

فصل چهارم : محاسبه‌ی ترابرد کوانتومی در نانوحلقه‌ی گرافینی با کانال‌های آرمیچر و زیگزاگ ۸۳

مقدمه..... ۸٤
٤-۱ معرفی سیستم گرافینی..... ۸٤
٤-۲ کاربرد تابع گرین در شبکه‌ی گرافین..... ۸٦
٤-۲-۱ روش تابع گرین شبکه‌ای..... ۸٦
٤-۲-۲ خود انرژی در کانال‌های نیمه بی‌نهایت..... ۸۷
٤-۳ محاسبات تئوری..... ۸۹
٤-٤ محاسبات عددی..... ۹۱
٤-٤-۱ نمودارهای جریان بر حسب ولتاژ بایاسی اعمالی به کانال‌ها..... ۹۱
٤-٤-۲ نمودار چگالی حالات..... ۹٤
٤-٤-۳ تغییرات جریان بر حسب میدان مغناطیسی خارجی..... ۹٦

٤-٥ پیشنهادات..... ۹۹

پیوست..... ۱۰۰

منابع و مراجع..... ۱۱۰

چکیده

در این پایان نامه، ویژگی‌های ترابرد کوانتومی غیرتعادلی در یک سیستم مزوسکوپیک دوبعدی شامل یک نانو حلقه‌ی گرافینی در حضور میدان مغناطیسی خارجی با کانال‌های زیگزاگ وآرمیچر، با استفاده از روش تابع گرین غیرتعادلی مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات در ولتاژهای بایاسی، دما و میدان‌های مغناطیسی مختلف انجام یافته و جریان و چگالی حامل‌ها مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج به دست آمده نشان دهنده‌ی تاثیر بسیار اندک میدان مغناطیسی در جریان عبوری از این نانوسیستم می‌باشد. همچنین، در سیستمی با دو کانال آرمیچر تابعیت نوسانی جریان بر حسب ولتاژ اعمالی و در سیستمی با دو کانال زیگزاگ حالت افزایشی جریان بر حسب ولتاژ اعمالی، در پاره‌ای از مقادیر خاص دما و میدان مغناطیسی قابل مشاهده است.

واژه‌های کلیدی : ترابرد کوانتومی؛ سیستم‌های مزوسکوپیک؛ گرافین؛ تابع گرین غیرتعادلی؛ نانو حلقه.

مقدمه

کربن ماده‌ی اولیه‌ی زندگی و پایه‌ای برای شیمیِ تمام موجودات زنده محسوب می شود. تنوع و انعطاف در پیوندهای کربن باعث شده تا تعداد زیادی از ساختارهای مختلف با خصوصیات فیزیکی کاملاً متفاوتی از این عنصر در طبیعت وجود داشته باشد. بُعد این ساختارهای متنوع به بارز بودن تفاوت‌های آنها کمک کرده است. یکی از این ساختارها که به صورت یک لایه از اتم‌های کربن در یک شبکه‌ی شش ضلعی منتظم آرایش یافته، گرافین است. تا چندی پیش باور فیزیکدانان بر آن بود که نمی‌توان یک ساختار کاملاً دو بعدی پایدار (یک تک لایه از اتم‌ها) ساخت و تا آن زمان سیستم هایی که دو بعدی نامیده می‌شدند در واقع به طور تقریبی دو بعدی بودند. در سال ۲۰۰٤ پژوهشگران دانشگاه منچستر به سرپرستی گایم[۱] و نووسلوف[۲] توانستند این ماده را در مقیاس قابل قبول آزمایشگاهی و به صورت پایدار تولید کنند. امروزه مواد و ساختارهای جدید در تکنولوژی برای برآوردِ نیازهای کوچک شدن ابعاد مورد توجه خاصی قرار گرفته اند. باتوجه به زمینه‌های کاربردی گسترده‌ای که نانوفیزیک ایجاد کرده است، گرافین به عنوان یک ساختار کم‌بعد اهمیت ویژه‌ای یافته است و در سال‌های اخیر موقعیت‌های تازه‌ای را در زمینه پژوهش‌ها و کاربردهای عملی مرتبط با فناوری نانو فراهم نموده است.

با تولید گرافین، توجه جمع کثیری از محققان نظری و تجربی به سوی این ماده جلب شد. فیزیکدانان خیلی زود متوجه شدند که معادله‌ی حاکم بر رفتار شبه ذرات درون گرافین با تقریب بسیار خوبی معادله نسبیتی دیراک است. گرافین به دلیل طیف برانگیختگی‌های دیراک گونه‌اش، در واقع آزمایشگاهی برای بررسی پیش‌بینی‌های کوانتوم نسبیتی و الکترودینامیک کوانتومی می‌باشد.

---

[۱] Geim
[۲] Novesolov

در پایان نامه‌ی حاضر، انتقال الکترون در یک نانو حلقه‌ی گرافین تحت میدان مغناطیسی خارجی، که به کانال‌هایی از همان جنس متصل می‌باشد، بررسی شده است. در این پایان نامه با صرف‌نظر کردن از برهمکنش‌های الکترون‌ها در سیستم، روش تابع گرین غیرتعادلی به‌عنوان ابزاری قدرتمند در مدل سازی اثرات کوانتومی مورد استفاده واقع شده است.

پایان نامه‌ی حاضر، از چهار فصل تشکیل شده است.

در فصل اول، با معرفی توابع گرین و خودانرژی‌های سیستم‌های مزوسکوپیک، روش تابع گرین غیرتعادلی را شرح خواهیم داد.

در فصل دوم، ابتدا سیستم‌های همدوس معرفی شده‌اند و مفاهیم مربوط به شارش الکترون در این سیستم‌ها ارائه شده است. در ادامه، محاسبه‌ی ترابرد با استفاده از فرمالیسم لاندائو- بوتیکر توضیح داده شده است و روابطی کاربردی برای فرمالیسم عبور بدست خواهند آمد.

در فصل سوم، مقدمه‌ای را در مورد ساختار دوبعدی گرافین و روش‌های جداسازی تک لایه‌ی گرافینی ارائه کرده‌ایم و در ادامه در مورد ساختار نوار انرژی در گرافین و نانوکانال‌های گرافینی بحث کرده‌ایم، محاسبه‌ی هامیلتونین در شبکه‌ی گرافینی با استفاده از تقریب تنگ بست قوی توضیح داده شده است.

در فصل چهارم، ترابرد کوانتومی را در یک سیستم مزوسکوپیک دوبعدی شامل یک نانو حلقه‌ی گرافین در حضور میدان مغناطیسی خارجی با کانال‌های زیگزاگ وآرمیچر، با استفاده از روش تابع گرین غیرتعادلی مورد بررسی قرار داده‌ایم. محاسبات در ولتاژهای بایاسی و میدان‌های مغناطیسی مختلف انجام یافته و جریان و چگالی حامل‌ها مورد بررسی قرار گرفته است و در نهایت ترابرد را در کانال‌هایی با لبه‌های زیگزاک و آرمیچر مقایسه کرده‌ایم.

فصل اول

تابع گرین غیر تعادلی

مقدمه

هنگام بررسی ترابرد الکترونی در سیستم‌های مزوسکوپیک، یکی از اهداف اساسی محاسبه‌ی تابع عبور بر حسب انرژی $\bar{T}(E)$ می‌باشد. در این فصل برای محاسبه‌ی تابع عبور دو روش را معرفی کرده‌ایم (۱)روش ماتریس پراکندگی (۲)روش تابع گرین.

در بخش اول این فصل، توضیحات مختصری در مورد روش ماتریس پراکندگی ارائه شده است و در بخش دوم، روش تابع گرین تعادلی و غیرتعادلی بطور کامل توضیح داده شده است.

۱-۱ تابع عبور و ماتریس پراکندگی

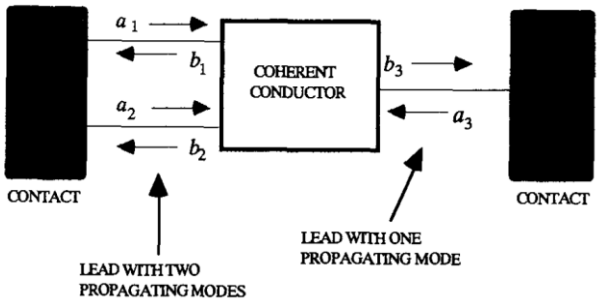
در این بخش درباره‌ی رابطه‌ی بین تابع عبور و ماتریس پراکندگی (S-ماتریس[۳]) در سیستم‌های همدوس به اختصار توضیح خواهیم داد. معمولاً هنگامی که با رسانای بزرگی سروکار داریم، بهترین روش این است که سیستم را به بخش‌های فرضی مختلفی تقسیم کنیم و برای هر بخش ماتریس پراکندگی جداگانه‌ای تعریف کنیم. ماتریس‌های پراکندگی در بخش‌های مختلفی که کاملا همدوس، کاملا غیرهمدوس و نیمه‌همدوس هستند، باهم ترکیب می‌شوند. این یک روش ساده برای محاسبه‌ی تابع عبور در رساناهای نیمه‌همدوس می‌باشد. قابل ذکر است که، روش S-ماتریس، فقط درصورتی که الکترون‌ها از داخل سیستم بطور همدوس عبور کرده باشند، کاربرد دارد.

یک سیستم رسانای همدوس در هر انرژی می‌تواند با یک S-ماتریس مشخص شود به‌طوری‌که این ماتریس دامنه‌ی امواج خروجی را به دامنه‌ی امواج ورودی از کانال‌های مختلف، به‌هم ربط می‌دهد. به عنوان مثال، اگر در کانال‌ها سه مد عرضی وجود داشته باشد، همان‌گونه که در شکل (۱-۱) نشان داده شده است، S-ماتریس متناظر با آن را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} \qquad (۱-۱)$$

اگر تعداد مدهای عرضی در کانال p اُم در هر انرژیِ داده شده‌ی E را با $M_P(E)$ نشان دهیم و سیستمی با p کانال داشته باشیم، تعداد کل مدها برابر با مجموع تعداد مدهای p کانال می‌باشد:

[۳] Scattering matrix



شکل۱-۱ یک سیستم همدوس در انرژیE، می‌تواند توسط ماتریس پراکندگی مشخص شود. ماتریس پراکندگی، دامنه‌های مدهای خروجی (b) را به دامنه‌های مدهای ورودی (a) مربوط می‌کند.

$$M_T(E) = \sum_p M_P(E) \qquad (۲-۱)$$

ابعاد ماتریس پراکندگی (S-ماتریس) $M_T \times M_T$ می‌باشد. ماتریس پراکندگی را می‌توان با شروع از معادله‌ی شرودینگر محاسبه کرد:

$$\left[E_s + \frac{(i\hbar\nabla + eA)^2}{2m} + U(x,y)\right]\Psi(x,y) = E\,\Psi(x,y) \qquad (۳-۱)$$

به‌طوریکه $\boldsymbol{A}$ پتانسیل برداری و $U(x,y)$ انرژی پتانسیل الکترون‌های داخل رسانا می‌باشد و E_s برابر است با مجموع انرژی مبدأ E_c (انرژی نوار رسانش) و انرژی پایین‌ترین زیرتراز ε_1 (که در دماها و چگالی‌های الکترونی پایین، تنها تراز اشغال شده می‌باشد).

$$E_s = E_c + \varepsilon_1 \qquad (٤-۱)$$

احتمال عبور از مد m اُم به مد n اُم T_{nm} با محاسبه‌ی مقدار مربعی عنصر متناظر، از ماتریس پراکندگی بدست می‌آید:

$$T_{n\leftarrow m} = |s_{n\leftarrow m}|^2 \qquad (٥-۱)$$

هدف ما محاسبه‌ی تابع عبور $\bar{T}_{pq}(E)$ می باشد که از جمع احتمالات عبور T_{nm}، روی تمام m مد در کانال q و تمام n مد در کانال p بدست می‌آید:

$$\bar{T}_{p\leftarrow q} = \sum_{m\in q}\sum_{n\in p} T_{n\leftarrow m} \qquad (٦-۱)$$

۱-۲ مفاهیم پایه‌ای در مورد تابع گرین

تابع گرین در فیزیک مفهومی بسیار قوی دارد. در این فصل، از این مفهوم به عنوان ابزاری ریاضی برای محاسبه‌ی ضرایب گذار استفاده می‌کنیم. از این روش برای محاسبه‌ی خواص ترابردی در سیستم‌های مزوسکوپیک گرافینی استفاده خواهیم کرد. ابتدا با تعریف پایه‌ای تابع گرین شروع خواهیم کرد. بخش اصلی در این بحث را، به روش تابع گرین شبکه‌ای منظم اختصاص داده‌ایم که روشی مناسب برای محاسبه‌ی عددی تابع گرین به ما می دهد.

با استفاده از روش ماتریس پراکندگی می‌توان پاسخ یک کانال به برانگیختگی[٤] در کانال دیگر را بدست آورد. تابع گرین مفهوم قوی‌تری دارد و عکس‌العمل در هر نقطه را (داخل یا خارج از رسانا) که ناشی از برانگیختگی در هر نقطه‌ی دیگر باشد، بدست می‌دهد. در ترابردهای بدون برهمکنش، برانگیختگی‌ها فقط ناشی از امواج فرودی از کانال‌ها می‌باشند. برای چنین برانگیختگی‌هایی، تابع گرین و S-ماتریس مفاهیم نزدیکی هستند و روشی که انتخاب می‌کنیم بیشتر سلیقه‌ای می‌باشد. قدرت اصلی تابع گرین هنگامی آشکار می‌شود که بخواهیم اثرات برهمکنش‌ها (مانند الکترون- الکترون یا الکترون- فونون) را نیز در نظر بگیریم. چنین برهمکنش‌هایی منجر به تحریک‌هایی در رسانا می‌شوند، که با روش ساده‌ی S-ماتریس نمی‌توان توضیح داد.

در اینجا برخی از خواص تابع گرین را که در بحث‌ها نیاز خواهیم داشت بطور خلاصه بیان می‌کنیم. یکی از علاقه‌مندی‌های عمومی در مکانیک کوانتومی، حل معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان است.

$$[\mathrm{E}-\mathrm{H}]\,\Psi(\mathrm{r})=0 \qquad (۷-۱)$$

که H هامیلتونی توصیف کننده در سیستم‌مان می‌باشد. تابع گرین متناظر با H به‌صورت حل معادله‌ی دیفرانسیلی زیر است:

$$[E-H]G(\mathrm{r},\mathrm{r}',E)=\delta(\mathrm{r}-\mathrm{r}') \qquad (۸-۱)$$

در بسیاری از موارد، نمادگذاری با عملگر دیراک[٥] کار را راحت‌تر می‌کند. در این نمادگذاری، معادله ی دیفرانسیلی(۱-۸) بدین صورت نوشته می‌شود:

$$(E-H)G(E)=1 \qquad (۹-۱)$$

[٤] excitation
[٥] Dirac

بطوری‌که H عملگر هامیلتونی می‌باشد (انرژی E_s در پتانسیل $U(r)$ احتساب شده است):

$$H \equiv \frac{(i\hbar\nabla+eA)^2}{2m} + U(r) \qquad (۱۰-۱)$$

اگر E ویژه مقدار عملگر هامیلتونین نباشد، می‌توان تابع گرین را بصورت معکوس یک عملگر دیفرانسیلی تعریف کرد و عملگر تابع گرین توسط رابطه‌ی زیر داده می‌شود:

$$G = [E - H]^{-1} \qquad (۱۱-۱)$$

در ادامه از علامتG برای تابع گرین و عملگر تابع گرین استفاده خواهیم کرد. رابطه‌ی بین این دو، توسط عبارت زیر داده می شود:

$$G(\mathrm{r},\mathrm{r}', E) = <\mathrm{r}|G(E)|\mathrm{r}'> \qquad (۱۲-۱)$$

۱-۳ توابع گرین تقدّمی و تأخیری

تا هنگامی که شرایط مرزی مشخصی را تعیین نکرده باشیم، معکوس عملگر دیفرانسیلی تک مقدار نمی‌باشد. با توجه به دو شرط مرزی متفاوت، معمولا دو تابع گرین متفاوت (Retarded, Advanced) تعریف می‌شوند. در ادامه با مطرح کردن مثال ساده‌ای این تفاوت را نشان خواهیم داد.

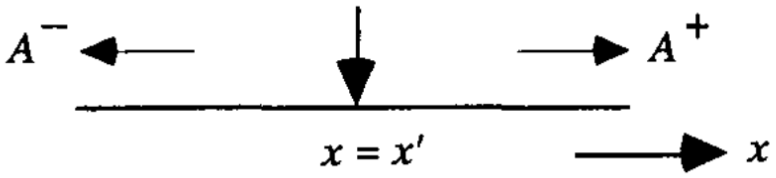
هامیلتونین ذره‌ای را در نظر می‌گیریم که در یک سیم تک بعدی با انرژی پتانسیل ثابت $U(r) = U_0$ و بردار پتانسیل $\mathrm{A} = 0$ حرکت می‌کند. با استفاده از معادلات (۱-۱۰) و (۱-۱۱) می‌توان نوشت:

$$G = [E - U_0 + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}]^{-1} \qquad (۱-۱۳ \text{ الف})$$

$$\Rightarrow [E - U_0 + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}]^{-1} G(x,x') = \delta(x - x') \qquad (۱-۱۳ \text{ ب})$$

این رابطه، به غیر از جمله‌ی مربوط به منبع، $\delta(x - x')$ در سمت راست رابطه‌ی فوق، شبیه معادله‌ی شرودینگر است:

$$[E - U_0 + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}]^{-1} \Psi(x) = 0$$



شکل ۱-۲ تابع گرین Retarded در یک سیم یک بعدی بی‌نهایت.

می‌توان تابع گرین $G(x,x')$، را به عنوان تابع موجی در مکان x ، که ناشی از یک برانگیختگی در مکان x' می‌باشد، دانست. از نظر فیزیکی انتظار داریم چنین برانگیختگی‌ای منجر به دو موج با دامنه های A^- و A^+ شود که از نقطه‌ی برانگیختگی دور می‌شوند (شکل ۱-۲).

این دو موج خروجی از منبع را می‌توان به این صورت نوشت:

$$G(x,x') = A^+ \exp[ik(x-x')] \quad , x > x' \qquad (۱-۱۴ \text{ الف})$$

$$G(x,x') = A^- \exp[-ik(x-x')] \quad , x < x' \qquad (۱-۱۴ \text{ ب})$$

بطوریکه $k = [2m(E-U_0)]^{1/2}/\hbar$. صرف نظر از اینکه A^+ و A^- چه مقداری داشته باشند، این روابط معادله‌ی (۱-۱۳ ب) را در تمام نقاط، بجز $x = x'$ ارضا می‌کنند. برای برقرار بودن رابطه در $x = x'$ ، باید تابع گرین در این نقطه پیوسته باشد:

$$[G(x,x')]_{x=x'+} = [G(x,x')]_{x=x'-}$$

$$\rightarrow A^+ = A^- \qquad (۱-۱۵)$$

در حالی‌که مشتق اول تابع گرین باید ناپیوسته باشد:

$$\left[\frac{\partial G(x,x')}{\partial x}\right]_{x=x'+} - \left[\frac{\partial G(x,x')}{\partial x}\right]_{x=x'-} = \frac{2m}{\hbar^2}$$

$$\rightarrow ik[A^+ + A^-] = \frac{2m}{\hbar^2} \qquad (۱-۱۶)$$

بنابراین:

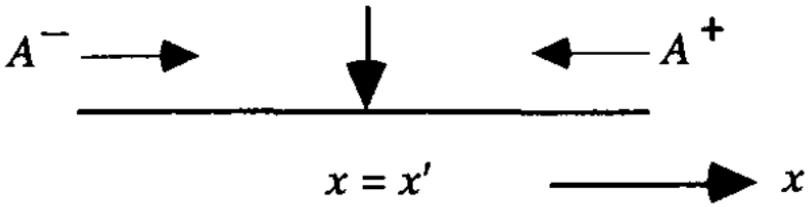
$$A^+ = A^- = -\frac{i}{\hbar\nu} \quad ; \quad \nu \equiv \frac{\hbar k}{m} \qquad (۱-۱۷)$$

و تابع گرین به این صورت بدست می‌آید:

$$G(x,x') = +\frac{i}{\hbar v}\exp\left[-ik\,|x - x'|\right] \qquad (۱-۱۸ \text{ الف})$$

جواب دیگری که در این حالت معادله‌ی (۱-۱۳) را برآورده می‌کند بدین صورت می‌باشد:

$$G(x,x') = +\frac{i}{\hbar v}\exp\left[+ik\,|x - x'|\right] \qquad (۱-۱۸ \text{ ب})$$



شکل ۱-۳ تابع گرین Advanced در یک سیم یک بعدی بی‌نهایت.

این جواب مربوط به موج‌های ورودی به نقطه‌ی منبع می‌باشد. موج‌هایی که در نقطه‌ی برانگیختگی (شکل ۱-۳) ناپدید می‌شوند، برخلاف موج‌هایی هستند که از نقطه‌ی برانگیختگی سرچشمه می‌گیرند. این جواب‌ها به ترتیب توابع گرین تأخیری یا Retarded (G^{R}) و تقدّمی یا Advanced (G^{A}) می باشند.

$$G^{R}(x\,,x') = +\frac{i}{\hbar v}\exp\left[-ik\,|x - x'|\right] \qquad (۱-۱۹ \text{ الف})$$

$$G^{A}(x\,,x') = +\frac{i}{\hbar v}\exp\left[+ik\,|x - x'|\right] \qquad (۱-۱۹ \text{ ب})$$

به‌طوری‌که:

$$K \equiv \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar} \;\; ; \;\; v \equiv \frac{\hbar k}{m} \qquad (۱-۱۹ \text{ ج})$$

هر دوی این جواب‌ها مربوط به معادله‌ی یکسانی می‌باشند، اما مطابق با شرایط مرزی متفاوتی هستند، تابع Retarded مربوط به امواج خروجی می‌باشد در حالی‌که تابع Advanced مربوط به امواج ورودی (از دور به سمت منبع) می‌باشد[۱].

مقدار بی‌نهایت کوچک η

روشی دیگر برای اعمال مستقیم شرایط مرزی در معادله، اضافه کردن یک قسمت موهومی بی‌نهایت کوچک در انرژی می‌باشد. برای تابع Retarded بجای معادله‌ی (۲-۱۳ ب) می‌توان نوشت ($\eta > 0$):

$$\left(\mathrm{E} - \mathrm{U}_0 + \frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{\partial^2}{\partial \mathrm{x}^2} + \mathrm{i}\eta\right) G^{\mathrm{R}}(\mathrm{x},\mathrm{x}') = \delta(\mathrm{x}-\mathrm{x}') \qquad (۲۰\text{-}۱)$$

با احتساب قسمت موهومی کوچک در انرژی، مولفه‌ی موهومی کوچکی در عدد موج وارد می‌شود:

$$\mathrm{k}' = \frac{\sqrt{2\mathrm{m}(\mathrm{E}+\mathrm{i}\eta-\mathrm{U}_0)}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2\mathrm{m}(\mathrm{E}-\mathrm{U}_0)}}{\hbar}\sqrt{1+\frac{\mathrm{i}\eta}{\mathrm{E}-\mathrm{U}_0}}$$

$$\approx \frac{\sqrt{2\mathrm{m}(\mathrm{E}-\mathrm{U}_0)}}{\hbar}\left[1+\frac{\mathrm{i}\eta}{\mathrm{E}-\mathrm{U}_0}\right] \equiv \mathrm{k}\,(1+\mathrm{i}\eta) \qquad (۲۱\text{-}۱)$$

این قسمت موهومی باعث می‌شود با دور شدن از نقطه‌ی برانگیختگی، تابع Advanced بطور نامحدودی افزایش داشته باشد. در این حالت تنها جواب قابل‌قبول و کران‌دار تابع Retarded است. به همین ترتیب تابع Advanced تنها جواب رابطه‌ی زیر می‌باشد ($\eta > 0$):

$$(\mathrm{E}-\mathrm{U}_0 + \frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{\partial^2}{\partial \mathrm{x}^2} - \mathrm{i}\eta)G^{\mathrm{A}}(\mathrm{x},\mathrm{x}') = \delta(\mathrm{x}-\mathrm{x}') \qquad (۲۲\text{-}۱)$$

در حالت کلی توابع گرین Retarded و Advanced بدین صورت تعریف می‌شوند:

$$G^{\mathrm{R}} = [\mathrm{E}-\mathrm{H}+\mathrm{i}\eta]^{-1} \quad (\eta \to 0^+) \qquad (۲۳\text{-}۱ \text{ الف})$$

$$G^{\mathrm{A}} = [\mathrm{E}-\mathrm{H}-\mathrm{i}\eta]^{-1} \quad (\eta \to 0^+) \qquad (۲۳\text{-}۱ \text{ ب})$$

متذکر می‌شویم که حتی اگر E یک ویژه مقدار برای H باشد، این رابطه برقرار است.

بسط ویژه توابع

در اینجا نتیجه‌ای را بدست می‌آوریم که بعضی مواقع در محاسبه‌ی تابع گرین استفاده می‌شود. پایه‌ی کار بدین‌صورت می‌باشد که، اگر ویژه توابع عملگر هامیلتونین را بدانیم:

$$\mathrm{H}\Psi_\alpha(\mathrm{r}) = \varepsilon_\alpha \Psi_\alpha(\mathrm{r}) \qquad (۲۴\text{-}۱)$$

در مجموعه‌ی ویژه توابع متعامد کامل، می‌توان نوشت:

$$\int \Psi_{\beta}^{*}(r)\Psi_{\alpha}(\mathrm{r})dr = \delta_{\beta\alpha} \qquad (۲۵-۱)$$

تابع گرین را می‌توان به این صورت بسط داد:

$$G^{\mathrm{R}}(\mathrm{r},\mathrm{r}') = \sum_{\alpha} C_{\alpha}(\mathrm{r}')\,\Psi_{\alpha}(\mathrm{r}) \qquad (۲۶-۱)$$

بطوری‌که ضریب C_{α} باید بطور مناسبی انتخاب شود. با جایگذاری معادله‌ی (۱-۲۶) در رابطه‌ی تابع گرین، خواهیم داشت:

$$(\mathrm{E}-\mathrm{H}+\mathrm{i}\eta)\,G^{\mathrm{R}}(\mathrm{r},\mathrm{r}') = \delta(\mathrm{r}-\mathrm{r}') \qquad (۲۷-۱)$$

با توجه به اینکه H فقط روی مولفه‌ی r اثر می‌گذارد و روی r' تاثیری ندارد و با استفاده از معادله‌ی (۱-۲۴) داریم:

$$\sum_{\alpha}(\mathrm{E}-\varepsilon_{\alpha}+\mathrm{i}\eta)\,\mathrm{C}_{\alpha}(\mathrm{r}) = \delta(\mathrm{r}-\mathrm{r}') \qquad (۲۸-۱)$$

با ضرب کردن رابطه‌ی فوق در $\Psi_{\alpha}^{*}(\mathrm{r}')$ و انتگرال‌گیری روی r و با استفاده از رابطه‌ی تعامد خواهیم داشت:

$$\mathrm{C}_{\alpha} = \frac{\Psi_{\alpha}^{*}(\mathrm{r}')}{\mathrm{E}-\varepsilon_{\alpha}+\mathrm{i}\eta} \qquad (۲۹-۱)$$

بنابراین تابع گرین را با استفاده از جمع زیر می‌توان محاسبه کرد:

$$G^{\mathrm{R}}(\mathrm{r},\mathrm{r}') = \sum_{\alpha}\frac{\Psi_{\alpha}(\mathrm{r})\Psi_{\alpha}^{*}(\mathrm{r}')}{\mathrm{E}-\varepsilon_{\alpha}+\mathrm{i}\eta} \qquad (۳۰-۱\ \text{الف})$$

به‌همین ترتیب:

$$G^{\mathrm{A}}(\mathrm{r},\mathrm{r}') = \sum_{\alpha}\frac{\Psi_{\alpha}(\mathrm{r})\Psi_{\alpha}^{*}(\mathrm{r}')}{\mathrm{E}-\varepsilon_{\alpha}-\mathrm{i}\eta} \qquad (۳۰-۱\ \text{ب})$$

به سادگی می‌توان مشاهده کرد، تابع گرین Retarded، مزدوج هرمیتی تابع گرین Advanced می باشد. از این به بعد منظورمان از تابع گرین، تابع گرین Retarded خواهد بود.

$$G^{\mathrm{A}}(\mathrm{r},\mathrm{r}') = [G^{\mathrm{R}}(\mathrm{r}',\mathrm{r})]^{*} \quad \rightarrow \quad G^{\mathrm{R}} = [G^{\mathrm{A}}]^{+} \qquad (۳۱-۱)$$