



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة العربي التبسي - تبسة
كلية العلوم الدقيقة وعلوم الطبيعة والحياة
قسم: علوم المادة



مذكرة مقدمة لنيل شهادة الماستر " LMD "

الميدان: فيزياء

التخصص: فيزياء المادة المكثفة

العنوان:

دراسة نظرية للخصائص الالكترونية لنظام ثلاثي الشوائب باستخدام نموذج TBM

إعداد الطالبين:

❖ قردي عامر
❖ عباس هشام

لجنة المناقشة:

رئيس
مؤطر
ممتحن

جامعة العربي التبسي
جامعة العربي التبسي
جامعة العربي التبسي

Pr
M.C.B
M.C.B

بومعالي عيد المالك
بوديار عبيد
طق محمد أمين

السنة الجامعية: 2017-2018

إهداء

إلهي لا يطيب النهار إلا بطاعتك ولا تطيب اللحظات إلا بذكرك راجين العون بحمدك
وشكرك و منك وفضلك.

هذا ومن ملء الوجدان نتقدم بأسمى التحايا والشكر والتقدير لوالدينا ياخير نور في هذي
الحياة ونرجو من الله وأقوم سند في كل حين وحال .

أسرتنا وذوينا و أقاربنا لكم منا كل الود والإمتنان.

أساتذتنا الكرام لكم منا كل الإحترام طبتهم وطاب ممشاكم أينما كنتم وحيثما وليتم.

أصدقاءنا وزملاءنا وأصحابنا يامن قاسمونا ضحكنا و حزننا وجدنا فيهم نبض الأمل
و حب العمل في الجد والهزل وكذا في الصعب والسهل.

وهذا ونبت لكل من صادفنا وصادفناه في مسيرتنا الجامعية طوال السنين الماضية كل
عبارات المحبة والأخوة والوفاء ولتكن معرفتنا بكم أعظم ما منحته لنا الأيام وشكرا .

شكر و عرفان

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

نشكر الله على نعمه التي لا تقدر ولا تحصى ومنها توفيقه تعالى على إتمام هذا العمل نتقدم بجزيل الشكر والامتنان وخالص العرفان والتقدير إلى الاستاذ المؤطر بوديار عبيد، الذي شرفنا بقبوله الإشراف على هذه المذكرة وعلى دعمه وتوجيهاته القيمة فجزاه الله خير الجزاء.

كما يسرنا أن نوجه أسمى آيات التقدير والعرفان إلى اساتذتنا الكرام على إرشاداتهم وآرائهم.

ثم نتقدم بالشكر إلى القائمين على جامعة الشيخ العربي التبسي سائلين المولى لهم التوفيق والسداد. ونتقدم بالشكر إلى أساتذتنا بكلية العموم الدقيقة وعلوم الطبيعة والحياة بالذكر منهم أساتذتنا الكرام الذين سبق لهم أن سهلوا لنا طريق البحث العلمي على أيدهم بداية بلجنة المناقشة الأستاذ الرئيس البروفيسور بومعالي عبد المالك و الأستاذ الدكتور طق محمد أمين الممتحن اللذان يشرفاننا أن يكونا مشرفين على مناقشة رسالة التخرج.

كما لا ننسى أيضا منهم أساتذتنا الذين رافقونا في مسيرة البحث العلمي الأستاذ بن زاوي مراد والأستاذ فردي عبد الحميد و الأستاذة بن مخلوف فلة.

وفي الأخير تقبلوا منا عبارات الشكر و العرفان.

قائمة الرموز والأشكال:

دالة غرين	G	دالة وينير	W
عدد مركب	z	تغاير ديراك	δ
شعاع الموضع في الفضاء الحقيقي	r	فضاء الأشعة	k
مؤثر هرميتي	L	تقطع دالة غرين	\tilde{G}
دالة ذاتية	ϕ	بعد الفضاء	d
قيم ذاتية	λ	الشحنة	q
مساحة السطح	s	دالة الموجة	Ψ
الطاقة	ε	موقع مدار الشائبة الأولى	l
المجال	Ω	موقع مدار الشائبة الثانية	m
كثافة الحالات	ρ	موقع مدار الشائبة الثالثة	s
عدد الحالات	N	الانحلال	f_p
كثافة الحالات	DOS	الارتباط الخطي بين الشائبتين	x
نموذج الترابط الضيق	TBM	جهد التفاعل	V
هاملتوني الترابط الضيق	TBH	مصفوفة التشتت	t
الهاملتون	H	شعاع الانسحاب	e_α

الصفحة	العنوان	المخطط
-35-	مخطط الحدود المساهمة في دالة غرين في وجود ثلاثة شوائب بعد إدخال الارتباط الخطي (x)	مخطط 1-4

الفهرس:

2	المقدمة العامة
4	الفصل الأول : دوال غرين في الرياضيات الفيزيائية
4	1. دوال غرين المستقلة عن الزمن
11	الفصل الثاني : دوال غرين ونظرية الاضطرابات
11	1.2. الحالة المستقلة عن الزمن
13	2.2. مصفوفة التشتت- t
16	3.2. معادلة lippman- Schwinger
19	الفصل الثالث : هاملتوني الترابط الضيق
19	1.3. هاملتوني الترابط الضيق
21	2.3. دوال غرين من أجل نموذج TBM
22	3.3. تشتت شائبة وحيدة (نوع واحد)
27	4.3. شائبتين (نوعين مختلفين)
33	الفصل الرابع : نظام يحتوي على ثلاثة شوائب مختلفة
35	النتائج والمناقشة
38	الخاتمة

المقدمة العامة

المقدمة العامة

ترتكز أغلب الصناعات الإلكترونية الحديثة على تغيير الخواص الإلكترونية لبعض المواد بسبب عملية التطعيم بشوائب معينة ، فمثلا في أنصاف النواقل يؤدي نوع التطعيم بالشوائب إلى إنتاج نصف ناقل من النمط n أو النمط p ، كما أن نسبة قليلة من الذرات المطعمة داخل عوازل Mott أدت إلى إنتاج مواد فائقة الناقلية ذات درجات حرارة مرتفعة .

تختلف كيفية دراسة تأثير الشوائب حسب طبيعة البحث والإمكانيات المتوفرة والتي تكون في الغالب تجريبية ، ولكن توجد أيضا طرق نظرية يمكنها أن تعطي نتائج ممتازة مقارنة بالتجريبية أو عملية المحاكاة.

وتعتبر دوال غرين من الوسائل الرياضية الرائدة في هذا المجال حيث نجدها في جميع تخصصات الفيزياء ، فهذه الدوال ورغم شكلها المجرد ، إلا أنها على صلة مباشرة بالمعاني الفيزيائية للنتائج ، كما أن عملية تمثيلها على شكل مخططات يسهل عملية الحساب أكثر ، ويصبح الانتقال السلس بين الكتابة الرياضية والمخططات والمعاني الفيزيائية ممكنا.

نهدف من خلال هذا العمل إلى دراسة تأثير وجود ثلاثة أنواع من الشوائب على الخواص الإلكترونية لبعض المواد، وذلك باستخدام دوال غرين، حيث قمنا بتقسيم هذا العمل إلى أربعة فصول كما يلي :

تطرقنا في الفصل الأول إلى دراسة رياضية شاملة لدوال غرين مع اختيار وجهة النظر الفيزيائية في كل مرة إذا كان ذلك ممكنا.

وبما أن حل أغلب مسائل ميكانيك الكم غير ممكن بشكل دقيق ، حيث تستخدم نظرية الاضطرابات المستقرة والمتعلقة بالزمن ، فقد خصصنا الفصل الثاني في هذا البحث إلى التكلم عن العلاقة المباشرة لدوال غرين مع نظرية الاضطرابات.

استخدمنا نموذج الترابط الضيق TBM ولذلك فقد خصصنا له الفصل الثالث حيث قمنا بكتابته باستخدام دوال غرين. أما في الفصل الرابع والأخير فقد قمنا بحساب دوال غرين في حالة وجود ثلاثة شوائب مختلفة وهذا باعتبار وجود ارتباط خطي بين المدارات الذرية من هذه الشوائب ، وقمنا بتمثيلها على شكل مخططات ، وفي الأخير قمنا بمناقشة النتائج التي توصلنا إليها.

الفصل الأول

دوال غرين في الرياضيات الفيزيائية:

1. دوال غرين المستقلة عن الزمن:

يمكن أن تعرف دوال غرين عموماً كحلول لمعادلات تفاضلية غير متجانسة [1] كالتالي:

$$[z - L(r)]G(r, r'; z) = \delta(r - r') \quad (1.1)$$

وهذا في وجود شروطحدية معرفة على سطح (s) في المجال المسموح (Ω) للمتغيرين (r, r') حيث z عبارة عن متغير مركب بحيث:

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

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

$$L(r)\phi_n(r) = \lambda_n\phi_n(r) \quad (1.2)$$

وهنا $\phi_n(r)$ تملك نفس الشروط الحدودية الخاصة بـ $G(r, r'; z)$ يمكن لـ (n) أن يمثل مجموعة من المتغيرات، تسمى في ميكانيك الكم الأعداد الكمية وتخضع هذه الأخيرة لشرط التنظيم:

$$\int \phi_n^*(r)\phi_m(r)dr = \delta_{nm} \quad (1.3)$$

كما أن مجموعة الدوال الذاتية $\{\phi_n(r)\}$ تحقق علاقة الانغلاق كما يلي:

$$\sum_n \phi_n(r)\phi_n^*(r')dr = \delta(r - r') \quad (1.4)$$

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

يصبح العمل مع دوال غرين أسهل كثيراً، عند الانتقال إلى فضاء هيلبرت المجرد، وهو ما يسمى بجبر ديراك، حيث نتقضى بعض الحسابات الروتينية كالتكاملات وغيرها، والتي تستبدل هنا بالجاءات السلمية، وهناك العديد من الخواص المعروفة في ميكانيك الكم، سنذكر بعضها فقط:

$$\phi_n(r) = \langle r|\phi_n \rangle \quad (1.5)$$

$$\delta(r - r')L(r) = \langle r|L|r' \rangle \quad (1.6)$$

$$G(r, r'; z) = \langle r|G(z)|r' \rangle \quad (1.7)$$

$$\langle r|r'\rangle = \delta(r - r') \quad (1.8)$$

$$\int dr |r\rangle\langle r| = 1 \quad (1.9)$$

يمكن كتابة المعادلة (1.1) كالتالي:

$$[z - L(r)]G(z) = 1 \quad (1.10)$$

وتصبح العلاقات السابقة كالتالي:

$$L|\phi_n\rangle = \lambda_n|\phi_n\rangle \quad (1.11)$$

$$\langle\phi_n|\phi_m\rangle = \delta_{nm} \quad (1.12)$$

$$\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = 1 \quad (1.13)$$

ويمكن الرجوع من العلاقة (1.10) إلى العلاقة (1.1) باستخدام كل من (1.6) و (1.7) كالتالي:

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

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

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

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

حيث يكتب توزيع ديراك على الشكل التالي: [2]

$$\delta(r - r') = \begin{cases} 0: (r - r') \neq 0 \\ 1: (r - r') = 0 \end{cases}$$

وفق خاصية دوال ديراك التي تعمل على جمع الدوال كالتالي:

$$\int_{\Omega} \delta(r - r') f(r') dr' = f(r) \quad (1.14)$$

بتبسيط الجهة اليسرى للعلاقة (1.10):

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

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

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

$$\begin{aligned} zG(r, r'; z) - \int ds \langle r|L|s\rangle\langle s|G(z)|r'\rangle \\ = zG(r, r'; z) - L(r)G(r, r'; z) = \delta(r - r') \end{aligned}$$

وهذا يعطينا تعريفا مطابقا للمعادلة (1.1)، كذلك من فوائد خواص ديراك:

سهولة الانتقال بين العلاقات جبريا و هذا لا يقتصر على العمل داخل الفضاء الحقيقي (r) فقط بل يمكن التعبير عنه في فضاء (k) باستخدام تحويل "فورييه": [3]

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

$$G(z) = \frac{1}{z - L} \quad (1.15)$$

بضرب طرفي هذه المعادلة في علاقة الانغلاق (1.13) نجد:

$$G(z) = \sum_n \frac{|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|}{z - L} \quad (1.16)$$

نظرا لإمكانية وجود نوعين من الطيف المستمر والمتقطع فالمعادلة (1.16) يمكن كتابتها بشكل أعم:

$$G(z) = \sum'_n \frac{|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|}{z - \lambda_n} + \int dc \frac{|\Phi_c\rangle\langle\Phi_c|}{z - \lambda_c} \quad (1.17)$$

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

$$G(r, r'; z) = \sum'_n \frac{\Phi_n(r)\Phi_n^*(r')}{z - \lambda_n} + \int dc \frac{\Phi_c(r)\Phi_c^*(r')}{z - \lambda_c} \quad (1.18)$$

عندما يكون (L) مؤثرا هرميتيا تكون جميع قيمها الذاتية (λ_n) حقيقة وبالتالي عندما يكون $Im(z) \neq 0$ فينبغي أن يتحقق $(z \neq \lambda_n)$ هذا يعني أن $G(z)$ هي دالة تحليلية في المستوى الذي يحمل قيم (z) إلا في تلك النقاط أو أجزاء من المحور الحقيقي لـ (z) التي تتوافق مع القيم الذاتية لـ (L) . [4]

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

نرمز للمؤثر G^+ لدالة غرين عند $Im(z) > 0$ ونرمز G^- لدالة غرين عند $Im(z) < 0$ ونعبر عن ذلك رياضيا عندما يكون $(z = \lambda)$ كالتالي:

$$G^{\pm}(r, r'; \lambda) = \lim_{s \rightarrow 0^+} G(r, r'; \lambda \pm is) \quad (1.19)$$

حيث:

$$(z = \lambda \pm is) \quad (1.20)$$

و حسب تعريفي المؤثرين G^+ و G^- ومن خلال العبارة (1.18) نستنتج أن:

$$G^*(r, r'; z) = G(r, r'; z^*) \quad (1.21)$$

ونستطيع التمييز بين الحالات التالية :

الحالة الأولى: إذا كان z عدداً حقيقياً، $\lambda \neq \lambda_n$ و $z = \lambda$ من العلاقة (1.21) نجد أن $G(r, r'; \lambda)$ هي دالة هرميتية، في حالة خاصة يمكن أن تكون $G(r, r'; \lambda)$ حقيقية.

الحالة الثانية: من جهة أخرى عندما يكون λ ينتمي إلى القيم المستمرة ومن خلال تعريف العلاقات (1.21) و (1.20) و (1.19) نجد أن:

$$G^-(r, r'; z) = [G(r', r; \lambda)]^* \quad (1.22)$$

ونستنتج من ذلك:

$$Re\{G^-(r, r; \lambda)\} = Re\{G^+(r, r; \lambda)\} \quad (1.23)$$

$$Im\{G^-(r, r; \lambda)\} = -Im\{G^+(r, r; \lambda)\} \quad (1.24)$$

وباستخدام الخاصية الرياضية المعروفة: [5]

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm iy} = \frac{p}{x} \pm i\pi\delta(x) \quad (1.25)$$

انطلاقاً من (1.18) يمكننا التعبير عن القيم المنفصلة $\tilde{G}(\lambda)$ من خلال خاصية دالة ديراك:

$$\tilde{G}(\lambda) \equiv G^+(\lambda) - G^-(\lambda) = -2\pi i\delta(\lambda - L) \quad (1.26)$$

بالانتقال إلى الفضاء الحقيقي وإظهار r و r' نجد:

$$\tilde{G}(r, r'; \lambda) = -2\pi i \sum_n (\lambda - \lambda_n) \Phi_n(r) \Phi_n^*(r') \quad (1.27)$$

$$= -2\pi i \sum_n' \delta(\lambda - \lambda_n) \Phi_n(r) \Phi_n^*(r') - 2\pi i \int \delta(\lambda - \lambda_c) \Phi_c(r) \Phi_c^*(r') dc$$

للحصول على عناصر قطر المصفوفة نستخدم العلاقتين (1.18) و (1.25).

$$G^{\pm}(r, r; \lambda) = p \sum_n \frac{\Phi_n(r)\Phi_n^*(r')}{(\lambda - \lambda_n)} \pm i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n)\Phi_n(r)\Phi_n^*(r') \quad (1.28)$$

بمكاملة العلاقة (1.28) بالنسبة لـ (r) :

$$\int dr G^{\pm}(r, r; \lambda) = \int dr \langle r | G^{\pm}(\lambda) | r \rangle$$

$$\equiv Tr\{G^{\pm}(\lambda)\} \quad (1.29)$$

$$= p \sum_n \frac{1}{(\lambda - \lambda_n)} \pm i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \quad (1.30)$$

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

$$\rho(r, \lambda) \equiv \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n)\Phi_n(r)\Phi_n^*(r) \quad (1.31)$$

$$= \sum_n' \delta(\lambda - \lambda_n)\Phi_n(r)\Phi_n^*(r) + \int \delta(\lambda - \lambda_c)\Phi_c(r)\Phi_c^*(r)dc \quad (1.32)$$

$$N(\lambda) = \int \rho(r, \lambda)dr \quad (1.33)$$

حيث نضرب العلاقة (1.27) في $(-\frac{1}{2\pi i})$ نجد العلاقة:

$$\rho(r, \lambda) = -\frac{1}{2\pi i} \tilde{G}(r, r; \lambda) \quad (1.34)$$

ومن جهة أخرى نضرب الجزء التخيلي للعلاقة (1.28) في $(\pm \frac{1}{\pi})$ نجد أن:

$$\rho(r, \lambda) = \pm Im\{G^{\pm}(r, r; \lambda)\} \quad (1.35)$$

ومن المرحلتين السابقتين نستنتج أن:

$$\rho(r, \lambda) = \pm Im\{G^{\pm}(r, r; \lambda)\} = -\frac{1}{2\pi i} \tilde{G}(r, r; \lambda) \quad (1.36)$$

بإدخال التكامل بالنسبة لـ r على طرفي المعادلة (1.35) نتحصل مباشرة على:

$$N(\lambda) = \pm \frac{1}{\pi} \text{Im}\{\text{Tr}G^{\pm}(\lambda)\} \quad (1.37)$$

وفق المعادلة (1.14) والعلاقة (1.33)، يمكن التعبير عن $G(z)$ بدلالة التقطع $\tilde{G}(z)$:

$$\tilde{G}(z) \equiv G^+(z) - G^-(z) \quad (1.38)$$

$$G(r, r'; z) = \sum_n \frac{\phi_c(r)\phi_c^*(r')}{z - \lambda}$$

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

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

$$G(r, r'; z) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda \sum_n \frac{\tilde{G}(r, r'; \lambda)}{z - \lambda} \quad (1.39)$$

لدينا من العلاقة (1.34):

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

نقوم بتعويضها في العلاقة (1.39) نجد: [5-7]

$$G(r, r'; z) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda' \sum_n \frac{\rho(r, \lambda')}{z - \lambda'} \quad (1.40)$$

الفصل الثاني

الفصل الثاني: دوال غرين ونظرية الاضطرابات:

ملخص:

إن مسألة العثور على القيم الذاتية والدوال الذاتية للهاملتون من الشكل $H = H_0 + H_1$ يمكن أن تتم في ثلاثة مراحل، عند استخدام دوال غرين:

- نقوم بحساب دوال غرين $G_0(z)$ الموافقة لـ H_0 .
- التعبير عن $G(z)$ كسلسلة اضطرابات بدلالة $G_0(z)$ و H_1 .
- استخراج من $G(z)$ معلومات عن القيم الذاتية و الدوال الذاتية لـ H .

1.2. الحالة المستقلة عن الزمن:

في هذا الفصل نعتبر الحالة المهمة جدا حيث يمكن فصل الهاملتون H إلى جزئين، الأول هو H_0 وهو الهاملتون في حالة عدم وجود أي اضطراب بالإضافة إلى الجزء الثاني H_1 الذي يعبر عن الاضطراب [8].

$$H = H_0 + H_1 \quad (2.1)$$

حيث يمكن الحصول على القيم الذاتية لـ H_0 بسهولة، أي هي مسألة معروفة الحل، لكن السؤال المطروح كيف يمكن إيجاد القيم الذاتية لـ H_1 ومنه H وغالبا ما يتحقق ذلك من خلال اتخاذ ما يلي:

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

دوال غرين $G_0(z)$ و G الموافقتين لـ H_0 و H على الترتيب هما:

$$G_0(z) = (z - H_0)^{-1} \quad (2.2)$$

$$G(z) = (z - H)^{-1} \quad (2.3)$$

باستخدام (2.1) و (2.2) يمكن إعادة كتابة (2.3) كالتالي:

$$\begin{aligned} G(z) &= (z - H_0 - H_1)^{-1} = \{(z - H_0)[1 - (z - H_0)^{-1}H_1]\}^{-1} \\ &= [1 - (z - H_0)^{-1}H_1]^{-1}(z - H_0)^{-1} \\ &= [1 - G_0(z)H_1]^{-1}G_0(z) \end{aligned} \quad (2.4)$$

نقوم بنشر المؤثر $(1 - G_0H_1)^{-1}$ وفق سلاسل قوى كالتالي: [9]

$$G = G_0 + G_0 H_1 G_0 + G_0 H_1 G_0 H_1 G_0 + \dots \quad (2.5)$$

ويمكن كتابتها أيضا بأشكال أخرى مختلفة كالتالي:

$$G = G_0 + G_0 H_1 (G_0 + G_0 H_1 G_0 + \dots) = G_0 + G_0 H_1 G \quad (2.6)$$

$$G = G_0 + (G_0 + G_0 H_1 G + \dots) H_1 G_0 = G_0 + G H_1 G_0 \quad (2.7)$$

وعند الكتابة في الفضاء (r) تصبح المعادلة (2.6) كما يلي:

$$G(r, r'; z) = G_0(r, r'; z) + \int dr_1 dr_2 G_0(r, r_1; z) H_1(r_1, r_2) G(r_2, r'; z) \quad (2.8)$$

عادة ما يأخذ $H_1(r_1, r_2)$ الشكل التالي: $\delta(r_1, r_2) V(r_1)$ ، ومنه تصبح (2.8) كالتالي:

$$G(r, r'; z) = G_0(r, r'; z) + \int dr_1 dr_2 G_0(r, r_1; z) V(r_1) G(r_1, r'; z) \quad (2.9)$$

وتكتب المعادلة (2.6) في الفضاء (k) كما يلي:

$$G(k, k'; z) = G_0(k, k'; z) + \sum_{k_1 k_2} G_0(k, k_1; z) H_1(k_1, k_2) G(k_2, k'; z) \quad (2.10)$$

مع الأخذ بعين الاعتبار أن:

$$\langle r | k \rangle = e^{ikr} / \sqrt{\Omega}$$

$$\sum_k = \Omega \int \frac{dk}{(2\pi)^d} \quad (2.11)$$

حيث يمثل (d) البعد الفضائي ، كما أن العبارة (2.11) هي مجرد تحويل فورييه للعبارة (2.8). [10]

2.2. مصفوفة التشتت – t :

تلعب المصفوفة t دورا مهما في حسابات نظرية التشتت [12-13] ، كما أنها مرتبطة مباشرة بكل من دالتي غرين G و $G_0(z)$.

تعرف علاقة $T(z)$ التي تتعلق بهاملتون الوسط (H_0) و الاضطراب (H_1) و المتغير (z) كالتالي:

$$T(z) = H_1 G(z)(z - H_0) \quad (2.12)$$

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

$$T^\pm(E) = H_1 G^\pm(E)(E - H_0) \quad (2.13)$$

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

$$H_0|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \quad \text{حيث:}$$

في هذه الحالة يتم إلغاء قطب $G(z)$ عند E_n بواسطة الصفر الناتج من انعدام $(z - H_0)$ عند $z = E_n$ ، و بالتالي تصبح $T(z)$ تحليلية بجوار E_n . والعبارة التحليلية لـ $T(z)$ قريبة جدا من العبارة التحليلية $G(z)$ ، حيث يكون $T(z)$ تحليلي في المستوي المركب z ويملك شذوذ على المحور الحقيقي، وقيمة أقطاب $T(z)$ على المحور الحقيقي تعطي القيم ذاتية المتقطعة للهاملتوني H والعكس صحيح.

وباستخدام (2.5) و (2.12) نتحصل على عبارة النشر التالية:

$$T(z) = H_1 + H_1 G_0(z) H_1 + H_1 G_0(z) H_1 G_0(z) H_1 + \dots \quad (2.14)$$

الجمع في المعادلة السابقة يمكن التعبير عنه بعدة أشكال:

$$T(z) = H_1 + H_1(G_0 + G_0 H_1 G_0 + \dots) H_1 = H_1 + H_1 G H_1 \quad (2.15)$$

$$= H_1 + H_1 G_0 (H_1 + H_1 G_0 H_1 + \dots) = H_1 + H_1 G_0 T \quad (2.16)$$

$$= H_1 + (H_1 + H_1 G_0 H_1 + \dots) G_0 H_1 = H_1 + T G_0 H_1 \quad (2.17)$$

بمساعدة T ، و المعادلة الأساسية (2.5) نعيد كتابتها كالتالي:

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z) T(z) G_0(z) \quad (2.18)$$

مما يعني أن معرفة T تؤدي حتماً أو تكافئ معرفة G ، والمعادلات (2.16) و (2.17) في تمثيل r أو k عبارة عن معادلات خطية تكاملية غير متجانسة لمؤثر $T(r, r; z)$ أو $T(k, k; z)$ وتكتب على النحو التالي:

$$T(k, k'; z) = H_1(k, k') + \sum_{k_1 k_2} H_1(k, k_1) G_0(k_1, k_2; z) T(k_2, k'; z) \quad (2.19)$$

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

$$= \frac{1}{\Omega} \int dr dr' \exp(-ik \cdot r + ik' \cdot r') H_1(r, r') \quad (2.20)$$

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

$$= \frac{1}{\Omega} \int dr_1 dr_2 \exp(-ik_1 \cdot r_1 + ik_2 \cdot r_2) G_0(r_1, r_2; z) \quad (2.21)$$

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

$$= \frac{1}{\Omega} \int dr dr' \exp(-ik \cdot r + ik' \cdot r') T(r, r'; z) \quad (2.22)$$

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

$$H_1(k, k') = V(k - k')/\Omega \quad (2.23)$$

حيث: $V(q)$ بتحويل فورييه للكمون إلى $V(r)$:

$$V(q) = \int dr V(r) e^{-iq \cdot r} \quad (2.24)$$

في الحالة العادية تتعلق الدالة $G_0(r_1, r_2)$ بالفرق $(r_1 - r_2)$ ونجد من العلاقة (2.21) أن:

$$G_0(k_1, k_2; z) = \delta_{k_1, k_2} G_0(k_1; z) \quad (2.25)$$

ومن خلال هذه الشروط يمكن إعادة كتابة (2.19) كالتالي:

$$T'(k, k'; z) = V(k - k') + \int \frac{dk_1}{(2\pi)^d} V(k - k_1) G_0(k_1; z) T'(k_1, k'; z) \quad (2.26)$$

$$T'(k, k'; z) = \Omega T(k, k'; z) \quad \text{حيث:}$$

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

3.2. معادلة *Lippman – Schwinger*:

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

$$(E - H_0)|\Psi\rangle = H_1|\Psi\rangle \quad (2.27)$$

حيث ينتمي E إلى القيم المستمرة لطيف H . ويمكن اعتبار العلاقة (2.27) كمعادلة غير متجانسة يكون حلها العام كالتالي:

$$|\Psi^\pm\rangle = |\phi\rangle + G_0^\pm(E)H_1|\Psi^\pm\rangle \quad (2.28)$$

$|\phi\rangle$: هو الحل العام للمعادلة المتجانسة $(E - H_0)|\phi\rangle = 0$.

المعادلة (2.28) هي معادلة تكاملية للحالة المجهولة $|\Psi^\pm\rangle$ ، وباستخدام التمثيل r تصبح كالتالي: [14]

$$\Psi^\pm(r) = \phi(r) + \int dr_1 dr_2 G_0^\pm(r, r_1; E)H_1(r_1, r_2)\Psi^\pm(r_2) \quad (2.29)$$

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

$$\Psi^\pm(r) = \phi(r) + \int dr_1 G_0^\pm(r, r_1; E)V(r_1)\Psi^\pm(r_1) \quad (2.30)$$

المعادلة (2.29) و (2.30) تدعى بمعادلة ليمان شوينغر (*Lippman Schwinger*).

إذا كانت E لا تنتمي إلى القيم المستمرة لطيف (H_0) فإن المعادلة (2.30) تكتب بالشكل التالي:

$$\Psi(r) = \int dr_1 G_0(r, r_1; E)V(r_1)\Psi(r_1) \quad (2.31)$$

و بنشر العبارة (2.28) نجد.

$$|\Psi^\pm\rangle = |\phi\rangle + G_0^\pm H_1 |\phi\rangle + G_0^\pm H_1 G_0^\pm H_1 |\phi\rangle + \dots \quad (2.32)$$

نستخدم العبارة (2.14) ضمنا في عبارة (2.32) لتصبح متعلقة بـ (T^\pm) كالتالي:

$$|\Psi^\pm\rangle = |\phi\rangle + G_0^\pm T^\pm |\phi\rangle \quad (2.33)$$

نضرب المعادلة (2.5) من اليمين أو اليسار في H_1 ونستخدم العبارة (2.14) فنجد:

$$H_1 G = T G_0 ; G H_1 = G_0 T \quad (2.34)$$

من العلاقة (2.34) تصبح العلاقة (2.33) كما يلي:

$$|\Psi^\pm\rangle = |\phi\rangle + G_0^\pm H_1 |\phi\rangle \quad (2.35)$$

المعادلات (2.33) مع (2.35) مهمة لأنها تحدد القيم الذاتية $|\Psi^\pm\rangle$ بدلالة كل من (T^\pm) و (G^\pm) .

بمقارنة (2.33) مع (2.28) ونفرض أن $(G^\pm \neq 0)$ نجد أن:

$$T^\pm |\phi\rangle = H_1 |\Psi^\pm\rangle \quad (2.36)$$

الفصل الثالث

1.3. هاملتوني الترابط الضيق:

يعتبر نموذج الترابط الضيق من أبسط وأنجح النماذج التي يمكن استخدامها ، وخاصة عند استخدام دوال غرين ، ويرمز له اختصارا بالرمز TBM وهو يعطى بالعلاقة البسيطة التالية: [15]

$$H = \sum_l |l\rangle \varepsilon_l \langle l| + \sum_{lm} |l\rangle V_{lm} \langle m|; V_{ll} = 0 \quad (3.1)$$

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

$$l = \sum_{\alpha=1}^d l_{\alpha} e_{\alpha} \quad (3.2)$$

e_{α} هي أشعة الوحدة الخاصة بالشبكة، بينما تأخذ l_{α} جميع القيم الصحيحة الممكنة.

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

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

نحتاج في الغالب عند استخدامنا لنموذج TBM إلى دوال متمركزة حول نقاط الشبكة l ، وتعتبر دوال Wannier مناسبة جدا لهذا الغرض، والتي يرمز لها بالرمز $W(r - l)$ ، وبالتالي فإن عناصر المصفوفة من هذا الفضاء الجزئي تعطى كالتالي:

$$\langle l|H|m\rangle = \varepsilon_l \delta_{lm} + V_{lm} \quad (3.3)$$

نرمز للعناصر القطرية للمصفوفة بالرمز (ε_l) بينما نرمز للعناصر الغير قطرية بالرمز (V_{lm}) ، حيث $(V_{ll} = 0)$.

كما الخاصية الدورية للهاملتون " ثابتة بالنسبة للتحويلات الخاصة بأشعة الشبكة" تعني أن:

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_l = \varepsilon_0 \\ \varepsilon_{l+m} = \varepsilon_l \end{array} \right. \quad (3.4)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} V_{lm} = V_{l-m} \\ V_{lm} = V_{l+m} \end{array} \right. \quad (3.5)$$

ينبغي التأكيد على أن الهاملتون الذي يصف الأجسام الصلبة الحقيقية يملك عناصر مصفوفية خارج الفضاء الجزئي الذي تم انشاؤه بواسطة دوال ونير المتمركزة $\{|l\rangle$ ، و بالنسبة لهذا الفضاء الجزئي فهو مرتبط بباقي فضاء هيلبرت ومع ذلك نحن نتقيد بهذا الفضاء الجزئي من أجل البساطة علاوة على ذلك، العصابات الناشئة عن المدارات الذرية تتداخل بشكل ضعيف مع جيرانها (أي مرتبطة بإحكام بذراتهم) يمكن وصفها بدقة عند استعمالنا لهذا الفضاء الجزئي، ولهذا السبب فإن الهاملتونيان (3.1) الذي يقتصر عمله داخل هذا الفضاء الجزئي المولد بواسطة الأساس $\{|l\rangle$ ، يعرف بنموذج الترابط الضيق (TBM) أو هاملتوني الترابط الضيق (TBH)، أين يمسح (l) جميع مواقع الشبكة الدورية.

في الحالة العامة يمكن تقسيم الشبكة إلى شبكتين فرعيتين متداخلتين بحيث تحيط كل نقطة من النقاط الفرعية للشبكة (1) بنقاط تنتمي إلى الشبكة (2): في هذه الحالة يبقى الهاملتونيان ثابت تحت التحويلات بواسطة الأشعة من الشبكة (1) أو الشبكة (2)، وفي هذه الحالة: [16]

$$\begin{cases} \varepsilon_1 & l \in 1 \\ \varepsilon_2 & l \in 2 \end{cases} \quad (3.6)$$

$$\quad (3.7)$$

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

$$V_{lm} = \begin{cases} V & \text{الجوار الأقرب} \\ 0 & \text{بقية الحالات} \end{cases} \quad (3.8)$$

$$\quad (3.9)$$

وبالتالي يتميز TBH بالخواص التالية :

1. البنية الشبكية المرتبطة بالنقاط $\{|l\rangle$.

2. القيم أو العناصر القطرية للمصفوفة $\{\varepsilon_l\}$ وهناك قيمة وحيدة مشتركة يمكن أن تأخذها الطاقة من خلال التعريف الصحيح لأصلها في حالة شبكتين دوريتين كما ذكرنا سابقا (3.6) ودلالة القيمة الفيزيائية تكمن في الفرق: $\{\varepsilon_1 - \varepsilon_2 > 0\}$.

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

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

إن الحد الأول من العلاقة (3.1) يصف إمكانية أسر الجسيم حول أي موقع (l) في الشبكة مع طاقة مساوية (ε_l) ، أما الحد الثاني فهو يصف إمكانية قفز الجسيم من الموقع (l) إلى الموقع (m) مع عنصر مصفوفة النقل V_{lm} .

2.3. دوال غرين من أجل نموذج TBH :

تعطى دالة غرين من أجل TBH كالتالي: [17]

$$G(z) = \sum_k \frac{|k\rangle\langle k|}{z - E(k)} \quad (3.10)$$

و عناصر المصفوفة $G(z)$ تكتب كالتالي:

$$\begin{aligned} G(l, m, z) &= \langle l|G(z)|m\rangle = \sum \frac{\langle l|k\rangle\langle k|m\rangle}{z - E(k)} \\ &= \frac{\Omega}{N(2\pi)^d} \int_{1Bz}^k dk \frac{e^{ik(l-m)}}{z - E(k)} \end{aligned} \quad (3.11)$$

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

$$G(l, l, z) = \frac{\Omega}{N(2\pi)^d} \int_{1Bz} dk \frac{1}{z - E(k)} \quad (3.12)$$

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

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

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

$$G(l, l, z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} \frac{1}{z} \quad (3.13)$$

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

$$G(l, l, z) = \int \frac{\rho(E)}{z - E} dE \xrightarrow{z \rightarrow \infty} \frac{1}{z} \int \rho(E) dE \quad (3.14)$$

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

3.3. تشتت شائبة وحيدة [نوع واحد]:

في هذه الحالة سنرى أن الترابط الضيق الهاملتوني (TBH) سيتم كسر دوريته في موقع واحد فقط {الموقع l } وتصبح العناصر القطرية للمصفوفة ε_l تساوي $(\varepsilon_0 + \varepsilon)$ ، بينما في كل موقع آخر هناك قيمة غير مضطربة (ε_0) ، هذه الوضعية تقريبا نعبر عنها فيزيائيا كاستبدال ذرة المضيف [ذرة المادة أو الوسط] في الموقع (l) بذرة أجنبية تملك مستوى طاقي (ε) أكبر من المستوى الطاقي المشترك للذرات المضيفة: وبالتالي يمكن كتابة (TBH) الخاص بهذه الحالة: [18]

$$H = H_0 + H_1 \quad (3.15)$$

H_0 : الجزء الغير المضطرب ويكتب في نموذج (TBH) كالتالي:

$$H_0 = \sum_m |m\rangle \varepsilon_0 \langle m| + V \sum_{nm}' |n\rangle \langle m| \quad (3.16)$$

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

$$H_1 = |l\rangle \varepsilon \langle l| \quad (3.17)$$

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

وجدنا فيما سبق أن:

$$G = G_0 + G_0 H_1 G_0 + G_0 H_1 G_0 H_1 G_0 + \dots \quad (3.18)$$

كما يمكننا استخدام العبارة المكافئة:

$$T = H_1 + H_1 G_0 H_1 + H_1 G_0 H_1 G_0 H_1 + \dots \quad (3.19)$$

من خلال (3.18) و(3.19) نجد:

$$\begin{aligned} T &= |l\rangle \varepsilon \langle l| + |l\rangle \varepsilon \langle l| G_0 |l\rangle \varepsilon \langle l| + |l\rangle \varepsilon \langle l| G_0 |l\rangle \varepsilon \langle l| G_0 |l\rangle \varepsilon \langle l| + \dots \\ &= |l\rangle \varepsilon \{1 + \varepsilon G_0(l, l) + [\varepsilon G_0(l, l)]^2 + \dots\} \langle l| \\ &= |l\rangle \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon G_0(l, l)} \langle l| \end{aligned} \quad (3.20)$$

حيث :

$$G_0(l, l) \equiv \langle l| G_0 |l\rangle \quad (3.21)$$

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

$$G = G_0 + G_0|l\rangle \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon G_0(l, l)} \langle l|G_0 \quad (3.22)$$

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

$$G_0(l, l; E_p) = 1/\varepsilon \quad (3.23)$$

الأقطاب E_p يجب أن تكون خارج نطاق (H_0) وذلك بسبب أن داخل نطاق $G_0(l, l; E)$ الجزء التخيلي لا يساوي الصفر وعليه تكون (3.23) غير معرفة وبالتالي نستخدم العلاقة (3.22) لإيجاد رواسب $G(n, m)$ لدى القطب (E_p) كالتالي: [19]

$$Res\{G(n, m; E_p)\} = - \frac{G_0(n, l; E_p)G_0(l, m; E_p)}{G_0'(l, l; E_p)} \quad (3.24)$$

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

يعرف الانحلال (f_p) الخاص بالمستوي (E_p) باستخدام كل من (3.24) و (3.6) كالتالي:

$$\begin{aligned} f_p &= Tr \{Res\{G(E_p)\}\} = \sum_n Res\{(n, m; E_p)\} \\ &= - \frac{1}{G_0'(l, l)} \sum_n G_0(n, l)G_0(l, n) \\ &= - \frac{\langle l|(E_p - H_0)^{-2}|l\rangle}{G_0'(l, l)} = 1 \end{aligned} \quad (3.25)$$

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

$$\langle n|b\rangle \langle b|m\rangle = Res\{G(n, m; E_p)\} \quad (3.26)$$

من خلال (3.24) و (3.26) نجد أن:

$$|b\rangle = \frac{G_0(E_p)}{\sqrt{-G_0'(l, l; E_p)}} |l\rangle \quad (3.27)$$

أو بالشكل التالي:

$$|b\rangle = \sum_n b_n |n\rangle \quad (3.28)$$

حيث :

$$b_n = \frac{G_0(n, l, E_p)}{\sqrt{-G'_0(l, l, E_p)}} \quad (3.29)$$

هنا $G'_0(l, l, E_p)$ دوما سالبة من أجل (E) لا تنتمي إلى الطيف كما في العلاقة (3.27).

لقد وجدنا فيما سبق أن $G_0(l, l, E)$ يضمحل تدريجيا مع المسافة $|n - l| = R_{nl}$ أي:

$$G_0(n, l, E) \xrightarrow{R_{nl} \rightarrow \infty} \text{const} \times \exp[-a(E)R_{nl}] \quad (3.30)$$

حيث: $a(E) > 0$

كل من العلاقتين (3.28) و (3.29) تعني أن الدالة الذاتية $|b\rangle$ هي عبارة عن ترجمة لمحيط الشائبة الواقعة في (l) وتتحلل بعيدا عن هذا الموقع متبعة الشكل الأسّي $\exp[-a(f_p/R_{ln})]$ ، وتعبّر الكمية $a^{-1}(E_p)$ عن الامتداد الخطي للدالة الذاتية، وتعطى $a(E)$ في حالة البعد الواحد كالتالي:

$$a(E) = -\frac{1}{a} \ln \left[\frac{|E - \varepsilon_0|}{B} - \sqrt{\frac{(E - \varepsilon_0)^2}{B^2} - 1} \right]; |E - \varepsilon_0| > B \quad (3.31)$$

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

تعطى كثافة الحالات عند الموقع (n) بالعلاقة :

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

نستخدم الآن العلاقة (3.22) تصبح:

$$\rho(n, E) = \rho_0(n, E) - \frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \frac{\varepsilon \langle n | G_0^+(E) | l \rangle \langle l | G_0^+(E) | n \rangle}{1 - \varepsilon G_0^+(l, l; E)} \right\} \quad (3.32)$$

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

$$\rho(l, E) = \frac{\rho_0(l, E)}{|1 - \varepsilon G_0^\pm(l, l; E)|^2} \quad (3.33)$$

نأخذ بعين الاعتبار أن:

$$G_0(E) \xrightarrow{E \rightarrow \infty} 1/E$$

وكذلك من (3.22) نجد أن:

$$G(E) \xrightarrow{E \rightarrow \infty} 1/E$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(n, E) dE = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} G^+(n, n; E) dE \right\} = 1 \quad (3.34)$$

المعادلة (3.32) تشير إلى أن كثافة الحالات (DOS) هي دالة مستمرة غير معدومة بدلالة (E) داخل العصابة الغير مضطربة، مع استثناء قد يكون في بعض المناطق المعزولة، وتكون عصابات الطاقة المستمرة الخاصة بالهاملتوني H متوافقة مع (H₀)، وعلى عكس ρ₀(n, E)، تظهر الكمية ρ(n, E) شذوذ (δ) خارج عصابة الطاقة عند الطاقة (E_p) لتصبح عبارتها كالتالي:

$$\begin{aligned} \rho(n, E) &= \frac{G_0(n, l; E_p) G_0(l, n; E_p)}{-G'_0(l, l; E_p)} \delta(E - E_p) \\ &= |b_n|^2 \delta(E - E_p); E \approx E_p \end{aligned} \quad (3.35)$$

للحصول على النتيجة الأخيرة نستعمل العلاقة (3.29)، و يمكن كتابة (3.34) كالتالي:

$$\int_{E_l}^{E_u} \rho(n, E) dE + \sum_p |b_n^2| = 1 \quad (3.36)$$

الجمع هنا على جميع الأقطاب (G).

$$\left. \begin{array}{l} E_u : \text{الطاقة العليا للعصابة} \\ E_l : \text{الطاقة السفلى للعصابة} \end{array} \right\}$$

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

$$\int_{E_l}^{E_u} N(E) dE + P = N \quad (3.37)$$

(حيث: P = ∑_p العدد الكلي للأقطاب)

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

العلاقة (3.37) تعني أنه يمكن تشكيل مستويات منفصلة على حساب الطيف المستمر.

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

$$|\Psi_E\rangle = |k\rangle + G_0^+(E) T^+(E) |K\rangle \quad (3.38)$$

|K>: هي موجة بلوخ كما رأينا في السابق.

و من خلال (3.20) و (3.38) وبعد التبسيط الجبري بعد الضرب على اليسار لـ $\langle \Psi_E |$ في $|n\rangle$ نجد:

$$\langle n | \Psi_E \rangle = \langle n | k \rangle + \frac{\langle n | G_0^+(E) | l \rangle \varepsilon \langle l | k \rangle}{1 - \varepsilon G_0^+(l, l, E)} \quad (3.39)$$

وباستبدال $\langle n |$ بموقع الشائبة $\langle l |$ نجد:

$$\langle l | \Psi_E \rangle = \frac{\langle l | k \rangle}{1 - \varepsilon G_0^+(l, l, E)} \quad (3.40)$$

4.3. شائبتين "نوعين مختلفين":

في هذا الجزء من الفصل نقوم بدراسة نظام يتكون من شائبتين "مخلفتين" وهو جزء لا يتجزأ من نموذج الترابط الضيق الدوري (TBM) وهذه الطريقة تسمح بفهم تقريبي لهذا للجمل غير المنظمة والتي تحتوي على تركيز ضعيف من الشوائب، وسوف نهتم على وجه الخصوص بمتوسط كثافة الحالات (DOS) والتي تعتمد أساساً على متوسط دوال غرين $\langle G \rangle$. [20]

نظام يحوي نوعين من الشوائب:

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

$$H = H_0 + H_l + H_m \quad (3.41)$$

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

$$\begin{cases} H_l = |l\rangle \varepsilon \langle l| \end{cases} \quad (3.42)$$

$$\begin{cases} H_m = |m\rangle \varepsilon' \langle m| \end{cases} \quad (3.43)$$

و نعرف أيضاً:

$$\begin{cases} H_{0l} = H_0 + H_l \end{cases} \quad (3.44)$$

$$\begin{cases} H_{0m} = H_0 + H_m \end{cases} \quad (3.45)$$

إذن:

$$H = H_{0l} + H_m = H_{0m} + H_l \quad (3.46)$$

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

كما رأينا فيما سابقاً أن:

$$G_{0l} = G_0 + G_0 T_l G_0 \quad (3.47)$$

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

$$T_l = |l\rangle t_l \langle l|; \quad t_l = \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon G_0(l, l)} \quad (3.48)$$

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

$$G = G_{0l} + G_{0l}H_mG_{0l} + G_{0l}H_mG_{0l}H_mG_{0l} + \dots \quad (3.49)$$

هذا الجمع الأخير يمكن ضبطه أكثر من خلال إعطاء عبارة أبسط لـ (H_m) كالتالي:

$$G = G_{0l} + G_{0l}|m\rangle \frac{\varepsilon'}{1 - \varepsilon'G_{0l}(m,m)} \langle m|G_{0l} \quad (3.50)$$

بتعويض (3.47) و (3.48) في عبارة (3.50).

$$G = G_0 + G_0TG_0 \quad (3.51)$$

ومع التبسيط بـ (H_0) و $(H_l + H_m)$:

$$\begin{aligned} T &= f_{ml}(T_l + T_m + T_lG_0T_m + T_mG_0T_l) \\ &= f_{ml}[|l\rangle t_l \langle l| + |m\rangle t_m \langle m| + |l\rangle t_l G_0(l,m) t_m \langle m| \\ &\quad + |m\rangle t_m G_0(m,l) t_l \langle l|] \end{aligned} \quad (3.52)$$

حيث:

$$t_m = \frac{\varepsilon'}{1 - \varepsilon'G_0(m,m)}; f_{ml} = \frac{1}{1 - t_m t_l G_0(m,l)G_0(l,m)} \quad (3.53)$$

الآن الترجمة الكلية لهذا المخطط هي كالتالي:

$$G(j,i) = G_0(j,i) + \langle j|G_0(T_l + T_m + T_lG_0T_m + T_mG_0T_lG_0)|i\rangle f_{ml} \quad (3.54)$$

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

$$T = T_l + T_m + O(T_lT_m) \quad (3.55)$$

هناك حالة خاصة: $T = T_l + T_m$

حيث: $|l - m| \rightarrow \infty$ في هذه الحالة يكون التشتت عبارة عن موجة منبعثة من مركزي التشتت (l) و (m) بغض النظر عن مدى تباعد الشائبتين عن بعضها البعض. من المهم دراسة مسألة المستويات المنفصلة في حالة اثنين من الذرات الشائبة والأكثر ملائمة للعثور على هذه المستويات هو من خلال إيجاد أقطاب G المعطاة في العلاقة (3.50)، هذه الأقطاب هي حلول للمعادلة:

$$1 - \varepsilon'G_{0l}(m,m) = 0 \quad (3.56)$$

يمكن الحصول على المعادلة (3.52) في خطوة واحدة من خلال النظر لعبارة الاضطراب $H_1 \equiv H_p + H_m$ وتطبيق العلاقة (2.14) و أيضا من خلال مؤثر الوحدة نجد:

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

$$T = H_1 + H_1 \sum_n |n\rangle\langle n| G_0 \sum_i |i\rangle\langle i| H_1 + \dots \quad (3.57)$$

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

$$|l\rangle\langle l| + |m\rangle\langle m| = (|l\rangle, |m\rangle) \begin{pmatrix} \langle l| \\ \langle m| \end{pmatrix} \quad (3.58)$$

نضع $|\alpha\rangle$ المصفوفة $(|l\rangle, |m\rangle)$ وكذلك $\langle\alpha|$ المصفوفة العكسية $\begin{pmatrix} \langle l| \\ \langle m| \end{pmatrix}$ يمكن كتابة (3.57) كالتالي:

$$T = H_1 + H_1 |\alpha\rangle\langle\alpha| G_0 |\alpha\rangle\langle\alpha| H_1 + H_1 |\alpha\rangle\langle\alpha| G_0 |\alpha\rangle\langle\alpha| H_1 |\alpha\rangle\langle\alpha| G_0 |\alpha\rangle\langle\alpha| \dots \quad (3.59)$$

الكمية $\langle\alpha|G_0|\alpha\rangle$ هي عبارة عن مصفوفة (2×2) :

$$\langle\alpha|G_0|\alpha\rangle = \begin{bmatrix} G_0(l, l) & G_0(l, m) \\ G_0(m, l) & G_0(m, m) \end{bmatrix} \quad (3.60)$$

ومنه:

$$\langle\alpha|H_1|\alpha\rangle = \begin{bmatrix} \varepsilon & 0 \\ 0 & \varepsilon' \end{bmatrix} \quad (3.61)$$

و:

$$\langle\alpha|T|\alpha\rangle = \begin{bmatrix} \langle l|T|l\rangle & \langle l|T|m\rangle \\ \langle m|T|l\rangle & \langle m|T|m\rangle \end{bmatrix} \quad (3.62)$$

ومن خلال (3.59) نجد أن:

$$\begin{aligned} \langle\alpha|T|\alpha\rangle &= \langle\alpha|H_1|\alpha\rangle (1 + \langle\alpha|G_0|\alpha\rangle \langle\alpha|H_1|\alpha\rangle + \dots) \\ &= \langle\alpha|H_1|\alpha\rangle (1 - \langle\alpha|G_0|\alpha\rangle \langle\alpha|H_1|\alpha\rangle + \dots)^{-1} \end{aligned} \quad (3.63)$$

حساب معكوس المصفوفة (2×2) لـ $\langle \alpha | G_0 | \alpha \rangle \langle \alpha | H_1 | k \rangle$ يمكن إيجاد بسهولة أن المعادلة (3,63) أن تساوي المعادلة (3.52).

في حالة الشوائب: إذا كان عدد الشوائب كبيراً جداً تصبح الحسابات مملة في هذه الحالة من المفيد النظر في طريقة ثالثة للحساب [حساب مجموع المصفوفة T] كالتالي: [21]

$$H_1 = \sum_m H_m \quad (3.64)$$

يكون الجزء المضطرب وهو الكمية (H_m) يأخذ الشكل التالي:

$$H_m = |m\rangle \sum'_m \langle m| \quad (3.65)$$

يمتد الجمع على جميع المواقع (m) ، المواقع التي تشغلها الذرات المضيفة تملك $(\varepsilon'_m = 0)$ ونعرف أيضاً أن:

المرتبط بالجزء الغير المضطرب لهاملتون الوسط (H_0) وكذلك الإضطراب (H_m) وجدنا سابقاً أن:

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

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

$$\begin{aligned} T &= H_2 + H_1 G_0 T = H_1 (1 + G_0 T) \\ &= \sum_m H_m (1 + G_0 T) = \sum_m Q_m \end{aligned} \quad (3.66)$$

أين: $Q_m = H_m (1 + G_0 T)$

من (3.66) نجد أيضاً أن: $T = \sum_n Q_n$ ومنه: $Q_m = H_m (1 + G_0 \sum_n Q_n)$ أو:

$$(1 - H_m G_0) Q_m = H_m (1 + G_0 \sum_{n \neq m} Q_n) \quad (3.67)$$

أو:

$$Q_m = (1 - H_m G_0)^{-1} H_m (1 + G_0 \sum_{n \neq m} Q_n) \quad (3.68)$$

الكمية $(1 - H_m G_0)^{-1} H_m$ تساوي T_m ومنه (3.68) تصبح:

$$Q_m = T_m \left(1 + G_0 \sum_{n \neq m} Q_n \right) \quad (3.69)$$

الفصل الرابع

الفصل الرابع: نظام يحتوي على ثلاث شوائب مختلفة:

في هذا الفصل سوف نحاول توقع بعض التأثيرات الفيزيائية لوجود ثلاثة شوائب وهذا باعتبار نموذج TBM نعتبر وجود ثلاثة شوائب والتي توجد في ثلاثة مواقع كيفية من الشبكة s ، m ، l وبالتالي يمكننا إعادة كتابة الهاملتونيان كما يلي:

$$H = H_0 + H_l + H_m + H_s \quad (4.1)$$

حيث H_0 عبارة الهاملتونيان الخاص بنموذج TBM.

$$H_l = |l\rangle \varepsilon \langle l| \quad (4.2)$$

$$H_m = |m\rangle \varepsilon' \langle m| \quad (4.3)$$

$$H_s = |s\rangle \varepsilon'' \langle s| \quad (4.4)$$

وبالتالي يمكننا تعريف ثلاثة تركيبات ممكنة من الهاملتوني H_0 و الهاملتونيات الخاصة بالشوائب الثلاثة:

$$H_{0m} = H_0 + H_l + H_s \quad (4.5)$$

$$H_{0l} = H_0 + H_m + H_s \quad (4.6)$$

$$H_{0s} = H_0 + H_l + H_m \quad (4.7)$$

حيث h_m تعني الهاملتونيان الذي لا يحوي الحد H_m ، h_l تعني الهاملتونيان الذي لا يحوي الحد H_l بينما تعني h_s الهاملتونيان الذي لا يحوي الحد H_s .

وبالتالي يمكننا كتابة الهاملتونيان بأحد الأشكال التالي:

$$H_{0m} = H_0 + h_m \quad (4.8)$$

$$H_{0l} = H_0 + h_l \quad (4.9)$$

$$H_{0s} = H_0 + h_s \quad (4.10)$$

نرمز لدوال غرين الخاصة بالهاملتونيات H_{0m} ، H_{0s} ، H_{0l} و H بالرموز G_{0m} ، G_{0s} ، G_{0l} و G على الترتيب، كما أننا بينا في الفصول السابقة أن العبارات التالية محققة:

$$G_{0l} = G_0 + G_0 T_l G_0 \quad (4.8)$$

$$T_l = |l\rangle t_l \langle l| \quad (4.9)$$

$$t_l = \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon G_0(l, l)} \quad (4.10)$$

$$G_{0m} = G_0 + G_0 T_m G_0 \quad (4.11)$$

$$T_m = |m\rangle t_m \langle m| \quad (4.12)$$

$$t_m = \frac{\varepsilon'}{1 - \varepsilon' G_0(m, m)} \quad (4.13)$$

$$G_{0s} = G_0 + G_0 T_s G_0 \quad (4.14)$$

$$T_s = |s\rangle t_s \langle s| \quad (4.15)$$

$$t_s = \frac{\varepsilon''}{1 - \varepsilon'' G_0(s, s)} \quad (4.16)$$

الكتابات السابقة تعطينا بعض الحرية في اختيار الحد الرئيسي و الحد المضطرب ، حيث يمكننا اعتبار H_{0l} الحد الغير مضطرب ، بينما h_l يصبح يمثل حد الاضطراب ، وبتطبيق العبارة العامة لنشر دالة غرين:

$$G = G_{0l} + G_{0l}h_lG_{0l} + G_{0l}h_lG_{0l}h_lG_{0l} + G_{0l}h_lG_{0l}h_lG_{0l}h_lG_{0l} + \dots \quad (4.17)$$

كما أنه ومن خلال الحسابات في الفصول السابقة، وبسبب بساطة h_l فالعبارة السابقة يمكن حسابها بدقة كما يلي:

$$G = G_{0l} + G_{0l}|x\rangle \frac{\varepsilon_x}{1 - \varepsilon_x G_{0l}(x, x)} \langle x|G_{0l} \quad (4.18)$$

حيث اعتبرنا $|x\rangle$ عبارة عن تركيب خطي بين كل من $|m\rangle$ و $|s\rangle$ كما يلي:

$$|x\rangle = a|m\rangle + b|s\rangle \quad (4.19)$$

بينما ε_x عبارة الطاقة المساهمة من المدارين $|m\rangle$ و $|s\rangle$ ويمكن التعبير عنها بالشكل التالي:

$$\varepsilon_x = x\varepsilon' + (1 - x)\varepsilon' \quad (4.20)$$

بتعويض كل من المعادلتين (4.14) و (4.16) في المعادلة (4.18) نجد:

$$G = G_0 + G_0 T G_0 \quad (4.21)$$

حيث يعطى T بالعبارة التالية:

$$T = f_{xl}(T_l + T_x + T_x G_0 T_l + T_x G_0 T_l) \quad (4.22)$$

$$T = f_{xl}(|l\rangle t_l \langle l| + |x\rangle t_x \langle x| + |l\rangle t_l G_0(l, x) t_x \langle x| + |x\rangle t_x G_0(x, l) t_l \langle l|) \quad (4.23)$$

حيث يعطى الكمية f_{xl} بالعبارة التالية:

$$f_{xl} = \frac{1}{1 - T_x T_l G_0(x, l) G_0(l, x)} \quad (4.24)$$

كما أن الكمية t_x تعطى بالعبارة التالية:

$$t_x = \frac{\varepsilon_x}{[1 - \varepsilon_x G_0(x, x)]} \quad (4.25)$$

النتائج و المناقشة:

أولاً:

يمكن تمثيل العبارات الرياضية السابقة على شكل مخططات كما سوف نوضحه في الشكل 4-1، حيث قمنا برسم جميع الخطوط من الموقع (i) إلى الموقع (j)، أما المواقع الوسطية فهي عبارة عن مواقع تشتتات بسبب وجود الشوائب (l)، (m) و (s) والتي يمثلها الارتباط الخطي (x).

ولذلك فالمساهمة الكلية للجزء (a) من المخطط الممثل في الشكل 4-1 يمكن التعبير عنها كما يلي:

$$\begin{aligned} & G_0(j, l)t_l G_0(l, i) + G_0(j, l)t_l G_0(l, x)t_x G_0(x, l)t_l G_0(l, i) + \dots \\ & = G_0(j, l)t_l G_0(l, i)\{1 + t_l G_0(l, x)t_x G_0(x, l) + [t_l G_0(l, x)t_x G_0(x, l)]^2 + \dots\} \\ & = G_0(j, l)t_l G_0(l, i)f_{xl} \end{aligned} \quad (4.26)$$

وبنفس الطريقة نجد المساهمة الكلية (b, c) وكذلك الجزء (d) في الشكل 4-1

$$G_0(j, x)t_x G_0(x, i)f_{xl} \quad (a)$$

$$G_0(j, x)t_x G_0(x, i)t_l G_0(l, i)f_{xl} \quad (b)$$

$$G_0(j, l)t_l G_0(l, i)t_x G_0(x, i)f_{xl} \quad (c)$$

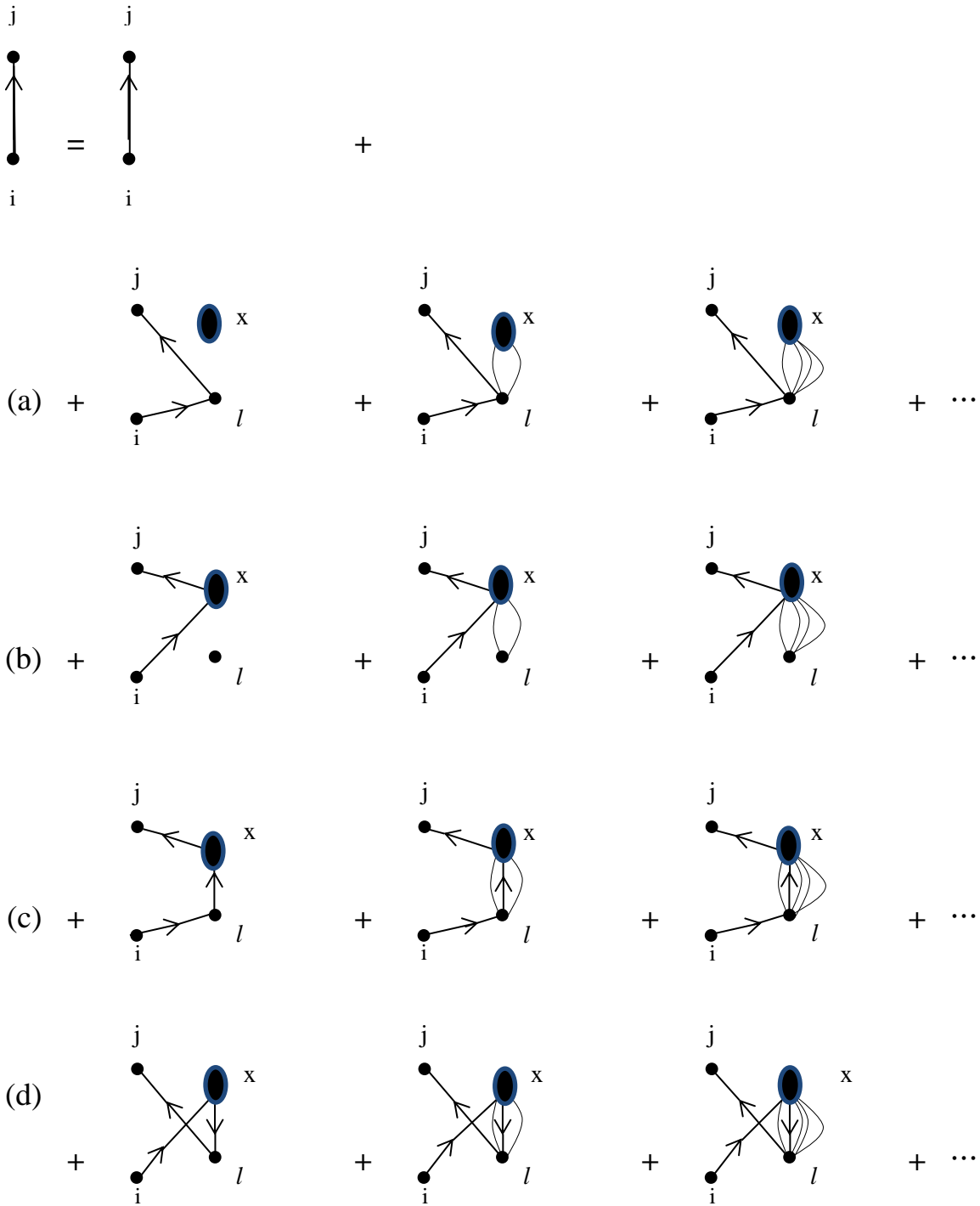
وبالتالي يمكن التعبير عن المخططات الموضحة في الشكل 4-1 بالعبارة الرياضية التالية:

$$G(j, i) = G_0(j, i) + \langle j | G_0(T_l + T_x + T_l G_0 T_x + T_x G_0 T_l) G_0 | i \rangle f_{xl} \quad (4.27)$$

ثانياً:

يمكن تفسير هذه المخططات فيزيائياً كما يلي:

- الخطوط من (i) إلى الموقع (j) تعني انتشار دون تشتت وهي تمثل $G_0(j, i)$.
- أما في المجموعة (a) فيمكن تفسير المخططات فهو عبارة عن انتشار من الموقع (i) إلى موقع الشائبة (l) يعبر عنه الحد $G_0(l, i)$ بسعة تشتت قدرها t_l ثم يتم بعد ذلك انتشار من (l) إلى (j) ويعبر عنه الحد $G_0(j, l)$.
- يمكن تفسير جميع المخططات السابقة بنفس الطريقة:



الشكل 4-1: مخطط الحدود المساهمة في دالة غرين في وجود ثلاثة شوائب بعد إدخال الارتباط الخطي x .

الخاتمة

الخاتمة

تختلف كيفية دراسة تأثير الشوائب حسب طبيعة البحث و الامكانيات المتوفرة والتي تكون في الغالب تجريبية ، ولكن توجد أيضا طرق نظرية يمكنها أن تعطي نتائج ممتازة مقارنة بالتجربة أو عملية المحاكاة.

وتعتبر دوال غرين من الوسائل الرياضية الرائدة في هذا المجال حيث نجدها في جميع تخصصات الفيزياء، فهذه الدوال ورغم شكلها الرياضي المجرد ، إلا أنها على صلة مباشرة بالمعاني الفيزيائية للنتائج ، كما أن عملية تمثيلها على شكل مخططات يسهل عملية الحساب أكثر ، ويصبح الانتقال السلس بين الكتابة الرياضية والمخططات والمعاني الفيزيائية ممكنا.

كنا نهدف من خلال هذا العمل إلى دراسة كيفية تأثر الخواص الالكترونية للمواد الصلبة في وجود ثلاثة شوائب مختلفة ، وحيث أن هذا يتطلب الكثير من الوقت في الحسابات النظرية والتفسيرات الفيزيائية، ونظرا لعدم كفاية الوقت فقد اقتصرنا على استخراج دوال غرين وتفسيرها باستخدام مخططات.

حيث اقترحنا نوع من الارتباط الخطي بين الحالات الكمية لاثنين من الشوائب الثلاثة، وهذا أعطى دوال غرين مكونة من عدة حدود تمكنا من تفسيرها على شكل عمليات تشتت بسبب وجود الشوائب.

قائمة المصادر والمراجع

قائمة المراجع

1. L. Fetter and J. D. Walecka. Quantum Theory of Many-Particle Systems. McGraw-Hill, New York, 1971.
2. C. Kittel. Introduction to Solid State Physics. Wiley, New York, seventh edition, 1996.
3. D. G. Duffy. Green's Functions with Applications. Chapman and Hall/CRC, Boca Raton, FL, 2001.
4. De B.D. Gupta , Mathematical Physics, 4th Edition, VIKAS PUBLISHING HOUSE , New Delhi 2010
5. De P. K. Chattopadhyya , Mathematical Physics , New age international, New Delhi 1990
6. De Robert Mills, Propagators for Many-particle Systems: An Elementary treatment, Gordon and Breach science publishers, 1969
7. De S. D. Joglekar Mathematical Physics: The Basics, Universities press 2005
8. F. W. Byron and R. W. Fuller. Mathematics of Classical and Quantum Physics. Dover, reprint edition, 1992.
9. H. Ibach and H. Lüth. Solid State Physics: An Introduction to Theory and Experiment. Springer, Berlin, 1991.
10. Stakgold. Green's Functions and Boundary Value Problems. Wiley, New York, second edition, 1998.
11. J. C. Slater and G. F. Koster. Phys. Rev., 94(6):1498–1524, 1954.
12. J. Callaway and A. Hughes. Phys. Rev., 156:860, 1967.
13. J. J. Sakurai. Modern Quantum Mechanics. Addison-Wesley, Reading, MA, 1994.
14. L. D. Landau and E. M. Lifshitz. Quantum Mechanics. Pergamon, Oxford, third edition, 1977.
15. M. P. Marder. Condensed Matter Physics. Wiley-Interscience, New York, 2000.
16. Mathews and R. L. Walker. *Mathematical Method of Physics*. Addison- Winston, London, 1976.
17. N. N. Bogoliubov and D. V. Shirkov. Introduction to the Theory of Quantized Fields. Wiley-Interscience, New York, 1959.
18. N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. Solid State Physics. Holt, Rinehart &
19. P. Sheng. Introduction to Wave Scattering, Localization and Mesoscopic Phenomena. Academic, San Diego, 1995.
20. W. A. Harrison. Electronic Structure and the Properties of Solids. W. H. Freeman, San Francisco, 1980. Reprinted by Dover, New York, 1989.
21. W. A. Harrison. Phys. Rev. B, 24(10):5835–5843, 1981.
22. Wesley, Reading, MA, second edition, 1970.

المُلخَص

ملخص

تؤثر الشوائب بشكل كبير على الخواص الالكترونية للمواد ، وتلعب دوال غرين دور مهم في دراسة هذه التأثيرات . قمنا باستخراج مخططات انتشار الالكترونات في وجود ثلاثة شوائب باستخدام دوال غرين وفسرنا المعنى الفيزيائي لكل حد من الحدود ، حيث أن اعتبار تركيبات خطية للمدارات الذرية للشوائب يسهل عملية الحساب بشكل ملحوظ.

الكلمات المفتاحية

شوائب، خواص الكترونية ، دوال غرين ، تركيب خطي.

Abstract

The impurities greatly affect the electronic properties of materials, and Green's functions plays an important role in studying these effects. We extracted the electron diffusion schemes in the presence of three impurities using the Green's functions and explained the physical meaning of each part, where we found that the use of linear combinations of atomic orbits of impurities makes calculation easier.

key words

Impurities, electronic properties, Green, linear combinations.

Résumé

Les impuretés affectent grandement les propriétés électroniques des matériaux, et les fonctions de Green joue un rôle important dans l'étude de ces effets. Nous avons extrait les schémas de diffusion d'électrons en présence de trois impuretés en utilisant les fonctions de Green et expliqué la signification physique de chaque partie, où nous avons trouvé que l'utilisation de combinaisons linéaires d'orbitales atomiques d'impuretés facilite le calcul.

Mots clés

Impuretés, propriétés électroniques, Green , combinaisons linéaires.