

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
The People's Democratic Republic of Algeria
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
Ministry for Higher Education and Scientific Research

Larbi Tebessi University - Tebessa -

Faculty of exact sciences and natural sciences and life

Departement of Material sciences

جامعة العربي التبسي - تبسة -

كلية العلوم الدقيقة وعلوم الطبيعة والحياة

قسم: علوم المادة



مذكرة تخرج لنيل شهادة ماستر

Graduation note to get Master certificate

Field: Material sciences

الميدان: علوم المادة

Division: Physics

الشعبة: فيزياء

Specialization: Condensed Matter Physics

التخصص: فيزياء المادة المكثفة

دراسة نظرية لتطبيقات ممكنة لوصلات النقاط الكمومية وفق نموذج أندرسون

من إعداد:

❖ مصار هشام

❖ روابحية نادر

لجنة المناقشة:

رئيسا

جامعة العربي التبسي

بروفيسور

❖ بن مخلوف فلة

مشرفا

جامعة العربي التبسي

أستاذ محاضر - ب -

❖ بوديار عبيد

ممتحنا

جامعة العربي التبسي

أستاذ محاضر - ب -

❖ قيرواني تقي الدين

تاريخ المناقشة: 2020/06/29

التقدير:

العلامة:



Déclaration sur l'honneur de non-Plagiat
(À joindre obligatoirement au mémoire; Remplie et signée)

Nous soussignons

Nom, prénom: Messar Hicham & Rowabhia Nader

N° de carte d'étudiant: (1) 34022183/2014 (2) 34028228/2015

Régulièrement inscrits (es) en **Master** au **Département Sciences de la Matière**

Année universitaire: **2019/2020**

Domaine: **Sciences de la matière**

Filière: **Physique**

Spécialité: Physique de la matière condensée

Intitulé du mémoire: دراسة نظرية لتطبيقات ميكانيكا لوس في السائل الكهروضوئية وفق نموذج أندرسون

Attestons que notre mémoire est un travail original et que toutes les sources utilisées ont été indiquées dans leur totalité. Nous certifions également que nous n'avons ni recopié ni utilisé des idées ou des formulations tirées d'un ouvrage, article, ou mémoire, en version imprimée ou électronique, sans mentionner précisément leur origine et que les citations intégrales sont signalées entre guillemets.

Sanctions en cas de plagiat prouvé:

Les étudiants seront convoqués devant le conseil de discipline, les sanctions prévues selon la gravité du plagiat sont:

- L'annulation du mémoire avec possibilité de le refaire sur un sujet différent.
- L'exclusion d'une année du master.
- L'exclusions définitive.

28 أكتوبر 2020
مجلس رئيس المجلس الشعبي البلدي
ويعتقد بيضاء منها (1):
مجلس رئيسي للأقاليمية (2):

Fait à Tébessa, le:

Signature des étudiants (es):

(Handwritten signature)



Formulaire de levée de réserves après soutenance d'un Mémoire de Master

Données d'identification du candidats(es) :

Nom et prénom du candidat (1): مصار هشام

Nom et prénom du candidat (2): روابحية نادر

Intitulé du Sujet : دراسة نظرية لتطبيقات ممكنة لوصلات
النقاط الكمومية وفق نموذج أندرسون

Données d'identification du membre de jury :

Nom et prénom : بن مخلوف فلة

Grade : أستاذة التعليم العالي

Lieu d'exercice : جامعة العربي التبسي - تبسة

Vu le procès-verbal de soutenance de la thèse sus citée comportant les réserves suivantes :

أخطاء كتابية

تحسين المراجع

إعادة ترتيب المراجع

Et après constatation des modifications et corrections suivantes :

تصحيح الأخطاء

المراجع محسنة

المراجع مرتبة

Je déclare en ma qualité de président de jury de soutenance que le mémoire cité remplit toutes les conditions exigées et permet au candidat de déposer son mémoire en vue de l'obtention de l'attestation de succès.

Le.....2020 / 10 / 26.....

Président de jury de soutenance : (Nom/Prénom et signature)

فلة بن مخلوف

سُبْحَانَكَ اللَّهُمَّ رَبِّ السَّمَاوَاتِ السَّبْعِ وَرَبُّ الْعَرْشِ الْمَجِيدِ



تشكرات

باسمك اللهم نلتعن على أمور الدنيا والدين، وبك آمنا وعليك توكلنا وإليك المصير
لا مانع لما أعطيت، ولا معطي لما منعت، ولا راداً لما قضيت. أنت على كل شيء قدير.
لك الحمد ال كثير والشكر الدائم، والسلام على سيدنا محمد الداعي إلى سبيل ربه
بالحكمة والموعظة
الحسنة وعلى آله وصحبه، والذين يستمعون القول فيتبعون أحسنه أما بعد...

هي كلمة أبت إلا الحضور هي كلمة شكر وتقدير الله عز وجل الذي وفقنا في إتمام هذه المذكرة في
أحسن الأحوال. نتقدم بأسمى آيات الشكر والامتنان والتقدير والمحبة، إلى الذين حملوا أقدس رسالة في
الحياة، إلى الذين مهدوا لنا طريق العلم والمعرفة ونخص بالتقدير والشكر الأستاذ الفاضل الذي لم يجخل
علينا بمساعداته وتوجيهاته ونصائحه من أجل هذا العمل المتواضع " الأستاذ الدكتور بوديار عبيد"
الذي تفضل بالإشراف على هذا البحث فجزاه الله عنا كل خير. كما نتقدم بالشكر والامتنان لأساتذة
جامعة العربي التبسي بتبسة وكل من أفادنا ولو بحرف وكل من كان سببا
في تعلمنا وتربيتنا بدءاً بالوالدين الكريمين اللذان هما أول مدرسة ينهل منها الأستاذ أصول العلم والمعرفة
والأخلاق...

مصبار هشام - رواجية نادر

إهداء

بعد حمده رب العالمين، وثنائه على أن أوصلنا لختام هاته السنين، وعلمنا أن العلم شريك أمين، يهديك الفطنة ويوصلك إلى المرموق، وينير لك دربك ويحل محل الشروق. ها نحن ذا نصل للنهاية، ونسعد بها ونفرح أن كانت أجمل رواية، وليس هناك أجمل من أن نرى ثمرات جهدنا وسعيينا نحو التفوق تنموا أمامنا، والآن آن وقت جنيها وقطفها، بفرحة انتهائنا من مذكرتنا وتخرجنا بإذنه عز وجل.

أهدي عملي ونجاحي إلى من أنارا دربي، وأروني الطريق وكانا معي طوال سنين حياتي، الى من قال فيهما الله تعالى **❖ وَأَخْفِضْ لَهُمَا جَنَاحَ الذَّلِيلِ مِنَ الرَّحْمَةِ وَقُلْ رَبِّي أَرْحَمُهُمَا كَمَا رَبَّيَانِي صَغِيرًا ❖**

❖ إلى من كرمها الله عز وجل أن رفع شأنها، ووضع الجنة تحت أقدامها، إلى من أعطتني الحياة وجعلتني رجلا... **إلى أمي الغالية.**

❖ إلى من كان نعم السند، وكان الأنيس والصديق ومفرج الكرب، إلى من لم ييخل علي يوماً بشيء، إلى من كان يتعب لرتاح ويجهد لننال ... **إلى أبي العزيز.**

❖ إلى من هما فرحة البيت وزينة الأيام ورفيقي دربي، إلى من لا تخلو أيامي منهما ولا يتوقف قلبي عن حبهما... **إلى أخي وأختي.**

❖ إلى كل من شاركني كلماته يوماً، إلى كل من بدت عليه علامات الاهتمام والتمني بالخير، إلى كل حبيب على القلب وكل عزيز على العين، إلى كل من عرفتهم في مشواري الدراسي، وكل **أصدقائي وأخوتي** أينما كانوا سعدت برفقتكم دائماً وأدام الله اجتماعنا...

وأخيراً...

إلى كل روح نقية أهدي نجاحي.



إهداء

بعد حمده رب العالمين، وعلمنا أن العلم شريكٌ أمين، يهديك الفطنة ويوصلك إلى المنشود، وينير لك دريك ويحل محل الشروق.

فبعد عناء طويل وشوق انتظرناه خلف مقاعد الدراسة، ها نحن ذا نصل للنهاية ونقف على عتبات التخرج ونسعد بها وفرح إن كانت أجمل رواية، وليس هناك أجمل من أن نرى ثمرات التعب والاجتهاد والسعي نحو التفوق ينتهي بتألق وفرح، وهنا نحن الان نقطفها بفرحة تخرجنا والحمد لله.

أهدي عملي ونجاحي إلى من أنارا دربي، وأروني الطريق وكانا معي طوال سنين حياتي، الى من قال فيهما الله تعالى **❖ وَأَخْفِضْ لَهُمَا جَنَاحَ الذَّلِيلِ مِنَ الرَّحْمَةِ وَقُلْ رَبِّي أَرْحَمُهُمَا كَمَا رَبَّيَانِي صَغِيرًا ❖**

❖ إلى أول كلمة نطقت بها لساني في الحياة ... **إلى أبي العزيز.**

❖ إلى أول من انتظر هذه اللحظات لتفتخر بي إلى سندي في الحياة... **إلى أمي الغالية.**

❖ إلى من أستمد منهم الأمان الذين لا يطيب العمر إلا بوجودهم رياحين حياتي الى من

حبهم يجري في عروقي ويلهج بذكر لهم فؤادي... **إلى أخي وأختي.**

❖ إلى أساتذتي الأفاضل من بداية المشوار وحتى هذه اللحظة الجميلة، إلى كل من

وقف معي وساندني في طول مسيرتي الدراسية ولو بكلمة أو بدعاء، إلى كل من كتبهم قلبي ولم يكتبهم قلبي، إلى كافة طلاب قسم علوم المادة ماستر 2 دفعة 2019/2020...

وأخيراً...

أبارك لكل أصدقائي الذين سوف يتخرجوا معي ونسأل الله أن يوفقنا في تحقيق الأماني والنجاحات وفي خدمة بلدنا العزيز.

رواحية نادر

❖ الفهرس:

III فهرس الأشكال
V فهرس الرموز
(1) مقدمة عامة

I. الفصل الأول: دراسة دوال Green وتطبيقاتها على المواد.

(2) 1.I مقدمة
(2) 2.I دوال الترابط Correlation functions
(2) 1.2.I تعريف دوال الترابط
(2) 2.2.I دالة الترابط السبينية T
(3) 3.2.I دالة الترابط المتأخرة R
(3) 4.2.I دالة الترابط المتقدمة A
(3) 3.I دوال Green
(5) 4.I المعنى الفيزيائي لدوال Green
(6) 5.I دالة الطيف وكثافة الطيف لدوال Green
(7) 6.I معادلة الحركة حسب دوال Green
(8) 7.I دراسة غاز من الإلكترونات غير المتفاعلة
(9) 8.I دراسة امتصاص ذرة على الجرافين
(9) 1.8.I تعريف الجرافين
(10) 2.8.I خصائص الجرافين
(10) 1.2.8.I البنية البلورية
(11) 2.2.8.I مصفوفة الربط القوي (البنية الإلكترونية ودراسة الهاميلتوني)
(14) 3.2.8.I الشبكة المعكوسة للجرافين
(15) 4.2.8.I الخصائص الإلكترونية
(15) 5.2.8.I الخصائص الحرارية
(16) 6.2.8.I الخصائص الضوئية
(16) 3.8.I دراسة نظرية باستعمال دوال Green لامتناس ذرة على سطح الجرافين

II. الفصل الثاني: دراسة النقاط الكمومية ذات مستوى وحيد..

(20) 1.II مقدمة
(20) 2.II النقاط الكمومية وخصائصها
(20) 1.2.II تعريف النقطة الكمومية
(21) 2.2.II خصائص النقاط الكمومية
(21) 1.2.2.II كثافة الحالة للإلكترونات
(21) 2.2.2.II النقاط الكمومية وميكانيك الكم
(22) 3.2.2.II الخصائص الضوئية للنقاط الكمومية
(24) 3.II دراسة نقطة كمومية ذات مستوى وحيد
(24) 4.II دراسة النقطة الكمومية ذات مستوى طاقي وحيد باستعمال معادلة الحركة

III. الفصل الثالث: دراسة النقاط الكمومية في حالة اتصال مع معدن حسب نموذج اندرسون

(27) 1.III مقدمة
(27) 2.III نموذج أندرسون لهاميلتوني نقطة كمومية في اتصال مع معدن
(28) 3.III دراسة معادلة الحركة لنقطة كمومية في اتصال مع معدن وفق نموذج اندرسون
(30) 4.III دراسة مفعول النفق في النقاط الكمومية المتصلة مع سطح معدن

IV. الفصل الرابع: دراسة نظرية لتطبيقات عدسات المجهر الالكتروني ومبدأ استعمال الغرافين والنقاط الكمومية في تحسينها

- (35) 1.IV مقدمة
- (35) 2.IV المجهر الإلكتروني
- 3.IV المجهر الإلكتروني الماسح والنافذ Scanning and transmission Electron Microscope
- (36) 1.3.IV المركبات الأساسية لكل من SEM و TEM
- (37) 1.1.3.IV المدفع الإلكتروني Electron Gun
- (38) 2.1.3.IV العدسات الكهرومغناطيسية Electromagnetic Lenses
- (40) 2.3.IV تفاعل الإلكترونات مع العينة في كل من SEM و TEM
- (41) 3.3.IV عيوب العدسات الكهرومغناطيسية المستعملة في المجهر الإلكتروني
- 4.IV دراسة نظرية لأحد تطبيقات الغرافين والنقاط الكمومية في تعويض العدسات الكهرومغناطيسية
- (42) بعدسات كمومية
- (42) 1.4.IV مبدأ الدراسة
- (44) 2.4.IV الدراسة الكمية
- (48) 3.4.IV النتائج والمناقشة
- (55) نتيجة عامة
- (56) المراجع

❖ فهرس الأشكال:

I. الفصل الأول: دراسة دوال Green وتطبيقاتها على المواد.

- الشكل I.1: التفسير الفيزيائي لدوال Green وكيفية تأثيرها على الجسيمات. (6)
 الشكل I.2: نموذج TEM الشبكة السداسية للجرافين..... (9)
 الشكل I.3: نموذج STM للجرافين يوضح ترسبه على SiC..... (10)
 الشكل I.4: المتجهات الأولية a_1 و a_2 المتخذة للخلية الأولية في الجرافين..... (11)
 الشكل I.5: التهجين sp^2 لذرة الكربون مع توضيح للروابط σ و π (11)
 الشكل I.6: الخلايا الأربع الأولى المختارة كمرجع لدراسة شبكة الجرافين..... (12)
 الشكل I.7: منطقة بريلوين الأولى في الجرافين..... (14)
 الشكل I.8: مخروط ديراك..... (15)
 الشكل I.9: على اليمين: نفاذية الضوء عبر طبقة وحيدة أو طبقتين من الجرافين. على اليسار: نفاذية الضوء عبر عدة طبقات من الجرافين معرفة بأنها تكون أقل بنسبة مضاعفة لأعداد صحيحة للنسبة المحصل عليها من طبقة وحيدة..... (16)
 الشكل I.10: الذرات الحمراء هي ذرات ممتصة على سطح الجرافين بينما الأرقام تمثل مواضع امتصاصها..... (16)
 الشكل I.11: منحني يمثل وصف لكثافة احتمال عن طريق توزيع لورنتز..... (17)

II. الفصل الثاني: دراسة النقاط الكمومية ذات مستوى وحيد.

- الشكل II.1: أنواع الحجز المطبقة على الإلكترونات في المواد..... (20)
 الشكل II.2: كثافة الحالة للإلكترونات في البئر الكومي، السلك الكومي والنقطة الكمومية..... (21)
 الشكل II.3: مقارنة بين أطيايف الطاقة..... (22)
 الشكل II.4: مقارنة بين مدار ذرة الهيدروجين والنقطة الكمومية..... (22)
 الشكل II.5: الترددات الناتجة عن تغير فجوات النطاق لانتقال الإلكترونات..... (23)
 الشكل II.6: أطوال الأمواج الصادرة عن نقاط كمومية مختلفة الحجم ومن نفس المادة..... (23)
 الشكل II.7: طاقة النقطة الكمومية في حالة وجود الكترون وحيد وفي حالة وجود الكترونين..... (24)

III. الفصل الثالث: دراسة النقاط الكمومية في حالة اتصال مع معدن حسب نموذج اندرسون.

- الشكل III.1: طبقة عازلة رقيقة تفصل بين معدن ونقطة كمومية حيث أن الإلكترونات تتبادل نفقيا بين المعدن والنقطة..... (27)
 الشكل III.2: الكترونين من المعدن مفصولين بطبقة عازلة. في (a) لم يطبق أي جهد انحياز لذا يكون النظام في توازن، أما في (b) يوجد جهد انحياز مطبق لذا نلاحظ اختلاف في كمون الإلكترونين..... (30)
 الشكل III.3: (a) يمثل الكترونين مفصولين تماما $H_T = 0$ ، أما (b) فيمثل الكترونين في اتصال عن طريق طبقة عازلة رقيقة $H_T \neq 0$ (31)

IV. الفصل الرابع: دراسة نظرية لتطبيقات عدسات المجهر الإلكتروني ومبدأ استعمال الجرافين والنقاط الكمومية في تحسينها.

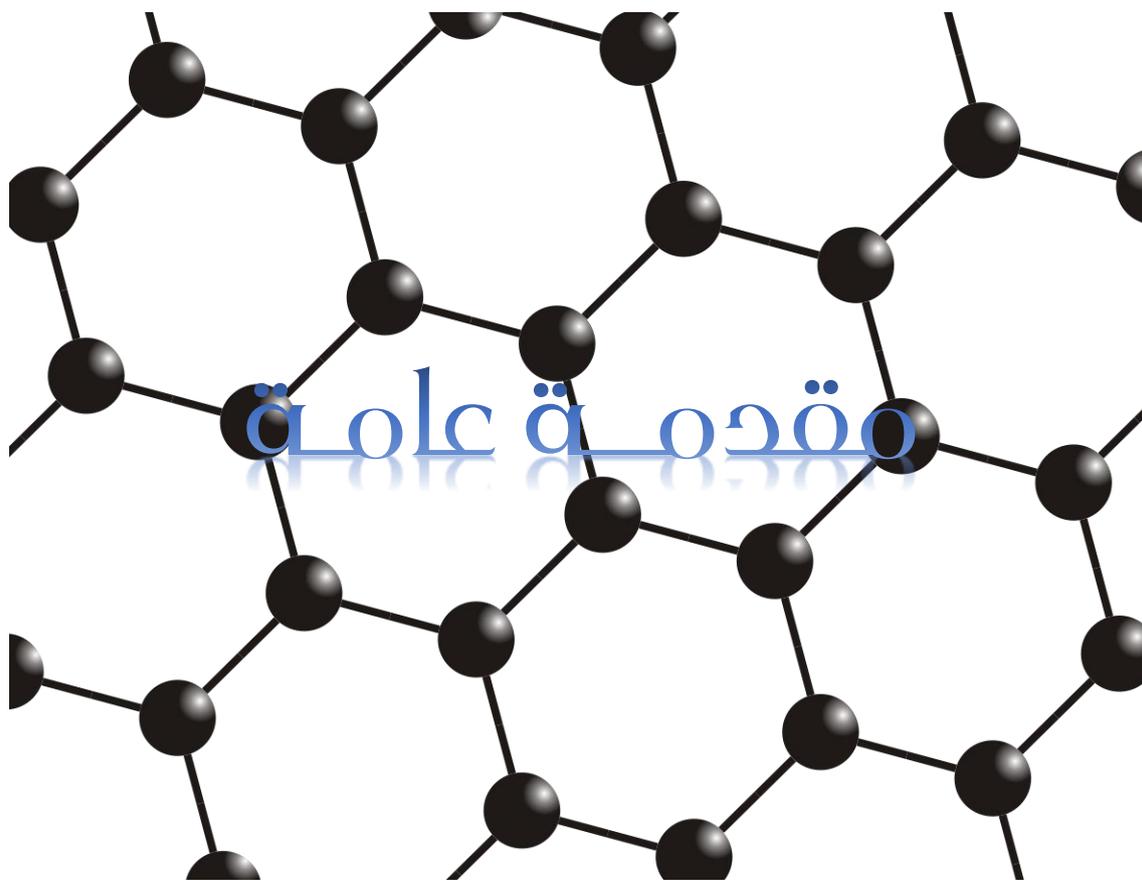
- الشكل IV.1: حدود دقة تقنيات التصوير المختلفة مقارنة بحجم بعض الأجسام..... (36)
 الشكل IV.2: المجهر الإلكتروني الماسح والنافذ..... (36)
 الشكل IV.3: المكونات الأساسية لكل من SEM و CLSM..... (37)
 الشكل IV.4: المكونات الأساسية لكل من TEM و WLM..... (37)
 الشكل IV.5: مختلف أنواع مصادر الإلكترونات وخصائصها (الصورة توضح باعث Schottky)..... (38)
 الشكل IV.6: A- مكونات العدسة الكهرومغناطيسية. B- مسار الإلكترونات عبر العدسة..... (39)

- الشكل 7.IV: الانحراف اللايوري المحوري للإلكترونات والذي يعطي صور مشوهة حسب انحرافه مع المحاور وكذا عن البؤرة.....
- (39) الشكل 8.IV: تصحيح الانحراف اللايوري المحوري للصورة باستعمال اللغائف المصححة.....
- (40) الشكل 9.IV: تفاعل الكترون مع ذرة تحت المجهر الإلكتروني.....
- (41) الشكل 10.IV: تفاعل الكترون مع عينة وتبيين مختلف الاشعاعات والانبعاثات (الطرف العلوي خاص ب SEM والسفلي ب TEM).....
- (41) الشكل 11.IV: a- اختراق الأشعة الإلكترونية للعدسة. b- طبقيه الغرافين والنقاط الكمومية المشكلة للعدسة.....
- (42) الشكل 12.IV: منحنى بياني لتفاعل التبادل.....
- (42) الشكل 13.IV: قيمة معامل الانتشار والانعكاس لحزمة إلكترونية ضعيفة الطاقة تمر عبر الغرافين.....
- (43) الشكل 14.IV: توضيح كيفية انحراف الإلكترونات المستقطبة أثناء عبورها سطح الغرافين بسبب التفاعل spin-spin.....
- (43) الشكل 15.IV: شكل يظهر التشابه بين العدسة الضوئية والعدسة المدروسة.....
- (44) الشكل 16.IV: توضيح لأشعة الموضع المختلفة على العدسة.....
- (44) الشكل 17.IV: دراسة اسقاطات الأشعة بالنسبة لكرة أحد خطوطها هو العدسة.....
- (47) الشكل 18.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 0.5$
- (48) الشكل 19.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 1$
- (49) الشكل 20.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 2$
- (49) الشكل 21.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 3$
- (49) الشكل 22.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 4$
- (50) الشكل 23.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 5$
- (50) الشكل 24.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 6$
- (50) الشكل 25.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 7$
- (51) الشكل 26.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 8$
- (51) الشكل 27.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 10$
- (51) الشكل 28.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 11$
- (52) الشكل 29.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 15$
- (52) الشكل 30.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 20$
- (52) الشكل 31.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 30$
- (53) الشكل 32.IV: ظهور الأشكال الدائرية في توزيع كثافة التفاعل $J(r)$
- (53)

❖ فهرس الرموز:

دالة الترابط المتقدمة.	C_{AB}^T
دالة القسمة.	Z_G^{-1}
دالة الترابط المتأخرة.	C_{AB}^R
تحويل هايزنبرغ لمؤثر A .	\tilde{A}
الهاملتوني.	H
مؤثر يرتب الزمن.	T
القيمة المتوسطة الحرارية لدالة M .	$\langle M \rangle$
دالة الخطوة.	$\theta(t - t')$
دالة Green.	G
دالة Green المتأخرة.	G^R
دالة Green المتقدمة.	G^A
دالة الطيف.	p
دالة كثافة الطيف.	A
كثافة الحالات لكل سبين في الجرافين.	D_σ
مؤثر الهدم في الجرافين.	$c_{k\sigma}$
مؤثر الإنشاء في الجرافين.	$c_{k\sigma}^\dagger$
مؤثر الهدم في النقطة الكمومية.	d_σ
مؤثر الإنشاء في النقطة الكمومية.	d_σ^\dagger
طاقة الالكترن.	ϵ
مؤثر العد.	n
التيار النفقي.	I
كمون التفاعل.	V_{kq}
مرافق كمون التفاعل.	V_{kd}^*
المرافق الهرميتي.	$H.C$
طول موجة الأشعة.	λ
كمية الحركة.	P
دالة دلتا ديراك.	$\delta(x)$
مسقط السبين.	σ
هاميلتوني المعدن.	H_e
هاميلتوني النقطة الكمومية.	H_D

هاميلتوني التفاعل بين المعدن والنقطة الكمومية (النقي).	H_T
الكمون الكيميائي.	μ
هاميلتوني التفاعل $RKKY$.	H_{RKKY}
دالة تفاعل التبادل.	$J(r)$
تابع كروي.	Y_l^m
نصف قطر فيرمي.	k_F

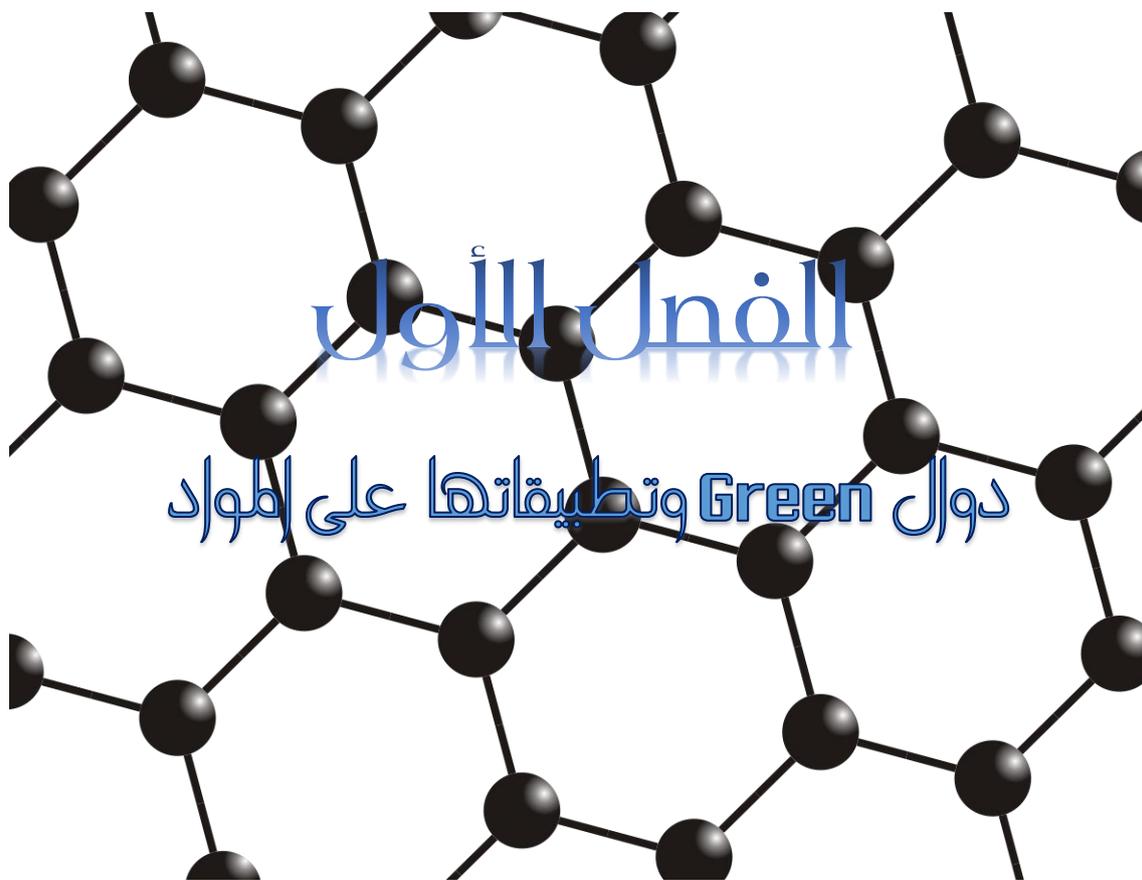


❖ مقدمة عامة:

من الواضح أن الكثير منا قد أصبح على دراية كبيرة بتأثير وفضل التطور التكنولوجي بكل أنواعه في شتى المجالات وكذا مختلف استعمالاته في الحياة اليومية عامة، والدراسات العلمية خاصة والتي تعبر عن القوة الهائلة والفائدة العظيمة للتطورات التكنولوجية المختلفة التي يقدمها العلماء، ولقد كانت البداية باكتشاف الالكترونات وذلك ما أدى إلى ثورة من الاختراعات، ويومًا بعد يوم اتسعت رقعة الاكتشافات وصولاً إلى المجاهر الإلكترونية التي أصبحت جزءاً لا يتجزأ من أي دراسة فيزيائية، كيميائية أو بيولوجية، ثم توالى هاته الدراسات لتطوير عمل وكفاءة هاته الأخيرة، وبإكتشاف الجرافين والنقاط الكمومية أصبح تفكير العلماء في كيفية استعمالها وتوظيفها في دراسات جديدة لإعطاء الأجهزة كفاءة أكثر وكذا تخفيض كميات استهلاك الطاقة كونها جيدة من هذه النواحي.

ورغبة منا في تعميق معارفنا وكفاءتنا والاطلاع عن كثب على دراسة طريقة تعويض العدسات الكهرومغناطيسية الموجودة في المجهر الإلكتروني كونها كبيرة الحجم ومستهلكة للطاقة، بعدسات جديدة مكونة من الجرافين والنقاط الكمومية، وبغرض الولوج في عالم الدراسات الكمية لهذا النظام الجديد، اخترنا أن نتطرق إلى دراسة شاملة والتي تمحورت حول دراسة نظرية لتطبيقات ممكنة لوصلات النقاط الكمومية وفق نموذج أندرسون، وحتى لا نكون بعيدين عن الاحتواء والفهم الجيد لمذكرتنا من كل النواحي قمنا بوضع الخطوط العريضة لعملنا إذ سنتطرق إلى عدة فصول:

- ✓ الفصل الأول من هذا العمل هو دراسة لدوال Green وتطبيقاتها على المواد، حيث سنتعرف على شكل هذه الدوال، أنواعها وأهم المصطلحات والعلاقات الواردة في هذه الدراسة وتطبيقاتها على الجرافين.
- ✓ ثم عرجنا في الفصل الثاني إلى شرح تفصيلي لدراسة النقاط الكمومية ذات مستوى وحيد، حيث قمنا بالتعريف الشامل للنقاط الكمومية وخصائصها وكذا دراستها باستعمال دوال Green.
- ✓ مروراً بالفصل الثالث والذي يحتوي على دراسة شاملة لنقاط كمومية في اتصال مع معدن وفقاً لنموذج أندرسون.
- ✓ وصولاً للفصل الرابع الذي قمنا فيه بدراسة نظرية لتطبيقات النقاط الكمومية والجرافين في عدسات المجهر الإلكتروني.



1.I مقدمة :

إن الحسابات النظرية لجملة متعددة الجسيمات معقدة جدا، هذه الأخيرة تنقسم إلى قسمين هما الفيرميونات والبوزونات حيث تُظهران خواص مختلفة تماما. فالفيرميونات (الكواركات بأنواعها واللبتونات كالألكترونات والميونات وغيرها) وهي جسيمات مسؤولة عن بناء المادة. دورانها المغزلي يساوي عدد نصف صحيح وتخضع لإحصاء فيرمي - ديراك Fermi-Dirac Statistics وتخضع أيضا لمبدأ الاستبعاد لباولي Pauli exclusion principal الذي ينص على أنه لا يمكن لاثنتين من الفيرميونات أن يشغلا نفس الحالة الكمية. أما البوزونات (كالفوتونات مثلا) هي جسيمات مسؤولة عن التفاعلات داخل المادة دورانها المغزلي يساوي عدد صحيح وتخضع لتوزيع بوز- آينشتاين Bose-Einstein Statistics حيث لا تخضع لمبدأ الاستبعاد لباولي، وتكون لها القدرة على شغل نفس الحالة الكمية في نظام ما، والمثير للاهتمام أن طيف الطاقة لهذه الجملة المتعددة الجسيمات يكون في حالة متصلة، والدوال الذاتية تكون معقدة وبالتالي الشكل الدقيق لطيف الطاقة ودوال الموجة لا يمكن حسابها ولا قياسها بالدقة اللازمة.

وحتى نتمكن من دراسة عمل النظام أو الجملة عندما تكون حرة أو في وجود حالة اضطراب خارجي، نستعمل وسيلة رياضية فعالة للقياس وهي دوال Green التي هي حالة خاصة لدوال الترابط المنفردة.

في هذا الفصل سوف نتعرف على ماهية دوال Green ومن أين أتت هذه الحسابات وسنعطي مثلا هاما في تطبيقاتها.

2.I دوال الترابط Correlation functions :

1.2.I تعريف دوال الترابط :

لتكن جملة مكونة من مجموعة جسيمات متطابقة وغير متفاعلة، هاميلتوني هذه الجملة لا يتعلق صراحة بالزمن، و \tilde{A} مؤثر يتعلق بـ c^+ و c .

يعرف تحويل هايزنبرغ كما يلي:

$$\tilde{A} = e^{\frac{i\tilde{H}t}{\hbar}} A e^{-\frac{i\tilde{H}t}{\hbar}} \dots\dots\dots(1)$$

$$\tilde{H} = H - \mu N \quad \text{حيث:}$$

حيث N هو مؤثر العدد، μ هو الكمون الكيميائي [1].

ومهما يكن المؤثرين \tilde{A} و \tilde{B} نعرف دالة الترابط للمؤثرين السابقين المتعلقين بالزمنين t و t' على التوالي:

$$C_{AB}(t, t') = \langle \tilde{A}(t), \tilde{B}(t') \rangle \dots\dots\dots(2)$$

توجد عدة أنواع من دوال الترابط وتتنوع حسب ما نريد دراسته نذكر منها:

2.2.I دالة الترابط السبينية T :

$$C_{AB}^T(t, t') = -i \langle T \tilde{A}(t), \tilde{B}(t') \rangle \dots\dots\dots(3)$$

حيث T يمثل مؤثر يرتب الزمن ويعرف كما يلي:

$$T\tilde{A}(t)\tilde{B}(t') = \begin{cases} \tilde{A}(t)\tilde{B}(t') & , \text{لما } t > t' \\ \pm \tilde{B}(t')\tilde{A}(t) & , \text{لما } t < t' \end{cases} \dots \dots \dots (4)$$

ومعلوم أن $\langle M \rangle$ تمثل القيمة المتوسطة الحرارية لدالة M ويتم حسابها كالآتي:

$$\langle M \rangle = Z_G^{-1} T_r [e^{-B\tilde{H}} . M] \dots \dots \dots (5)$$

3.2.I دالة الترابط المتأخرة R: سميت بالتأخرة لأن استجابة النظام أنت بعد الزمن t' وتعطي كالتالي :

$$C_{AB}^R(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \{\tilde{A}(t), \tilde{B}(t')\} \rangle \dots \dots \dots (6)$$

حيث $\theta(t - t')$ هي دالة الخطوة وهي تعبر عن تأثير الزمن في الحسابات حيث تكون:

$$\theta(t - t') = \begin{cases} 0, & t < t' \\ 1, & t \geq t' \end{cases} \dots \dots \dots (7)$$

4.2.I دالة الترابط المتقدمة A: سميت بالمتقدمة لأن استجابة النظام أنت قبل الزمن t' وتعطي كالتالي:

$$C_{AB}^A(t, t') = -i\theta(t' - t) \langle \{\tilde{A}(t), \tilde{B}(t')\} \rangle \dots \dots \dots (8)$$

حيث $\theta(t' - t)$ هي دالة الخطوة وهي تعبر عن تأثير الزمن في الحسابات حيث تكون:

$$\theta(t' - t) = \begin{cases} 0, & t' < t \\ 1, & t' \geq t \end{cases} \dots \dots \dots (9)$$

- **ملاحظة:** تعبر القيمة $\langle \{\tilde{A}(t), \tilde{B}(t')\} \rangle$ عن القيمة المتوسطة الحرارية للمبدل المتعلق بمؤثرين مختلفين في نظام معين مكون من جسيمات، يمكن لهذه الجسيمات أن تكون بوزونات او فرميونات لذا نستعمل المبدل أو المبدل المضاد حسب نوع الجسيمات التي يحتويها النظام [1].

3.I دوال Green:

تعتبر دوال Green حالة خاصة من دوال الترابط، حيث يكمن الاختلاف في أن دوال الترابط تعطي دراسة بين مؤثرين مختلفين لنظام معين، أما دوال Green فهي تدرس هذا الترابط اعتمادا على مؤثرات الحقل، فيتم استبدال كل من \tilde{A} و \tilde{B} بـ $\psi_{\sigma}(\vec{r})$ و $\psi_{\sigma}^+(\vec{r}')$ على الترتيب، وتسمى دوال الترابط في هذه الحالة بدوال Green المنفردة ويرمز لها بالرمز G. فتصبح على الشكل التالي [1]:

$$G(r\sigma t, r'\sigma' t') = -i \langle \psi_{\sigma}(rt) . \psi_{\sigma'}^+(r't') \rangle \dots \dots \dots (10)$$

تعطي مؤثرات الحقل بالشكل التالي:

$$\psi_{\sigma}(\vec{r}) = \sum_{n\sigma} \varphi_n(\vec{r}) c_{n\sigma} \dots \dots \dots (11)$$

ويعبر هذا المؤثر عن هدم جسيم ذو سبين σ في الموضع r .

$$\psi_{\sigma'}^+(\vec{r}') = \sum_{n'\sigma'} \varphi_{n'}(\vec{r}') c_{n'\sigma'}^+ \dots \dots \dots (12)$$

ويعبر هذا المؤثر عن إنشاء جسيم ذو سبين σ' في الموضع r' [1].

- ملاحظة: في حالة موجة مستوية نعرف دالة بلوخ التالية:

$$\psi_{\sigma}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{v}} \sum_k e^{ikr} c_{k\sigma} \dots \dots \dots (13)$$

$$\psi_{\sigma}^+(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{v}} \sum_k e^{-ikr} c_{k\sigma}^+ \dots \dots \dots (14)$$

وبما أن دوال Green هي حالة خاصة من دوال الترابط، فتصبح كالتالي:

• دالة Green المتأخرة:

$$G^R(r\sigma t, r'\sigma' t') = -i\theta(t - t') \langle [\psi_{\sigma}(rt), \psi_{\sigma'}^+(r't')]_{\mp} \rangle \dots \dots \dots (15)$$

• دالة Green المتقدمة:

$$G^A(r\sigma t, r'\sigma' t') = -i\theta(t' - t) \langle [\psi_{\sigma}(rt), \psi_{\sigma'}^+(r't')]_{\mp} \rangle \dots \dots \dots (16)$$

حيث:

$$[\psi_{\sigma}(\vec{r}), \psi_{\sigma'}^+(\vec{r}')] = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \dots \dots \dots (17)$$

$$[\psi_{\sigma}(\vec{r}), \psi_{\sigma'}(\vec{r}')] = [\psi_{\sigma}^+(\vec{r}), \psi_{\sigma'}^+(\vec{r}')] = 0 \dots \dots (18)$$

بصفة عامة تأخذ دوال Green في حالة أي أساس: $\{|\phi_1\rangle |\phi_2\rangle |\phi_3\rangle \dots \dots \dots\}$

$$\phi_v \rightarrow G^R(vt, v't') = -i\theta(t - t') \langle [c_v(t), c_{v'}^+(t')]_{\mp} \rangle \dots \dots \dots (19)$$

حيث v يحوي جميع الأعداد الكمية (n, l, m, σ) [1].

$$\phi_v \rightarrow G^R(nlm\sigma t, n'l'm'\sigma' t') = -i\theta(t - t') \langle [c_{nlm\sigma}(t), c_{n'l'm'\sigma'}^+(t')]_{\mp} \rangle \dots \dots \dots (20)$$

- ملاحظة: مما سبق الشكل العام لدوال Green لا يتغير إنما يتغير التمثيل الذي تعمل فيه وفي حالة عدم وجود

تأثيرات مغناطيسية تسبب انقلاب السبين فان احتمال تطور الجملة من σ الى σ' معدوم وبالتالي يمكن كتابة

دالة Green كما يلي [1]:

$$G^R(r\sigma t, r'\sigma' t') \rightarrow \delta_{\sigma\sigma'} G^R(rt, r't') \dots \dots \dots (21)$$

4.I المعنى الفيزيائي لدوال Green:

سنقوم بدراسة دالة Green في الحالة العامة الدالة $G(r\sigma t, r'\sigma' t')$ وذلك لمعرفة ماهية كل حد فيزيائيا إذن:

$$G(r\sigma t, r'\sigma' t') = -i \langle \psi_\sigma(r t) \cdot \psi_{\sigma'}^+(r' t') \rangle \dots \dots \dots (22)$$

$$+iG(r\sigma t, r'\sigma' t') = Z_G^{-1} T_r \{ e^{-\beta \tilde{H}} \psi_\sigma(r t) \psi_{\sigma'}^+(r' t') \} \dots \dots \dots (23)$$

نعلم أن:

$$\tilde{H}|n\rangle = \tilde{E}_n |n\rangle \dots \dots \dots (24)$$

إذن يمكننا كتابة الشكل التالي [2]:

$$iG(r\sigma t, r'\sigma' t') = Z_G^{-1} \sum_n \langle n | e^{-\beta \tilde{H}} \psi_\sigma(r t) \psi_{\sigma'}^+(r' t') | n \rangle \dots \dots \dots (25)$$

حيث:

$$\psi_\sigma(r t) = e^{-\frac{i\tilde{H}t}{\hbar}} \psi_\sigma(r) e^{\frac{i\tilde{H}t}{\hbar}} \dots \dots \dots (26)$$

$$\psi_{\sigma'}(r' t') = e^{-\frac{i\tilde{H}t'}{\hbar}} \psi_{\sigma'}(r') e^{\frac{i\tilde{H}t'}{\hbar}} \dots \dots \dots (27)$$

إذن:

$$iG(r\sigma t, r'\sigma' t') = Z_G^{-1} \sum_n e^{-\beta \tilde{E}_n} \langle n | e^{\frac{i\tilde{H}t}{\hbar}} \psi_\sigma(r) e^{-\frac{i\tilde{H}(t-t')}{\hbar}} \psi_{\sigma'}^+(r') e^{-\frac{i\tilde{H}t'}{\hbar}} | n \rangle \dots \dots \dots (28)$$

بأخذ كل من:

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{i\tilde{H}(t-t')}{\hbar}} \psi_{\sigma'}^+(r') e^{\frac{i\tilde{H}t'}{\hbar}} | n \rangle \dots \dots \dots (29)$$

$$\langle \beta | = \langle n | e^{\frac{i\tilde{H}t}{\hbar}} \psi_\sigma(r) \dots \dots \dots (30)$$

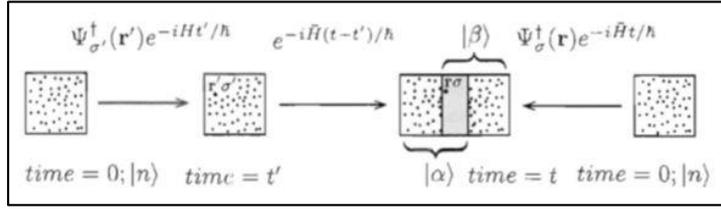
إذن تصبح العلاقة (28) على الشكل:

$$iG(r\sigma t, r'\sigma' t') = Z_G^{-1} \sum_n e^{-\beta \tilde{E}_n} \langle \beta | \alpha \rangle \dots \dots \dots (31)$$

الجداء السلمي $\langle \beta | \alpha \rangle$ يعبر عن سعة الاحتمال أن تتطور الجملة أو النظام من الحالة α إلى β .

- 1- انطلاقاً من اللحظة $t = 0$ ، الحالة $|n\rangle$ للنظام تتطور إلى غاية اللحظة t' .
- 2- عند اللحظة الزمنية t' ، يقوم المؤثر $\psi_{\sigma'}^+(r')$ بإنشاء جسيم يملك سبين σ' في النقطة r'
- 3- ينقل مؤثر التطور $e^{-\frac{i\tilde{H}(t-t')}{\hbar}}$ الجملة أو النظام من اللحظة t' إلى اللحظة t .

وبالتالي $|\alpha\rangle$ هي حالة النظام او الجملة عند اللحظة t ، وإذا أضيف جسم معرف بـ $(r'\sigma')$ في زمن سابق t' تكون المصفوفة $\langle\beta|\alpha\rangle$ هي سعة احتمال أن نجد الجملة المدروسة مع جسم خارجي معرف بـ $(r\sigma)$ عند اللحظة t [2].



الشكل 1.I: التفسير الفيزيائي لدوال Green وكيفية تأثيرها على الجسيمات [2].

5.I دالة الطيف وكثافة الطيف حسب دوال Green:

الكتابة الطيفية لأي مؤثر تكون على الشكل الموافق الذي أعطينا مثال عنه للهاميلتوني \hat{H} :

$$H = \mathbb{I} H \mathbb{I} = \sum_{n,m} |n\rangle\langle n|H|m\rangle\langle m| = \sum_{n,m} E_n |n\rangle\langle n|m\rangle\langle m| \dots \dots \dots (32)$$

تكتب دالة Green المتأخرة في حالة هاميلتوني مستقل عن السبين ومتناظرة إنسحابيا وليست إنسحابية [3].

$$G^R(r\sigma t, r'\sigma' t') = G^R(r - r', \sigma t) \dots \dots \dots (33)$$

ولدينا:

$$G^R(k\sigma, t) = -i\theta(t)\langle [C_{k\sigma}(t), C_{k\sigma}^+(0)]_{\mp} \rangle \dots \dots \dots (34)$$

حيث اعتبرنا أن الزمن $t' = 0$ ذلك لأن دوال Green تتعلق بالمجال الزمني من t' إلى t ، ونكتب:

$$C_{k\sigma}^+(0) \rightarrow C_{k\sigma}^+$$

$$\langle [C_{k\sigma}(t), C_{k\sigma}^+]_{\mp} \rangle = \langle C_{k\sigma}(t)C_{k\sigma}^+ \rangle_{\mp} - \langle C_{k\sigma}^+C_{k\sigma}(t) \rangle \dots \dots \dots (35)$$

الجزء الأول من الطرف الأيمن للمساواة (35) يمثل:

$$\langle C_{k\sigma}(t)C_{k\sigma}^+ \rangle = - \int_{-\infty}^{+\infty} p(k\sigma, \epsilon) e^{-i\epsilon t} \frac{d\epsilon}{2\pi} \dots \dots \dots (36)$$

الجزء الثاني من الطرف الأيمن للمساواة (35) يمثل:

$$\langle C_{k\sigma}^+C_{k\sigma}(t) \rangle = - \int_{-\infty}^{+\infty} p(k\sigma, \epsilon) e^{-i\epsilon(t-i\hbar\beta)} \frac{d\epsilon}{2\pi} \dots \dots \dots (37)$$

حيث $p(k\sigma, \epsilon)$ تمثل دالة الطيف وتعطى بالعلاقة:

$$p(k\sigma, \epsilon) = -2\pi 2_G^{-1} \sum_{n,m} \langle e^{-\beta\tilde{E}_n} | \langle m|C_{k\sigma}^+|n \rangle |^2 \delta\left(\epsilon - \frac{(\tilde{E}_n - \tilde{E}_m)}{\hbar}\right) \rangle \dots \dots (38)$$

بتعويض كل من العلاقة (36) و (37) في العلاقة (35) ثم تعوض هذه الأخيرة في العلاقة (34) نجد:

$$G^R(k\sigma, t) = -i\theta(t) \left(- \int_{-\infty}^{+\infty} p(k\sigma, \epsilon) e^{-i\epsilon t} \frac{d\epsilon}{2\pi} \pm \int_{-\infty}^{+\infty} p(k\sigma, \epsilon) e^{-i\epsilon(t-i\hbar\beta)} \frac{d\epsilon}{2\pi} \right) \dots (39)$$

باستعمال تحويل فورييه:

$$G^R(k\sigma, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} G^R(k\sigma, t) e^{i\omega t} dt \dots \dots (40)$$

وبما أن G^R تساوي الصفر من أجل $t < 0$:

$$G^R(k\sigma, \omega) = \int_0^{+\infty} G^R(k\sigma, t) e^{i\omega t} dt \dots \dots (41)$$

نعوض المعادلة (39) في المعادلة (41) (باخذ بعين الاعتبار دالة الخطوة التي حددت حدود التكامل في تحويل فورييه) ثم نقوم ببعض التبسيطات فنحصل على المعادلة التالية [3]:

$$G^R(k\sigma, \omega) = i \int_{-\infty}^{+\infty} p(k\sigma, \epsilon) (1 \mp e^{-\beta\hbar\epsilon}) \frac{d\epsilon}{2\pi} \int_0^{+\infty} e^{i(\omega-\epsilon)t} dt \dots \dots (42)$$

والتالي الطرف $(1 \mp e^{-\beta\hbar\epsilon}) p(k\sigma, \epsilon)$ هو الذي يعبر عن دالة كثافة الطيف حيث [3]:

$$A(k\sigma, \epsilon) = p(k\sigma, \epsilon) (1 \mp e^{-\beta\hbar\epsilon}) \dots \dots (43)$$

6.I معادلة الحركة حسب دوال Green:

مثل أي نظام كلاسيكي كان أم كمي فمعادلة الحركة من أهم المعادلات التي تساعدنا على دراسة صفات الأجسام أو الجسيمات لذا يجب إيجاد معادلة الحركة من خلال دالة Green المتأخرة، فهذه المقارنة تسمح لحساب G^R لنظام تفاعلي على شرط أن نعتمد بعض التقريبات، ونركز هنا على نظام من الفرميونات المتفاعلة ذات هاميلتوني مستقل عن الزمن.

نعتبر نظام مكون من فرميونات متفاعلة حيث يعطى الهاميلتوني المستقل عن الزمن بالعلاقة [3]:

$$\tilde{H} = \tilde{H}_0 + V = \sum_{k\sigma} \tilde{\epsilon}_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + V \dots \dots (44)$$

حيث V : يمثل التفاعل بين الجسيمات أو تفاعل الجسيمات مع حقل خارجي (اضطراب).

تعطى دالة Green المتأخرة بالعلاقة:

$$G^R(k\sigma, t) = -i\theta(t) \langle \{c_{k\sigma}(t), c_{k\sigma}^\dagger(0)\} \rangle \dots \dots (45)$$

يعرف المشتق الأول لدالة الخطوة بأنه دالة دلتا - ديراك، وبالتالي يمكننا كتابة:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G^R(k\sigma, t) = \delta(t) \langle \{c_{k\sigma}(t), c_{k\sigma}^\dagger(0)\} \rangle + \theta(t) \langle \left\{ \frac{\partial}{\partial t} c_{k\sigma}(t), c_{k\sigma}^\dagger \right\} \rangle \dots \dots (46)$$

وبما أن: $\delta(x)f(x) = \delta(x)f(0)$

فالجزء الأول من الطرف الأيمن للمعادلة (46) يكتب كما يلي:

$$\delta(t)\langle\{c_{k\sigma}(t), c_{k\sigma}^\dagger\}\rangle = \delta(t)\langle\{c_{k\sigma}(0), c_{k\sigma}^\dagger(0)\}\rangle = \delta(t)\langle 1 \rangle = \delta(t) \dots (47)$$

أما الجزء الثاني من الطرف الأيمن للمعادلة (46) يكتب كما يلي:

$$\frac{\partial}{\partial t} c_{k\sigma}(t) = \frac{i}{\hbar} [\tilde{H}, c_{k\sigma}(t)] = \frac{i}{\hbar} [\tilde{H}_0(t), c_{k\sigma}(t)] + \frac{i}{\hbar} [V(t), c_{k\sigma}(t)] \dots (48)$$

لقد فرضنا أن هاميلتوني النظام \tilde{H} مستقل عن الزمن حيث: $\tilde{H} = \tilde{H}(t)$ لذا في معادلة (48) تصبح:

$$\frac{\partial}{\partial t} c_{k\sigma}(t) = -\frac{i}{\hbar} \tilde{\epsilon}_{k\sigma} c_{k\sigma}(t) + \frac{i}{\hbar} [V(t), c_{k\sigma}(t)] \dots (49)$$

تصبح معادلة الحركة لـ $G^R(k\sigma, t)$ كالتالي:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \tilde{\epsilon}_{k\sigma}\right) G^R(k\sigma, t) = \hbar\delta(t) + F^R(k\sigma, t) \dots (50)$$

حيث $F^R(k\sigma, t)$ هي من الشكل:

$$F^R(k\sigma, t) = -i\theta(t)\langle\{[-V(t), C_{k\sigma}(t)], C_{k\sigma}(0)\}\rangle \dots (51)$$

وهي دالة ارتباط متأخرة تصف تأثير التفاعلات في النظام، وفي حساباتنا نحتاج إلى استنتاج $F^R(k\sigma, t)$ وبشكل عام الحل الدقيق غير ممكن، لذلك سنحتاج إلى استعمال تقريبات معينة [3].

7.I دراسة غاز من الإلكترونات غير المتفاعلة:

نستعمل معادلة الحركة لإيجاد G^R لنظام من الإلكترونات الغير المتفاعلة $V = 0$ ، حيث تصبح المعادلة (50) على

الشكل [3]:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\tilde{\epsilon}_{k\sigma}}{\hbar}\right) G^R(k\sigma, t) = \delta(t) \dots (52)$$

يمكن حل هذه المعادلة باستعمال تحويلات فورييه:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\tilde{\epsilon}_{k\sigma}}{\hbar}\right) \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} G^R(k\sigma, \omega) d\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} d\omega \dots (53)$$

بالمطابقة وبعض الحسابات البسيطة نجد:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\omega - \frac{\tilde{\epsilon}_{k\sigma}}{\hbar}\right) e^{-i\omega t} G^R(k\sigma, \omega) d\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} d\omega$$

$$\Rightarrow G^R(k\sigma, \omega) = \frac{1}{(\omega - \tilde{\epsilon}_{k\sigma}/\hbar)} \dots (54)$$

يوجد اشكال في عبارة $G^R(k\sigma, \omega)$ لذا سنحاول حساب $G^R(k\sigma, t)$ انطلاقا من

$$G^R(k\sigma, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega t} d\omega}{(\omega - \tilde{\epsilon}_{k\sigma}/\hbar)} \dots (55)$$

التكامل فيه إشكال بسبب القطب $(\tilde{\epsilon}_{k\sigma}/\hbar)$ ، ولحل هذا الإشكال نستطيع إزاحة القطب جزئياً إما فوق أو تحت المحور الحقيقي ω . من أجل $t < 0$ ، التكامل على طول نصف الدائرة في اللانهاية للجزء العلوي من المستوي المركب ω يؤول إلى الصفر بسبب المعامل $e^{-i\omega t}$ الموجود في تكامل [3].

في هذه الحالة، $G^R(k\sigma, t)$ تساوي التكامل على حيز مغلق متكون من المحور الحقيقي ω ونصف الدائرة في اللانهاية للجزء العلوي في المستوي ω ، وبما أن $G^R(k\sigma, \omega) = 0$ من أجل $t < 0$ ، القطب يجب ألا يتجاوز المحور الحقيقي لأن نظرية الرواسب تسفر عن كمية غير منتهية لـ $G^R(k\sigma, t)$. وهذا يشير إلى أن القطب يجب أن يزاح جزئياً تحت المحور الحقيقي لـ $i0^+$ وعليه العبارة الصحيحة لـ $G^R(k\sigma, \omega)$ هي:

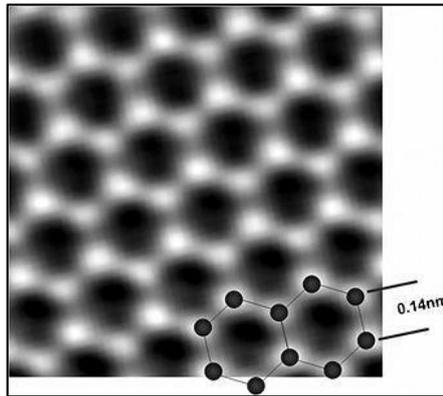
$$G^R(k\sigma, \omega) = \frac{1}{(\omega - \tilde{\epsilon}_{k\sigma}/\hbar + i0^+)} \dots \dots \dots (56)$$

وهذا يتوافق مع ما حصلنا عليه سابقاً [3].

8.I دراسة امتصاص ذرة على الغرافين:

1.8.I تعريف الغرافين:

الغرافين هو واحدة من الحالات البلورية للكربون، وهو يصنف جنباً إلى جنب مع الألماس، الغرافيت، أنابيب الكربون النانوية والفليرينات. في هذه المادة، ذرات الكربون تكون مرتبة بنمط سداسي منتظم، كما يمكن وصف الغرافين بأنه طبقة سميكة من ذرة واحدة من الجرافيت المعدني متعدد الطبقات، حيث أن الغرافين عالي الجودة قاسي، خفيف، شفاف تقريباً، موصل ممتاز للحرارة والكهرباء. وكذا تفاعله مع المواد الأخرى ومع الضوء، وطبيعته ثنائية الأبعاد المتأصلة فيه، تعطي خصائص فريدة من نوعها [4].



الشكل 2.I: نموذج TEM الشبكة السداسية للغرافين [4].

الغرافين هو في الأساس طبقة ذرية مفردة من الغرافيت، وهو معدن وفير وهو عبارة عن ترابط بين ذرات الكربون مرتبطة بإحكام شديد وتكون منظمة في شبكة سداسية. ما يجعل الغرافين فريداً من نوعه هو تهجين sp^2 وسمكه الذري الرفيع جداً (0.345 نانومتر). مما يجعل خصائص الغرافين تستطیع التفوق على العديد من خصائص المواد الأخرى من حيث القوة والخصائص الكهربائية وكذا الخصائص الحرارية [5].

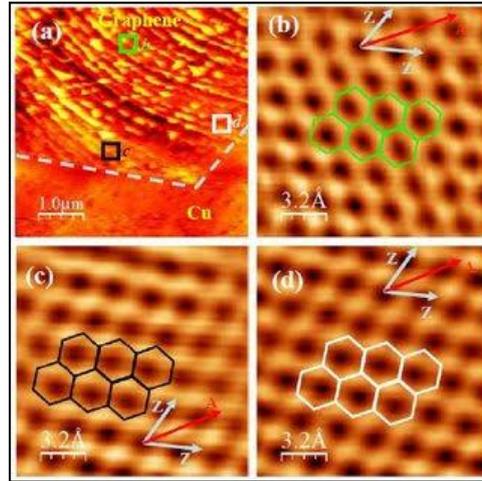
يبلغ طول رابطة الكربون - الكربون في الجرافين حوالي 0.142 nm. حيث أن تكديس صفائح الجرافين فوق بعضها بتباعد بين المستويات قدره 0.345 nm يعطي الجرافيت، مما يعني أن كومة من ثلاثة ملايين ورقة سيكون سمكها مليمتر واحد فقط [4].

إن تناظر الشبكة السداسية للجرافين (يكون شكلها كخلية النحل) يمنح الجرافين خصائص نقل فريدة من نوعها. وكمثال على ذلك، نجد أن الذرات المسؤولة عن النقل في الجرافين تفقد كتلتها الفعالة لذا يمكن وصفها بمعادلة ديراك-ليك بدلا من معادلة شرودينغر المستعملة في أنصاف النواقل التقليدية. هذه الكتلة الفعالة المنخفضة جدًا مسؤولة عن حركة عالية للإلكترونات والثقوب بمقدار يزيد عن $200000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ عند درجة حرارة $T = 5 \text{ K}$ وأكثر من $100000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ عند $T = 240 \text{ K}$ في الجرافين المعلق، وهي أعلى نسبة تم التحصل عليها على الإطلاق لأي من أشباه الموصلات [5].

2.8.I خصائص الجرافين:

1.2.8.I البنية البلورية:

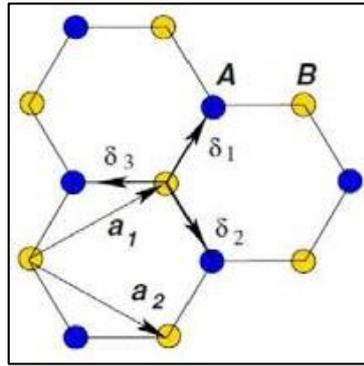
إن ذرات البلورة ثنائية الأبعاد تكون متوضعة بشكل منتظم على مستوي. ومن الأمثلة المثيرة للاهتمام على وجه الخصوص هو الجرافين الذي تم الحصول عليه من تقشير الجرافيت، عادة ما يتم ترسيب رقائقه على مادة ما كالسيليكون [5].



الشكل 3.I: نموذج STM للجرافين يوضح ترسيبه على SiC [4].

يبين (الشكل 3.I)، أن ذرات الكربون تكون متوضعة على رؤوس سداسيات منتظمة، بحيث يكون لكل ذرة ثلاث ذرات أخرى تمثل الجوار الأقرب وتكون أضلاع هذه السداسيات عبارة عن رابطة (C - C) طولها 1.4 Å [5]. وحتى تتمكن من التعرف على خصائص الروابط الموجودة في الجرافين يجب علينا استعمال طريقة الربط القوي (Tight binding method)، لذا فالخطوة الأولى هي معرفة شبكة برافي التي تعطي تموضع ذرات الكربون وبالعودة للشكل الماضي يتضح تماما أن خلية بلورة الجرافين ليست شبكة برافي، حيث أنه لا يمكن تحديد شعاعي الأساس اللذان يكونان على ارتباط خطي بأعداد صحيحة في كامل البلورة، إذن فمن اللازم تعريف أساس للدراسة [6].

يوضح الشكل التالي خياراً أولياً وممكناً للمتجهات والأساس:



الشكل 4.I: المتجهات الأولية a_1 و a_2 المتخذة للخلية الأولية في الجرافين [6].

يمكن ملاحظة أن:

$$\begin{aligned} a_1 &= a\hat{x} + b\hat{y} \\ a_2 &= a\hat{x} - b\hat{y} \end{aligned} \dots \dots \dots (57)$$

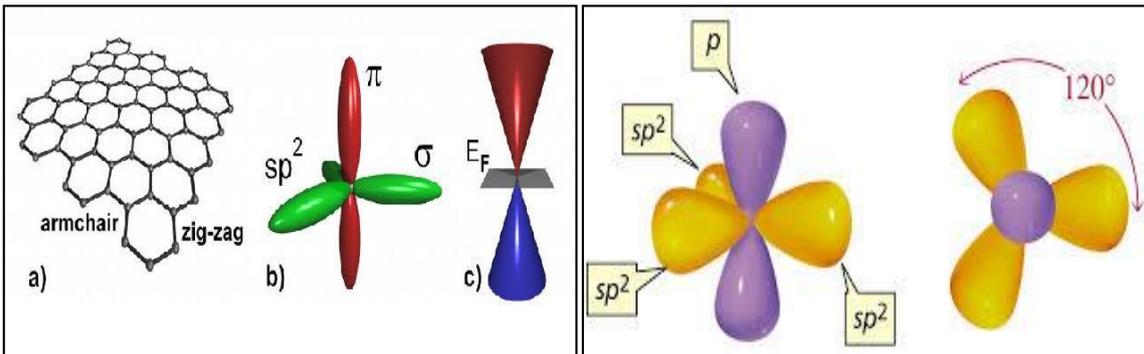
حيث:

$$\begin{cases} a = \frac{3}{2}a_0 \\ b = \frac{\sqrt{3}}{2}a_0 \end{cases} \dots \dots \dots (58)$$

حيث a_0 يمثل طول الرابطة $(C - C)$ [6].

2.2.8.I مصفوفة الربط القوي (البنية الإلكترونية ودراسة الهاميلتوني):

للإيجاد البنية الإلكترونية يجب أن نحدد المدارات الذرية، حيث الكربون يملك 6 إلكترونات بالتوزيع التالي $1s^2 2s^2 2p^2$ وهو رباعي التكافؤ. عندما تتفاعل ذرة الكربون مع جيرانها الأقرب (الأوائل)، تتجهن المدارات الثلاثة p_x, p_y و s مشكلة بذلك الروابط σ ، في حين تتداخل المدارات p_z لتشكل الرابطة π [6].



الشكل 5.I: التهجين sp^2 لذرة الكربون مع توضيح للروابط σ و π [4].

إذا قمنا بصياغة دالة موجة الجرافين على شكل تركيب خطي للمدارات s, p_x, p_y, p_z متمركزة حول ذرتي الخلية الأولية A و B ، فإنه سوف تظهر 6 روابط ناتجة عن التهجين sp^2 إضافة إلى رابطتين ناتجة عن البنية π . يوضح التحليل الدقيق لعناصر مصفوفة الهاملتونيان على أن مصفوفة 8×8 تنقسم إلى قسمين مستقلين: الأول 6×6 ، الذي يعطينا σ ، حيث تحتوي المصفوفة على عناصر المدارات s, p_x, p_y و بالإضافة لقسم آخر 2×2 ، الذي يعطينا π حيث عناصر المصفوفة تحتوي على عناصر المدارات p_z . ومن المهم هنا أن نذكر أن فصل الهاميلتوني إلى قسمين وهو ما يعطينا نتيجة مباشرة تدل على تعامد المدارات p_z مع المستوي الخاص بالجرافين. لكن في حالة دراسة جرافين غير مسطح، مصفوفة الهاميلتوني لن تكون بالتقسيم الماضي [6].

والجزء المثير للاهتمام في هاته الحالة هو أن بنية الروابط في الجرافين مبنية أساسا على المدارات p_z . وللتقدم في هذه الدراسة نعرف دالة بلوخ لكل ذرة في الخلية الأولية على الشكل:

$$\psi_\alpha = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R e^{ik \cdot R} |R, \alpha\rangle \dots \dots \dots (59)$$

حيث تحدد α إحدى الذرتين في الأساس و N يمثل عدد الخلايا الأولية. لذا من هذه المعادلة تكون مصفوفة الهاميلتوني على الشكل:

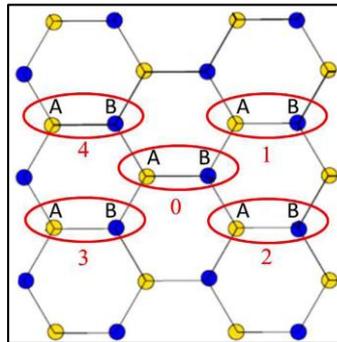
$$\langle \psi_\alpha | H | \psi_\beta \rangle = \frac{1}{N} \sum_{R, R'} e^{ik \cdot (R - R')} \langle R', \alpha | H | R, \beta \rangle \dots \dots \dots (60)$$

حيث أن المجموع على R لكل قيمة ثابتة لـ R' تعطي دائما نفس العدد. وبالتالي يمكننا تثبيت الخلية الأولية حيث نأخذ $R' = 0$ ، وبضرب في N نجد:

$$\langle \psi_\alpha | H | \psi_\beta \rangle = \sum_R e^{ikR} \langle 0, \alpha | H | R, \beta \rangle \dots \dots \dots (61)$$

ولإيجاد عناصر المصفوفة الموضحة في المعادلة (61) سوف نأخذ فقط بعين الاعتبار مواقع ذرات الجوار الأقرب الأولى الموضحة في (الشكل 6.I)، إذن فالحساب يكون سهلا، نقوم بتحديد العناصر القطرية بـ:

$$\langle \psi_A | H | \psi_A \rangle = \sum_R e^{ikR} \langle 0, A | H | R, A \rangle \dots \dots \dots (62)$$



الشكل 6.I: الخلايا الأربعة المختارة كمرجع لدراسة شبكة الجرافين [6].

من (الشكل 6.I) نلاحظ أن الذرة A في الخلية المرجعية 0 لها ذرات من الجوار الأول فقط من النوع B بحيث يكون المجموع في المعادلة (62) وعندما تقتصر فقط على الجيران الاوائل، تصبح لدينا القيمة $R = 0$ ، لذا النتيجة هي:

$$\langle \psi_A | H | \psi_A \rangle = \langle 0, A | H | 0, A \rangle = E_0 \dots \dots \dots (63)$$

حيث E_0 تدل على القيمة الفعلية لعناصر المصفوفة، نمر الآن لحساب العناصر الغير قطرية:

$$\langle \psi_A | H | \psi_B \rangle = \sum_R e^{ikR} \langle 0, A | H | R, B \rangle$$

$$\langle \psi_A | H | \psi_B \rangle = \langle 0, A | H | 0, B \rangle + e^{-ik \cdot a_2} \langle 0, A | H | 3, B \rangle + e^{-ik \cdot a_1} \langle 0, A | H | 4, B \rangle \dots \dots (64)$$

نلاحظ أن الخلايا 1 و 2 في (الشكل 6.I) لا تساهم بسبب أن الذرات B لهذه الخلايا ليست من الجيران الأقرب (الأوائل) للذرة A في الخلية 0 . وبما أن عناصر المصفوفة $\langle 0, A | H | 0, B \rangle$ ، $\langle 0, A | H | 3, B \rangle$ ، و $\langle 0, A | H | 4, B \rangle$ كلها متساوية، نقوم بالتعبير عنها بـ γ :

$$\langle \psi_A | H | \psi_B \rangle = \gamma (1 + e^{-ika_2} + e^{-ika_1}) \dots \dots (65)$$

حيث نأخذ:

$$f(k) = 1 + 2 e^{ikx a} \cos(k_y b) \dots \dots \dots (66)$$

إذن تكون مصفوفة الهاميلتوني كالتالي [4]:

$$H(k) = \begin{pmatrix} E_0 & \gamma f(k) \\ \gamma f^*(k) & E_0 \end{pmatrix} \dots \dots \dots (67)$$

• القيم والأشعة الذاتية:

نقوم بحل المعادلات الخطية التالية:

$$\begin{pmatrix} E_0 & \gamma f(k) \\ \gamma f^*(k) & E_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_A \\ C_B \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} C_A \\ C_B \end{pmatrix} \dots \dots \dots (68)$$

حيث C_A و C_B هي معاملات الترجيح لمجموع بلوخ المعادلة (59) للذرات A و B في خلية الوحدة. إذن حل المعادلة (68) يعطي القيم الذاتية التالية:

$$\varepsilon(k) = E_0 \pm \gamma |f(k)| \dots \dots \dots (69)$$

يمكن الحصول على الشعاعين الذاتيين الموافقان للقيمتين الذاتيتين لكل k بسهولة من خلال المعادلة الخطية (68) وذلك بالاستعانة بشرط التنظيم (التقنين):

$$|C_A|^2 + |C_B|^2 = 1 \dots \dots \dots (70)$$

النتيجة التي تكون بها الإشارة الموجبة في المعادلة (69) متعلقة بنطاق التوصيل، وتعطي القيم:

$$\begin{cases} C_{A,c} = \frac{f(k)}{|f(k)|\sqrt{2}} \\ C_{B,c} = \frac{1}{\sqrt{2}} \end{cases} \dots\dots\dots (71)$$

أما النتيجة التي تكون بها الإشارة السالبة في المعادلة (69) متعلقة بنطاق التكافؤ، وتعطي القيم [16]:

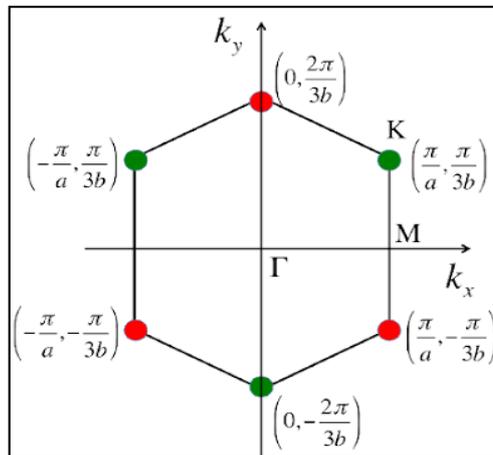
$$\begin{cases} C_{A,v} = -\frac{f(k)}{|f(k)|\sqrt{2}} \\ C_{B,v} = \frac{1}{\sqrt{2}} \end{cases} \dots\dots\dots (72)$$

3.2.8.I الشبكة المعكوسة للغرافين:

لدراسة بنية الغرافين انطلاقاً من المعادلة (69)، نحتاج أولاً لتحديد شبكة الغرافين المعكوسة انطلاقاً من المتجهات الأولية لشبكة برافي المباشرة المعادلة (57) فإنه من السهل إيجاد المتجهات الأولية للشبكة المعكوسة والتي هي:

$$\begin{cases} A_1 = \frac{\pi}{a}\hat{x} + \frac{\pi}{b}\hat{y} \\ A_2 = \frac{\pi}{a}\hat{x} - \frac{\pi}{b}\hat{y} \end{cases} \dots\dots\dots (73)$$

في (الشكل 7.I) تظهر الشبكة المعكوسة إضافة إلى منطقة بريليون الأولى. يجدر ذكر ملاحظة مهمة، كما هو مبين في نفس الشكل، منطقة بريليون الأولى عبارة عن سداسي ويشار إلى إحداثيات رؤوسه كما هو موضح في نفس الشكل، حيث أن الرؤوس المتكافئة تكون بنفس اللون، والتكافؤ في هذه الحالة يعني أن أي الأزواج التي لها نفس اللون تختلف في المتجه المعكوس بمقدار ثابت يعبر عنه بأحد المتجهات الأولية السابقة في المعادلة (73)، وللتوضيح نعتبر كمثال النقاط $(0, 2\pi/3b)$ و $(\pi/a, -\pi/3b)$ إذا أخذنا الفرق بين المتجهين الذان يشيران إلى هاذين الرأسين نحصل على $(\pi/a, -\pi/b)$ وهو بالضبط $(-A_2)$ ، وينطبق نفس شئ على جميع الأزواج الأخرى. وتعرف رؤوس في منطقة بريليون الأولى بنقاط ديراك، وغالبا ما يشار إليها بنقاط K ولها دور مهم في تحديد خصائص الغرافين [16].

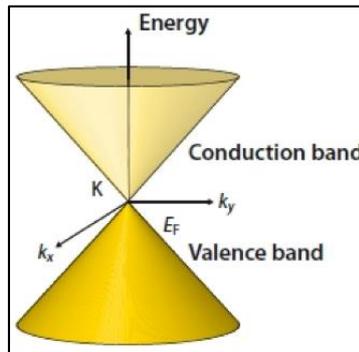


الشكل 7.I: منطقة بريليون الأولى في الغرافين [6].

4.2.8.I الخصائص الإلكترونية:

واحدة من أكثر الخصائص المفيدة للجرافين هو أنه شبه معدن ذو خاصية تداخل صفرية (مع كل من الثقوب والإلكترونات كحاملات شحن) ذات موصلية كهربائية عالية جداً. تحتوي ذرات الكربون على ما مجموعه 6 إلكترونات. 2 في الغلاف الداخلي و 4 في الغلاف الخارجي. تعطي الإلكترونات الأربعة للغلاف الخارجي في ذرة كربون فردية الترابط الكيميائي لها، ولكن في الجرافين، ترتبط كل ذرة بثلاث ذرات كربون أخرى على مستوى ثنائي الأبعاد، تاركة إلكترونًا متاحًا بحرية في البعد الثالث للتوصيل الإلكتروني. تسمى هذه الإلكترونات عالية الحركة بالإلكترونات (π) وتقع أعلى وأسفل ورقة الجرافين [17].

يتداخل هذا المدار π ويساعد على تعزيز روابط الكربون - الكربون في الجرافين. بشكل أساسي، الخصائص الإلكترونية للجرافين تعرف بواسطة الروابط والروابط المضادة (نطاقات التكافؤ والتوصيل) لهذه المدارات π . أثبتت الأبحاث المشتركة على مدى السنوات الخمسين الماضية أنه عند نقطة ديراك في الجرافين، فإن الإلكترونات والثقوب ليس لها كتلة فعالة، يحدث هذا لأن علاقة الطاقة - حركة (طيف الإثارة) تكون خطية للطاقات المنخفضة بالقرب من الزوايا الفردية الستة لمنطقة بريلوين. تُعرف هذه الإلكترونات والثقوب باسم فرميونات ديراك، أو الجرافينوس Graphinos، وتعرف الزوايا الستة لمنطقة بريلوين بنقاط ديراك. ونظرًا للكثافة الصفرية للحالات عند نقاط ديراك، فإن الموصلية الإلكترونية منخفضة جدًا في الواقع. ومع ذلك، يمكن تغيير مستوى فيرمي عن طريق التطعيم (باستخدام الإلكترونات أو الثقوب) لإنشاء مادة من المحتمل أن تكون أفضل في توصيل الكهرباء [4].



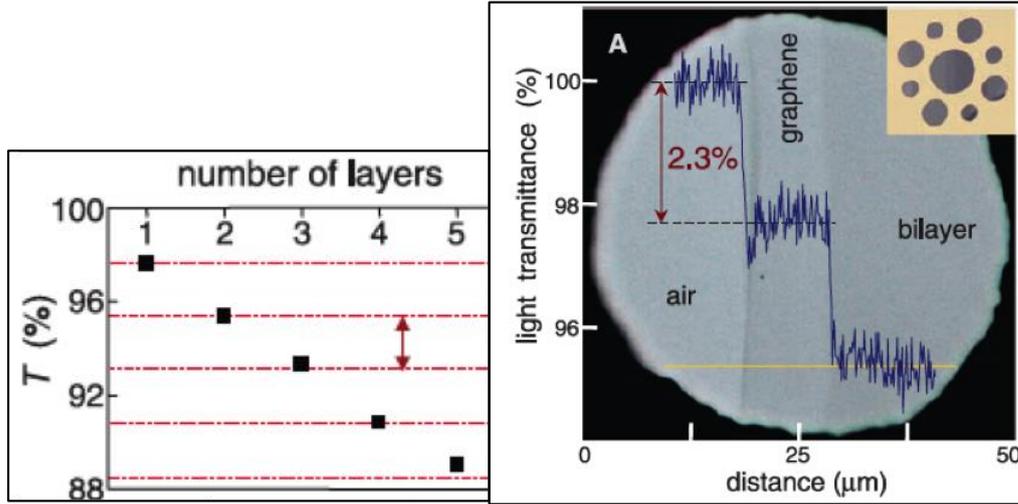
الشكل 8.I: مخروط ديراك [4].

5.2.8.I الخصائص الحرارية:

عندما تمر الإلكترونات عبر الدارات، تفقد بعض طاقتها على شكل حرارة، وعندما تصبح الدارات أصغر، تزداد كثافة الحرارة. أصبحت مشكلة الحرارة كبيرة جدًا لدرجة أن دراسة حديثة أظهرت أن 50% من الكهرباء التي تستهلكها خوادم البيانات الضخمة تكون في عملية تبريدها. أما الآن فقد أظهر باحثون في جامعة تشالمرز للتكنولوجيا، التي تفقد مشروع الجرافين الرائد الذي تبلغ تكلفته مليار يورو، أن طبقة من الجرافين يمكن أن توجه الحرارة بكفاءة جيدة بعيدًا عن عناصر الدارة الساخنة حيث تم تخفيض درجة الحرارة في بعض الحالات حتى 13 درجة مئوية، وهو ما يمكن أن يضاعف عمر المكون الإلكتروني. تم قياس الموصلية الحرارية للجرافين عند درجة حرارة قريبة من درجة حرارة الغرفة لتكون بين $(4.84 \pm 0.44)10^3$ و $(5.30 \pm 0.48)10^3 (W \cdot m^{-1}K^{-1})$ [4].

6.2.8.I الخصائص الضوئية:

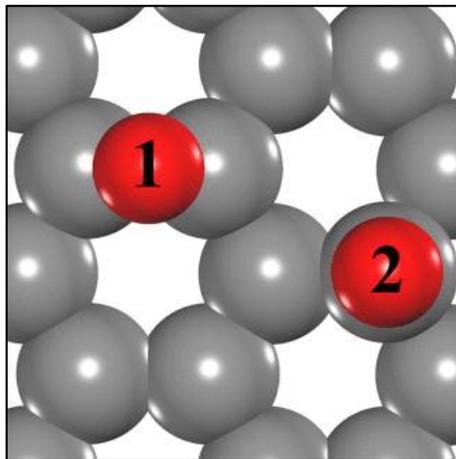
إن قدرة الجرافين على امتصاص الضوء الأبيض كبيرة جداً وتقدر بنسبة 2.3% هي أيضاً خاصية فريدة ومثيرة للاهتمام، خاصة مع الأخذ في الاعتبار أنه لا يتجاوز سمك ذرة واحدة وهذا يرجع إلى خصائصه الإلكترونية المذكورة أعلاه، حيث تعمل الإلكترونات كحاملات شحن بلا كتلة ذات حركية عالية جداً. قيل بضع سنوات، تم إثبات أن كمية الضوء الأبيض الممتص يعتمد على ثابت البنية الدقيقة، أكثر من أن يعتمد على خصائص المواد، حيث تؤدي إضافة طبقة أخرى من الجرافين إلى زيادة كمية الضوء الأبيض الممتص بنفس القيمة تقريباً (2.3%) [4].



الشكل 9.I: على اليمين: نفاذية الضوء عبر طبقة وحيدة أو طبقتين من الجرافين. على اليسار: نفاذية الضوء عبر عدة طبقات من الجرافين معرفة بأنها تكون أقل بنسبة مضاعفة لأعداد صحيحة للنسبة المحصل عليها من طبقة وحيدة [6].

3.8.I دراسة نظرية باستعمال دوال Green لامتناص ذرة على سطح الجرافين:

يوضح الشكل التالي كيفية امتصاص الجرافين لذرة على سطحه والمواقع التي تشغرها الذرة الممتصة، حتى نأخذ مبدئياً فكرة عن ذلك.

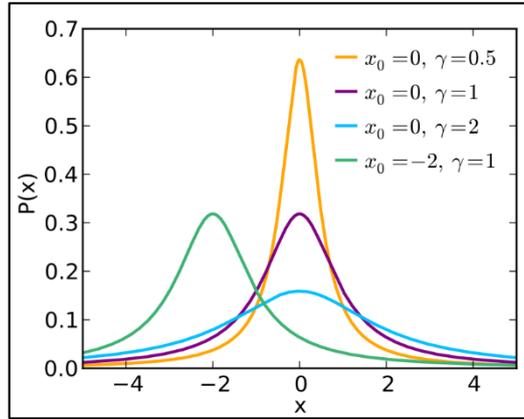


الشكل 10.I: الذرات الحمراء هي ذرات ممتصة على سطح الجرافين بينما الأرقام تمثل مواقع امتصاصها [12].

ولدراسة تصرف الذرات على سطح الجرافين نعرف نظام متكون من ذرة ممتصة على سطح مادة الجرافين، وذلك عن طريق الهاميلتوني التالي:

$$H = \sum_{nk\sigma} \epsilon_{nk} c_{nk\sigma}^\dagger c_{nk\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_d d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + \sum_{nk\sigma} V_{nk} c_{nk\sigma}^\dagger d_{\sigma} + \sum_{nk\sigma} V_{nk}^* d_{\sigma}^\dagger c_{nk\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \dots \dots (74)$$

في الحد الأول للهاملتوني، n يمثل دليل الحزمة والذي يمكن أن يأخذ قيمتين إما 1 أو 2، بينما $k = (k_x, k_y)$ يمثل شعاع في المنطقة الأولى لبريلوين للجرافين، والسبين σ إما علوي أو سفلي. نفترض في هذه الحالة أن الذرة الممتصة على سطح الجرافين لديها مدار طاقي وحيد ϵ_d . بينما تتزايد الطاقة بمقدار U إذا كان المدار مشغول ثانياً، كما هو مبين في الحد الأخير من الهاملتوني. أما المؤثرين d_{σ}^\dagger و d_{σ} فهي تنشئ أو تهدم الكترون بمسقط سيني σ في المدار الذري. بالمرور إلى الحد الثالث نجد أنه يعبر عن التهجين بين المدار للذرة الممتصة مع الحالة π للجرافين، حيث أن الالكترونات تستطيع القفز من الذرة نحو الجرافين والعكس صحيح. في هذا المثال، سنفترض أن $U = 0$ ، ثم نقوم بحساب دالة كثافة الطيف للذرة الممتصة. أما بالنسبة لذرة معزولة تكون دالة ديراك لها قمة عند $\epsilon_d = \hbar\omega$ ، وسوف نرى أن التفاعلات بين الذرة الممتصة والجرافين توسع القمة حتى تعطينا دالة على شكل لورنتزيان (توزيع لورنتز أو توزيع كوشي) [2].



الشكل 11.I: منحنى يمثل وصف لكثافة احتمال عن طريق توزيع لورنتز [17].

تعطى دالة Green المتأخرة للذرة ممتصة كما يلي:

$$G^R(dd\sigma, t) = -i\theta(t)\langle\{d_{\sigma}(t), d_{\sigma}^{\dagger}(0)\}\rangle \dots \dots (75)$$

وبأخذ المشتق بالنسبة للزمن، نحصل على:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G^R(dd\sigma, t) = \delta(t) + \frac{i}{\hbar} \theta(t)\langle\{[H, d_{\sigma}(t)], d_{\sigma}^{\dagger}(0)\}\rangle \dots \dots (76)$$

ونشير إلى أن الهاملتوني مستقل عن الزمن حيث:

$$H(t) = e^{iHt/\hbar} H e^{-iHt/\hbar} = H$$

فيكون المبدل كالتالي:

$$[H, d_{\sigma}] = \sum_{\sigma'} \epsilon_d [d_{\sigma'}^{\dagger}, d_{\sigma'}, d_{\sigma}] + \sum_{nk\sigma'} V_{nk}^* [d_{\sigma'}^{\dagger}, c_{nk\sigma'}, d_{\sigma}]$$

$$= - \sum_{\sigma'} \epsilon_d \{d_{\sigma'}^\dagger, d_\sigma\} d_{\sigma'} - \sum_{nk\sigma'} V_{nk}^* \{d_{\sigma'}^\dagger, d_d\} C_{nk\sigma}$$

$$\Rightarrow [H, d_\sigma] = -\epsilon_d d_\sigma - \sum_{nk} V_{nk}^* C_{nk\sigma} \dots \dots (77)$$

- **ملاحظة:** قمنا باستعمال العلاقة $[AB, C] = A[B, C] - \{A, C\}B$ وكذا خواص مؤثرات الإنشاء والهدم في المبدلات المضادة للفرميونات. بعد التعويض تحصلنا على العلاقة [3]:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G^R(dd\sigma, t) = \delta(t) + \frac{\epsilon_d}{\hbar} G^R(dd\sigma, t) + \frac{1}{\hbar} \sum_{nk} V_{nk}^* G^R(nkd\sigma, t) \dots \dots (78)$$

تعطى دالة Green المتأخرة لذرة ممتصة على سطح الغرافن:

$$G^R(nkd\sigma, t) = -i\theta(t) \langle \{C_{nk}(t), d_{\sigma'}^\dagger(0)\} \rangle \dots \dots (79)$$

فتكون معادلة الحركة للمعادلة (62) كالتالي:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G^R(nkd\sigma, t) = \frac{\epsilon_{nk}}{\hbar} G^R(nkd\sigma, t) + \frac{1}{\hbar} V_{nk} G^R(dd\sigma, t) \dots \dots (80)$$

وحسب تحويلات فورييه:

$$G^R(dd\sigma, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} G^R(dd\sigma, \omega) d\omega \dots \dots (81)$$

حيث:

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} d\omega$$

وبتحليل مماثل لـ $G^R(nkd\sigma, t)$ نحصل على [3]:

$$(\omega - \epsilon_d/\hbar) G^R(dd\sigma, \omega) = 1 + (1/\hbar) \sum_{nk} V_{nk}^* G^R(nkd\sigma, \omega) \dots \dots (82)$$

وأيضاً:

$$(\omega - \epsilon_d/\hbar) G^R(nkd\sigma, \omega) = (1/\hbar) V_{nk} G^R(dd\sigma, \omega) \dots \dots (83)$$

هاته المعادلات يمكن حلها من أجل $G^R(dd\sigma, \omega)$ ، حيث نجد:

$$G^R(dd\sigma, \omega) = \frac{\hbar}{\hbar\omega - \epsilon_d - \sum_{nk} \frac{|V_{nk}|^2}{\hbar\omega - \epsilon_{nk}}} \dots \dots (84)$$

عند هذه النقطة، يصادفنا نفس الإشكال الذي صادفناه مع القطب $\hbar\omega$ الذي تعرضنا إليه في العنوان السابق، لذا سيكون:

إذن: $\omega \rightarrow \omega + i0^+$

$$G^R(dd\sigma, \omega) = \frac{\hbar}{\hbar\omega - i0^+ - \epsilon_d - \sum_{nk} \frac{|V_{nkd}|^2}{\hbar\omega - \epsilon_{nk} + i0^+}} \dots \dots (85)$$

بالقيام ببعض الحسابات نتحصل على:

$$G^R(dd\sigma, \omega) = \frac{\hbar}{\hbar\omega - \epsilon_d - \sum_{nk} P \left(\frac{|V_{nkd}|^2}{\hbar\omega - \epsilon_{nk}} \right) + i\pi \sum_{nk} |V_{nkd}|^2 \delta(\hbar\omega - \epsilon_{nk})} \dots (86)$$

حيث P يمثل القيمة الأساسية. ولشرح ذلك أكثر، نفرض أن V_{nkd} صغير جداً باستثناء عند النقاط k في المنطقة الأولى لبريلوين بالقرب من K و K' ، حيث تأخذ قيمة ثابتة \bar{V} ، لذا بعد هذا الافتراض تصبح:

$$\sum_{nk} |V_{nkd}|^2 \delta(\hbar\omega - \epsilon_{nk}) = \bar{V}^2 \sum_{nk} \delta(\hbar\omega - \epsilon_{nk}) = \bar{V}^2 D_\sigma(\hbar\omega) \dots \dots (87)$$

حيث $D_\sigma(\hbar\omega)$ هي كثافة الحالات لكل سبين في الغرافن. إذن دالة كثافة الطيف تعطى بالعلاقة:

$$A(dd\sigma, \omega) = \frac{2\pi\hbar\bar{V}^2 D_\sigma(\hbar\omega)}{\left[\hbar\omega - \epsilon_d - \sum_{nk} P \left(\frac{|V_{nkd}|^2}{\hbar\omega - \epsilon_{nk}} \right) \right]^2 + [\pi\bar{V}^2 D_\sigma(\hbar\omega)]^2} \dots \dots (88)$$

وكما كان متوقعاً، وجود تفاعلات يسبب إزاحة، واتساع نحو توزيع لورنتزيان لقمة دلتا ديراك. وما ما يميز الكثافة الطيفية للنظام الغير متفاعل هو أن الإزاحة مساوية للتغير في الطاقة للمدار الذري، أما عرض شريط توزيع اللورنتزيان يحدد عمر الحالة الذرية [3].



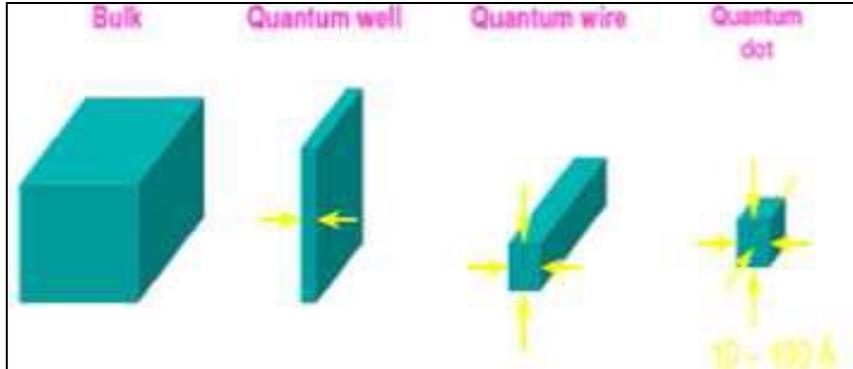
1.II مقدمة :

بعد التفصيلات التي تعرضنا إليها في الفصل الأول، نقوم الآن بتطبيق الطرق التحليلية الخاصة بدراسة النقاط الكمومية ذات مستوى وحيد. أولاً لدينا نظام ذو مستوى طاقي وحيد الذي بدوره يستوعب إلكترونين، بعد ذلك، نعتبر أن هذا النظام يحتوي على نقطة كمومية في اتصال مباشر مع معدن، حيث يكون للإلكترونات القدرة على الانتقال (عن طريق ظاهرة مفعول النفق) من النقطة إلى المعدن ومن المعدن إلى النقطة. وأخيراً، سنعتبر إلكترونين (قطبين كهربائيين) معدنيين يفصل بينهما عازل حيث يسمح بإعطاء جهد كهربائي يسمح بتكون تيار، والذي نستخرج منه عبارة التيار الناتج عن الانتقالات الإلكترونية الناتجة عن مفعول النفق (تيارات نفقية)، حيث تمثل هاته العبارة دالة لجهد الانحياز وذلك باستخدام نظرية الاستجابة الخطية.

سنقوم في هذا الفصل بدراسة الانتقالات اعتماداً على طريقة دوال Green الغير مستقرة.

2.II النقاط الكمومية وخصائصها:**1.2.II تعريف النقطة الكمومية:**

خلال السنوات القليلة الماضية، اتخذت البحوث عامة وفي اشباه النواقل خاصة أبعاداً جديدة تماماً. حيث حاول العلماء تقليص دراسة الأبعاد في المواد إلى بعدين، بعد وحيد والبعد الصفري (يتمثل ذلك في نقطة)، حيث يمكن أن تحصر دراسة الإلكترونات في هذه المواد المطورة حديثاً في مستوي، خط أو نقطة رياضية (نقطة كمومية). [5]



الشكل 1.II: أنواع الحجز المطبقة على الإلكترونات في المواد. [5]

ويمكن الملاحظة من خلال (الشكل 1.II) أن البئر الكمومي يحصر الإلكترونات أو الثقوب في بعد واحد ويسمح بالانتشار الحر في بعدين، أما السلك الكمومي فإنه يحصر الإلكترونات أو الثقوب في بعدين مكانيين ويسمح بالانتشار الحر في الثالث. أما بالنسبة للنقطة الكمومية فإن الإلكترونات فيها ليست حرة في أي بعد. [5]

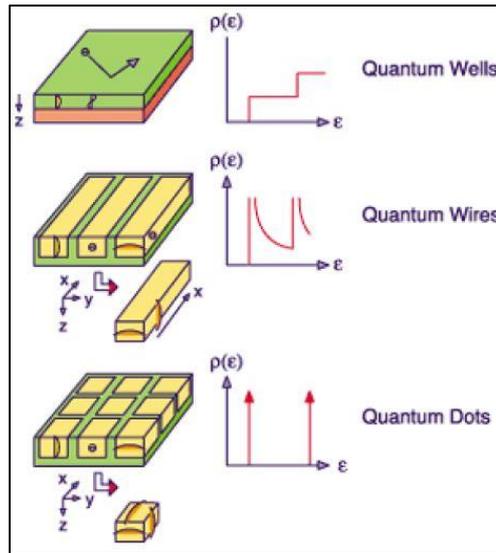
غالباً ما تسمى النقاط الكمومية بالذرات الاصطناعية لأنها مثل الذرات الحقيقية، حيث تحصر الإلكترونات في حالات كمية ذات طاقات منفصلة. ومع ذلك، على الرغم من أن الذرات الحقيقية متطابقة، فإن معظم النقاط الكمومية تشتمل على مئات أو آلاف الذرات، مع اختلافات حتمية في الحجم والشكل. [18]

وبالتالي، لا يمكن تجنب التغيرات التي تنجم على دوال أمواجها وكذا طاقاتها. يمكن استخدام البوابات الإلكترونية لتثبيت الطاقة للتخفيف من هذه الاختلافات من خلال تعديل مستويات طاقة الإلكترون، ولكن الهدف الأكثر المراد أكثر متمثل في إنشاء نقاط كمومية بدقة إبداعية جوهريّة من خلال القضاء على الاختلافات الإحصائية في حجمها وشكلها وترتيبها ورغم التطور الحاصل فيها إلا أن الدقة الكاملة لا تزال بعيدة المنال. [6]

2.2.II خصائص النقاط الكمومية:

1.2.2.II كثافة الحالة للإلكترونات:

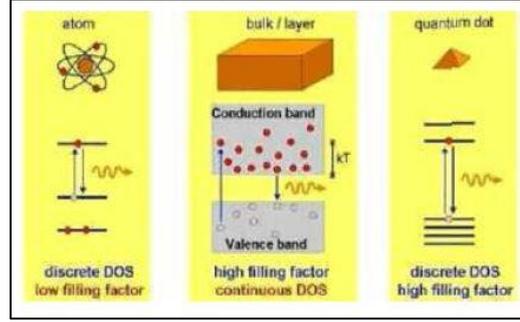
تحتوي أشباه الموصلات على نطاقات للطاقة، حيث توفر تقنيات MOCVD و MBE القدرة على التحكم في سمك الطبقة في حدود 1 nm ، وعندما يكون سمك الطبقة النشطة صغيراً بما يكفي، تعمل الإلكترونات والثقوب كما لو كانت محصورة في بئر كمومي. يؤدي هذا الحبس إلى تكميم نطاقات الطاقة وجعلها نطاقات فرعية (صغيرة متقطعة وليست مستمرة)، والنتيجة الرئيسية هي أن الكثافة المشتركة للحالات $\rho(\epsilon)$ تكتسب هيكلًا يشبه الدرج كما هو موضح في (الشكل 2.II) حيث يؤثر هذا التعديل في كثافة الحالات على خصائص الكسب بشكل كبير ويحسن من الأداء. [5]



الشكل 2.II: كثافة الحالة للإلكترونات في البئر الكمومي، السلك الكمومي والنقطة الكمومية. [5]

2.2.2.II النقاط الكمومية وميكانيك الكم:

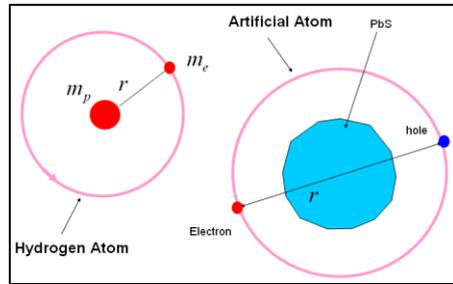
إن النقاط الكمومية تحتوي أيضا على إلكترونات حيث يمكن مقارنتها بالذرات: حيث يكون لكل منهما طيف طاقة منفصل كما هو موضح في (الشكل 3.II) وكذا أنا كلا منهما يربط عدد صغير من الإلكترونات. على عكس الذرات، فإن إمكانات الحبس في النقاط الكمومية لا تظهر بالضرورة تناظراً كروياً. بالإضافة إلى ذلك، لا تتحرك الإلكترونات المحصورة في الفضاء الحر، لكنها تتحرك في جل بلورة شبه الناقل. [5]



الشكل 3.2: مقارنة بين أطيف الطاقة. [5]

على عكس الذرات، يمكن هندسة طيف الطاقة للنقطة الكمومية عن طريق التحكم في الحجم، الشكل الهندسي وقوة كمون الحجز، وكذا من السهل نسبياً ربط النقاط الكمومية بنواقل أساسية عن طريق حواجز نفقية، مما يسمح بتطبيق تقنيات التحليل الطيفي النفقي لاستقصائها. وكما هو الحال في الذرات، يمكن استكشاف مستويات الطاقة للنقاط الكمومية الصغيرة بواسطة تقنيات التحليل الطيفي البصري. لهذا السبب يُطلق على النقاط الكمومية ذرات اصطناعية. [19]

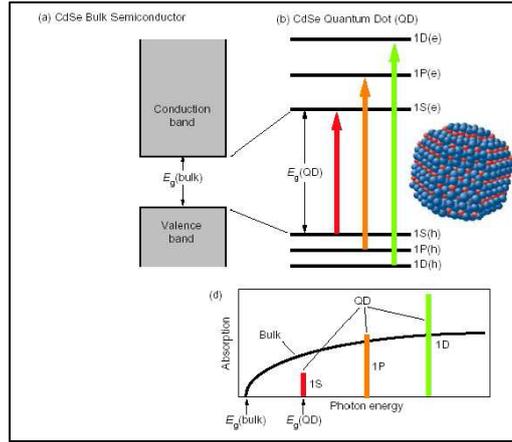
أفضل وصف للنقاط الكمومية هو الذرات الكاذبة، حيث أن ما يميز النقطة الكمومية هو "الثقوب"، وتكون عبارة عن مادة تفتقد إلكتروناتاً من نطاق التكافؤ الخاص بها مما يعطيها شحنة موجبة. ونظراً لحجمها الصغير جداً تبدأ الإلكترونات في اتخاذ مدارات معينة. نظراً لأن النقاط الكمومية لا تحتوي على بروتونات أو نيوترونات في المركز، فإن كتلتها الفعلية أصغر بكثير. بما أن الكتلة في المركز أصغر من كتلة الذرة، فإن النقاط الكمية تمارس قوة أصغر على الإلكترونات المدارية مسببة مداراً أكبر من ذرة عادية كما هو موضح في (الشكل 4.2). [5]



الشكل 4.2: مقارنة بين مدار ذرة الهيدروجين والنقطة الكمومية. [5]

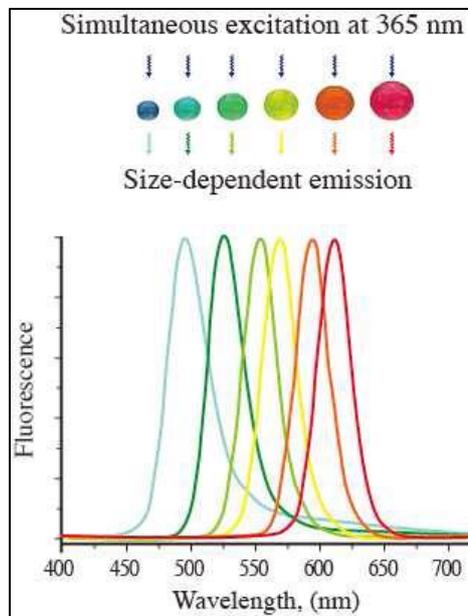
3.2.2.II الخصائص الضوئية للنقاط الكمومية:

يعطي التكوين والحجم الصغير (يضع مئات إلى بضعة آلاف من الذرات) هذه النقاط خصائص بصرية استثنائية يمكن التحكم فيها بسهولة عن طريق تغيير حجم أو تكوين النقاط، حيث تمتص النقاط الكمومية الضوء، ثم تعيد إصداره بسرعة ولكن بلون مختلف. تتناسب النقاط الكمومية بشكل وثيق مع هذا المثل الأعلى وبأخذ بعين الاعتبار الكتلة الصغيرة، يستطيع العلماء حساب وتغيير حجم فجوة النطاق للنقطة الكمومية بدقة عن طريق إضافة أو أخذ الإلكترونات، حيث أن فجوة النطاق للنقطة الكمومية هي التي تحدد الترددات التي ستستجيب لها (الشكل 5.2)، لذا فإن القدرة على تغيير فجوة النطاق هي ما يمنح العلماء المزيد من التحكم والمرونة عند التعامل مع التطبيقات. [5]



الشكل 5.11: الترددات الناتجة عن تغير فجوات النطاق لانتقال الإلكترونات. [5]

واحدة من الخصائص الضوئية للنقاط الكمومية والتي يمكن ملاحظتها على الفور بالعين المجردة هي الضوء المنبعث، حيث أن الحجم هو الأكثر أهمية من حيث إعطاء اللون، وبالتالي فإن النقاط الكمومية من نفس المادة، ولكن بأحجام مختلفة، يمكن أن تنبعث منها أضواء بألوان مختلفة، والتفسير الفيزيائي لذلك هو تأثير الحجز الكمومي، فعندما تكون الإلكترونات والنقوب المحجوزة في النقطة (زوج الإثارة) و الناتجة عن الفوتونات أصغر من نصف قطر بوهر، تتسع فجوة النطاق لأشبه الموصلات ويتحول لونها نحو اللون الأزرق كما هو موضح في (الشكل 6.11). وهكذا كل ما زاد حجم النقطة كلما زاد نطاق الانبعاث وبالتالي زيادة في طول الموجة وبالتالي تدرج الألوان الصادرة حسب طولها الموجي. [5]



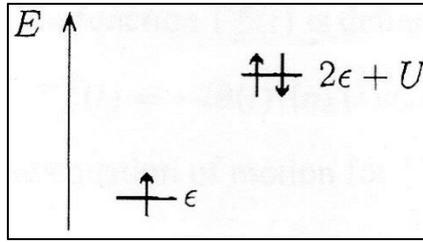
الشكل 6.11: أطوال الأمواج الصادرة عن نقاط كمومية مختلفة الحجم ومن نفس المادة. [5]

3.II دراسة نقطة كمومية ذات مستوى وحيد:

يكتب هاميلتوني نقطة كمومية ذات مستوى وحيد بالعلاقة التالية:

$$H_D = \epsilon \sum_{\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} \dots \dots \dots (89)$$

حيث ϵ يعبر عن طاقة المستوى، d_{σ}^{\dagger} يعبر عن مؤثر إنشاء (هدم) إلكترون ذو مسقط سبيني σ في نفس المستوى، n_{\downarrow} يعبر عن مؤثر العد الخاص بالسبين العلوي (السفلي) للإلكترونات، و $U > 0$ يعبر عن تنافر كولوم الموضعي. الحد الثاني للهاميلتوني الذي يحتوي على مؤثري العد يمنع الانشغال المزدوج للمستوى الطاقوي، حيث إذا كان إلكترون وحيد يشغل المستوى الطاقوي، تكون طاقة النقطة الكمومية هي ϵ ، وإذا كان إلكترونين يشغلان المستوى الطاقوي، واحد له سبين علوي وآخر سفلي (حسب مبدأ الاستبعاد لباولي) فطاقة النقطة الكمومية في هذه الحالة تكون $2\epsilon + U$. [2]



الشكل 7.II: طاقة النقطة الكمومية في حالة وجود إلكترون وحيد وفي حالة وجود إلكترونين. [2]

4.II دراسة النقطة الكمومية ذات مستوى طاقي وحيد باستعمال معادلة الحركة:

في نظام نقطة كمومية وحيدة المستوى تعطى دالة Green المتأخرة بالعلاقة:

$$G_{\sigma}^R(t) = -i\theta(t)\langle\{d_{\sigma}(t), d_{\sigma}^{\dagger}(0)\}\rangle \dots \dots \dots (90)$$

حيث $\langle X \rangle$ تعبر عن القيمة المتوسطة الحرارية، $\theta(t)$ هي دالة الخطوة، و $\{A, B\} = AB + BA$ هو المبدل المضاد للمؤثرين A و B ، نقوم بتعيين الدالة المتأخرة انطلاقاً من معادلة الحركة:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{\sigma}^R(t) = \delta(t) + \theta(t)\langle\{d'_{\sigma}(t), d_{\sigma}^{\dagger}(0)\}\rangle \dots \dots \dots (91)$$

حيث $d'_{\sigma}(t) = \partial d_{\sigma}(t) / \partial t$ ، ومن خلال معادلة هايزنبرغ للحركة نجد:

$$d'_{\sigma}(t) = -\frac{i}{\hbar} [d_{\sigma}(t), H_D(t)] \dots \dots \dots (92)$$

يمكننا حساب قيمة المبدل السابق بسهولة لاستنتاج قيمة $d'_{\sigma}(t)$ حيث نعوض علاقة $H_D(t)$ ونكمل الحساب:

$$d'_{\sigma}(t) = -\frac{i}{\hbar} [d_{\sigma}(t), \epsilon \sum_{\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + U n_{\uparrow} n_{\downarrow}] \dots \dots \dots (93)$$

$$d_{\sigma}(t) = -\frac{i}{\hbar}(\epsilon[d_{\sigma}(t), \sum_{\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}] + U[d_{\sigma}(t), n_{\uparrow} n_{\downarrow}]) \dots \dots \dots (94)$$

وبالحساب تكون قيمة المبدلين الماضيين:

$$[d_{\sigma}, \sum_{\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}] = d_{\sigma} \dots \dots \dots (95)$$

$$[d_{\sigma}, n_{\uparrow} n_{\downarrow}] = n_{\uparrow}[d_{\sigma}, n_{\downarrow}] + [d_{\sigma}, n_{\uparrow}]n_{\downarrow} = n_{\uparrow}[d_{\sigma}, d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow}] + [d_{\sigma}, d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow}]n_{\downarrow} \dots \dots \dots (96)$$

$$[d_{\sigma}, n_{\uparrow} n_{\downarrow}] = n_{\uparrow} d_{\downarrow} \delta_{\sigma\downarrow} + d_{\uparrow} n_{\downarrow} \delta_{\sigma\uparrow} = n_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} \dots \dots \dots (97)$$

حيث $\bar{\sigma} = -\sigma$. مع العلم أن d_{σ} و $n_{\bar{\sigma}}$ متبادلان. فتصبح النتيجة النهائية هي:

$$d_{\sigma}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\epsilon + U n_{\bar{\sigma}}(t)] d_{\sigma}(t) \dots \dots \dots (98)$$

بالعودة للمعادلة رقم (91) نجد:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{\sigma}^R(t) = \delta(t) + \frac{\epsilon}{\hbar} G_{\sigma}^R(t) + \frac{U}{\hbar} \Gamma_{\sigma}^R(t) \dots \dots \dots (99)$$

حيث علاقة الارتباط المتأخرة $\Gamma_{\sigma}^R(t)$ معرفة بـ:

$$\Gamma_{\sigma}^R(t) = -i\theta(t) \langle \{n_{\bar{\sigma}}(t) d_{\sigma}(t), d_{\sigma}^{\dagger}(0)\} \rangle \dots \dots \dots (100)$$

نقوم بتفصيل معادلة الحركة لعلاقة الارتباط $\Gamma_{\sigma}^R(t)$:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Gamma_{\sigma}^R(t) = \delta(t) \langle \{n_{\bar{\sigma}}(0) d_{\sigma}(0), d_{\sigma}^{\dagger}(0)\} \rangle + \theta(t) \langle \{\dot{n}_{\bar{\sigma}}(t) d_{\sigma}(t), d_{\sigma}^{\dagger}(0)\} \rangle \\ + \theta(t) \langle \{n_{\bar{\sigma}}(t) \dot{d}_{\sigma}(t), d_{\sigma}^{\dagger}(0)\} \rangle \dots \dots \dots (101)$$

حيث $n_{\bar{\sigma}}$ يتبادل مع كل من d_{σ} و d_{σ}^{\dagger} ، إذن يمكننا تبسيط الحد الأول إلى $\delta(t) \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle$ ، والحد الثاني ينعدم لأن $n_{\bar{\sigma}}$ يتبادل مع الهاميلتوني H_D ، وبتبسيط الحد الثالث بالاستعانة بالمعادلة (98) نتحصل على علاقة تحتوي على الجداء $n_{\bar{\sigma}}(t) n_{\bar{\sigma}}(t)$ وعند تبسيطها نجد: [2]

$$n_{\bar{\sigma}} n_{\bar{\sigma}} = d_{\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{\bar{\sigma}} d_{\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{\bar{\sigma}} = d_{\bar{\sigma}}^{\dagger} (1 - d_{\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{\bar{\sigma}}) d_{\bar{\sigma}} = d_{\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{\bar{\sigma}} - d_{\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{\bar{\sigma}} d_{\bar{\sigma}} = d_{\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{\bar{\sigma}} = n_{\bar{\sigma}} \dots \dots \dots (102)$$

ومنه تصبح معادلة الحركة لعلاقة الارتباط المتأخرة على الشكل:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Gamma_{\sigma}^R(t) = \delta(t) \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle + \frac{1}{\hbar} (\epsilon + U) \Gamma_{\sigma}^R(t) \dots \dots \dots (103)$$

باستعمال تحويل فورييه للمعادلتين (99) و (103) نجد:

$$(\omega - \epsilon/\hbar + i0^+) G_{\sigma}^R(\omega) = 1 + (U/\hbar) \Gamma_{\sigma}^R(\omega) \dots \dots \dots (104)$$

$$(\omega - \epsilon/\hbar - U/\hbar + i0^+) \Gamma_{\sigma}^R(\omega) = \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle \dots \dots \dots (105)$$

حل هاته المعادلات يكون:

$$G_{\sigma}^R(\omega) = \frac{1 - \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{\omega - \epsilon/\hbar + i0^+} + \frac{\langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{\omega - (\epsilon + U)/\hbar + i0^+} \dots \dots \dots (106)$$

وهاته المعادلة الأخيرة هي بالضبط دالة Green المتأخرة لنظام معزول لمستوى وحيد في نقطة كمومية. دالة الكثافة السبينية للحالة D_{σ} المعطاة بالعلاقة $(-1/\pi\hbar) \text{Im } G_{\sigma}^R(\omega)$ تملك قمتين على شكل دالة دلتا: [2]

- الأولى عند $\epsilon = \hbar\omega$ مع وزن احصائي $\langle n_{\bar{\sigma}} \rangle - 1$ والتي تشير إلى المستوى المشغول بالإلكترون وحيد.
- الثانية عند $\epsilon + U = \hbar\omega$ مع وزن احصائي $\langle n_{\bar{\sigma}} \rangle$ والتي تشير إلى مستوى مزدوج الإسكان.

النتيجة المتحصل عليها في المعادلة (106) محققة ومعقولة إلى حد بعيد: حيث أنه إذا أضفنا إلكترون ذو مسقط سبيني σ إلى نقطة كمومية فارغة ($\langle n_{\bar{\sigma}} \rangle = 0$)، $G_{\sigma}^R(\omega)$ ستحمل قيمة الحد الأول فقط وسوف تملك قطب وحيد عند ϵ/\hbar وبالتالي طاقة الإلكترون في هاته الحالة هي ϵ . [2]

أما في حالة إضافة إلكترون ثاني ذو مسقط سبيني σ للنقطة الكمومية السابقة ذات المستوى الوحيد والتي هي مشغولة سابقا بالإلكترون آخر، يصبح سبين الإلكترون المضاف هو $\bar{\sigma}$ (حسب مبدأ الاستبعاد لباولي) وتكون لديه طاقة ϵ ، وعليه في هاته الحالة $\langle n_{\bar{\sigma}} \rangle = 1$ تصبح المعادلة (106) تحتوي فقط على الحد الثاني، والتي لديها قطب عند $(\epsilon + U)/\hbar$.

طاقة الإلكترون المضاف تكون إذن $\epsilon + U$ ، والطاقة الإجمالية للإلكترونين هي $2\epsilon + U$ ، وهي القيمة المتوقعة. [2]

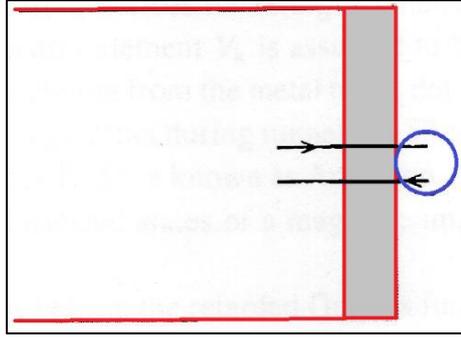


1.III مقدمة :

في هذا الفصل سنتعرض إلى دراسة خصائص اتصال النقاط الكمومية مع معدن، وذلك بالدراسة الشاملة للهاميلتوني المطروح حسب نموذج أندرسون والذي سيعطينا نظرة عن معادلة الحركة وفق دوال Green لمعرفة سلوك إلكترونات النقطة الكمومية، في حالات مختلفة حسب الكمون الذي يجسد من طرف المعدن وذلك لدراسة مفعول النفق.

2.III نموذج أندرسون لهاميلتوني نقطة كمومية في اتصال مع معدن:

نفترض نظام يحتوي على وصلة كمومية ذات مستوى وحيد في اتصال مع سطح معدن (الشكل 1.III). [1]



الشكل 1.III: طبقة عازلة رقيقة تفصل بين معدن ونقطة كمومية حيث أن الإلكترونات تتبادل نفقيا بين المعدن والنقطة الكمومية. [1]

نأخذ بعين الاعتبار وبالخصوص تأثير التفاعل الحادث بين المعدن والنقطة الكمومية على مستوى الطاقة للنقطة، لذا فالهاميلتوني الذي يعرف هذا النظام يعطى بالعبارة:

$$H = H_e + H_D + H_T \dots \dots \dots (107)$$

حيث H_e يمثل هاميلتوني المعدن، H_D هو هاميلتوني النقطة الكمومية، و H_T يمثل هاميلتوني التفاعل بين سطح المعدن والنقطة الكمومية (نفترض أنه لا توجد تفاعلات بين إلكترونات المعدن، أو كل الكترون يتفاعل مع الإلكترونات الأخرى بكمون ذاتي متوسط) حيث: [1]

$$H_e = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \dots \dots \dots (108)$$

حيث $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / (2m^* - \mu)$ ، و m^* تمثل الكتلة الفعالة للإلكترون، و μ يمثل الكمون الكيميائي للمعدن (طاقة فيرمي). ولدينا هاميلتوني النقطة الكمومية هو نفسه الذي ذكرناه سابقا:

$$H_D = \epsilon \sum_{\sigma} d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} \dots \dots \dots (109)$$

والتفاعل بين المعدن والنقطة يوصف بهاميلتوني مفعول النفق التالي:

$$H_T = \sum_{k\sigma} (V_k c_{k\sigma}^\dagger d_{\sigma} + V_k^* d_{\sigma}^\dagger c_{k\sigma}) \dots \dots \dots (110)$$

الحد الأول في عبارة H_T يصف مفعول النفق للإلكترون اثناء انتقاله من النقطة الكمومية إلى المعدن، حيث V_k يمثل مصفوفة كمون التفاعل وهي لا تتعلق بالسبين. أما الحد الثاني فهو يصف مفعول النفق من المعدن إلى النقطة الكمومية. افترضنا في هذا النموذج أنه أثناء الانتقال النفقي يكون غير متعلق بتاتا بالسبين. المعادلات الموصوفة سابقا من (107) إلى (110) معروفة بنموذج أندرسون المشوب وقد استعمل لأول مرة لوصف شوائب مغناطيسية متوضعة داخل معدن.

3.III دراسة معادلة الحركة لنقطة كمومية في اتصال مع معدن وفق نموذج اندرسون :

مثلا قمنا في الفصل السابق بحساب واستخراج معادلة الحركة انطلاقا من دالة Green المتأخرة للنقطة الكمومية، ان يمكننا أخذ معادلة الحركة في نموذج اندرسون مباشرة بالعلاقة:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_{d\sigma}^R(t) = \hbar\delta(t) + \epsilon G_{d\sigma}^R(t) + U\Gamma_{d\sigma}^R(t) + \sum_k V_k^* G_{kd\sigma}^R(t) \dots \dots \dots (111)$$

حيث هاته العبارة:

$$G_{kd\sigma}^R(t) = -i\theta(t)\{c_{k\sigma}(t), d_{\sigma}^{\dagger}(0)\} \dots \dots \dots (112)$$

هي دالة Green المتأخرة المشتركة معادلة حركتها هي:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_{kd\sigma}^R(t) = \epsilon_k G_{kd\sigma}^R(t) + V_k G_{d\sigma}^R(t) \dots \dots \dots (113)$$

وأيضا $\Gamma_{d\sigma}^R(t)$ معطى بالعلاقة:

$$\Gamma_{d\sigma}^R(t) = -i\theta(t)\{n_{\bar{\sigma}}(t)d_{\sigma}(t), d_{\sigma}^{\dagger}(0)\}$$

وتكون معادلة حركة $\Gamma_{d\sigma}^R(t)$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Gamma_{d\sigma}^R(t) = \hbar\delta(t) + (\epsilon + U)\Gamma_{d\sigma}^R(t) + \sum_k V_k^* B_{kd\sigma}^R(t) - \sum_k V_k C_{kd\sigma}^R - \sum_k V_k^* D_{kd\sigma}^R \dots \dots (114)$$

حيث:

$$B_{kd\sigma}^R(t) = -i\theta(t)\{n_{\bar{\sigma}}(t)c_{k\sigma}(t), d_{\sigma}^{\dagger}(0)\} \dots \dots \dots (115)$$

$$C_{kd\sigma}^R = -i\theta(t)\{c_{k\bar{\sigma}}^{\dagger}(t)d_{\bar{\sigma}}(t)d_{\sigma}(t), d_{\sigma}^{\dagger}(0)\} \dots \dots (116)$$

$$D_{kd\sigma}^R = -i\theta(t)\{c_{k\bar{\sigma}}^{\dagger}(t)d_{\bar{\sigma}}^{\dagger}(t)d_{\sigma}(t), d_{\sigma}^{\dagger}(0)\} \dots \dots (117)$$

قمنا باستخراج ثلاث دوال جديدة متأخرة. معادلات الحركة لهذه الدوال ستعطينا دوال أخرى معقدة لديها معادلات حركة أكثر تعقيداً، وفي كل مرة يستمر ذلك في سلسلة غير متناهية، إذن نحتاج إلى تقريب معين يعطينا علاقة لها مفهوم فيزيائي بعيداً عن التعقيدات. لذا نستعمل تقريب المجال المتوسط (هارتري - فوك) ونكتب: [1]

$$B_{kd\sigma}^R(t) \approx -i\theta(t)\langle n_{\bar{\sigma}} \rangle \{c_{k\sigma}(t), d_{\sigma}^{\dagger}(0)\} \approx \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle G_{kd\sigma}^R \dots \dots \dots (118)$$

في هذا التقريب كل من $D_{kd\sigma}^R$ و $C_{kd\sigma}^R$ ينعدمان لأن القيم المتوسطة مثل $\langle c^{\dagger}d \rangle$ ، $\langle d_{\bar{\sigma}}d_{\sigma} \rangle$ و $\langle d_{\sigma}^{\dagger}d_{\sigma} \rangle$ تكون معدومة ومنه تصبح معادلة الحركة (114) على الشكل:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Gamma_{d\sigma}^R(t) = \hbar\delta(t)\langle n_{\bar{\sigma}} \rangle + (\epsilon + U)\Gamma_{d\sigma}^R(t) + \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle \sum_k V_k^* G_{kd\sigma}^R(t) \dots \dots \dots (119)$$

وباستعمال تحويل فوريي تصبح المعادلات (111)، (113) و (119) على الشكل:

$$(\hbar\omega - \epsilon + i0^+)G_{d\sigma}^R(\omega) = \hbar + U\Gamma_{d\sigma}^R(\omega) + \sum_k V_k^* G_{kd\sigma}^R(\omega) \dots \dots \dots (120)$$

$$(\hbar\omega - \epsilon_k + i0^-)G_{kd\sigma}^R(\omega) = V_k G_{d\sigma}^R(\omega) \dots \dots \dots (121)$$

$$(\hbar\omega - \epsilon - U + i0^+)\Gamma_{d\sigma}^R(\omega) = \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle \left(\hbar + \sum_k V_k^* G_{kd\sigma}^R(\omega) \right) \dots \dots \dots (122)$$

بحل هاته المعادلات نتحصل على دالة Green المتأخرة الخاصة بالنقطة الكمومية:

$$G_{d\sigma}^R(\omega) = \frac{\hbar\omega - \epsilon - U + \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle U}{(\omega - \epsilon/\hbar)(\hbar\omega - \epsilon - U) - \Sigma^R(\omega)(\hbar\omega - \epsilon - U + \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle U)} \dots \dots \dots (123)$$

حيث $\Sigma^R(\omega)$ معطى بالعلاقة:

$$\Sigma^R(\omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_k \frac{|V_k|^2}{\hbar\omega - \epsilon_k + i0^+} \dots \dots \dots (124)$$

في هاته الحالة إذا افترضنا أن Σ^R مستقل عن ω والقيمة $U \ll \hbar|\Sigma^R|$ ، إذن قطبي دالة Green $G_{d\sigma}^R(\omega)$ يكونان عند قيمتين تقريبيتين لـ ω حيث:

$$\omega \approx \epsilon/\hbar + (1 - \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle)\Sigma^R \dots \dots \dots (125)$$

$$\omega \approx (\epsilon + U)/\hbar + \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle \Sigma^R \dots \dots \dots (126)$$

إذن عند أخذ هذا الفرض تصبح دالة Green المتأخرة بالتقريب معطاة بـ:

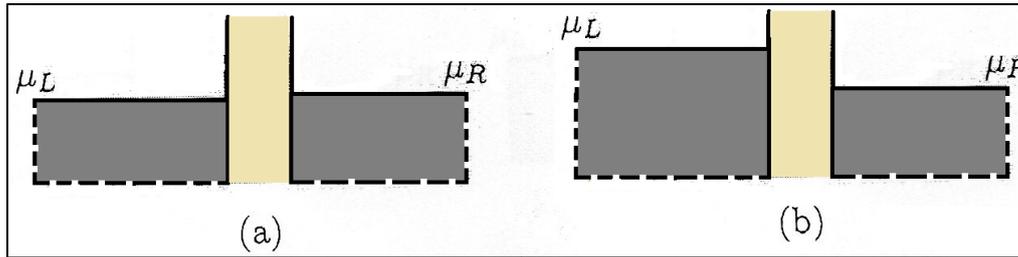
$$G_{d\sigma}^R(\omega) \approx \frac{1 - \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{\omega - \epsilon/\hbar - (1 - \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle)\Sigma^R} + \frac{\langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{\omega - (\epsilon + U)/\hbar - \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle \Sigma^R} \dots \dots \dots (127)$$

رأينا أن كثافة الحالة لنقطة كمومية معزولة تتكون من ذروتين للدالة دلتا عند ϵ و $\epsilon + U$ (المعادلة (127)). والآن بعد هاته الحسابات نرى أن تأثير التفاعل بين النقطة الكمومية و سطح المعدن يعطينا إزاحة وتوسيع للذروتين حيث:

- قيمة الإزاحة متناسبة مع الجزء الحقيقي للدالة Σ^R .
- قيمة التوسيع متناسبة مع الجزء التخيلي للدالة Σ^R . [1]

III.4 دراسة مفعول النفق في النقاط الكمومية المتصلة مع سطح معدن:

سنقوم بحساب التيار النفقي بين الكترودين شبه لا نهائين مفصولين بطبقة عازلة رقيقة. يندفق تيار عند تطبيق جهد الانحياز مما يزيد في قيمة الكمون الكيميائي لوحد من الإلكترونين بالنسبة للآخر (شكل III.2). [1]



الشكل III.2: الكترودين من المعدن مفصولين بطبقة عازلة. في (a) لم يطبق أي جهد انحياز لذا يكون النظام في توازن، أما في (b) يوجد جهد انحياز مطبق لذا نلاحظ اختلاف في كمون الإلكترونين. [1]

نفترض أن الإلكترونين عبارة عن معدنين في الحالة العادية، عند حرارة منخفضة كافية كل الحالات التي هي تحت الكمون الكيميائي تكون مشغولة. ومع ذلك، يمكن تعميمها لتسمح لأي من الإلكترونين أو كليهما أن يكون موصلًا فائقًا. ولدراسة مفصلة لمفعول النفق نستعين بالهاميلتوني النفقي:

$$H = H_L + H_R + H_T \dots \dots \dots (128)$$

حيث H_L و H_R يمثلان هاميلتوني لكل من الإلكترون الأيسر والأيمن على الترتيب، و H_T يمثل الهاميلتوني النفقي. ويكون H_L و H_R يعبران عن تفاعل الجسيمات في كل إلكترون. الهاميلتوني النفقي يأخذ بالعلاقة:

$$H_T = \sum_{kq\sigma} (V_{kq} b_{q\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + V_{kq}^* c_{k\sigma}^\dagger b_{q\sigma}) \dots \dots \dots (129)$$

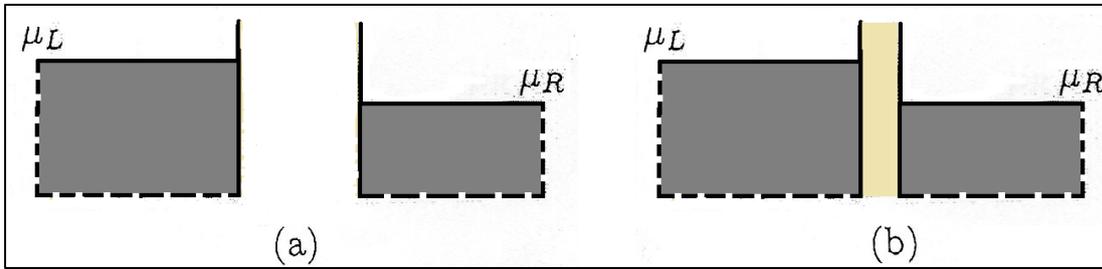
حيث $c_{k\sigma}$ و $c_{k\sigma}^\dagger$ هما مؤثري الإنشاء والهدم على الترتيب لإلكترون على الإلكترون الأيسر في الحالة $|k\sigma\rangle$ ، $b_{q\sigma}^\dagger$ و $b_{q\sigma}$ هما مؤثري الإنشاء والهدم لإلكترون على الإلكترون الأيمن في الحالة $|q\sigma\rangle$. وهنا نفترض أن مؤثري الإنشاء والهدم لكل من الإلكترونين لا تتبادل فيما بينها. [1]

الحد الأول في H_T يصف الانتقال النفقي لإلكترون من الحالة $|k\sigma\rangle$ في الإلكترون الأيسر إلى الحالة $|q\sigma\rangle$ في الإلكترون الأيمن، وتكون سعة الانتقال في هاته العملية هي المصفوفة V_{kq} والتي اعتُبرت مستقلة عن السبين. أما الحد الثاني فهو يصف الانتقال النفقي في الاتجاه المعاكس. نفترض أنه لا يوجد لف (سبين) اثناء حدوث مفعول النفق، وهذا عادة يكون صحيحا في حالة ما إذا كان المعدن المكون للإلكترونين والطبقة العازلة غير مغناطيسيين. [1]

وعلى العموم نقول إن عملية الانتقال النفقي يمكن أن تكون إما سلسلة (مطاطية) بمعنى أن الإلكترون في هذه الحالة لا تتغير طاقته، أو غير سلسلة (غير مطاطية، بلاستيكية) بمعنى أن الإلكترون المنتقل بواسطة المفعول النفقي يكون صاحبه إثارة طاقوية على الطبقة العازلة. [2]

في تجهيز تجريبي، يكون النظام في بداية العملية في حالة توازن، حيث يكون كل من الكمونين الكيميائيين للإلكترونين μ_L و μ_R متساويين. يمر التيار (تيار نفقي) عند تطبيق جهد انحياز الذي بدوره يرفع من قيمة الكمون الكيميائي في إلكترود بالنسبة إلى الآخر. الاضطراب الخارجي المطبق يكون عبارة عن إزاحة شاقولية لطاقة الإلكترونات في واحد من الإلكترونين. [2]

المقاربة المستعملة للحسابات ستكون مختلفة، حيث نفترض أن الإلكترونين في البداية يكونان في حالة توازن بالنسبة لكمونيهما الكيميائي، حيث: $\mu_L = \mu_R + eV$ ، لكن هنا لا يوجد أي تأثير للمفعول النفقي (شكل 3.III (a))، ويكون الهاميلتوني الابتدائي: $H_0 = H_L + H_R$ (الإلكترود الأيمن والأيسر مفصولين). [2]



الشكل 3.III: (a) يمثل الكترودين مفصولين تماما $H_T = 0$ ، أما (b) فيمثل الكترودين في اتصال عن طريق طبقة عازلة رقيقة $H_T \neq 0$. [1]

بعد ذلك نقوم بجعل الإلكترونين على اتصال ويكون بينهما طبقة عازلة عند اللحظة $t = t_0$ ، فتصبح عبارة الهاميلتوني التالي:

$$H = \begin{cases} H_0 = H_L + H_R, & t < t_0 \\ H_L + H_R + H_T, & t \geq t_0 \end{cases} \dots \dots \dots (130)$$

الاضطراب الخارجي هو H_T ، وينشأ التيار النفقي عن طريق الاستجابة لهذا الاضطراب (شكل 3.III (b))

نتحصل على التيار الإلكتروني من معدل التغير بالنسبة للزمن في عدد الاكترونات في إلكترود واحد، فيكون التيار للإلكترود الأيسر:

$$I = -e\langle \dot{N}_L \rangle \dots \dots \dots (131)$$

حيث N_L هو مؤثر العد للإلكترونات بالنسبة للإلكترود الأيسر:

$$N_L = \sum_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \dots \dots \dots (132)$$

معدل التغير لـ N_L معطي بعلاقة هايزنبرغ للحركة حيث:

$$\dot{N}_L = \frac{i}{\hbar} [N_L, H_0 + H_T] = -\frac{i}{\hbar} [N_L, H_T] \dots \dots \dots (133)$$

حيث يكون N_L يتبادل مع H_L و H_R . ونستطيع بسهولة حساب المبدل السابق لنتحصل على:

$$\dot{N}_L = \frac{i}{\hbar} \sum_{kq\sigma} (V_{kq} b_{q\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - V_{kq}^* c_{k\sigma}^\dagger b_{q\sigma}) \dots \dots \dots (134)$$

وباستعمال نظرية الاستجابة الخطية، $\langle \dot{N}_L(t) \rangle_{ext}$ يكون معطي بعلاقة كيبو (Kubo) التالية:

$$\langle \dot{N}_L(t) \rangle_{ext} = \langle \dot{N}_L(t) \rangle_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle [\dot{N}_L(t), H_T(t')] \rangle_0 \dots \dots \dots (135)$$

(الصفير الموضوع كدليل يعني أن المؤثرات تتطور حسب H_0)، ولدينا:

$$\dot{N}_L(t) = e^{iH_0 t/\hbar} \dot{N}_L e^{-iH_0 t/\hbar}, H_T(t) = e^{iH_0 t/\hbar} H_T e^{-iH_0 t/\hbar}$$

وبما أن $\langle c_{k\sigma}^\dagger b_{q\sigma} \rangle_0 = \langle b_{q\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle_0 = 0$ يكون $\langle \dot{N}_L(t) \rangle_0 = 0$ وهذا معناه أنه في غياب مفعول النفق (بمعنى غياب الاتصال بين الإلكترودين) يكون التيار معدوماً. إذن نكتب:

$$\langle \dot{N}_L(t) \rangle_{ext} = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle [\dot{N}_L(t), H_T(t')] \rangle_0 \dots \dots \dots (136)$$

للتعبير عن الحد الأيمن للمساواة الماضية في المعادلة (..) كدالة ارتباط متأخرة، نحتاج إلى كتابة مؤثري هايزنبرغ $\dot{N}_L(t)$ و $H_T(t')$ على شكل مؤثر هايزنبرغ المعدل الذي يكون فيه قيمة الكمون الكيميائي التي تؤخذ بعين الاعتبار في هذه الدراسة، حيث يكون: [1]

$$\tilde{H}_0 = H_0 - \mu_L N_L - \mu_R N_R \dots \dots \dots (137)$$

ويجب الحذر أثناء الحسابات لأن H_T و \dot{N}_L لا يتبادلان مع N_R و N_L .

وبما أن H_T و \dot{N}_L عبارة عن تركيبات خطية لـ $c_{k\sigma}^\dagger b_{q\sigma}$ و $b_{q\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$ ، انن نكتب أولاً هذه المؤثرات على شكل هايزنبرغ المعدل، بناء على الكتابة التالية:

$$e^{iH_0 t/\hbar} = e^{i\tilde{H}_0 t/\hbar} e^{i(\mu_L N_L + \mu_R N_R) t/\hbar} \dots \dots \dots (138)$$

حيث المعادلة السابقة محققة لأن $[\tilde{H}_0, N_L] = [\tilde{H}_0, N_R] = 0$ ، إذن:

$$b_{q\sigma}^\dagger(t) c_{k\sigma}(t) = e^{iH_0 t/\hbar} b_{q\sigma}^\dagger c_{k\sigma} e^{-iH_0 t/\hbar} \dots \dots \dots (139)$$

تصبح هذه المعادلة:

$$b_{q\sigma}^\dagger(t) c_{k\sigma}(t) = e^{i\tilde{H}_0 t/\hbar} e^{i(\mu_L N_L + \mu_R N_R) t/\hbar} b_{q\sigma}^\dagger c_{k\sigma} e^{-i(\mu_L N_L + \mu_R N_R) t/\hbar} e^{-i\tilde{H}_0 t/\hbar} \dots \dots \dots (140)$$

$$b_{q\sigma}^\dagger(t)c_{k\sigma}(t) = e^{iH_0 t/\hbar} X(t) e^{-iH_0 t/\hbar} \dots\dots\dots(141)$$

ولتعيين $X(t)$ ، نأخذ مشتقه بالنسبة للزمن:

$$\dot{X}(t) = \frac{i}{\hbar} e^{i(\mu_L N_L + \mu_R N_R)t/\hbar} [\mu_L N_L + \mu_R N_R, b_{q\sigma}^\dagger c_{k\sigma}] e^{-i(\mu_L N_L + \mu_R N_R)t/\hbar} \dots\dots\dots(142)$$

بعد الحسابات نتحصل على:

$$\dot{X}(t) = - (ieV/\hbar)X(t) \Rightarrow X(t) = X(0)e^{-ieVt/\hbar} = b_{q\sigma}^\dagger c_{k\sigma} e^{-ieVt/\hbar} \dots\dots\dots(143)$$

إن تصب المعادلة (141) على الشكل:

$$b_{q\sigma}^\dagger(t)c_{k\sigma}(t) = e^{-ieVt/\hbar} e^{iH_0 t/\hbar} b_{q\sigma}^\dagger c_{k\sigma} e^{-iH_0 t/\hbar} \dots\dots\dots(144)$$

بأخذ المرافق في الطرفين في المعادلة الأخيرة نتحصل على:

$$c_{k\sigma}^\dagger(t)b_{q\sigma}(t) = e^{ieVt/\hbar} e^{iH_0 t/\hbar} c_{k\sigma}^\dagger b_{q\sigma} e^{-iH_0 t/\hbar} \dots\dots\dots(145)$$

ومنه تكون معادلة التيار تصبح:

$$I(V, T) = -e\langle \dot{N}_L \rangle \dots\dots(146)$$

$$= \frac{e}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \left\langle \left[\sum_{kq\sigma} (e^{-ieVt'/\hbar} V_{kq} b_{q\sigma}^\dagger(t) c_{k\sigma}(t) - H.C), \sum_{kq\sigma} (e^{-ieVt'/\hbar} V_{kq} b_{q\sigma}^\dagger(t') c_{k\sigma}(t') - H.C) \right] \right\rangle_0$$

حيث $H.C$ يمثل المرافق الهرميتي. التيار يعتمد على قيمة جهد الانحياز V ودرجة الحرارة T (من القيمة المتوسطة الحرارية)، حيث العبارة السابقة تطور الزمن لكل من مؤثري الانشاء والهدم يتعلق بـ $\tilde{H}_0 = H_0 - \mu_L N_L - \mu_R N_R$.

نعرف المؤثر $A(t)$ بـ:

$$A(t) = \sum_{kq\sigma} V_{kq} b_{q\sigma}^\dagger(t) c_{k\sigma}(t) \dots\dots\dots(147)$$

ومنه تكون عبارة التيار الجديدة هي:

$$I(V, T) = \frac{e}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \left\langle \left[(e^{-ieVt/\hbar} A(t) - e^{ieVt/\hbar} A^\dagger(t)), (e^{-ieVt'/\hbar} A(t') + e^{ieVt'/\hbar} A^\dagger(t')) \right] \right\rangle_0 \dots(148)$$

وبما أن الإلكترودين مصنوعين من معدن عادي يكون: $\langle A(t)A(t') \rangle_0 = \langle A^\dagger(t)A^\dagger(t') \rangle_0 = 0$ لأن: $\langle c_{k\sigma}(t)c_{k\sigma}(t') \rangle_0 = \langle c_{k\sigma}^\dagger(t)c_{k\sigma}^\dagger(t') \rangle_0 = 0$ وهذه القيم لا تكون على هذا الشكل في جالة إلكترودين مصنوعين من مادة ذات ناقلية فائقة. [1]

وفي هذه الحالة أيضا سنهتم بتقييم التيار لفترة طويلة بعد تشغيل الاضطراب الخارجي ويكون $t \gg t_0$ (حالة مستقرة)، إذن يكون مكافئ هذه الحالة التغيير في حدود التكامل حيث يصبح $t_0 = -\infty$ ، إذن بعد هذا الافتراض يصبح التيار:

$$I(V, T) = \frac{e}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \{ e^{-ieV(t-t')/\hbar} \langle [A(t), A^\dagger(t')] \rangle_0 - e^{ieV(t-t')/\hbar} \langle [A^\dagger(t), A(t')] \rangle_0 \} \dots (149)$$

نقوم بتبسيط العبارة الماضية حيث:

$$[A^\dagger(t), A(t')] = -[A(t), A^\dagger(t')]^\dagger \Rightarrow \langle [A^\dagger(t), A(t')] \rangle_0 = -\langle [A(t), A^\dagger(t')] \rangle_0^* \dots (150)$$

إذن:

$$I(V, T) = \frac{2e}{\hbar^2} Re \int_{-\infty}^t dt' e^{-ieV(t-t')/\hbar} \langle [A(t), A^\dagger(t')] \rangle_0 \dots (151)$$

وبما أن \hbar_0 مستقل عن الزمن، القيمة المتوسطة للطرف الأيمن للعبارة الأخيرة يتعلق بـ $t - t'$ وليس كل من t و t' على حدى. إذن: [1]

$$\int_{-\infty}^t dt' \dots = - \int_0^\infty d(t-t') \dots = \int_0^\infty d(t-t') \dots = \int_{-\infty}^\infty d(t-t') \theta(t-t') \dots, \dots (152)$$

وبأخذ $t' = 0$ نتحصل على:

$$I(V, T) = \frac{2e}{\hbar^2} Re \int_{-\infty}^\infty dt \theta(t) e^{-ieVt/\hbar} \langle [A(t), A^\dagger(0)] \rangle_0 \dots (153)$$

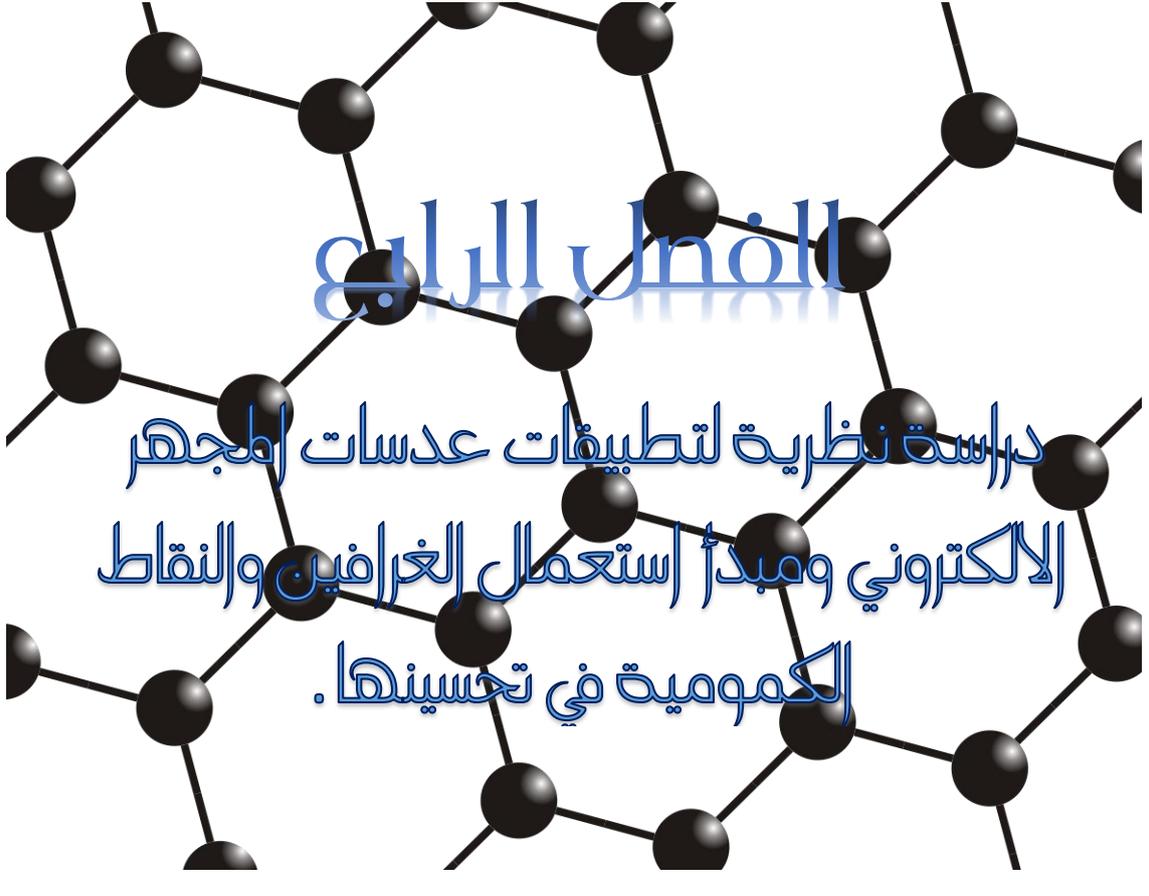
وفي الأخير نقوم بالتعبير عن دالة الترابط المتأخرة:

$$D_{AA}^R(t) = -i\theta(t) \langle [A(t), A^\dagger(0)] \rangle_0 \dots (154)$$

ومنه تصبح عبارة التيار النفقي هي:

$$I(V, T) = -\frac{2e}{\hbar^2} Im D_{AA}^R(\omega)|_{\omega=-eV/\hbar} \dots (155)$$

إلى هنا نكون قد نجحنا في التعبير عن التيار النفقي بواسطة دالة ترابط متأخرة. [1]



الفصل الرابع

دراسة نظرية لتطبيقات عدسات أجهزة
الالكتروني ومبدأ استعمال الخرافين والنقاط
الكمومية في تحسينها.

1.IV مقدمة :

كان عمل كبار علماء الفيزياء في بداية القرن العشرين مثل هنري بوانكاريه ولويس ديبروغلي وهانس بوش على الإلكترونيات والعدسات الكهرومغناطيسية وذلك ما ساعد في أوائل الثلاثينيات من الوصول إلى تركيب المجهر الإلكتروني. حيث قدم ماكس نول وطالبه إرنست روسكا في عام 1931 صوراً تم التقاطها بالمجهر الإلكتروني الأول بعدستين وأظهرت الصور بالفعل تفاصيل برتبة عشرات النانومترات.

وقد حصل إرنست روسكا على جائزة نوبل في الفيزياء عام 1986 عن اختراعه هذا وإلى يومنا هذا مازال تطوير المجهر الإلكتروني مستمرا، لا سيما بعد الحرب العالمية الثانية فقد كانت قفزة نوعية آنذاك [9].

سنقوم في هذا الفصل بشرح الأجزاء المهمة من المجهر الإلكتروني والتعريف بالعدسات الكهرومغناطيسية وإمكانية استبداله بعناصر أقل تكلفة وكذا أكثر فعالية وتساعد في تقليل حجم المجهر وإعطائه دقة أكثر.

2.IV المجهر الإلكتروني:

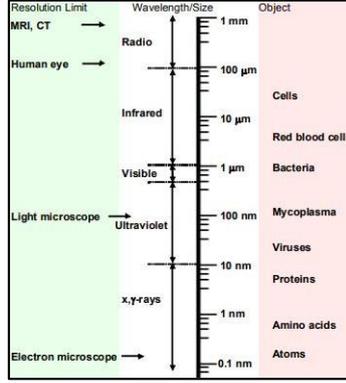
إن فكرة المجهر إنطلقت أساسا من المجاهر الضوئية، حيث أن العلماء في كل مرة يحاولون إيجاد طرق مبتكرة لزيادة قوة التكبير وذلك اعتمادا على الطول الموجي للضوء المرئي واعتماد الضوء في الأطوال الموجية الأقصر وذلك بوضع العدسات في زيوت لتعديل خواصها البصرية، ولكن ذلك لم يعطه إلا قيمة تكبير تصل إلى 2000 مرة فقط من قدرات العين البشرية [10].

ومن هنا بدأ التفكير في بديل مساعد ليعطي قيمة تكبير أكثر، حيث اعتمد العلماء على مبدأ معين حيث أن هذه البدائل يجب أن يكون طولها الموجي أقصر من الطول الموجي للضوء المرئي حتى تنفذ عبر مسافات أقل وتقوم بتفصيل أكثر، حيث يلزم للحصول على صورة مكبرة وواضحة أن يكون طول موجة الأشعة المسلطة على الشيء أصغر من قياساته، ف جاء الاختيار على الإلكترونيات بعد دراسات متعددة عليها والتي هي عبارة عن جسيمات تحمل خواص موجية خاصة عندما تتحرر من الذرة، كما جاء في فرضية ديبروغلي أن لكل جسيم موجية مصاحبة له وذلك حسب العلاقة:

$$\lambda = \frac{h}{p} \dots \dots \dots (156)$$

وتوصل العلماء قبل ذلك إلى أن الموجة المصاحبة للإلكترون أقصر بألاف المرات من الضوء المرئي، حيث أن طول موجة الضوء المرئي بين 380 nm و 750 nm أما طول موجة شعاع الإلكترونات فيمكن التحكم فيه وتصغيره إلى قيم تصل إلى 1 nm مثلاً، وبالتالي تكون للإلكترونات قدرة عالية على التفاعل واختراق الجسيمات الدقيقة جدا.

ومن هنا جاءت تسمية المجهر الإلكتروني نسبة إلى اعتمادها على الإلكترونيات [20].



الشكل 1.IV: حدود دقة تقنيات التصوير المختلفة مقارنة بحجم بعض الأجسام [11].

يختلف المجهر الإلكتروني في تركيبه كثيراً عن المجهر الضوئي حيث أنه جوهر الاختلاف يكمن في أنه لا يعتمد على عدسات بصرية وكذا أنه يستخدم الإلكترونات كمصدر إضاءة ثم تستقبل الأشعة الإلكترونية على فيلم فوتوغرافي بالغ الحساسية، وعليه ففحص العينة لا يتم بالعين المجردة كما في المجهر الضوئي. كما أن هناك اختلاف آخر ألا وهو الحجم الكبير للمجهر الإلكتروني وذلك بسبب تعدد مكوناته للوصول إلى دقة جيدة [10].

إن المجاهر الإلكترونية اختلفت مع الزمن وذلك بتطويرها في كل مرة حسب نموذج استقصائي معين وفق دراسات علمية مختلفة لكن يبقى اعتمادها الأساسي على الإلكترونات ويكمن الاختلاف في طريقة عملها واستخداماتها وسنعرض أهم أنواعها بناء على ما نحتاجه في دراستنا وكذا مبدأ عملها في العناوين القادمة.

3.IV المجهر الإلكتروني الماسح والنافذ Scanning and transmission Electron Microscope:

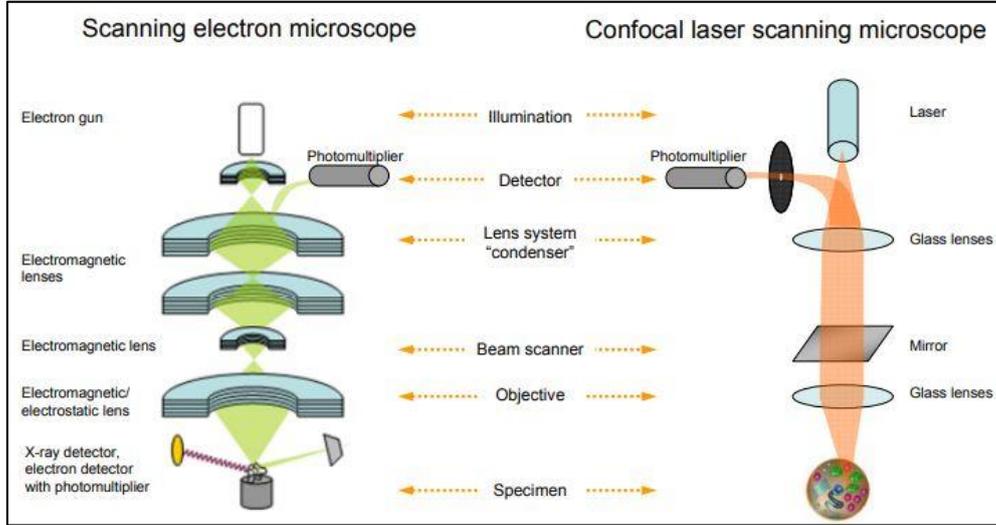
يعرف هذين المجهرين بالاختصار (SEM, TEM)، حيث عرفت تقنية العمل بالإلكترونات لأول مرة سنة 1935 فعمل العلماء على تطويرها وتقدير استعمالها الضروري لأن المجهر الضوئي وصل إلى حدوده وكذا أن الضوء له عقبة أخرى تمنعه من الوصول إلى دقات تكبير أكثر ألا وهي حيود الضوء، لذا طور العلماء كل من تقنيتي SEM و TEM حيث كان الفرق الزمني صغير بين صنعهما لكن يبقى هناك اختلاف بسيط في مبدأ عملهما وكذا استخداماتهما الخاصة [11].



الشكل 2.IV: المجهر الإلكتروني الماسح والنافذ [10].

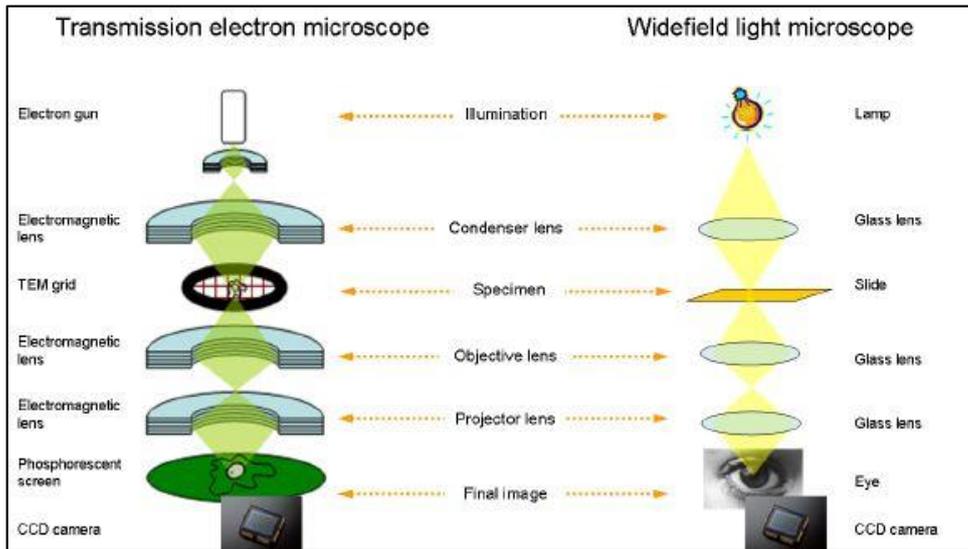
1.3.IV المركبات الأساسية لكل من SEM و TEM:

إن تصميم المجهر الإلكتروني الماسح يشابه إلى حد بعيد تصميم المجهر البؤري الليزري الماسح كما هو موضح في الشكل التالي.



الشكل 3.IV: المكونات الأساسية لكل من SEM و CLSM [11].

بينما تصميم المجهر الإلكتروني النافذ يشابه إلى حد بعيد تصميم المجهر الضوئي كما هو موضح في الشكل التالي:



الشكل 4.IV: المكونات الأساسية لكل من WLM و TEM [11].

إن المجاهر الإلكترونية هي أنظمة فراغ عالية حيث في منطقة مصدر الإلكترونات يلزم فراغ من 10^{-7} إلى 10^{-10} mbar لمنع أكسدة أو حرق الفتيل المسخن، ويتم إخلاء العمود ومنطقة العينة بشكل طردي إلى فراغ من 10^{-5} إلى 10^{-7} mbar حيث أن أي تصادم مع جزيء غاز أو هواء متبقي في النظام يقلل من الدقة والأداء عن طريق تشتيت الإلكترونات. يتكون نظام التفريغ للمجهر الإلكتروني من سلسلة من مضخات التفريغ المنخفضة والعالية ولا يمكن لمضخات التفريغ العالية أن تعمل مباشرة ضد الضغط المحيط، لذلك يلزم إعداد تسلسلي لمضخات التفريغ المنخفضة والعالية [21].

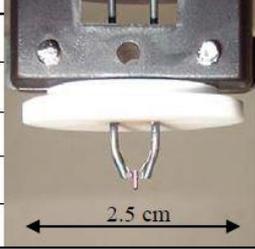
إن مركبات الـ SEM و TEM متنوعة ومختلفة وكل له عمله وسنركز في عملنا هذا على العدسات الكهرومغناطيسية:

1.1.3.IV المدفع الإلكتروني Electron Gun (أو مصدر الإلكترونات):

يمكن إنتاج الإلكترونات إما عن طريق انبعاث التأيين الحراري أو في عملية تسمى انبعاث المجال البارد. يوضح (الشكل 5.IV) مواد صنع مصدر الإلكترون وخصائصه.

في حالة انبعاث التأيين الحراري، يتم تسخين فتيل دقيق جدًا من خيوط التنغستن، أو بلورة LaB6 أو باعث ZrO/W Schottky بواسطة تيار كهربائي يتدفق عبر مصدر الإلكترونات مما يسمح بتحرر الإلكترونات، حيث هذه الأخيرة تغادر الفتيل بطاقة منخفضة، وبالتالي يجب تسريعها إلى سرعة معينة قبل دخول العمود الإلكتروني. يلزم تطبيق جهد عالي بين مصدر الإلكترون المصعد (الكاثود) ولوحة المهبط (الأنود) مما يؤدي إلى نشأة مجال كهروستاتيكي يتم من خلاله توجيه الإلكترونات وتسريعها. أما بالنسبة لانبعاث المجال البارد، يمكن للإلكترونات الهروب من طرف تنجستن دقيق للغاية بدون تسخين (درجة حرارة الغرفة). ميزة مصادر انبعاث المجال البارد هي الإنتاجية العالية جدًا للإلكترونات والحيود اللوني المنخفض جدًا للإلكترونات مما يسمح بالتصوير بالدقة الذرية. هذه الأدوات مكلفة للغاية وتتطلب فراغًا عاليًا بشكل خاص [11] [22].

	Tungsten	Thermionic LaB6	Schottky	Cold field emission
Material	W	LaB6	ZrO/W	W
Heating temp. (K)	2700	1800	1800	300
Normalized brightness	[Bar chart showing brightness levels]			
Required vacuum (Pa)	high			Ultra high
ΔE (eV)	Chromatic aberration!			



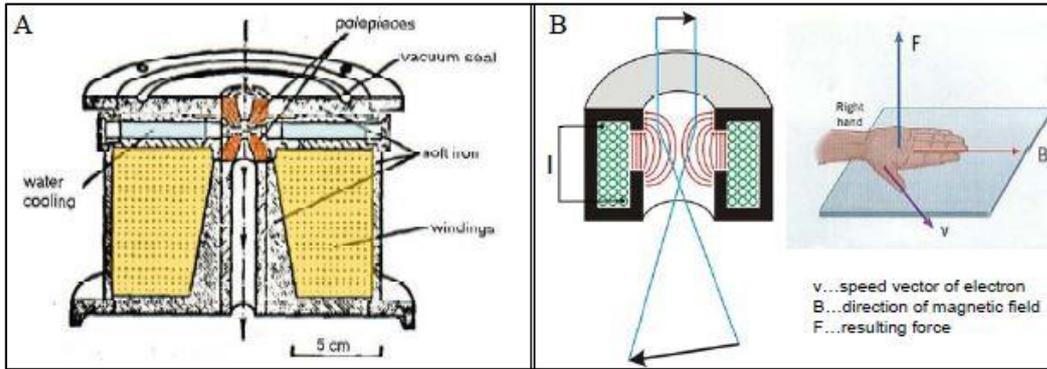
الشكل 5.IV: مختلف أنواع مصادر الإلكترونات وخصائصها (الصورة توضح باعث Schottky) [11].

2.1.3.IV العدسات الكهرومغناطيسية Electromagnetic Lenses:

يستخدم كل من جهازي SEM و TEM عدسات مثلها مثل المجهر الضوئي لإظهار صور دقيقة ومفصلة، إلا أن هاته العدسات ليست عدسات بصرية، إنما هي عدسات كهرومغناطيسية مصنوعة من مغناطيسات قادرة على توجيه والتحكم في مسار الإلكترونات المنبعثة من المصدر الإلكتروني، وهذا ما يضمن وصول الإلكترونات إلى العينة بالدقة المطلوبة [23].

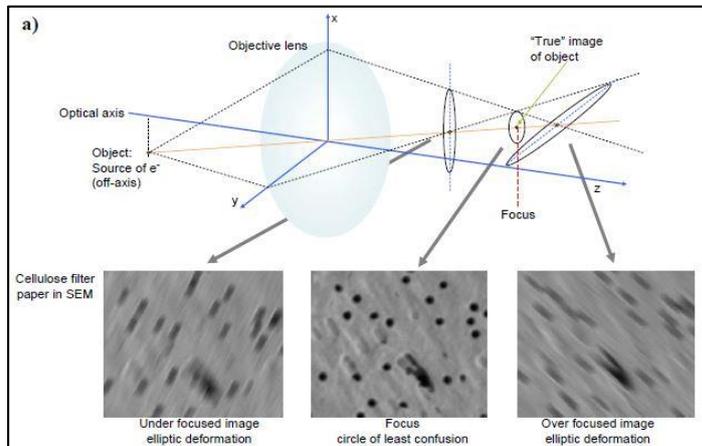
تتكون العدسات الكهرومغناطيسية من حزمة ضخمة من لفات الأسلاك النحاسية المعزولة، وكذا الحديد الناعم وقطعة القطب (الشكل)، حيث يتم إحداث مجال مغناطيسي بواسطة تيار كهربائي ويصل إلى قوته الرئيسية عند القطعة القطبية للعدسة حيث تنحرف الإلكترونات المسرعة التي تدخل المجال المغناطيسي وفقًا لقانون الشحنة (لورنتز) التي تمر بالمجال المغناطيسي ودائمًا ما تكون القوة الناتجة عمودية على المستوى المحدد باتجاه المجال المغناطيسي واتجاه الإلكترونات، لذا تأخذ الإلكترونات مسارًا دائريًا من خلال نظام العدسة (الشكل 6.IV -B) [23].

واعتمادًا على قوة المجال المغناطيسي، يتم التحكم في البعد البؤري للعدسة حيث يعمل نظام العدسة الأول في المجهر الإلكتروني كعدسة مكثفة والتي تجمع الإلكترونات وتحدد السطوع الكلي للحزمة وتوجهها إلى العينة ثم تُنقل الإلكترونات عبر العينة بعد عدة تصادمات ثم تمر عبر العدسة الشيئية من الصورة الأساسية. يتم تنفيذ تركيز الصورة بقوة المجال المغناطيسي في العدسة المسقطة ويتم تحديد التكبير النهائي من خلال العدسات الإسقاطية الماضية، وهي نظام يتكون من عدستين أو ثلاث عدسات تعمل معًا وتعرض الصورة النهائية على الشاشة الفلورية أو كاميرا CCD (أو فيلم حساس للضوء)، يؤدي المسار الدائري للإلكترونات إلى دوران الصورة اعتمادًا على التكبير (تيار العدسة للعدسات الإسقاطية). يتم تصحيح هذا الدوران في TEM الحديثة من خلال مجموعة من ملفات مصحح [11].

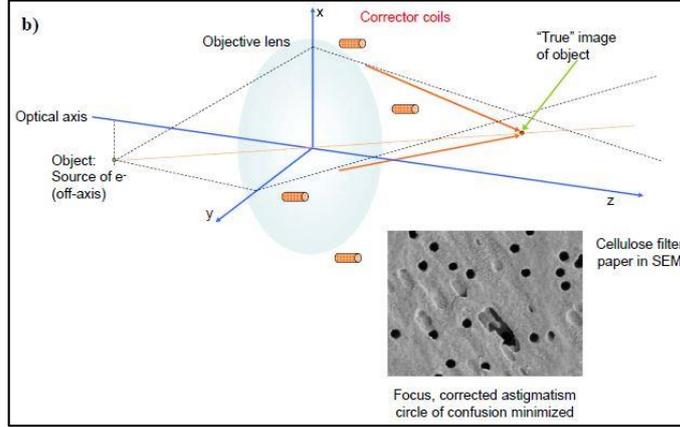


الشكل 6.IV: A- مكونات العدسة الكهرومغناطيسية. B- مسار الإلكترونات عبر العدسة [11].

تظهر العدسات الكهرومغناطيسية نفس الانحرافات مثل العدسات الزجاجية مثل الانحراف اللوني، الكروي، التشويه وكذا الانحراف اللابؤري، ومن أبرز الانحرافات في المجهر الإلكتروني هو الانحراف اللابؤري المحوري، حيث أن الإلكترونات المنحرفة من نقطة معينة لا تتطابق مع نظيرتها عبر العدسات في الصورة المعطاة وهذا ما يحدث تشوهات في الصورة. يحدث الانحراف اللابؤري يحدث بسبب عدم تجانس العدسات، تلوثها والفجوات والشحن المحمولة على العينة. وعلى وجه الخصوص في SEM، حيث يجب تصحيح الانحراف اللابؤري بانتظام، وفي غالب الحالات بعد تحريك العينة يتم التصحيح مرة أخرى باستخدام مجموعة من لفائف التصحيح. يوضح الشكلين المولدين الأخطاء التي يمكن ان تسببها العدسات بسبب الانحراف اللابؤري المحوري وكذا كيفية جعل الصورة واضحة بواسطة لفائف التصحيح.



الشكل 7.IV: الانحراف اللابؤري المحوري للإلكترونات والذي يعطي صور مشوهة حسب انحرافه مع المحاور وكذا عن البؤرة [11].



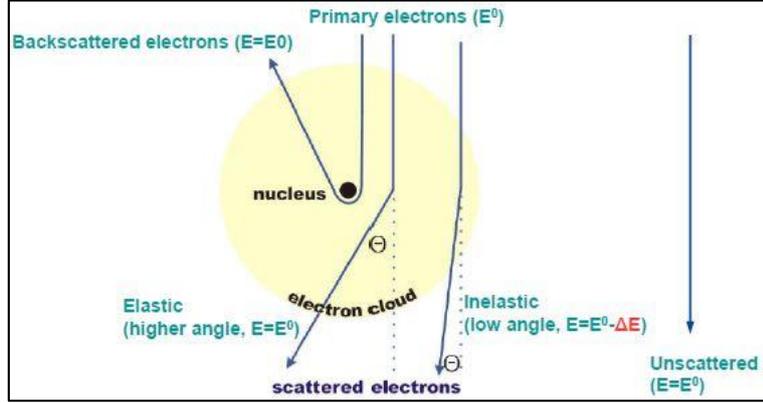
الشكل 8.IV: تصحيح الانحراف اللابؤري المحوري للصورة باستعمال اللفائف المصححة [11].

- ملاحظة: هناك العديد من القطع الأخرى لكننا ركزنا فقط على أهمها وما يخدمنا في المذكرة لذا سنمر الآن إلى كيفية عمل الإلكترونيات في كل من SEM و TEM.

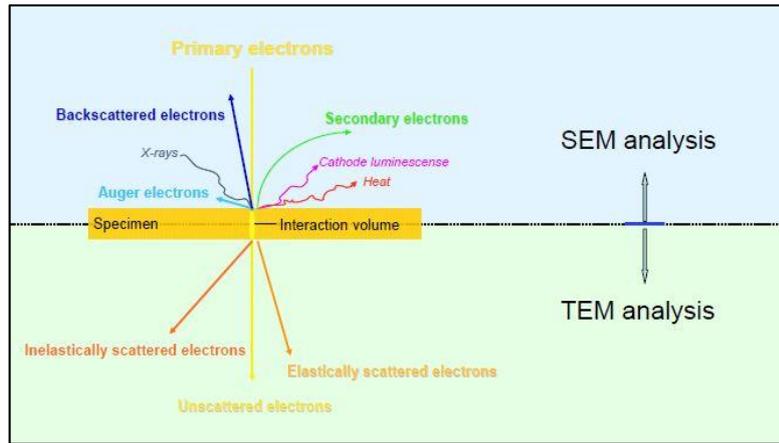
2.3.IV تفاعل الإلكترونيات مع العينة في كل من SEM و TEM:

سواءً في المجهر الإلكتروني الماسح أو النافذ فإن حزمة الإلكترونات إما أن تصدم وتتفاعل مع العينة وإما أن تمر عبرها دون أن تتأثر أو تتفاعل معها، ويمكن بشكل عام إذن تمييز ثلاثة تفاعلات مختلفة للإلكترونات مع الذرة (الشكل 9.IV):

- ينشئت إلكترونات من الحزمة الأساسية من خلال التفاعل الكهروستاتيكي مع نواة الذرة الموجبة الشحنة بزواوية تزيد عن 90 درجة، مما يؤدي إلى تناثر الإلكترونات ويمتلك هذا النوع من الإلكترونات عملياً نفس الطاقة التي اكتسبها عند قدومه من الحزمة الأولية [11].
- ينتشر إلكترونات من الحزمة الأساسية من خلال التفاعل الكهروستاتيكي مع نواة الذرة الموجبة الشحنة بزواوية أقل من 90 درجة، مما يؤدي إلى ظهور إلكترونات متناثرة مرنة. أيضاً هذه الإلكترونات لا تفقد الطاقة وبالتالي يشار إليها باسم الإلكترونات المتناثرة المرنة [11].
- يمكن للإلكترونات أيضاً أن تفقد الطاقة أثناء التفاعل مع "السحابة الإلكترونية" للذرة مما يؤدي إلى ظهور إلكترونات متناثرة غير مرنة، ويمكن أن يؤدي هذا التفاعل إلى العمليات التالية:
 - تأين الطبقة الداخلية: يتم اقتلاع إلكترونات من الطبقة الداخلية خارج سحابة الإلكترونات ويتم ملء الثقب الذي خلفه بواسطة إلكترونات من غلاف خارجي، فإما أن تنبعث الطاقة الفائضة "كأشعة إكس مميزة" أو يتم نقلها إلى إلكترون آخر ليتم انبعائه (الكثرون Auger).
 - إشعاع الانكباح Bremsstrahlung (إشعاع اكس مستمر): وهو الإشعاع الكهرومغناطيسي الناتج عن التسارع أو بشكل خاص تباطؤ الإلكترونات بعد المرور عبر المجال الكهروستاتيكي للنواة، ويعطي في هذه الحالة أشعة إكس غير مميزة.
 - الإلكترون الثانوي: يمكن بسهولة إخراج الإلكترونات المرتبطة بشكل ضعيف (على سبيل المثال، في نطاق التوصيل)، ويمتلك هذا الإلكترون طاقة ضعيفة ($> 50 \text{ eV}$).
 - الفونونات: ناتجة عن اهتزازات مختلفة (حرارة).
 - البلازمونات: شبه جسيم ناتج عن تذبذبات الإلكترونات غير المرتبطة في المعادن [11].



الشكل 9.IV: تفاعل الكترون مع ذرة تحت المجهر الإلكتروني [10].



الشكل 10.IV: تفاعل الكترون مع عينة وتبيين مختلف الاشعاعات والانبعاثات (الطرف العلوي خاص بـ SEM

والسفلي بـ TEM) [11].

3.3.IV عيوب العدسات الكهرومغناطيسية المستعملة في المجهر الإلكتروني:

الوظيفة الأساسية للعدسة المغناطيسية المسطوية هي تكبير الصورة التي تكونها العدسة الشبكية وإسقاطها على شاشة المجهر الإلكتروني، ولكن غالباً ما يصاحب عمل هذا النوع من العدسات حدوث تشويه في الصورة المتكونة على شاشة المجهر الإلكتروني، وأهم هذه التشويهات هما الانحراف اللوني والكروي ولأجل الحصول على صور ذات جودة عالية يجب إلغاء هذه العيوب أو تقليصها، وقد تبين من خلال نشر العديد من البحوث في هذا المجال انه لا يمكن إلغاء التشوهين في آن واحد باستخدام العدسة المنفردة، لذلك لجأ الباحثون إلى استخدام عدسة مسطوية مزدوجة بطرائق عديدة [12].

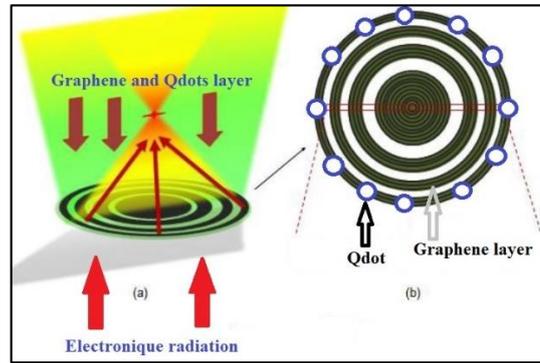
وهذا ما استدعى اللجوء إلى تكبير حجم المجهر وذلك لاستعمال العديد من العدسات والتي تحتاج مساحة كبيرة وكذا دقة في التصنيع إضافة إلى أن مواد التصنيع باهضة الثمن وحساسة للغاية. لذا ارتأينا في مذكرتنا أن نقوم بدراسة نظرية وتطبيقية لإمكانية استبدال هاته العدسات بعدسات أخرى أقل حجماً وتكلفة وأكثر فعالية بالاعتماد على خصائص مادة الغرافين والتي هي مادة متوفرة بوفرة وكذا ليست باهضة الثمن إضافة إلى خصائصها الإلكترونية الجدمهمة، وكذا الاعتماد على خصائص النقاط الكمومية في ذلك.

4.IV دراسة نظرية لأحد تطبيقات الغرافين والنقاط الكمومية في تعويض العدسات الكهرومغناطيسية بعدسات كمومية:

إن أساس مذكرتنا في هذا الفصل هو في هذا العنوان حيث نهدف إلى دراسة نظرية لإمكانية استبدال عدسة المجهر الإلكتروني كبيرة الحجم والتي تعتمد على تأثير الحقول المغناطيسية المولدة بواسطة وشائع كبيرة الحجم نسبياً على الإلكترونات التي تمر من خلالها واستبدالها بعدسات تعتمد على المفاهيم الحديثة لميكانيك الكم وعلى الاكتشافات الحديثة في فيزياء المواد، ونعني هنا مادة الغرافين، والتي بينا ماهيتها في الفصل II بأنها مادة مثالية وخاصة من حيث السماحية للإلكترونات بالعبور من خلالها، كما أن النقاط الكمومية أيضاً تلعب دوراً رئيسياً في هذه الفكرة.

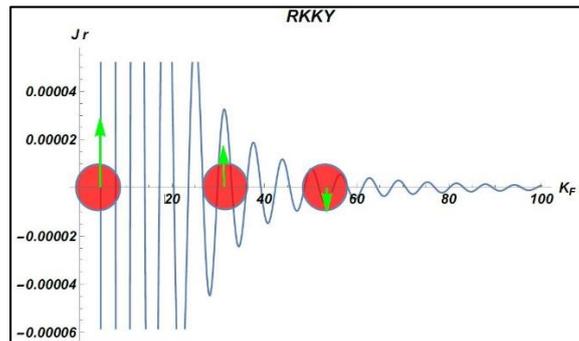
1.4.IV مبدأ الدراسة:

بما أن النقاط الكمومية يمكن التحكم في حالتها الفيزيائية من سبين وطاقة وغيرها من الخصائص، وكذلك إمكانية تحريكها وفق شكل هندسي معين فوق السطوح ثنائية الأبعاد حسب ما تقتضيه الحاجة، فمن السهل أن تشكل مجموعة من النقاط الكمومية عدداً N شكلاً دائرياً نصف قطره R على سطح الغرافين كما يوضحه الشكل التالي:



الشكل 11.IV: a- اختراق الأشعة الإلكترونية للعدسة. b- طبقة الغرافين والنقاط الكمومية المشكلة للعدسة.

ولكن النقاط الكمومية المطلوبة في هذه الحالة يجب أن تكون جميعها تكتسب سبين مستقطب في اتجاه معين. وحسب نظرية $RKKY$ التي وضعها العلماء (Yoshida, Kasuya, Kittel, Ruderman) والتي توضح كيفية انتقال تفاعل التبادل Exchange Interaction في النقاط الكمومية إلى أي نقطة على سطح الغرافين بواسطة موجة متخامدة كما في الشكل التالي [24]:

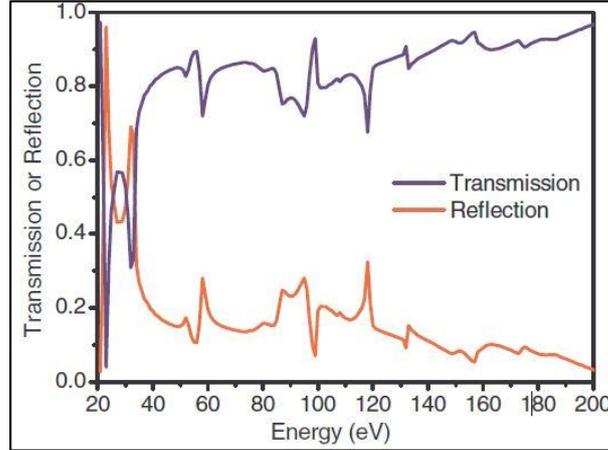


الشكل 12.IV: منحنى بياني لتفاعل التبادل.

حيث يغير تفاعل التبادل $J(r)$ إشارته حسب بعده من النقاط الكمومية التي أصدرت هذه الموجة حيث يعطى هاميلتوني التفاعل $RKKY$ بالعلاقة:

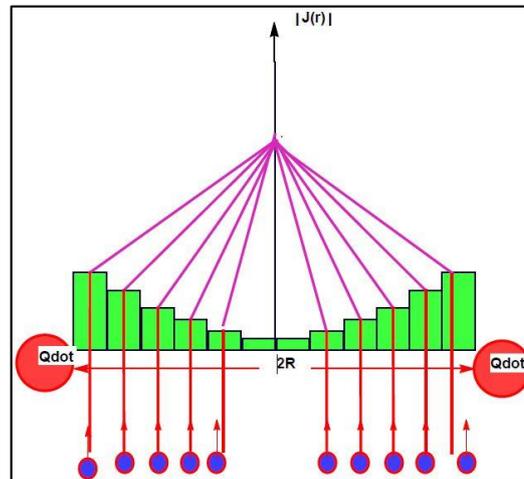
$$H_{RKKY} = j(r)\vec{S}_1\vec{S}_2 \dots \dots \dots (157)$$

أي أنه كلما ابتعدنا عن محيط دائرة النقاط الكمومية كلما قلت قيمة $J(r)$ بشدة. عند محاولة عبور الإلكترونات المستقطبة سطح الغرافين فإنها حتى لو امتلكت طاقة ضعيفة فإن الغرافين يملك سماحية ممتازة تجاهها كما توضحه النتيجة التجريبية الممثلة في الشكل التالي:

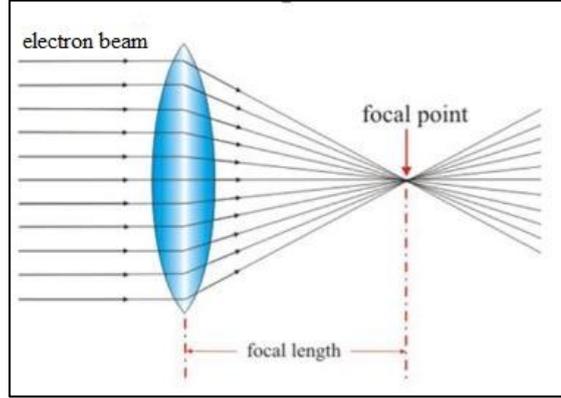


الشكل 13.IV: قيمة معامل الانتشار والانعكاس لحزمة إلكترونية ضعيفة الطاقة تمر عبر الغرافين [14].

ولكن في حالة وجود النقاط الكمومية على سطح الغرافين بالشكل الذي تكلمنا عليه، فالأمر يصبح مختلفاً قليلاً لأن التفاعلات بين سبين الإلكترونات المستقطبة التي تحاول العبور عبر العدسة، والسبينات على سطح الغرافين المستقطبة من طرف النقاط الكمومية بسبب التفاعل $RKKY$ سوف يؤدي إلى انحراف مسار الإلكترونات بشكل متدرج، حيث يكون الانحراف معدوماً تقريباً في مركز العدسة، ويزداد شدة كلما اقتربنا من محيط العدسة حيث تكون قيمة $J(r)$ عظيمة، وبالتالي أصبح تصرف الإلكترونات المستقطبة التي تعبر العدسة يشبه تصرف الضوء الهندسي عند عبوره عدسة مقربة والشكل التالي يوضح ذلك.



الشكل 14.IV: توضيح كيفية انحراف الإلكترونات المستقطبة أثناء عبورها سطح الغرافين بسبب التفاعل spin-spin.



الشكل 15.IV: شكل يظهر التشابه بين العدسة الضوئية والعدسة المدروسة.

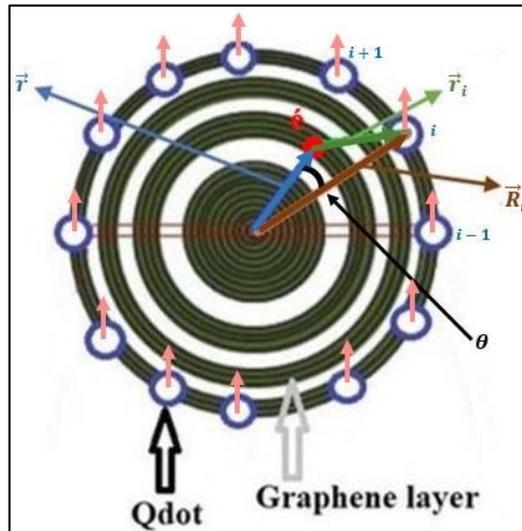
2.4.IV الدراسة الكمية:

إن جوهر الدراسة يعتمد أساسا على مدى التفاعل الحاصل بين سبين الإلكترونات المرسلّة والموجودة على العدسة، فالنقاط الكمومية تحمل سبيننا مستقطبا إضافة إلى أن الإلكترونات المنبعثة أيضا تكون مستقطبة. لذا فالإلكترونات المستقطبة من محيط العدسة تنفر بشدة أكبر من المناطق الداخلية بسبب التفاعل spin-spin لكل من الإلكترون المنبعث والنقطة الكمومية.

يقوم التفاعل $RKKY$ المتخادم مع زيادة المسافة بين النقاط الكمومية ونقطة التفاعل بتحديد خصائص هذه العملية وفق إشارة $J(r)$ حيث يتناسب مع:

$$j(x) \propto \frac{x \cos(x) - \sin(x)}{x^4} \dots \dots \dots (158)$$

حيث $x = 2k_F r_i$ ، k_F يمثل نصف قطر فيرمي، r_i هو المسافة بين النقطة الكمومية ونقطة حدوث التفاعل على سطح العدسة كما في الشكل التالي.



الشكل 16.IV: توضيح لأشعة الموضع المختلفة على العدسة.

سنقوم الآن بالدراسة الاستقصائية للهاميلتوني الماضي في نقطة كيفية من سطح العدسة حيث:

$$H = \sum_{i=1}^N H_i \dots \dots \dots (159)$$

حيث H_i يخص النقطة الكمومية رقم i ويكتب بالعبرة:

$$H_i = J(|\vec{R}_i - \vec{r}|) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_e \dots \dots \dots (160)$$

حيث:

\vec{S}_i هو سبين الإلكترون الموجود في النقطة الكمومية رقم i .

\vec{S}_e هو سبين الإلكترون المستقطب الذي يعبر العدسة.

N هو عدد النقاط الكمومية الموجودة على محيط العدسة.

إذن تصبح العلاقة (159) على شكل المجموع التالي:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{|\vec{R}_i - \vec{r}| \cos(2k_F |\vec{R}_i - \vec{r}|) - \sin(2k_F |\vec{R}_i - \vec{r}|)}{|\vec{R}_i - \vec{r}|^4} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_e \dots \dots \dots (161)$$

إن حساب هذا المجموع جد معقد خاصة في حالة ما إذا كان سبين النقاط الكمومية غير مستقطب، حيث يتم الأخذ بعين الاعتبار الجداء السلمي بين سبين النقطة الكمومية والإلكترون، وكذا يوجد إشكال آخر هو أن الدراسة في هذه الحالة على النقاط الكمومية تكون متقطعة أي من أجل عدد محدود. لذا لتسهيل الدراسة يجب نلجأ إلى ما يلي:

- الأخذ بعين الاعتبار أن سبين النقطة والإلكترون المنبعث مستقطب بمعنى أن الجداء السلمي ثابت على قيمة المجموع.
- اعتبار عدد كبير من النقاط الكمومية N حتى تكون الدراسة مستمرة ويحول المجموع إلى تكامل.

إذن في هذه الحالة يصبح المجموع كالتالي:

$$H = \vec{S}_i \cdot \vec{S}_e \sum_{i=1}^N J(|\vec{R}_i - \vec{r}|) \dots \dots \dots (162)$$

حيث أخذنا $\vec{S}_i = \vec{S}_e$ للنقاط الكمومية كفيماً، لأن جميعها مستقطبة في نفس الجهة. فالمسألة تؤول في هذه الحالة إلى حساب قيمة تفاعل التبادل $J(r)$ في نقطة كيفية من سطح العدسة حيث:

$$|\vec{R}_i - \vec{r}| = \sqrt{R^2 + r^2 - 2rR \cos \theta_i} \dots \dots \dots (163)$$

حيث θ_i هي الزاوية بين \vec{R}_i و \vec{r} .

إذن يتحول المجموع إلى الشكل التالي:

$$J(r) = \sum_{i=1}^N \frac{\sqrt{R^2+r^2-2rR \cos \theta_i} \cos(2k_F \sqrt{R^2+r^2-2rR \cos \theta_i}) - \sin(2k_F \sqrt{R^2+r^2-2rR \cos \theta_i})}{(R^2+r^2-2rR \cos \theta_i)^2} \dots (164)$$

إذن بأخذ بعين الاعتبار التوزيع المستمر للنقاط الكمومية على محيط العدسة يصبح المجموع في العبارة (164) عبارة عن تكامل، ومع الأخذ بعين الاعتبار كثافة النقاط الكمومية الموزعة على محيط العدسة بأنها ثابتة، حيث تكون في هذه الحالة:

$$\rho = \frac{dN}{Rd\theta} = \frac{N}{2\pi R} \dots \dots \dots (165)$$

حيث R يمثل نصف قطر العدسة، ومنه نجد:

$$\sum_{i=1}^N J(r_i) \rightarrow \frac{N}{2\pi R} \int_0^{2\pi} \frac{\sqrt{R^2+r^2-2rR \cos \theta_i} \cos(2k_F \sqrt{R^2+r^2-2rR \cos \theta_i}) - \sin(2k_F \sqrt{R^2+r^2-2rR \cos \theta_i})}{(R^2+r^2-2rR \cos \theta_i)^2} d\theta \dots (166)$$

أول ما نلاحظه أن شدة تفاعل التبادل أصبحت تعتمد على النسبة $\frac{N}{R}$ ، أي أنه كلما زاد عدد النقاط الكمومية وصغر نصف قطر العدسة كلما زادت شدة التفاعل وهذا سوف يؤثر على خواص هذه العدسة التي سوف نراها لاحقاً.

إن حساب قيمة $J(r)$ هو امر غاية في التعقيد حيث يعتمد على الدوال التوافقية Y_l^m وكثيرات حدود Legendre الذين يظهران في عملية نشر الدالة حيث يظهر الحد التالي:

$$\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^t}$$

حيث تظهر هنا العبارة السابقة على الشكل:

$$\frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}|^t} = |\vec{R} - \vec{r}|^{-t} \dots \dots \dots (167)$$

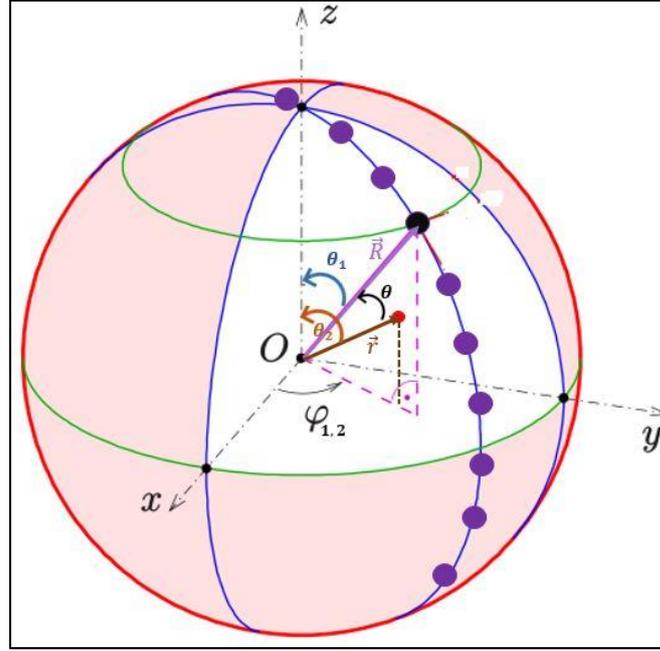
ونتيجة هذا النشر تختلف حسب كون t فردي أو زوجي، وحسابات هذا النشر معروفة وموجودة بالتفصيل في المقال رقم [15] في المراجع.

إذن لدينا هنا الحالة الأولى أين يكون $t = 3$ (فردي) والحالة الثانية أين يكون $t = 4$ (زوجي).

• أولاً: في حالة $t = 3$:

إذا اعتبرنا الدائرة العدسة هي عبارة عن خط من خطوط كرة نصف قطرها R كما هو موضح في (الشكل 17.IV)

فإن $\theta = \theta_1 - \theta_2$ بينما $\varphi_1 - \varphi_2 = 0$.



الشكل 17.IV: دراسة اسقاطات الأشعة بالنسبة لكرة أحد خطوطها هو العدسة.

وعليه تكون الحسابات بدلالة التوابع الكروية كالتالي:

$$\frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}|^3} = 4\pi \sum_{u=0}^{\infty} \frac{1}{4} (u-1)(u-2) \sum_{v=0}^{(u-2v-1)} \sum_{m=-(u-2v-1)}^{(u-2v-1)} \frac{1}{R^3} \frac{1}{f(1)} \left(\frac{r}{R}\right)^{(u-v)} C_{(v)} \prod_{k=0}^{-1} (2u - 2v - 2k - 1) \times Y_{u-2v-1}^m(\theta_1, \varphi_1) Y_{u-2v-1}^{m*}(\theta_2, \varphi_2) \dots \dots \dots (168)$$

وبالتالي يمكن تقسيم التكامل الذي نبحث عنه إلى جزأين، الفردي والزوجي، أي:

$$J(r) = J_3(r) + J_4(r) \dots \dots \dots (169)$$

حيث $J_3(r)$ المعني في الحسابات هنا هو:

$$J_3(r) = \frac{N}{2\pi R} \int_0^{2\pi} \frac{\cos 2k_F |\vec{R} - \vec{r}|}{|\vec{R} - \vec{r}|^3} d\theta \dots \dots \dots (170)$$

حيث θ في هذه الحالة هي عبارة عن $(\theta_1 - \theta_2)$ ، بينما $f(1) = 1$.

• ثانياً: في حالة $t = 4$:

أي أننا سنقوم بحساب التكامل التالي:

$$J_4(r) = \frac{N}{2\pi R} \int_0^{2\pi} \frac{-\sin 2k_F |\vec{R} - \vec{r}|}{|\vec{R} - \vec{r}|^4} d\theta \dots \dots \dots (171)$$

ونحتاج في هذه الحالة أيضا إلى تحديد $|\vec{R} - \vec{r}|^{-4}$ ، وباستخدام نفس المرجع رقم [14] من أجل عدد زوجي نجد:

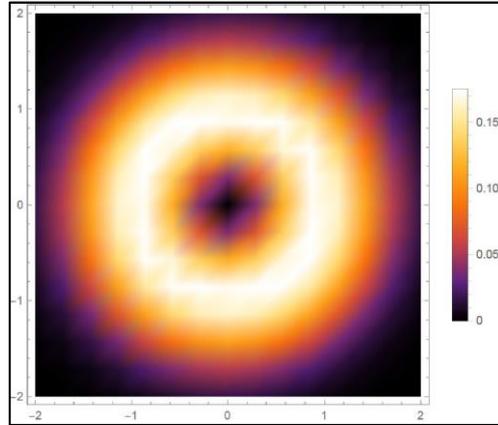
$$\frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}|^4} = 4\pi \sum_{d=0}^{\infty} \sum_{v=0}^{\frac{1}{4}(d-1)^2} \sum_{m=-\frac{1}{2}(2d-4v-2)}^{\frac{1}{2}(2d-4v-2)} \frac{2d+1}{2\left(\frac{r}{R}\right)} Q_d \left(\frac{1 + \left(\frac{r}{R}\right)^2}{2\left(\frac{r}{R}\right)} \right) \times \frac{1}{2} \frac{1}{\left(\frac{r}{R}\right)} \frac{1}{R^4} C_{(v)}$$

$$\times \prod_{k=0}^{-1} (2d - 1 - 2v - 2k) Y_{\frac{1}{2}(2d-4v-2)}^m(\theta_1, \varphi_1) Y_{\frac{1}{2}(2d-4v-2)}^{m*}(\theta_2, \varphi_2) \dots \dots (172)$$

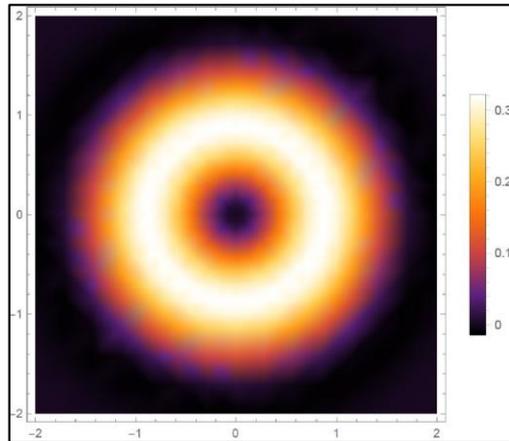
حيث Q_d هي كثيرات حدود Legendre من النمط الثاني. وبسبب تعقيد الحسابات هنا فقد اضطررنا إلى الاستعانة بالبرمجيات (Wolfram Alpha) من أجل الحصول على عبارة تقريبية للتكامل $J(r)$.

3.4.IV النتائج والمناقشة:

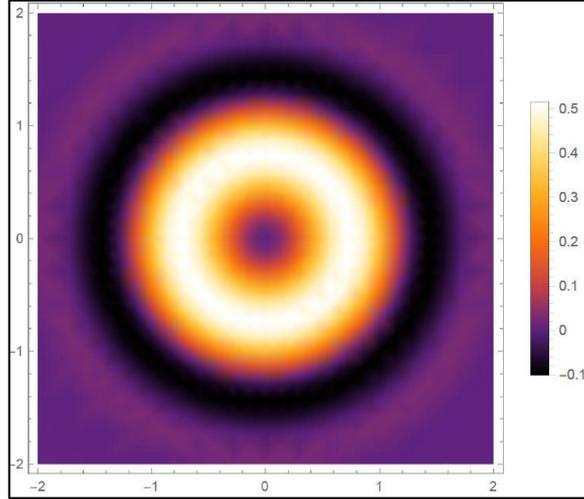
لقد تحصلنا على عدد كبير من النتائج الخاصة بتوزيع كثافة $J(r)$ على سطح العدسة وذلك من أجل قيم مختلفة للوسيط $k_F R$ كما تظهره الأشكال من الشكل 18.IV إلى الشكل 29.IV



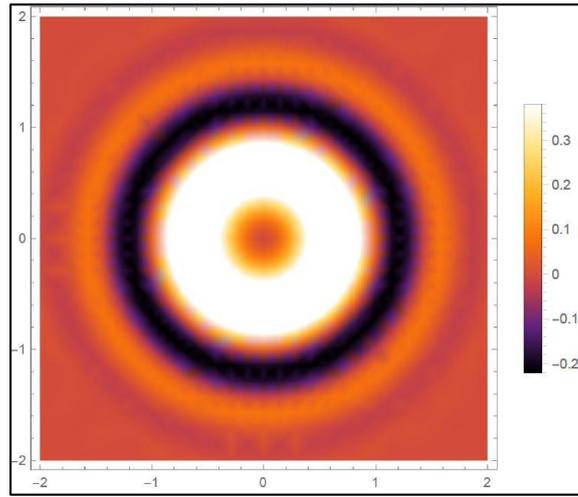
الشكل 18.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 0.5$.



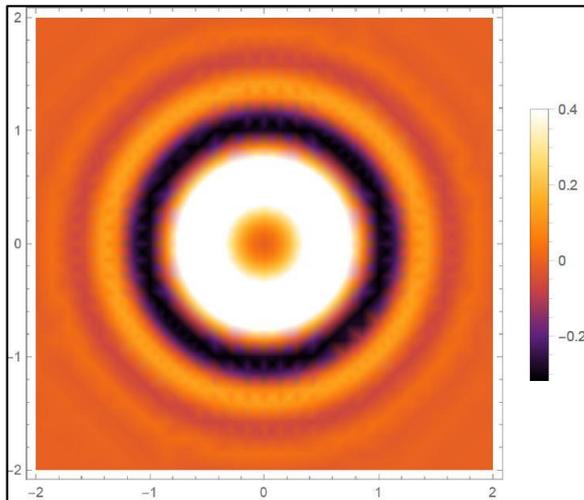
الشكل 19.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 1$.



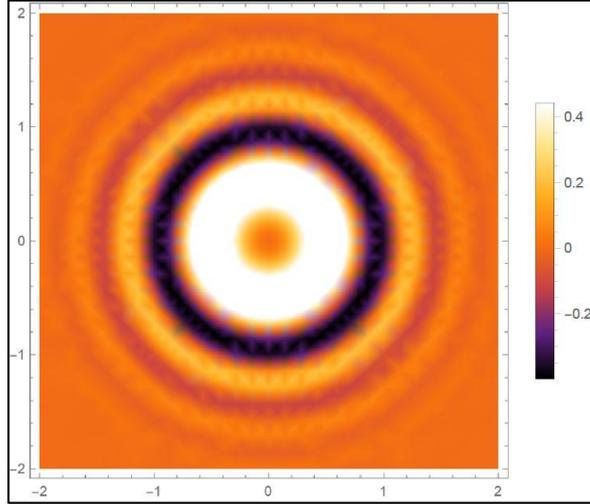
الشكل 20.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 2$.



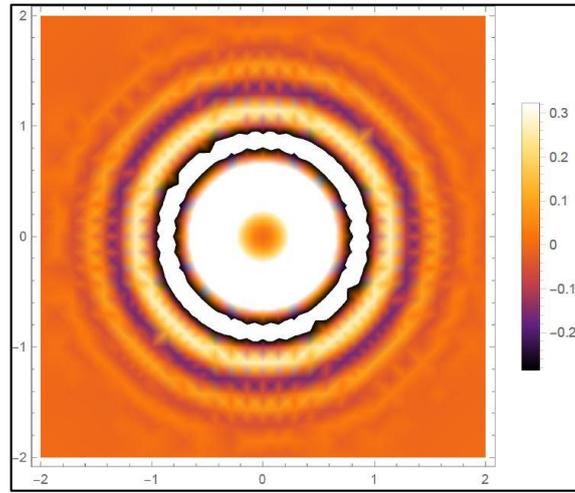
الشكل 21.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 3$.



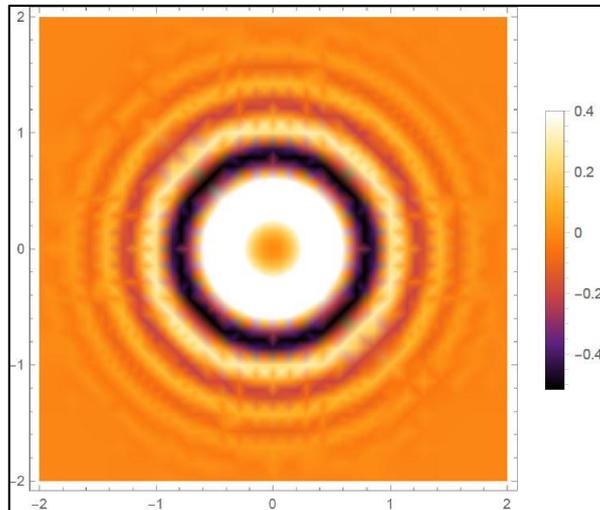
الشكل 22.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 4$.



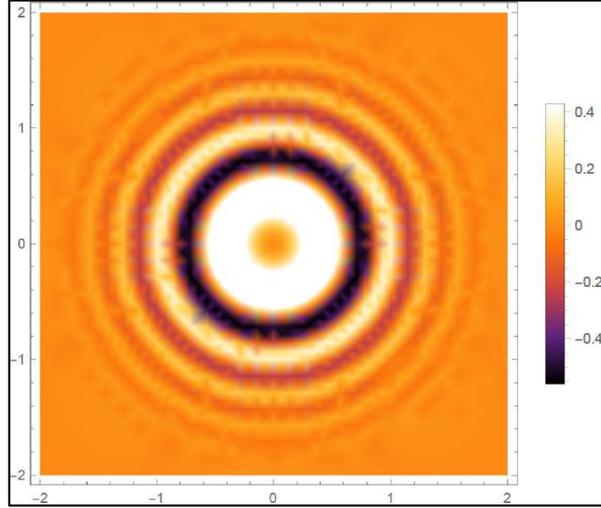
الشكل 23.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 5$.



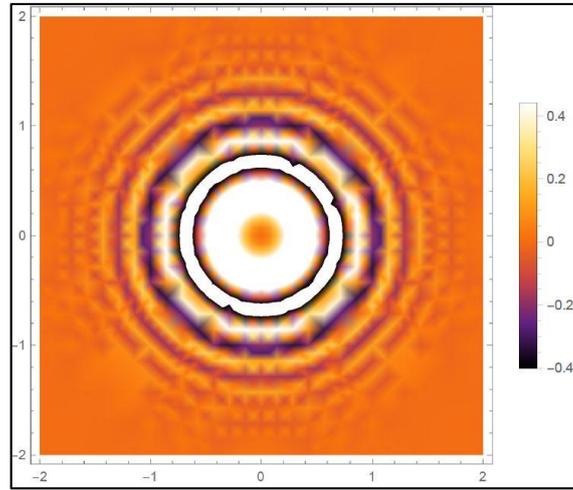
الشكل 24.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 6$.



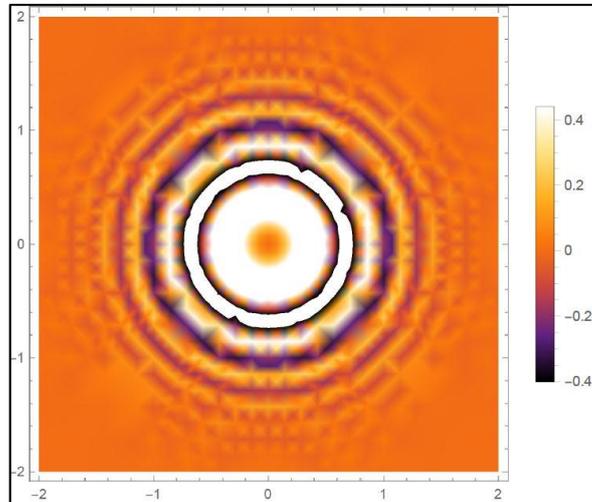
الشكل 25.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 7$.



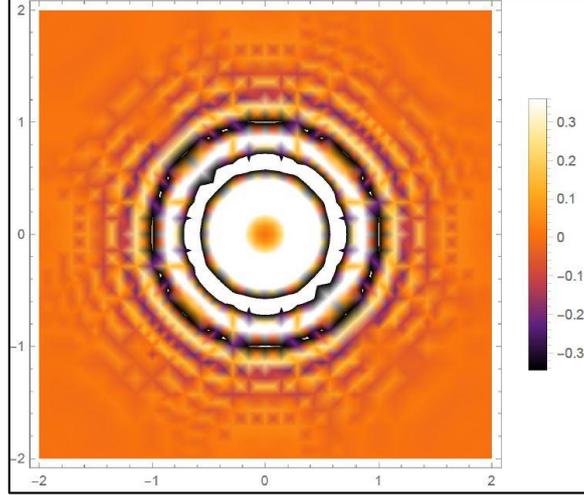
الشكل 26.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 8$.



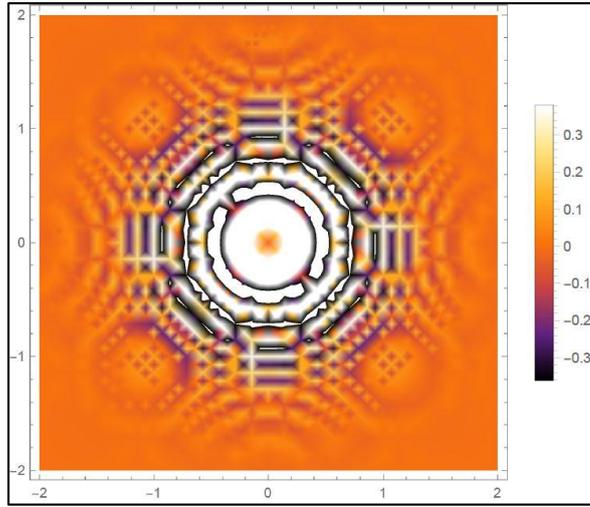
الشكل 27.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 10$.



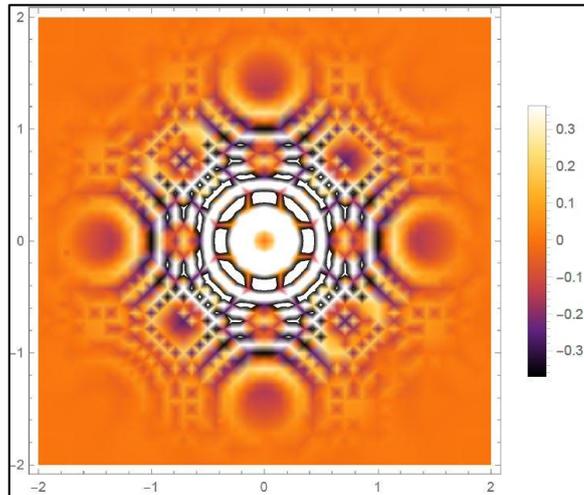
الشكل 28.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 11$.



الشكل 29.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 15$.



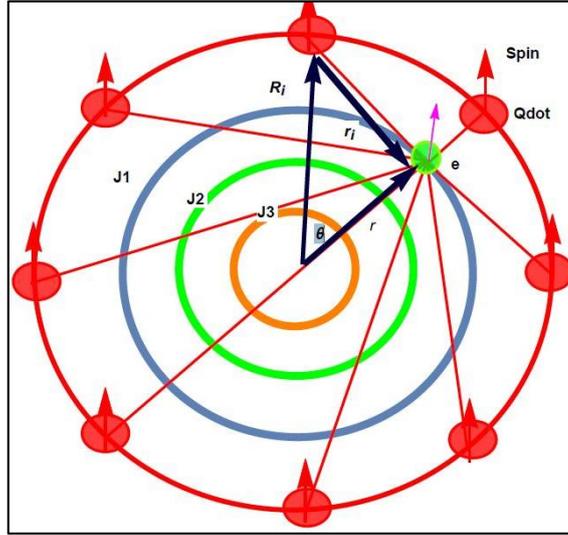
الشكل 30.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 20$.



الشكل 31.IV: توزيع كثافة التكامل $J(r)$ ثنائية الأبعاد من أجل $k_F R = 30$.

قمنا بتفسير بعض الأشكال بشكل منطقي في حين أن أشكال أخرى تحتاج لإدخال عوامل أخرى من أجل تفسيرها مثل اهتزازات Friedel.

تحتوي الأشكال على دوائر داخل بعضها وتفسيرها المنطقي هو أن النقاط الموجودة على سطح العدسة التي تملك نفس قيمة $J(r) = cte$ يجب أن تقع على نفس الدائرة، وذلك بسبب التناظر الدائري للعدسة والتوزيع المنتظم للنقاط الكمومية على محيط العدسة والشكل التالي يوضح ذلك.



الشكل 32.IV: ظهور الأشكال الدائرية في توزيع كثافة التفاعل $J(r)$.

في (الشكل 19.IV) نرى أن مركز العدسة أسود وحسب الشريط المرافق تكون قيمة $J(r)$ معدومة وهذا يعني أن الإلكترونات تمر من هذه المنطقة دون أن تنحرف تقريبا، وتزداد الكثافة انطلاقا من المركز إلى غاية حواف العدسة، وهذا يعني أن انحراف الإلكترونات يتزايد مع الاقتراب من حواف العدسة، وهذا بالضبط صفة العدسة المقربة، ونفس الكلام يمكن أن نقوله بالنسبة للأشكال (18.IV و 20.IV). بينما تحدث في بقية الأشكال الأخرى تداخلات وتظهر كثافات سالبة لعدة أسباب أهمها:

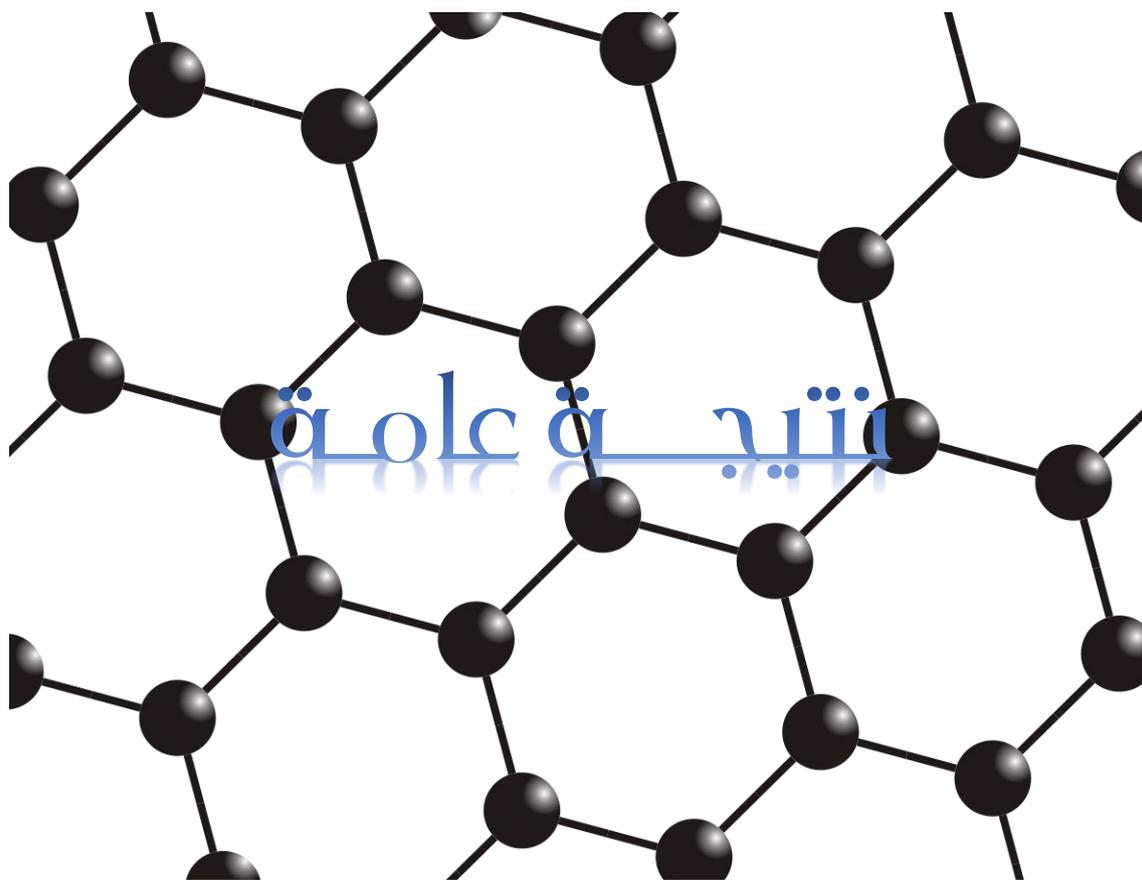
- i. إن الحسابات التي قمنا بها هي تبسيط للحسابات المتقطعة ولكن في الواقع لا ينبغي أن تكون الحسابات متصلة تماما لأننا نتكلم عن النقاط الكمومية.
- ii. إن التداخلات التي تظهر بشكل غير اعتيادي هي في النهاية تداخلات أمواج تعتمد على فرق الطور بينها، والعلاقة بين طول الموجة ونصف قطر العدسة $\lambda = \frac{\pi}{k_F}$ ، حيث تحدث أمواج مستقرة كما هو الحال في سطح الماء ولكن الأمر أكثر تعقيدا في هذه الحالة بسبب العدد الكبير لمصادر الأمواج (النقاط الكمومية) في هذه الحالة.
- iii. إن k_F في العبارات السابقة يعود إلى نصف قطر فيرمي للوسط الذي توجد عليه النقطة الكمومية ونصف قطر فيرمي هنا يخص الغرافين، وسوف يتغير نصف قطر فيرمي هنا بسبب وجود تطعيم أي زراعة النقاط الكمومية على سطح الغرافين.

.iv إن وضع النقاط الكمومية على سطح الغرافين يؤدي إلى تغيير الكثافة الإلكترونية بجوار الشائبة (النقطة الكمومية) مما يعني نشوء مفعول حجب للشحن وهو كمي في هذه الحالة ويختلف عن مفعول الحجب الكلاسيكي الذي يكون قصير المدى، حيث تتغير الكثافة الإلكترونية حسب علاقة Friedel:

$$n(r) \approx n_0 + \delta n \frac{\sin(2k_F r + \phi)}{r^2} \dots \dots \dots (173)$$

حيث:

- n_0 هو كثافة غاز الإلكترونات في غياب الشائبة (النقطة الكمومية) في هذه الحالة.
- δn هو عبارة عن مقدار الكثافة الإلكترونية المحرصة.
- ϕ هو فرق الطور.



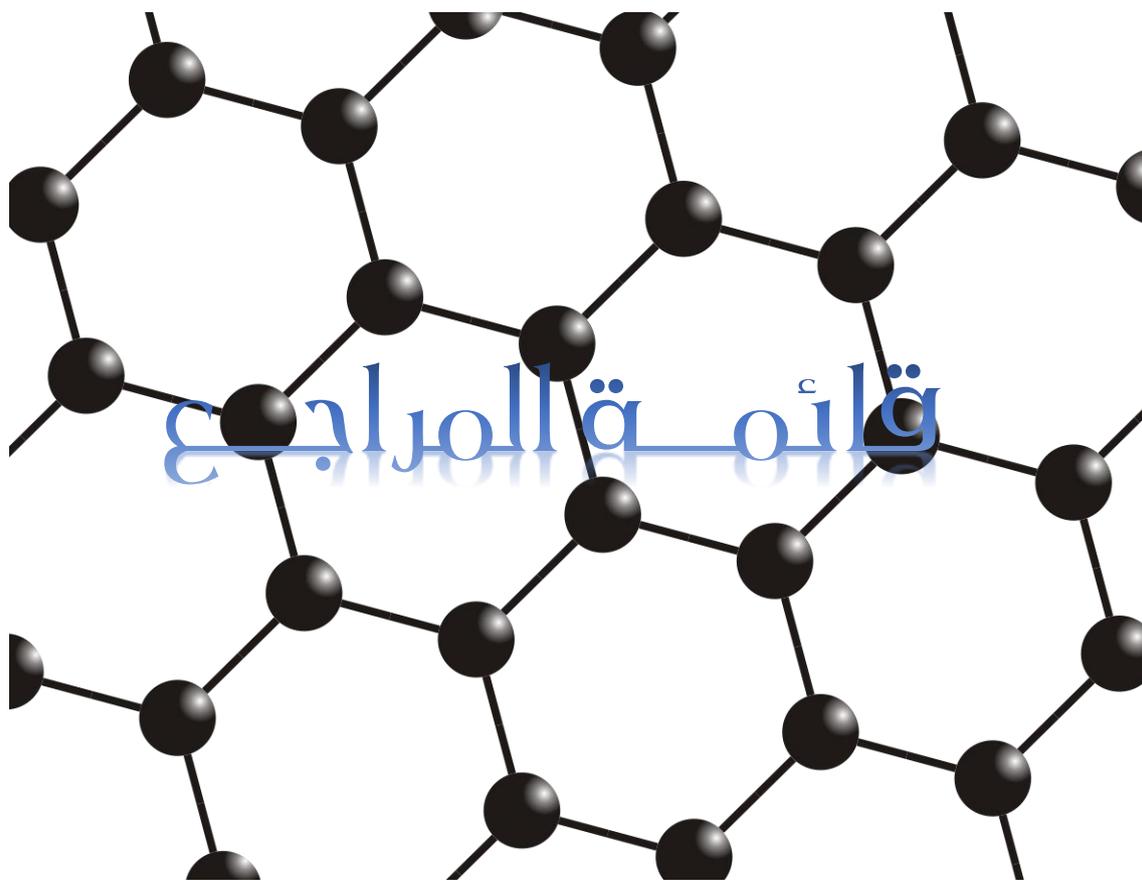
النتيجة العامة:

نهدف من خلال هذا العمل إلى استغلال التقنيات والاكتشافات الحديثة في فيزياء المواد من أجل تحسين وتصغير بعض الأجهزة التي لازالت تعمل بتقنيات قديمة، مثل المجهر الإلكتروني الذي تلعب العدسة الكهرومغناطيسية كبيرة الحجم الدور الأساسي، وبسبب حجمها فإن المجهر الإلكتروني كبير الحجم ويستهلك طاقة كبيرة، بالإضافة إلى ثمنه الباهظ.

بعد تعرضنا لفصول نظرية تطرقنا فيها إلى أساسيات الدراسة التي صادفناها في مذكرتنا وصلنا أخيرا إلى دراسة إمكانية استبدال هذه العدسة بعدسة صغيرة الحجم ولا تستهلك كمية كبيرة من الطاقة، وذلك من خلال زرع نقاط كمومية بشكل دائري على سطح الغرافين وبتوزيع منتظم، حيث يلعب التفاعل $RKKY$ دورا رئيسيا في طريقة عمل هذه العدسة، حيث بيننا أن هذه العدسة تستطيع أن تملك خواص العدسة التي تعمل بالضوء، كما أنه يمكن التحكم في خواصها من خلال التحكم في النقاط الكمومية من خلال النوع والحجم، وكذلك من خلال التحكم في نصف قطر فيرمي للغرافين عن طريق زرع الشوائب.

قمنا بإجراء عملية محاكاة لقيمة تفاعل التبادل $J(r)$ على سطح العدسة، فتحصلنا على العديد من النتائج حسب قيمة الجداء $k_F R$ ، حيث تمكنا من تفسير بعضها حسب النموذج الأولي الي اعتمدناه في هذه المذكرة، كما تحصلنا على نتائج غير متوقعة، قمنا بتفسيرها حسب المعطيات الفيزيائية الداخلة في هذه العملية.

وفي الأخير استنتجنا أن هذا النوع من العدسات ممكن من الناحية النظرية شريطة إيجاد تقنيات تستطيع التحكم في الظواهر الفيزيائية التي تؤثر على خواص هذا النوع من العدسات.



المراجع:

- [1] Bruus. H and Flensberg. K, Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics, Oxford: Oxford University press, 2004.
- [2] Mahan. G. D, Many-Particles Physics, 3rd edn, New York: Kluwer Academic/Plenum Publisher, 2000.
- [3] Barc TS, Graphene, Departement of Atomic Energy, India, 2013-2014.
- [4] D Ninno, Lecture Notes on Graphene, July 7, 2013.
- [5] Manisha Yadav, Anita Chaudhary, India, Quantum Dots An Introduction, National Conference “LAEISDISE2014”, Departement of Electronics and Communication Engineering, 12-13 September 2014.
- [6] Stefan Fölsch, Jesús Martínez-Blanco, Jianshu Yang, Kiyoshi Kanisawa and Steven C. Erwin, Quantum dots with single-atom precision, Published at “Nature Nanotechnology”, 29 July, 2014.
- [7] Céline Fabry, Thèse pour l'obtention de Docteur de l'Université Joseph Fourier – Grenoble I, Etude Structurale par microscope électronique et cristallographie aux rayons X de la Capside des Adénovirus, le 24 septembre 2008, pp 14-15.
- [8] الدكتور حازم فلاح سكيك، الميكروسكوبات الإلكترونية، عن شبكة الفيزياء التعليمية، غزة، 25 ماي 2013، الصفحات 5-6.
- [9] Andres Kaech, Centre for Microscopy and Image Analysis, University of Zurich, An Introduction to Electron Microscopy Instrumentation, Imagine and Preparation, April 2013, pp 2-10.
- [10] مروة ثامر محمود الشماع، قسم الفيزياء، جامعة الموصل، تقليص البعد البؤري المسطحي في العدسات الكهرومغناطيسية ثنائية الفجوة الهوائية، مجلة علوم الرافدين، المجلد 24، العدد 1، 10 سبتمبر 2012.
- [11] Picture of doped Graphene page 16 from this note, H. J. Yan, B. Xu, S. Q. Shi and C. Y. Ouyang, First-principles study of the oxygen adsorption and dissociation on graphene and nitrogen doped graphene for Li-air batteries, November 2012.
- [12] Jia-An Yan, J. A. Driscoll, B. K. Wyatt and K. Varga, Time-domain simulation of electron diffraction in crystals, PHYSICAL REVIEW B 84, 224117, 2011.

- [13] J. M. Dixon and R. Lacroix, Some useful relations using spherical harmonics and Legendre polynomials, Departement de Chimie Physique, University of Geneva, Switzerland, August 1973
- [14] J. Woods Halley, Correlation Functions and Quasiparticle Interaction in Condensed Matter, University of Minnesota, Published In cooperation with NATO scientific affairs division, 1978.
- [15] J. H. Warner, F. Schäffel, A. Bachmatiuk, M. H. Rummeli, Graphene Fundamentals and Emergent Applications, Elsevier, Kidlington, Oxford, 2013
- [16] C.N.R Rao and A.K. Sood, Graphene Synthesis, Properties and Phenomena, Wiley-VCH Verlag & Co. KGaA, Weinheim, Germany, 2013
- [17] Jean Pierre Lecoutre, Statistique et probabilité, Collection Eco Sup, Eco sup, ISSN 1637-6765, Éco sup. Travaux dirigés, 2^{ème} Edition, Dunod, 2002.
- [18] Alexander Tratakovskii, Quantum Dots Optics, Electron transport and Future Applications, Cambridge University Press, UK, First Published 2012
- [19] V. Mitin, D. Sementsov and N.Vagidov, Quantum Mechanics for Nanostructures, Cambridge University Press, UK, First Published 2010
- [20] John Kuo, Electron Microscopy Methods and Protocols, Humana Press, Centre for Microscopy and Microanalysis, University of Western Australia, Totowa, New Jersey, 2nd edition, 2007.
- [21] P. J. Goodhew, J.Humphreys, R. Beanland, Electron Microscopy, Published by Taylor & Francis, USA and Canada, 3rd edition, 2001.
- [22] L. Reimer, H. Kohl, Transmission Electron Microscopy, Springer science+ Business Media, LLC, Münster, Germany, 5th edition, 2008.
- [23] J. J. Bozzola and L. D. Russel, Electron Microscopy Principles And techniques for Biologists, Jones and Bartlett Publishers, 2nd edition, 1998.
- [24] A. V. Ten, M. B. Belonenko, Indirect interaction of impurity spins on the surface of topological insulators, Volgograd State University, Volgograd, Russia, 26 May 2017.

ملخص:

إن هذه المذكرة هي عبارة عن دراسة نظرية لعدسة مكونة من نقاط كمية مزروعة على سطح الجرافين وتوصلنا إلى أن هذه العدسة يمكن أن تلعب دور العدسة الكهرومغناطيسية في المجهر الإلكتروني وهذا ما أكدناه عن طريق ما قمنا به في المحاكاة، حيث توصلنا إلى نتائج مرضية نظريا مما يجعل هامش تحقيقها تطبيقيا كبير جدا، خاصة في حال ما إذا تم التحكم في عوامل مشتتة أخرى مثل اهتزازات Friedel

الكلمات المفتاحية: نقطة كمومية – جرافين – مجهر الكتروني – عدسة.

Abstract:

This graduation work, represent a theoretical study for a lens consisting of quantum dots planted on the surface of graphene, Where we reached the possibility of working this lens the role of the electromagnetic lens in the electron microscope, and this is what we proved by simulation, where we reached to satisfactory theoretical results that make the possibility of making it applied too high, especially if other disturbing factors such as Friedel vibrations were controlled.

Key words: Quantum dot – Graphene – Electron microscope – lens.

Résumé :

Ce travail de graduation, représente une étude théorique pour une lentille composée de points quantiques plantés à la surface du graphène, où nous avons atteint la possibilité de travailler cette lentille le rôle de la lentille électromagnétique dans le microscope électronique, et c'est sa ce qu'ont prouvé par simulation, où nous avons atteint des résultats théoriques satisfaisants, et c'est sa qui nous donnent une grande possibilité de la réaliser, surtout si d'autres facteurs perturbateurs tels que les vibrations de Friedel seront contrôlés.

Mots clés: Quantum dot – Graphene – Microscope Electronique – Lentille.