دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده فیزیک

پایان نامه فیزیک کارشناسی ارشد

نانو فیزیک

ترابرد الکترونی در یک سیم کوانتومی تحت تابش الکترومغناطیس

نگارش

بهزاد کریم مسلک

استاد راهنما

آقای دکتر سعید حسامی پیله رود

بهمن ۱۳۹۲

بسم الله الرحمن الرحيم

تشکر و قدردانی :

بدینوسیله از خانواده گرامیم و بخصوص همسرم که همیشه مشوق و پشتیبان من در تمام مراحل زندگیم بوده وبدون ممانعت از انجام خواسته هایم همواره همراه من بوده اند نیز در این مجال از همکاران و بخصوص اعضای هیات مدیره شرکت تی ان تی ایران قدردانی می نمایم که در به پایان رساندن این دوره آموزشی حمایت های بی دریغی انجام دادند در انتها از استاد گرانقدر جناب آقای سعید حسامی پیله رود قدردانی می نمایم چرا که ایشان با صبر و بردباری مثال زدنی و راهنمایی های بجا و موثر عنصر اصلی در به پایان رساندن این اثر بوده اند .

چکیده :

کاربردهای روز افزون نانو سیم ها درصنایع اپتو الکترونیک جهت ساخت لیزرهای نیمه هادی ، حسگرهـای فوق العاده سریع ، ساخت موادی پایـدار با خواص فیـزیکی و شیمیـایی ویژه ، جهت جوابگویـی روزافزون بـه صنعت در حوزه های گوناگون ما را بر آن می دارد تا به دنبال دیدگاه و نظریه جامع نظری در این حوزه باشیم تا از طرفی بتوانیم به توصیف پدیده های اتفاق افتاده در حوزه تجربی دست یابیم و از طرف دیگر به بسط این حوزه (تجربی) برای یافتن امکانات و افق-های جدید مبادرت ورزیم . می دانیم که مهمترین مسئله در شناخت خواص فیـزیکی یک ماده نیم-رسـانا مسئله بررسی ترابرد الکتـرونی آن می باشد ، ما در این مبحث به مسئلـه ترابرد الکترون در یک نانوسیم تحت تابش الکترومغناطیس می پردازیم ، امید است که موضوع این پایان نامه افق ها و دیدگاههای جدیدی پیش روی ما قرار دهد .

کلید واژه ها :

نانو سیم – چاه کوانتومی – جذب الکترومغناطیسی –گالیم آرسناید – ماتریس چگالی – میدان لیزری تراهرتز - اثرات کوانتش

فهرست مطالب

۱-۱ لیست اشکال ..... ت

۱-۲ لیست جداول ..... ث

۱-۳ مقدمه ۲

۲ نانو ساختارهای نیمه رسانا

۲-۱ نیمرساناها ۱۲

۲-۲ نیم رساناها در ابعاد پائین ۱۴

۲-۳ خواص الکترونیکی نیمرساناها ۱۹

۳ بررسی نظری جذب تابش در نیمرساناها

۳-۱ انواع روشهای محاسبه رسانایی در نیمرساناها ۲۶

۳-۲ روش Density Matrix ۲۸

۴ رسانندگی الکترونها در نانوسیم نیمرسانا تحت اثر تابش الکترومغناطیسی

۴-۱ بدست آوردن حالتهای الکترونی تابع موج ۴۶

۴-۲ Density Matrix ۵۵

۴-۳ رسانندگی ۶۰

۴-۴ محاسبات عددی ۶۷

۵ نتایج

۵-۱ مقدمه ۷۲

۵-۲ نتایج ۷۳

۵-۳ بحث در نتیجه ۷۷

۵-۴ پیشنهاد برای ادامه کار بعدی ۷۸

مراجع ۷۹

پیوست ها ۸۱

لیست اشکال

شکل (۱-۱) چاپ صفحه اول کتاب" داستان دو شهر "اثر چارلز دیکنز به روش لیتوگرافی پرتو الکترونی توسط تام نیومن ٦

شکل (۲-۱) سمت راست : آگهی آی بی ام که از اتم های زنون ساخته شده است. سمت چپ : باروی الکترونی، این نگاره ها گام های پی در پی در آفرینش بارویی گرد از اتمهای آهن بر صفحه مس ، را نشان می دهد که گروه آی بی ام به رهبری دان ایگلر ساحته اند ۶

شکل (۳-۱) جام لیکورگوس که در موزه بریتانیا در شهر لندن نگهداری می شود و قدمت آن به دو هزار سال قبل بازمی گردد ، شیشه این جام که از مخلوط کربنات کلسیم و اکسید کلسیم تشکیل شده است حاوی نانو ذرات نقره و طلا می باشد ، این نانو ذرات باعث می شوند که طیف رنگ نور بازتابیده از این جام ازسبز تا قرمز تیره تغییر یابد ۷

شکل (۱-۲) نشان دهنده مسیر حرکت براونی یک ذره درون مخلوط گازی می باشد، منشا این نوع حرکت ذره برخوردهای متوالی آن با ذرات دیگر می باشد ۱۵

شکل (۲-۲) سمت راست نمایانگر ابعاد یک میکروچیپ بوده،فواصل نوعی کمتراز میکرومتر می باشند سمت چپ روش برآورد طول فاز همدوسی دو موج تداخلی را نشان می دهد این فاصله در حد نانومترمی باشد ۱۶

شکل(۳-۲) (a) نمایانگر چگالی حالات الکترونی برحسب انرژی در یک ماده محتوی نانو نقطه ها می-باشد،

(b) نمایانگر چگالی حالات الکترونی بر حسب انرژی در یک ماده محتوی نانو سیم ها می باشد،

(c) نمایانگر چگالی حالات الکترونی بر حسب انرژی در یک نانو صفحه می باشد،

(d) نمایانگر چگالی حالات الکترونی بر حسب انرژی در یک ماده معمولی می باشد.....۱۸

شکل(۴-۲) (a) نمایانگر مسیر حرکت الکترون در رژیم دیفیوز ،(b) نمایانگر مسیر حرکت الکترون

در رژیم شبه بالستیک و(c)نمایانگر مسیر حرکت الکترون در رژیم بالستیک می باشد ۲۲
شکل (۱-۵) نمودار تغییرات رسانش بر حسب دامنه میدان الکتریکی آزمون در جذب تابشی با دامنه ثابت و فرکانس متغیر.....۷۴
شکل (۲-۵) تغییر در محل و ارتفاع قله تشدید در جذب با تغییر در فرکانس میدان آزمون ۷۵
شکل (۳-۵) وابستگی میزان جذب تابش به دامنه میدان تابشی.....۷۵
شکل (۴-۵) مقایسه نحوه تغییرات جذب با دامنه تابش در فرکانس های متفاوت.....۷۶
شکل (۵-۵) اثر جذب تابش با دامنه بزرگ در ترابرد الکترونی.....۷۷

لیست جداول

جدول ۱-۵ : بعضی از مقادیر کمیت های فیزیکی مربوط به گالیم آرسناید در یک شبه ساختار دو بعدی ۷۳

فصل اول

مقدمه ۲

فصل اول

مقدمه

دنیای شگفت انگیز نانو همچنان رو به گسترش است و به جرات می توان گفت که تمام بخش های فناوری از این کشف تاثیر پذیرفته است ولی سرآغاز این فن آوری از کجا آمده است ؟ در یونان باستان [19] ، مردم و به خصوص دانشمندان براین باور بودند که مواد را می توان آن قدربه اجرای کوچک تقسیم کرد تا به ذرات خرد ناشدنی رسید که بنیان مواد را تشکیل می دهند . شاید بتوان دموکریتوس فیلسوف یونانی را پدر فناوری و علوم نانو دانست،چرا که وی در حدود چهارصد سال قبل از میلاد مسیح نخستین بار واژه اتم را که در زبان یونانی به معنی تقسیم نشدنی است ، برای توصیف ذرات سازنده مواد به کار برد .نانو فن آوری واژه ای است کلی که به تمام فن آوری های پیش رفته درعرصه کار با مقیاس نانو اطلاق می شود . معمولا منظور از مقیاس نانو ،ابعادی در حدود یک تا صدنانومتر[1] است (یک نانو متر یک میلیاردم متر است) ،واژه فن آوری نانو اولین بار توسط"نوریوتاینگوچی "[2] استاد دانشگاه علوم توکیو درسال ۱۹۷۴ بر زبان ها جاری شد .اواین واژه را برای توصیف ساخت مواد (وسایل) دقیقی که اندازه ابعاد آنها در حد نانومتر است، به کار برد .در سال ۱۹۸۶ این واژه توسط اریک درکسلر[3] در کتابی تحت عنوان موتورآفرینش ، آغاز دوران نانوفن آوری بازآفرینی و تعریف مجدد شد . وی این واژه را به شکل عمیق تری در رساله دکتری خود بررسی کرد و بعدها آن را در کتابی تحت عنوان نانوسیستم ها، ماشینهای مولکولی ،چگونگی ساخت ومحاسبات آنها را توسعه

1 Nanometers
2 Nurio Taiganochi
3 Eric Derksler

داد . یک نانو متر یک هزارم میکرون است و اگر بخواهیم احساس فیزیکی نسبت به آن داشته باشیم ، می توان گفت که یک نانو متر ۱:۸۰۰۰ قطرموی انسان است . اما این تعریف نانو مقیاس نمی تواند مقایسه درستی باشد ، چرا که ضخامت موی انسان بسته به خصوصیات فردی هرانسان از چند ده میکرومتر تا چند صد میکرومترمتغیر است . یک نانـومتر برابر قطر ده اتم هیـدروژن یا پنـج اتم سیلیسیـوم اسـت . درک این موضوع برای افراد معمولی نیز راحتتراست علیرغم اینکه درک اندازه یک اتم برای افراد غیرعلمی ساده نیست ، با این تشابه مشخص می شود که نانو فن آوری عبارت از هنر دست کاری مواد در مقیاس اتمی یا مولکولی و به خصوص ساخت قطعات و لوازم نانو- سکوپی (مانند نانوروباتها) می باشد . از این رو نانو فناوری بر پایه دست کاری تک تک اتم ها و مولکولها استوار است ، بدین منـظور که بتوان ساختاری پیچیده را با خصوصیات اتمی تولید کرد . تعریف دیگری[۴] از فن آوری نانو عبارت است از : توسعه و استفاده از ادوات و قطعاتی که اندازه آنها تنها چند نانومتر است ؛ تحقیق روی قطعات وادوات بسیار کوچک که خواصشان به خواص الکترونیکی این قطعات وابسته است و خواص الکتریکی آنها احتمالا متاثر از حرکت تعداد معدودی الکترون در طی عملکرد قطعه است . این ادوات سریعتر از ادوات بزرگ عمل می کنند .

در آخر می توان اشاره به تعریفی که موسسه مشوقی نانو فناوری (امریکا) [۵] برای فناوری نانو دارد ، بکنیم :

۱-توسعه فناوری و تحقیقات در درسطوح اتمی،مولکولی یا ماکرو ملکولی درمقیاس اندازه ای۱ تا ۱۰۰نانومتر.

4 MIT Definition

5 NNI/National Nanotechnology Initiativ

۲- خلق و استفاده از ساختارها و ابزارها و سیستم هایی که بخاطر اندازه کوچک یا حد میانه آنها ،خواص وعملکرد نوینی دارند .

۳- توانایی کنترل یا دستکاری مواد در سطح اتمی .

زمانی که مواد درمقیاس نانو مطالعه و بررسی می شوند ، واکنش های و رفتاراتمها در مقایسه با حالتی که مطالعه درسطح مولکولی انجـام می شوند کاملا متفاوت است ؛ چرا که در این قلمرو خصوصیات فیزیکی مواد تغییر می کند. تفاوت در قلمرو نانو به اندازه ای است که حتی رنگ، نقطه ذوب،خصوصیات شیمیایی و غیره مواد در خارج از این محدوده کاملا متفاوت است.

آغازی نو

There's Plenty of Rooms at the Bottom...

آنچه می خواهم درباره اش گفتگو کنم ،پرسمان دستکاری و زیر فرمان درآوردن چیزها در مقیاس خرد است ... در آن زیر جهانی است که ریزی گیج کننده ای دارد.در سال ۲۰۰۰ ، هنگامی که مردمان به گذشته و به زمان ما بنگرند ،در شگفت خواهند شد از اینکه چرا تا سال۱۹۶۰ هیچ کس در این راستا کاری انجام نداد .

متن بالا[2,6] بخشی از سخنرانی ریچارد فیلیپس فاینمن[6] می باشد که در۲۹ دسامبر ۱۹۵۹ در نشست سالانه انجمن فیزیک آمریکا درموسسه فناوری کالیفرنیا [7]،انجام داد،عنوان سخنرانی "در آن زیرها،جای بسیار هست"،بینش ژرفی از آینده ، پیش رو نهاد. نام دیگراین گفتگو فراخوان زیادی به میدان نوینی

6 Richard Philips Feynman
7 The California Institute of Technology

در فیزیک بود و نشانگر آغاز چیزی بود که فن آوری نانو خوانده می شود .فاینمن درآن گردهمایی برآن پای می فشرد که چنین تلاشی نیازبه فیزیک نوینی ندارد. نیز در آنجا وعده پرداخت دو جایزه نقدی هزار دلاری از طرف ایشان به عنوان ،"نخستین کسی که موتور الکتریکی بسازد که حجمش ١/٦٤ اینچ مکعب باشد "و "برای نخستین کسی که اطلاعات روی یک برگ کتاب را ١/٢٥٠٠٠ بار کوچک سازد ."

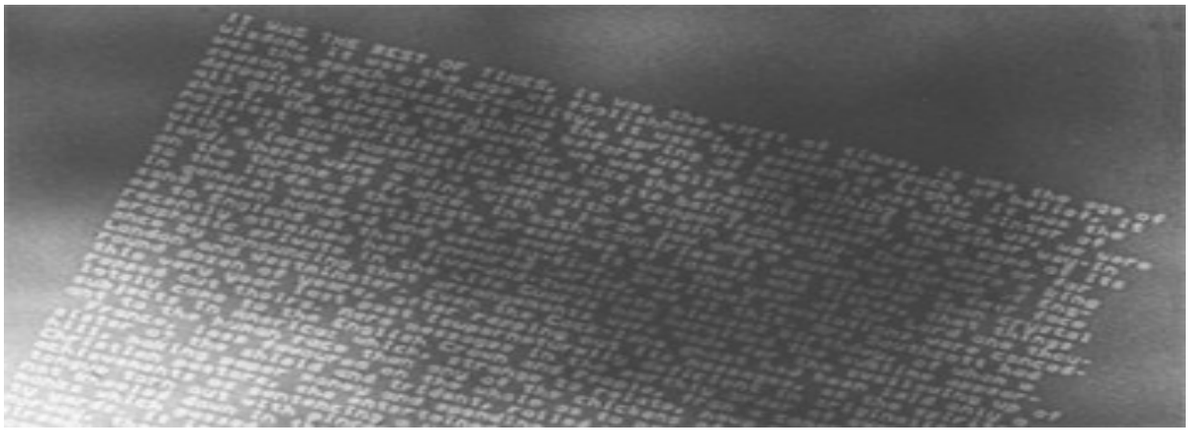
ساخت موتور با آن ابعاد همانطور که خودش فکر می کرد نیاز به هیچ پیشرفت فنی نوینی نداشت و آقای مک للان[8] کمتر از یکسال جایزه را دریافت کرد .

٢٥ سال سپری شد تا تام نیومن[9] دانش آموخته استنفورد با سود جستن از روشی به نام لیتوگرافی پرتو الکترون[10] گرته هارا از روی سیلیکون کنده کاری کند او پس از دفاع ازموضوع پایان نامه خود دستگاه رامجددا برنامه ریزی کرد تا بتواند هر حرف را به اندازه طول پنجاه اتم کوچک کند و بدینوسیله اولین صفحه ازکتاب داستان دو شهر نوشته چارلز دیکنز[11] را روی سطح سیلیکونی بنگارد ولی این ساده ترین کار بود چرا که که دشوارترین قسمت یافتن آن نوشته روی آن سطح بود . ایده دیگر فاینمن از زبان او چنین بود :

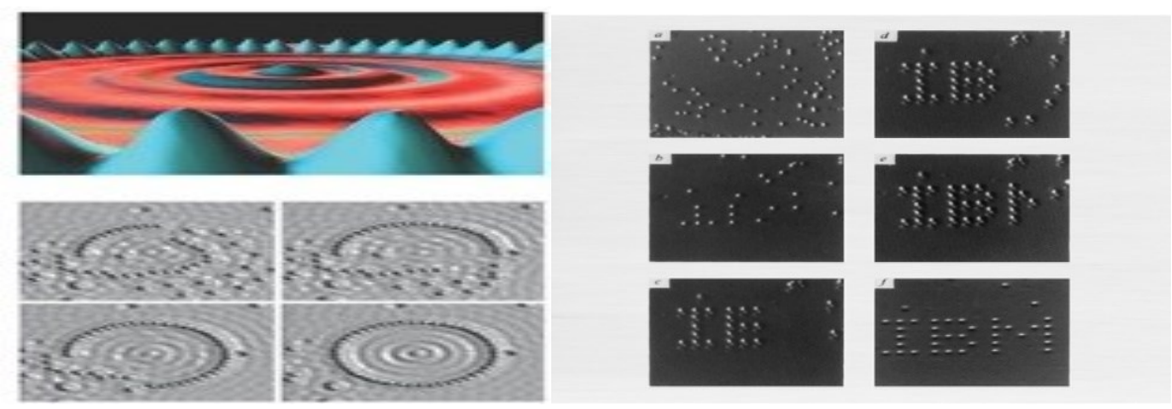
به طور کلی گمان می کنم که بشود فیزیکدان هر ماده شیمیایی را که شیمیدان بنویسد ،سر هم کند.چگونه؟ اتم ها را هر کجا که شیمیدان می گوید بگذارید و .بدین سان ماده ساخته می شود.

اندکی بعد در ١٩٨٩ دونالد ایگلر[12] با ساخت میکروسکوپ تونلی روبشی پایه محکمی برای ورود به این عرصه را بنیاد گذاشتند .دهه نود آغاز تعبیر رویای فاینمن بود چرا که فناوریهای جدید در حوزه نانو

8 Mc Lelan
9 Tom Numann
10 Electron Litography
11 Charles Dickens
12 Donald Igler



شکل (۱-۱) چاپ صفحه اول کتاب "داستان دو شهر" اثر چارلز دیکنز به روش لیتوگرافی پرتو الکترونی توسط تام نیومن



شکل (۲-۱) سمت راست : آگهی آی بی ام که از اتم های زنون ساخته شده است. سمت چپ : باروی

الکترونی، این نگاره ها گام های پی در پی در آفرینش بارویی گرد از اتمهای آهن بر صفحه مس ،

خود موجب توسعه بیشتر این عرصه نوین علمی بودند. ولی آیا این همه داستان "نانو"بود؟ مسلما نه!

چرا که مشخص شده شیشه گران رومی [3] به مزیت استفاده از شیشه های حاوی ذرات بسیار ریزی

پی برده بودند.یک اثر باقیمانده از این دوران که جام "لیکورگس[۱۳] "نام دارد [4]،در موزه بریتانیا،در

13 Lycurgus Cup

شکل (۳-۱) جام لیکورگوس که در موزه بریتانیا در شهر لندن نگهداری می شود و قدمت آن به دو
هزار سال قبل بازمی گردد ، شیشه این جام که از مخلوط کربنات کلسیم و اکسید کلسیم تشکیل شده
است حاوی نانو ذرات نقره و طلا می باشد ، این نانو ذرات باعث می شوند که طیف رنگ نور

شهر لندن نگهداری می شود . شیشه این جام که منقش به تصویری از مرگ شاه Lycurgus است از مخلوط کربنات کلسیم و اکسید کلسیم تشکیل شده ونیز حاوی نانو ذرات نقره و طلا است . هنگامی که منبع نور درون جام قرارداده می شود رنگ آن از سبز تا قرمز تیره تغییرمی کند . تنوع زیاد رنگ های زیبای پنجره های کلیساهای جامع مربوط به قرون وسطی نیزبه سبب وجود نانو ذرات فلزی درون شیشه آنهاست .

نانو فن آوری روز

نانو فن آوری هم اکنون درتمام جنبه های علم ،فن آوری، صنعت رسوخ کرده است حال جالب خواهد بود اشاره ای به کاربردهای خاص این فناوری بخصوص مرتبط با موضوع مورد مطالعه ما یعنی" نانو

سیم ها" درحوزه صنعت بیندازیم .شبه نانوسیم های یک بعدی دارای خواص منحصر به فرد الکتریکی و الکترونیکی ، ترموالکتریکی ، نوری ، مغناطیسی و شیمیایی متفاوتی نسبت به همتایان غیر نانویی خود دارند ، خواص نانوسیم ها بسیار تحت تاثیرمورفولوژی ابعاد / ضخامت نانوسیم دارد که این امر پهنای گاف نواری band gap و چگالی حاملهای بار را تحت تاثیر خود قرار داده است، این خصوصیات نانوسیمها موجب استفاده گسترده از آنها دردستگاههای الکترونیک ، ترانزیستور،FET ،و گیت های منطقی، ساخت ابرشبکه ها حافظه الکترونیکی، سیستم خنک کننده ترموالکتریک ساخته شده ازنانوسیم های فلزی ساخته شده ،اجزای سیستمهای مختلف اپتو الکترونیکی، استفاده از آرایه ای ازنانو سیمهای مغناطیسی به عنوان جایگزین حافظه های الکترونیکی رایج که دارای مزیت کم مصرف بودند انرژی و سرعت پردازش بالا نسبت به اسلاف خود دارد ،شده است .همچنین نانوسیم ها پتانسیل بالایی را برای کاربرد بعنوان اجزای حسگر ها دارند نیز کاربردهایی از آنها در حوزه زیست پزشکی گزارش شده است . هم اکنون تحقیقات گسترده ای درزمینه های بهره گیری از نانوسیم ها و نانو لوله ها بخاطر خواص منحصر بفرد آنها در طیف متنوعی از کاربردها در جریان است، نانوسیم ها در دو بعد فضایی محدود شده اند ولی دریک بعد محدودیتی از نظر ابعاد ندارند ، بنابراین خاصیت هدایت الکتریکی آنها از طرفی بسیار متفاوت از حالت کپه ای آنها و دربعد دیگر مشابه آن خواهد بود بنابراین هدایت الکتریکی نانوسیم ها هم از طریق رسانش حالت کپه ای آنها وهم از طریق پدیده تونلی خواهد بود ازاین رو بدلیل چگالی بالای حالتهای الکترونی، وابستگی پهنای باند انرژی به ضخامت آن ،توانایی پراکندگی سطحی الکترونها و فونونها ، افزایش یافتن انرژی بستگی الکترون تحریک شده ، بالابودن قابل توجه نسبت سطح به حجم آنها، در اینصورت نانو سیم های فلزی و نیمرسانا نسبت به حالت بزرگ ساختار خود می توانند خواص

الکتریکی، مغناطیسی، اپتیکی، ترموالکتریکی و شیمیایی منحصر بفردی از خود نمایش می دهند آرایش نانوسیم های مغناطیسی اخیرا مورد توجه زیادی قرار گرفته است تا بتوان آنها را برای ضبط مغناطیسی مورد استفاده قرار داد، نانو سیم هایی که معرفی گردیدند در منافذ آلومینا بصورت بارگذاری الکتریکی (الکترو دپازیشن) جایگزیده می شوند و توان تولید حافظه های مغناطیسی برابر با یکصد گیگابایت بر اینچ مربع را دارا می باشند،آنها میدان مخالفی تولید می کنند که متناسب با عکس قطر منافذ می باشد[۳].

فصل دوم

نانو ساختارهای نیمه رسانا

۲-۱ نیمرساناها ۱۲
۲-۲ نیم رساناها در ابعاد پائین ۱۴
۲-۳ خواص الکترونیکی نیمرساناها ۱۹

نیمرساناها

مواد جامد در سه دسته [5] : نارساناها، نیمرساناها و رساناها گروه بندی می شوند . نارساناها مانند شیشه و کوارتز دارای رسانندگی خیلی پائین در حدود 10^{-18} تا 10^{-8} s/m [۱۴] می باشند ؛ و رساناهایی نظیر آلومینیوم و نقره دارای رسانندگی بالا بطور نمونه از 10^{6} تا 10^{4} s/m هستند . نیمرساناها دارای رسانندگی بین نارساناها و رساناها هستند .رسانندگی یک نیمرسانا بطور کلی نسبت به دما ، روشنایی ، میدان مغناطیسی و مقدار دقیق ناخالصی اتمها حساسیت دارد . این حساسیت در رسانندگی نیمرساناها را به یکی از مهمترین مواد برای کاربردهای الکترونیکی تبدیل می کند .

نوارهای انرژی

برای[۱۵] یک اتم منفرد ، الکترونهای اتم فقط می توانند دارای ترازهای انرژی مجزا باشند ؛ حال اگر دو اتم یکسان را در بررسی کنیم ،وقتی آنها خیلی از یکدیگر دور هستند ، ترازهای انرژی مجاز برای یک عدد کوانتومی اصلی معین شامل یک سطح تبهگن دوگانه می باشد یعنی ضمن آنکه دو اتم به یکدیگر نزدیک می شوند ، تراز انرژی تبهگن دوگانه در اثر بر هم کنش بین اتمها به دو تراز تقسیم خواهد شد . وقتی N اتم را برای تشکیل بلور به هم نزدیک می کنیم ، تراز انرژی تبهگن N تایی بخاطر برهم کنش اتمی به N تراز ، اما به فواصل خیلی نزدیک تقسیم می شود ، این امربه تراز انرژی اساسا پیوسته منجر می شود، درادامه کاهش فواصل بین اتمی تا فواصل اتمی دربلورها، مثلا برای سیلیسیوم با ثابت شبکه ۵,۴۳ آنگستروم، این نوار مجددا به دو نوار تقسیم می شود . این نوارها توسط ناحیه ای با انرژی های خاص که الکترونهای جامدات نمی توانند دارای آن انرژیها باشند از یکدیگر جدا می شوند .این ناحیه

۱۴ واحد رسانندگی "زیمنس" معادل معکوس "اهم" واحد مقاومت الکتریکی می باشد

15 Energy Bands

گاف نواری[۱۶] نامیده می شود . نوار بالاتر نوار رسانش در حالی که نوارپائینی نوار ظرفیت نامگذاری می شود . در نارساناها الکترونهای ظرفیت بین اتمهای همسایه پیوندهای قوی تشکیل می دهند . این پیوندها به سختی می شکنند و در نتیجه هیچ الکترون آزادی برای شرکت درجریان رسانش وجود ندارد. درعایقها گاف نواری بزرگ بوده ونیزتمام ترازهای انرژی در نوار ظرفیت با الکترونها اشغال شده و تمام سطوح انرژی در نوار رسانش خالی هستند، انرژی گرمایی یا میدان الکتریکی اعمال شده نمی تواند بالاترین الکترونهای تراز ظرفیت را بهتراز رسانش منتقل کند؛ در نیمرسانا ها پیوندهای اتمی بین اتمهای همسایه بطور متوسط قوی هستند یعنی اندازه گاف نواری از گاف نوار انرژی نارساناها کوچکتر می باشد،در نتیجه در اثر ارتعاشات گرمایی چنین پیوندهایی شکسته خواهند شد و یک جفت الکترون آزاد در نوار رساتش و متناظر آن یک حفره[۱۷] آزاد در نوار ظرفیت تولید خواهد شد ، حال اگر میدان الکتریکی خارجی به قطعه نیمرسانا اعمال شود ، الکترونهای نوار رسانش و حفره های نوار ظرفیت در اثر اعمال میدان ، برآورد خالصی جابجا شده و الکتریسیسته را هدایت خواهند نمود .

در رساناها همچون فلزات نوار رسانش بطور جزئی پر است و یا با نوار ظرفیت روی هم می افتند ، بطوری که هیچ گاف نواری وجود ندارد . در نتیجه بالاترین الکترونهای واقع در نوار بطور جزئی پر یا الکترونهای واقع در قسمت بالای نوار ظرفیت با کسب انرژی با منشاء خارجی،مانند میدان الکتریکی اعمال شده به دو سر قطعه فلزی ، می توانند به تراز انرژی مناسب بعدی نقل مکان کنند و بدین سان در رسانـاها هدایت جریان به سهولت انجام می شود.

16 band gap

۱۷ اثر جمعی الکترونهای ظرفیت با وجود داشتن یک موقعیت خالی مانند یک "حفره" مجازی نمود خواهد کرد

نیم رساناها در ابعاد پائین

سیستم های مزوسکوپیک[۱۸]

ممکن است[7] این سوال از ذهن خطور کند که چرا لغت "نانو" برای نمود این حوزه ازعلم فیزیک بکار رفته است ، در واقع زمانی که ابعاد ذرات درحدود "نانومتر" می باشند رفتار فیزیکی و شیمیایی آنها تاحد زیادی با حالت ماکروسکوپیک همان ماده تفاوت زیادی خواهد داشت ، سر منشاء این تغییر رفتار را می توان با معرفی پارامترهای خاص که بطور اجمال در زیر اشاره ای به آنهامی شود بیان کرد . حال درمرحله ای هستیم که بطورکمی ودقیق بتوانیم دنیای نانورا توصیف کنیم،بطور کلی موادی که خصوصیات فیزیکی آنها بدلیل ابعاد کوچکشان با حالت کپه ای همان مواد فرق می کند واین امر بدلیل ظهور بعضی از خواص نانودر آنها می باشد " سیستم های مزوسکوپیک " می گویند ابعاد فیزیکی این سیستمها نوعا بین چند نانومتر تا صد میکرون می باشد ولی مهمترین مسئله بروز رفتار غیر متعارف مواد نسبت به حالت بالک/مجتمع دارد که ناشی از مقدار خاص پارامترهای فیزیکی ویژه ای دارد .

طول موج دوبروی [۱۹]

$$\lambda_f = 2\pi / k_f = (2\pi / n_s)^{1/2} \qquad (۲-۱)$$

که درآن λ_f طول موج دوبروی، k_f بردار موج دوبروی الکترون، n_s چگالی الکترونها درواحد حجم می باشند .

برای یک نمونه نوعی در محیط آزمایشکاهی خواهیم داشت [5] :

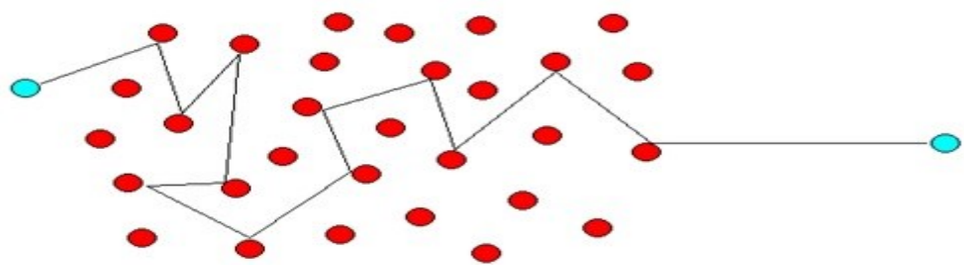
18 Mesoscopic Systems .
19 Doubraglie wavelength

$$n_s = 5*10^{11} / cm^2 \qquad (۲-۲)$$

$$\lambda_f = 35 \text{ nm} \qquad (۲-۳)$$

در واقع اگر ابعاد ماده کوچکتر ازطول موج دوبروی الکترون آزاد باشد جایگزیدگی مشاهده خواهد شد.

طول پویش آزاد میانگین[۲۰]



شکل (۱-۲) نشان دهنده مسیر حرکت براونی یک ذره درون مخلوط گازی می باشد، منشا این نوع حرکت ذره برخوردهای متوالی آن با ذرات دیگر می باشد .

"طول پویش آزاد میانگین" عبارت است از میانگین فاصله ای است که یک حامل بار بین دو برخورد متوالی طی می کند .

$$V_f = h\, k_f / m = \hbar / m\,(2\pi / n_s)^{1/2} = 3 * 10^7 \text{ cm / s}$$

$$L_m = V_f \tau_m \qquad (۲-۴)$$

که درآن L_m طول پویش آزاد میانگین ، V_f سرعت حرکت الکترون و τ_m زمان بین دو برخورد متوالی می باشد. k_f بردار موج دوبروی الکترون ، m جرم الکترون و n_s چگالی الکترونها در واحد حجم می باشند . برای یک نمونه نوعی خواهیم داشت :

$$n_s = 5*10^{11} / cm^2 \quad \& \quad \tau_m = 100 \text{ ps} \qquad (۲-۵)$$

20 Mean Free Path

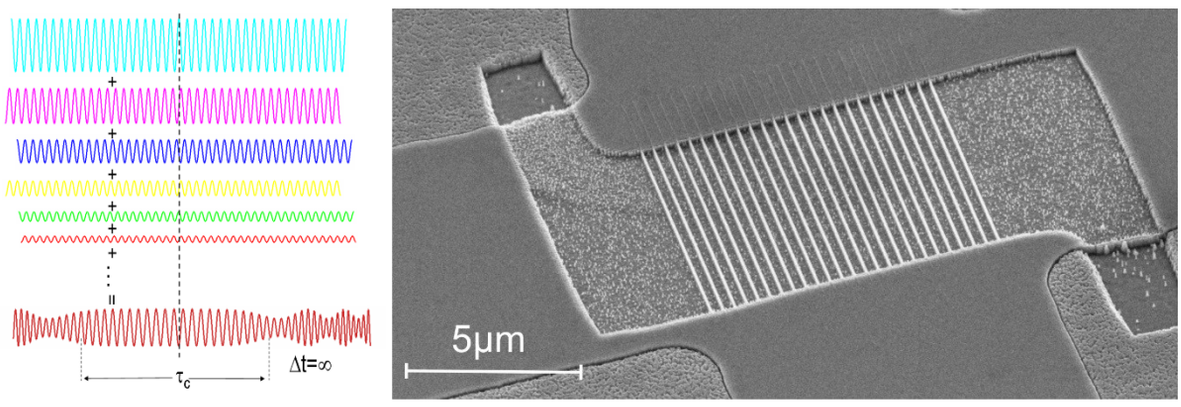
در نتیجه خواهیم داشت :

$$L_m = 30\ \mu m \qquad (۲-۶)$$

در اثر کم شدن چگالی الکترونی تعداد برخوردهای متوالی بین الکترونها کم خواهد شد ، اگر این فرآیند ادامه پیدا کند و ابعاد ذره از طول پویش آزاد میانگین کمتر شود مبنای محاسبه پارامترهای ماکروسکوپیک مثل مقاومت الکتریکی / رسانندگی و ... با مشکل مواجه خواهند شد .

طول فاز همدوس [۲۱]

میانگین فاصله ای که یک حامل بار قبل از تغییر قابل ملاحظه فازش در اثر برخورد با حاملهای بار دیگر اتمهای شبکه طی می کند .



شکل (۲-۲) سمت راست نمایانگر ابعاد یک میکروچیپ بوده ، فواصل نوعی کمتراز میکرومتر می باشند - سمت چپ روش برآورد طول فاز همدوسی دو موج تداخلی را نشان می دهد این فاصله در حد نانومتر می باشد.

$$\lambda_f = 2\pi / k_f = (2\pi / n_s)^{1/2} \qquad (۲-۷)$$

21 Coherent Length

که در آن λ_f طول همدوسی و k_f بردار موج همدوسی و n_s چگالی اللکترونها می باشند . بطور مثال برای یک نمونه داریم :

$$n_s = 5*10^{11} / cm^2 \qquad (۲-۸)$$

$$\lambda_f = 35\ nm \qquad (۲-۹)$$

تقسیم بندی های مختلف درنانو فن آوری

همانطور [8] که قبلا اشاره شد تغییر در ابعاد جسم نیمرسانا منجربه تغییرقابل ملاحظه ای درخصوصیات فیزیکی و شیمیایی آن ماده خواهد شد ، مواد با خصوصیات نانو ، به سه گروه اصلی تقسیم می شوند ، در این گروهها عموما مواد رفتاری و خواص مشابهی از خود بروز می دهند که بیشتر وابسته به ساختار ابعادی آنها می باشد و ارتباط کمی با عناصر شیمیائی تشکیل دهنده آنها دارد ، نیز می دانیم این رفتار ناشی از نمود رفتار کوانتوم مکانیکی ماده جدا از عناصر تشکیل دهنده آنها و کاملا متفاوت بارفتار آنها در ساختار عادی شان می باشد . تقسیم بندی در این حوزه به شرح زیر می باشد :

۱- نانوسطوح : سطوح با ضخامت چند ده نانو متر مواد بر همنشانده شده روی مواد دیگر

۲- نانو سیم ها : لایه های بسیار نازک از مواد که طول آنها چند هزار برابر عرض آنها می باشد، عموماعرض آنها در حدود چند ده نانومتر می باشد (ضخامت آنها هم در حدود چند نانومتر تا چند ده نانومتر می باشد).

۳- نانو نقطه ها : مواد یکسان انباشته شده در حد چند نانومتر در درون مواد دیگر .

چگالی حالات در ابعاد گوناگون :

چگالی حالات $D(E)$ [8] ، تعداد حالات در دسترس الکترونی می باشند که انرژی آنها کمتر از ε بر واحد سطح بر واحد انرژی می باشند .

چگالی حالات را می توان به صورت زیر نوشت :

(۲-۱۰)

که در آن :

(۲-۱۱)

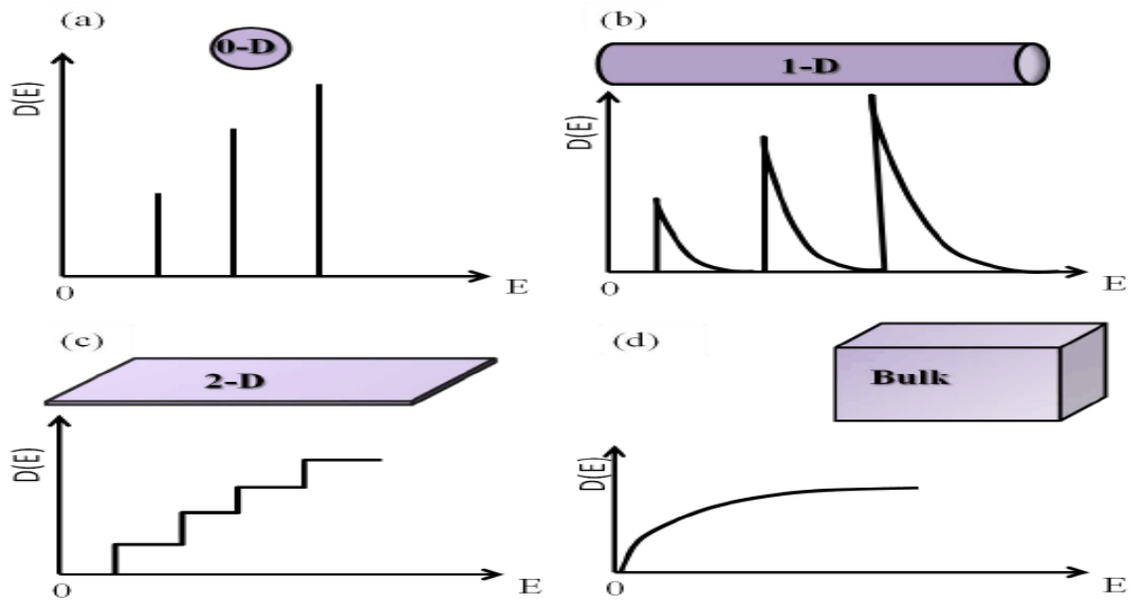
تابع توزیع فرمی-دیراک یا احتمال اینکه آن حالات به چه مقداری پر خواهند شد می باشد . در اینجا μ پتاسیل شیمیایی ، k_B ثابت بولتزمن است . برای حالتهای مختلف خواهیم داشت :

(۲-۱۲)

(۲-۱۳)

(۲-۱۴)

(۲-۱۵)



شکل (۳-۲)

(a) نمایانگر چگالی حالات الکترونی بر حسب انرژی در یک ماده محتوی نانو نقطه ها می باشد،

(b) نمایانگر چگالی حالات الکترونی بر حسب انرژی در یک ماده محتوی نانو سیم ها می باشد،

(c) نمایانگر چگالی حالات الکترونی بر حسب انرژی در یک نانو صفحه می باشد،

(d) نمایانگر چگالی حالات الکترونی بر حسب انرژی در یک ماده معمولی می باشد،

خواص الکترونیکی نیمرساناها

قبل از اینکه به بررسی مسئله ترانسپورت الکترونی در یک نانو نیمرسانا بپردازیم باید از نحوه برخورد-های بین حاملهای بار در آنها آگاهی یابیم . یکی [۷] از مهمترین پارامترها دربررسی ترابرد محاسبه و برآورد الکترونها می باشد بنابراین نیاز است که انواع مختلف تقسیم بندی پراکندگی های الکترونها را درون شبکه مورد مطالعه قرار دهیم .

تقسیم بندی انواع برخوردهای الکترونی در درون شبکه بلوری

تقسیم بندی از نظر پایاور بودن برخورد :

۱- پراکندگی صلب

الکترون-الکترون / الکترون اتمهای شبکه

۲- پراکندگی غیر صلب

الکترون-اتمهای ناخالصی شبکه دارای ممان مغناطیسی صفر/الکترون -فونون با طول موج کوتاه

/الکترون فونون با طول موج بلند / الکترون-اتمهای ناخالصی شبکه دارای ممان مغناطیسی

تقسیم بندی از نظر پایور بودن ممان مغناطیسی الکترون :

۱- پراکندگی استاتیک

الکترون-اتمهای ناخالصی شبکه دارای ممان مغناطیسی صفر/ الکترون - فونون با طول موج بلند /

الکترون اتمهای شبکه

۲- پراکندگی دینامیک

الکترون - فونون با طول موج کوتاه / الکترون-الکترون / الکترون-اتمهای ناخالصی شبکه دارای ممان

مغناطیسی

تقسیم بندی از نظر نوع ذرات برخوردی

۱ - الکترون – اتمهای شبکه :

اگر تانسور جرم موثر الکترون متقارن باشد در این حالت پراکندگی " متقارن + صلب + استاتیک "

می باشد.

۲ - الکترون – الکترون :

پراکندگی صلب می باشد – پتانسیل نوسانی که الکترونهای دیگر تولید می کنند باعث پراکندگی الکترون فرودی می شوند این پتانسیل همیشه به یک شکل نبوده ،بنابراین پراکندگی استاتیک نمی باشد . " صلب + دینامیک "

۳ - الکترون-اتمهای ناخالصی شبکه دارای ممان مغناطیسی صفر:

پراکندگی غیرصلب می باشد– این پراکندگی منجربه تاخیر فاز می شود ولی چونکه ناخالصی ها درکل بطورهمگن پخش شده اند در کل در نتیجه همدوسی الکترونها یی که مسیرهای متفاوتی طی کرده اند تاثیری بجای نمی گذارد – همه به یک اندازه تاخیر فاز می افتند (فرض بر این است که طول مسیر طی شده توسط آنها یکسان می باشد) بنا بر این پراکندگی " غیر صلب + استاتیک " خواهد بود .

۴ - الکترون-اتمهای ناخالصی شبکه دارای ممان مغناطیسی :

پراکندگی غیر صلب می باشد – در این نوع برخورد عکس حالت قبل تابع حالت الکترون خروجی همیشه به یک شکل نخواهد بود در این حالت ممکن است الکترون با اسپین الکترون مداری آن ناخالصی واکنش انجام دهد و احتمال این پدیده همیشه یکسان نمی با شد بنابراین الکترونها در گذار ازمسیرهای متفاوت و حتی درزمانهای متفاوت تاخیرفازهای متفاوتی خواهند داشت . بنا براین در این حالت پراکندگی "غیر صلب + دینامیک " می باشد.

۵ - الکترون - فونون با طول موج بلند :

پراکندگی غیر صلب می باشد چونکه راستای بردار موج فونون باعث غیر همگن شدن تانسورجرم موثر می شود. و نیز پراکندگی استاتیک است زیرا الکترونهایی که بازه ای کمترازکسر طول موج فونون را

طی کرده اند باز هم باهم همدوس خواهند بود، اثراختلال پتانسیل حاصل ازفونون بر همه تقریبا یکسان می باشد. بنا بر این پراکندگی " غیر صلب + استاتیک می باشد .

۶ - الکترون - فونون با طول موج کوتاه :

بدلیل مشابه حالت قبل غیر صلب ، ولی در این حالت الکترونها پتانسیل اختلالی (ناشی از فونون) متفاوتی را تجربه خواهند کرد ودر نتیجه تابع حالت نهایی و درنتیجه فاز نهایی الکترون پراکننده با دیگران متفاوت خواهد بود . پراکندگی "غیر صلب + دینامیک" می باشد .

بررسی انواع رژیم های ترابرد [7,9,10]

بدلیل پیچیدگی حل مسئله ترانسپورت و تحلیل رفتار جمعی الکترونها و به منظور بدست آوردن پارامترهای رفتاری الکترونها نگرشهای و رویکردهای متفاوتی در تحلیل مسئله ترانسپورت اتخاذ می-شود که به مهمترین آنها در ذیل اشاره می شود :

رژیم کلاسیکی (همدوس) :

$$l << W << L \qquad (۲-۱۶)$$

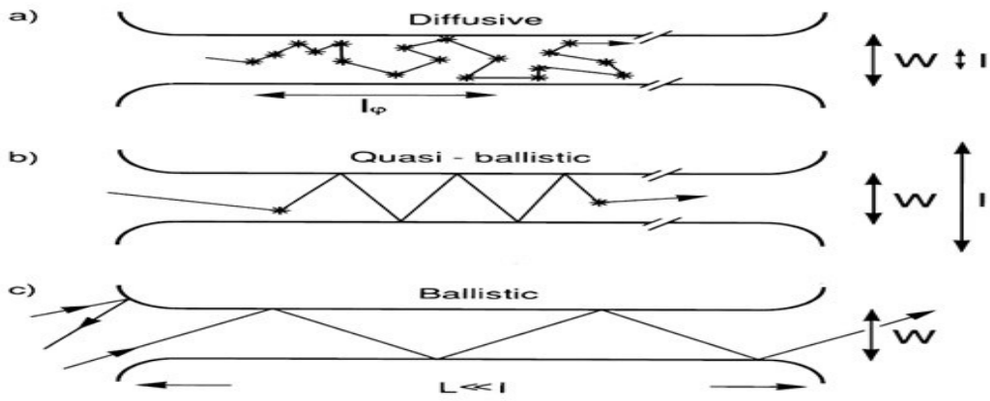
l طول پویش آزاد میانگین و W عرض قطعه و L طول قطعه می باشند .

رژیم دیفوز :

$$l << W << L \qquad (۲-۱۷)$$

اگر دما غیر صفر باشد

که در آن G رسانندگی کل و σ رسانندگی می باشد .



شکل(۴-۲) (a) نمایانگر مسیر حرکت الکترون در رژیم دیفیوز ،

(b) نمایانگر مسیر حرکت الکترون در رژیم شبه بالستیک و

(c)نمایانگر مسیر حرکت الکترون در رژیم بالستیک می باشد .

رژیم بالستیک :

$$W << L << l \qquad (۲-۱۹)$$

$$G = (e^2 / h)\, T \qquad (۲-۲۰)$$

T دمای نمونه بر حسب کلوین می باشد .

رژیم شبه بالستیک :

$$W << l << L \qquad (۲-۲۱)$$

$$G = (W/L)\, \sigma \qquad (۲-۱۸)$$

در این رژیم بخاطر جایگزیدگی الکترون در یک راستا عملا گاز دو بعدی الکترونی به گاز یک بعدی الکترونی

تبدیل می شود . جالبترین مشخصه این رژیم مشاهده ”اثر جایگزیدگی ضعیف “ [۲۲] می باشد .

22 Weak Localization

رژیم کوانتومی :

$$l << W << L \qquad (۲-۲۲)$$

منظور ما در این مقاله بررسی رفتار الکترونها در این حوزه می باشد .

از اثرات قابل توجه دیگر می توان به اثر ناخالصی ها درترانسپورت الکترونی اشاره کرد که در بالا در توضیح طول اسکرینینگ اشاره کوتاهی به آن شد، نمود این اثربصورت افزایش مقاومت الکتریکی ویا تغییردرطیف جذبی ماده مورد نظر دارد که این امربستگی شدیدی به چگالی و آرایش توزیع ناخالصی ها در ماده پذیرنده خواهد داشت.

محاسبه ترابرد بار در سیستم های مزوسکوپیک

محدوده اعتبار قانون درود[۲۳]

می دانیم که یکی از آشناترین و قدیمی ترین قوانین رایج درحوزه الکترومغناطیس قانون تجربی اهم می باشد،

$$I = G^* V \qquad (۲-۲۳)$$

I جریان الکتریکی ، G رسانندگی کل و V پتانسیل الکتریکی می باشد .این قانون مدل ماکرسکوپیک قانون درود می باشد [11] که اولین مدل نظری را در مورد پدیده ترابرد در مورد هادیها در فیزیک حالت جامد ارائه داد :

$$\sigma = ne^2\tau/m \qquad (۲-۲۴)$$

n چگالی الکترونی و e بار الکتریکی الکترون و m جرم موثر الکترون وτ زمان واهلش می باشد .

23 Drude Law

حال در مرحله ای هستیم که به اعتبار قانون درود شک کرده و این سوال را داشته باشیم :

آیا در این شاخه جدید از فیزیک این قانون اعتبار دارد ؟

برای جواب به این سوال به کمی قبل بازمی گردیم ، در اوایل قرن بیستم تلاشهای زیادی برای توجیه نظری از این قانون توسط فیزیکدانانی همچون "درود" بعمل آمد و آنها توانستند با برخی ملاحظات و تقریبهایی معادل این قانون را درحوزه فیزیک نظری بدست آورند،درنتیجه تلاشهای آنها حدود اعتبار این قانون نیز مشخص شد؛کشف خواص نیمرساناها و توجه صنعت جهت استفاده روز افزون باعث شد تا نیاز به یافتن معادل این قانون برای بررسی رفتار و خصوصیات جالب نیمه هادیها ایجاد شود .

$$G = (W / L) * \sigma \qquad (۲-۲۵)$$

حال حتی اگر فرضیاتی که به قانون درود اعتبار می بخشند درست باشد باید L و W خیلی بزرگتر از طول پویش آزاد میانگین الکترونها باشند تا مدل ماکروسکوپیک این قانون اعتبار داشته باشد .

در ابعاد نانو L و W در حدود طول پویش آزاد میانگین می باشند بنا بر این ترابرد حاملهای بار در قطعات با این ابعاد ویژگیهای خیلی خاص و متفاوتی نسبت به شرایط ابعاد ماکروسکوپیک دارند .ولی بهتر است که اساسا محاسبات را بر مفروضات قابل قبولی بنا نهیم .

فصل سوم

۳ بررسی نظری جذب تابش در نیمرساناها

۳-۱ انواع روشهای محاسبه رسانایی در نیمرساناها ۲۶

۳-۲ روش Density Matrix ۲۸

بررسی نظری جذب تابش در نیمرساناها

اهمیت بررسی ترانسپورت در نیمرساناها

بستگی مقاومت الکتریکی – مغناطیسی – جذب اپتیکی و ... به عوامل داخلی و خارجی ویژه نیمه هادیهای بکاررفته درصنایع الکترونیک واپتیک نیازمند تحلیل ترابرد(ترانسپورت) الکترون می باشد. آگاهی از شرایط خاص ترابرد الکترون (حفره) در نیم رساناها باعث تعدد قطعات طراحی شده جهت کاربردهای خاص در صنایع می گردد که این هم جذابیت علمی داشته و هم جذابیتهایی در زمینه های صنعتی و اقتصادی دارد.

انواع روشهای محاسبه رسانایی در نیمرساناها

روش MFT/Mean Field Theory

همچنین [۲۴] از این روش به نام های زیر نیز یاد می شود[12,13,14,15,16,17,18]:

Bragg-Williams approximation Bethe lattice, Landau theory, Pirrre-Weiss approximation,

Flory-Huggins solution theory, Scheutiens-Fleer theory

این روش که به روش تئوری میدان خود سازگار[۲۵] / نیز شناخته می شود .رفتار مدلهای آشوبی پیچیده را با یک مدل ساده جایگزین می کند . چنین مدلهایی برهم کنش تعداد بسیار زیاد ذرات خرد را که با هم اندر کنش دارند بررسی می کنند . این ایده اولین بار توسط پییر کوری[۲۶] و پییر وایس۲۷ برای توصیف

۲۴ نظریه میدان متوسط

25 Self Consistent Field Theory

26 Piere Currie

27 Piere Wice

۲۸ تابع پارش

گذارهای فاز مشاهده شد ، یک سیستم چند ذره ای را نمی توان بطور دقیق حل کرد مگر در موارد ساده-ای چون " Ising Model "" Random Field Theory "بتوان این کار را انجام داد که در آن دو مدل یک سیستم چند ذره ای تبدیل به یک سیستم یک ذره ای بعلاوه یک میدان "خوب" جایگزین می-شود.میدان برهم کنشی به یک میدان برآیند کل ذرات به یک ذره اختیاری تبدیل می شود.مشکل عمده زمانی آغاز می شود که بخواهیم با ترکیب برهم کنشها مثلا در محاسبه Partition Function [۲۸] کل سیستم وجمع زنی هامیلتونی را روی تک تک ذرات سیستم انجام دهیم . ایده اصلی دراین روش این است که کل برهم کنشها را با یک میدان میانگین برهم کنشی که به اصطلاح [۲۹] " Molecular Field " نامیده می شود جایگزین کنیم در نهایت مسئله چند ذره ای تبدیل به یک مسئله یک ذره ای می شود ، از نظر بیشتر افراد جواب حاصل از این روش دارای ارزش کمی می باشد .

در تئوری میدان می توان هامیلتونی را برحسب اندازه نوسانات حول میانگین اندازه میدان بسط می دهند، MFT درواقع به عنوان بسط مرتبه صفرم هامیلتونی نسبت به این افت و خیزها در نظر گرفته می شود. از نظر فیزیکی یک سیستم MFT هیچ افت وخیزی ندارد،اما این موضوع را دربردارد که تمام برهم کنشها با یک "میدان میانگین" جایگزین شده اند. در واقعMFT نقطه پرتابی برای شروع محاسبات بعدی برای مطالعه افت و خیزهای مرتبه اول و مراتب بعدی می باشد .

عموما ، ابعاد نقش تعیین کننده ای در اینکه رهیافت MFT برای حل یک مسئله خاص قابل قبول است و یا مقبول نمی باشد . درMFT همه برهم کنشها با یک میدان موثر جایگذاری می شوند. بنا بر این اگر سهم عمده برهم کنشها در میدان اولیه گنجانده شده باشند در این صورت MFT تقریب بسیار خوبی برای

۲۸ تابع پارش
۲۹ میدان مولکولی

این سیستم خواهد بود.این مسئله در مواردی که ابعاد زیاد می باشند و یا این که هامیلتونی شامل نیروهای با برد زیاد می باشد صادق می باشد . نیز اگر هامیلتونی وابسته به مختصات سمتی باشد در آن صورت MFT نمی تواند تقریب خوبی برای چنین سیستمی باشد.

$$\hat{H}= \hat{H}_0+\Delta\hat{H} \qquad (۳-۱)$$

پایه اساسی MFT بر اصل "Bogoliubov inequality" [۳۰] در نظریه میدانها استواراست و آن اظهار می دارد که انرژی آزاد یک سیستم با چنین هامیلتونینی دارای یک حد بالا بوده و میانگین گیری روی آنسامبلی از سیستم های مشابهی که هر کدام دارای هامیلتونین بالا می باشند ،انجام گرفته است .

همانطور که گفته شد روش MFT پایه و مبنای اولیه روشهای دیگر برای حل مسائل در بسیاری از شاخه های فیزیک می باشد ؛ دراینجا از ادامه بحث صرفنظر کرده و فقط به موضوع مرتبط با تز خواهیم پرداخت .

رهیافت ماتریس چگالی

روش[۳۱] [1,20]ما حل مسئله محاسبه رسانندگی بر اساس روش " تئوری ماتریس چگالی " می باشد، قبل از اینکه به معرفی این روش بپردازیم ذکراین نکته لازم است ، با وجود اینکه این روش شناخته شده-ترین و پرکاربرد ترین روش در تئوری ماده چگال می باشد [۲۱] ، لذا از اینرو مناسب است که هم بدلیل فوق الذکر و هم بدلیل دور نشدن از مطلب موضوعات مربوط به این پایان نامه شامل بخشهایی ازفصل "۲" مرجع [1] وفصل "۵" مرجع [20]عینا در زیر آورده شوند.

۳۰ نامساوی بوگلیبوف

31 Density Matrix Formalism

ماتریس چگالی

ما آنسامبلی[۳۲] را از N سیستم یکسان در نظر می گیریم ، که $N>>1$ است. این سیستم ها با یک هامیلتونی (یکسان) مشخص می شوند، که با عملگر $\hat{H}$ نمایش داده می شود. در زمان t ، حالتهای پایه سیستم های مختلف در آنسامبل را می توان با ویژه توابع $\psi(r_i,t)$ مشخص کرد ، که در آن r_i نشان دهنده مختصات مکانی نسبت به سیستم تحت مطاالعه می باشد . اجازه دهید $\psi^k(r,t)$ که نمایشگر ویژه توابع (بهنجار شده) مشخصه حالت فیزیکی باشد که برای سیستم kام آنسامبل در زمان t رخ داده است ، طبیعتا

$$k=1,2,...N \qquad (۳-۲)$$

خواهد بود . تغییرات زمانی تابع $\psi^k(t)$ با معادله شرودینگر زیر نمایش داده خواهد شد

(۳-۳)

H هامیلتونی سیستم می باشد. حال یک مجموعه متعامد بهنجار از توابع ϕ_n را معرفی می کنیم ، توابع $\psi^k(t)$ را ممکن است به صورت زیر نوشت :

(۳-٤)

که در آن :

(۳-۵)

در اینجا ϕ_n^* نشان دهنده مزدوج مختلط ϕ_n است درحالی که $d\tau$ نمایش دهنده عنصرحجمی از فضای مختصات سیستم داده شده می باشد.

32 Ensemble

آشکارا حالت فیزیکی سیستم k ام را می توان بخوبی برحسب ضرایب $a_n^k(t)$ توصیف کرد .تغییرات زمانی این ضرایب با رابطه زیر داده می شود :

(۳-۶)

که در آن (۳-۷)

اهمیت ضرایب $a_n^k(t)$ از رابطه (۳-٤) آشکار می شود.آنها دامنه های احتمال برای سیستم های گوناگون آنسامبل هستند که در حالت های مختلف ϕ_n می باشند. عملا عدد $|a_n^k(t)|^2$ نمایشگر احتمال اینکه با اندازه گیری در زمان t سیستم k ام آنسامبل را در حالت خاص ϕ_n یافت ، می باشد . آشکارا باید داشته باشیم :

(۳-۸)

هم اکنون عملگر چگالی $P_{nn}(t)$ را که با عناصر ماتریسی زیر تعریف می شود :

(۳-۹)

آشکاراعنصر ماتریسی $P_{nn}(t)$،میانگین آنسامبلی کمیت $a_m(t)\, a_n^*(t)$ می باشد ، که قانونا، ازعضوی به عضو دیگر در آنسامبل تغییر می کند . بویژه عنصر قطری $\rho_{nn}(t)$ میانگین آنسامبلی احتمال " $|a_n(t)|^2$ " می باشد .

کمیت اخیر خودش یک میانگین کوانتومی می باشد . بنابراین با یک فرآیند میانگین گیری دوگانه مواجه هستیم، که یکی وابسته به دیدگاه احتمالاتی ویژه توابع ودیگری وابسته به دیدگاه آماری آنسامبل می باشد. حال کمیت $\rho_{nn}(t)$ را بررسی می کنیم که نشان دهنده احتمال اینکه یک سیستم (که بطور کتره ای در آنسامبل انتخاب شده است) در زمان t در حالت ϕ_n یافت شود ، می باشد . با توجه به معادلات (۸-۳) و (۹-۳) داریم :

(۱۰-۳)

ما باید معادله حرکت ماتریس چگالی $P_{nn}(t)$ را مشخص کنیم . با معادلات پیش رو آن را بدست می-آوریم ،

(۱۱-۳)

در اینجا از مشخصه هرمیتی عملگر $\hat{H}$ استفاده شده است $\hat{H}_{nl}{}^{*} = \hat{H}_{nl}$. با استفاده از خلاصه نویسی جابجاگرها معادله (۹) را می توان به صورت زیر نوشت :

(۱۲-۳)

حال اگرسیستم شناخته شده درحالت تعادل باشد ، آنسامبل مختص آن نیز باید پایا باشد، یعنی اینکه :

$$d/dt\ \rho_{mn} = 0 \ .$$

معادلات (۱۱-۳) و(۱۲-۳) فقط دلالت بریک چیز دارند وآن اینکه اولا تابع چگالیP باید تابع صریحی از عملگر هامیلتونی $\hat{H}$ باشد (بنا براین دو عملگر باید جابجا شوند) و ثانیا هامیلتونی نباید به طورصریح به زمان وابسته باشد . یعنی اینکه باید داشته باشیم :

اولا $P\hat{H} = \hat{H}\ P$ و ثانیا $d/dt\ \ \hat{H} = 0$. حال اگر ϕ_n ها که فقط ویژه توابع هامیلتونی بودند در این صورت ماتریس چگالی و هامیلتونی در این نمایش قطری خواهند بود :

(۱۳-۳)

توجه شود که دراین نمایش (که نمایش انرژی خوانده می شود) عملگر چگالی را می توان به صورت زیر نمایش داد :

(۱۴-۳)

(۱۵-۳)

عنصر قطری ρ_{nn} یک اندازه گیری از احتمال سیستمی(که بطور کتره ای در زمان t از آنسامبل انتخاب شده است) می باشد که درویژه حالت ϕ_n یافت می شودو بطور طبیعی وابسته به ویژه حالت متناظر E_n هامیلتونی را دارد، با وجود این طبیعت دقیق این وابستگی بوسیله "نوع" آنسامبل مشخص می شود که می خواهیم بسازیم.

در هر نمایش بغیر ازانرژی ، ماتریس چگالی ممکن است قطری نباشد. با وجود این اساسا متقارن خواهد بود:

(۳-۱۶)

علت فیزیکی این تقارن دراین است در"تعادل آماری"، تمایل سیستمی که ازیک حالت(در نمایش جدید) به حالت دیگر می خواهد برود باید با تمایل حرکتی سیستمهای دیگر (درون آنسامبل) که در جهت خلاف می خواهند حرکت کنند ، تنظیم شود . این شرط تنظیم جزء به جزء برای حفاظت از توزیع درون آنسامبل ضروری است .در نهایت ما مقدار چشمداشتی یک کمیت فیزیکی G را در نظر می گیریم ، که بطور دینامیکی با یک عملگرG نمایش داده می شود . این امر با رابطه زیر داده می شود :

(۳-۱۷)

که برحسب ضرایب a_n^k داریم ،

(۳-۱۸)

که در آن

(۳-۱۹)

با وارد کردن عملگر چگالی معادله (۱۵) به شکل زیر در می آید

(۳-۲۰)

اگر $\hat{G}=1$ باشد

(۳-۲۱)

که همان رابطه (۳-۱۰) می باشد. باید توجه کرد که اگر ویژه توابع ψ^k که بهنجار شده اند ومقدار چشمداشتی $<G>$ که با رابطه زیر داده می شود :

(۳-۲۲)

از دیدگاه ساختار ریاضی فرمولهای (۳-۲۰) و (۳-۲۲) ، که مقادیر چشمداشتی کمیت فیزیکی G می باشند اساسا مستقل ازانتخاب پایه $\{ \phi_n \}$ می باشند ، که باید همین گونه هم باشد.بنابراین با دانستن ماتریس چگالی می توانیم کمیت های فیزیکی دیگر را حساب کنیم . در زیر به معرفی روش رهیافت ماتریس چگالی برای حل یک مسئله می پردازیم .

گاز الکترون آزاد در دو بعد

هامیلتونی سیستم چند ذره ای به صورت زیر در می آید :

(۳-۲۳)

که در آن $\psi(r,t)$ تابع موج سیستم چند ذره ای می باشد (از اسپین الکترونها صرفنظر کرده ایم).

هامیلتونی H باید شامل تمام بر هم کنشهایی باشد که در آن الکترون ها نقش دارند . این معادله در واقع شامل چندین معادله دیفرانسیل جفت شده با هم می باشد که در نتیجه حل آن پیچیده می باشد . روشهای تقریبی مناسبی برای ساده سازی و حل این معادلات موجود می باشند ، مثلا اثرات بر هم کنش یونهای

شبکه با الکترونها را با وارد کردن جرم موثر در معادله فوق لحاظ می کنیم ، در نتیجه هامیلتونی فوق به صورت دو جمله یکی شامل جمع هامیلتونی تک ذره ای الکترونها و دیگری مربوط به برهم کنش الکترون-الکترون ، کل الکترونها در می آید .

(۳-۲۴)

H_0 هامیلتونی مربوط به جمع هامیلتونی تک ذره ای الکترونها و H_{ee}هامیلتونی برهم کنش الکترون-الکترون بین کل الکترونهای سیستم مورد نظر می باشد .اگر میدانهای خارجی وجود نداشته باشند H_0 را می توان بر حسب حالتهای تک الکترونی بسط داد :

(۳-۲۵)

که در آن $\{p_i\}$ عملگر های تگانه تک الکترونی می باشند. درحضور میدان تابشی تحت تاثیر میدان مغناطیسی ناشی از این میدان که بوسیله پتانسیل برداری $A(r,t)$ نمایش داده می شود ، H_0 به شکل زیر درمی آید ،

(۳-۲۶)

که در آن $\{r_i\}$ مختصات الکترونها e بار الکتریکی الکترون و c سرت نور در خلا می باشند . و قسمت الکترون-الکترون هامیلتونی به فرم زیر درمی آید ،

(۳-۲۷)

در غیاب میدان خارجی معادلات موج ذره آزاد بصورت ویژه توابع تک الکترون آزاد بسط داده می-شوند ،

(۳-۲۸)

در بنداشت کوانتش ثانی ، $a_k(t)$ ، $a_k^+(t)$ عملگرهای فنا و خلق یک الکترون در زمان t با حالت k را به نمایش می گذارند .در اینجا اسپین الکترون به منظور سادگی لحاظ نگردیده است .روابط پادجابجایی زیرین در مورد عملگرهای بنداشت کوانتش ثانی برقرار می باشند :

(۳-۲۹)

(۳-۳۰)

عملگرهای میدان $\psi(r,t)$ و $\psi^+(r,t)$ الکترونها را در زمان t در موقعیت r فنا یا خلق می کنند . آنها روابط پادجابجایی زیر را برای فرمیونها ارضا می کنند :

(۳-۳۱)

(۳-۳۲)

رابطه (۳-۲۵) بصورت زیر درخواهد آمد ،

(۳-۳۳)

که در اینجا عملگرهای $a_k(t)$ ، $a_k^+(t)$ نمایانگر تعدادالکترونهای موجود درتراز با با بردار موج k می-باشند . برای قسمت برهم کنش الکترون – الکترون داریم :

(۳-۳۴)

که در ان V_q تبدیل فوریه پتانسیل کولنی می باشد ،

(۳-۳۵)

حال عملگرهای کوانتش ثانی رابطه (۲۸-۳) را در رابطه (۳۴-۳) جایگذاری می کنیم :

(۳-۳۶)

(۳-۳۷)

در نتیجه خواهیم داشت :

(۳-۳۸)

در غیاب میدانهای خارجی هامیلتونی رابطه (۲۴-۳) به شکل زیر درمی آید :

(۳-۳۹)

ماتریس چگالی تک الکترونی

عملگر چگالی تک ذره ای (الکترون) به صورت زیر تعریف می شود :

(۳-۴۰)

با استفاده از ویژه بردارهای تک ذره ای که خود متعامد بهنجار می باشند ، داریم ،

(۳-۴۱)

مقدار چشمداشتی تبدیل فوریه عملگر چگالی به شکل زیر خواهد بود :

(۳-۴۲)

مقدار چشمداشتی یک مشاهده پذیر A را که خود عملگر هرمیتی می باشد را می توان بوسیله عملگر چگالی $\rho(r,t)$ بدست آورد ، مقدارچشمداشتی A را می توان از طریق میانگین گیری آماری آنسامبلی ازسیستم الکترونها که خود با میانگین گیری کوانتوم روی حالت هر سیستم موجود در آنسامبل همراه است، بدست آورد :

(۳-۴۳)

که در آن "< > " نمایانگر میانگن گیری آماری روی آنسامبل بوده و A_{nm} عنصر ماتریس A در پایه $\{\phi_n(r)\}$ می باشدکه خود میانگین کوانتوم مکانیکی به صورت زیر می باشد :

(۳-۴۴)

ماتریس چگالی تک الکترون با عنصر ماتریسی زیر تعریف می شود ،

(۳-۴۵)

عضوقطری ماتریس چگالی یعنی $< a_n^+(t)\, a_n(t) >$، تعداد حالتهای اشغال شده حالات متناظررا نشان می دهد. حال با جایگذاری رابطه (۲۳) در رابطه (۲۱) داریم :

(۳-۴۶)

این معادله خیلی مفید است چونکه بر حسب پایه ای که آن را بدست آوردیم بستگی ندارد .

عنصر ماتریس چگالی در نمایش فضای تکاه بصورت زیر می باشد :

(۳-۴۷)

ارزشمند است که اشاره ای داشته باشیم مبنی بر اینکه عملگرهایی که در رابطه (۲۴) نمایش داده شدند در تصویر شرودینگر می باشند . معادله حرکت ماتریس چگالی تحت هامیلتونی H بصورت زیر در می آید :

(۳-۴۸)

که این رابطه معادل کوانتوم مکانیکی رابطه لیوویل در مکانیک کلاسیک می باشد .

چگالی حالات گاز الکترونی دو بعدی

چگالی [۱] حالات $D(E)$ ، تعداد حالات در دسترس الکترونی می باشند که انرژی آنها کمتر از ε بر واحد سطح بر واحد انرژی می باشند .

چگالی حالات را می توان به صورت زیر نوشت :

(۳-۴۹)

که در آن :

(۳-۵۰)

شیمیایی ، k_B ثابت بولتزمن است . بردار موج متناظر الکترون متحرک در صفحه دو بعدی در فضای تکانه تابع توزیع فرمی-دیراک یا احتمال اینکه آن حالات به چه مقداری پر خواهند شد می باشد . در اینجا μ پتاسیل نیز در دو بعد قرار خواهد گرفت .ناحیه متناظر در فضای تکانه ، به ازای هرحالت الکترونی که در دو بعد و مثلا در ابعاد L^2 حرکت می کند ، برابر با $2\pi/L^2$ خواهد بود .چگالی حالات طیف پیوستار الکترون آزاد با ضریب تبهگنی g_v عبارت است از :

(۳-۵۱)

که درآن ضریب "۲" به منظورشمارش اسپین الکترون منظور گردیده است.صرفنظر از برهم کنش های کولنی بین الکترونها و اثر میدانهای خارجی ، انرژی های متناظر با یک تک زیر نوار الکترون آزاد دو

بعدی در یک نانو ساختار بوسیله رابطه زیر بدست می آیند :

(۳-۵۲)

چگالی حالات متناظر با این زیر نوار تنها، عبارت است از :

(۳-۵۳)

که در آن $\Theta(\varepsilon)$ تابع پله ای "هوی ساید" می باشد . چگالی کل حالات سیستم با انرژی ε از جمع روی چگالی حالات زیر نوارهای اشغال شده بدست می آید ،

(۳-۵۴)

که در آن ε_n انرژی الکترونهای داخل زیر نوار n ام می باشد . برای حل معادله (۲۶) ناچاریم به منظور تبدیل روابط دیفرانسیلی به روابط جبری تبدیل فوریه عبارات لازم را بدست آوریم ؛

(۳-۵۴)

(۳-۵۵)

(۳-۵۶)

در این حالت در معادله (۲۶) با عباراتی بصورت زیر برخورد خواهیم کرد :

(۳-۵۷)

و یا :

(۳-۵۸)

و داریم :

(۳-۵۹)

در تقریب RPA معادله فوق به شکل زیر در می آید :

(۳-۶۰)

با استفاده از "تقریب فاکتورگیری" یا جایگذاری مقدار چشوداشتی چهار مولفه ای با با حاصلضرب دو

تا مقدارچشمداشتی دو مولفه ای معادله حرکت در تصویر هایزنبرگ برای ماتریس چگالی "سیستم تک الکترونی" بهصورت زیر می باشد :

(۳-۶۱)

که می توان آن را به شکل زیر نوشت :

(۳-۶۲)

اگربعنوان یک فرض، بستگی $F(k,k+q)$ را به زمان بصورت $\exp[-i(\omega+i\delta)]$ خطی بدانیم، خواهیم داشت :

(۳-۶۳)

در دیدگاه RPA جملاتی که $q \neq q'$ باشند حذف خواهند شد . حال فرم توزیع فرمی-دیراک را جایگزین عناصر ماتریسی در تقریب RPA می کنیم :

(۳-۶۴)

و (۳-۶۵)

بخشی از عبارت (۴۱) را می توان به شکل زیر در می آید :

(۳-۶۶)

با $\delta \to 0$ می توان ویژه فرکانسهای سیستم را بدست آورد . حال هامیلتونی به شکل زیر درمی آید :

(۳-۶۷)

که در آن $V(q,t)$ تبدیل فوریه انرژی پتانسیل موثر می باشد . برای $n(q,t)$ داریم :

(۳-۶۸)

تابع پلاریزاسیون الکترونهای آزاد را معرفی می کنیم :

(۳-۶۹)

تبدیل فوریه $\rho(q,\omega)$ به شکل زیر می باشد ،

(۳-۷۰)

حال با استفاده از روابط تبدیل فوریه $q^2\phi(q,\omega)=4\pi\rho(q,\omega)$ برای لاپلاسین و $V_q=4\pi e^2/q^2$ برای پتانسیل ، شکل انرژی پتانسیل القایی به صورت زیر در می آید :

(۳-۷۱)

تابع دی الکتریک گاز الکترونی که بصورت V_{ext}/V تعریف می شود فرم زیر را خواهد داشت :

(۳-۷۲)

عملگر چگالی جریان

در[۱] اینجا برای مثال عملگر ماتریس چگالی جریان رابرای گازالکترونی دو بعدی بررسی می کنیم؛

عملگر چگالی جریان کل را می توان از معادله پیوستگی و یا از مشتق نسبت به هامیلتونی سیستم ،H ،

نسبت به پتانسیل برداری A(t) استخراج کرد ،

(۳-۷۳)

برای یک سیستم گاز الکترونی دو بعدی در حضور میدان الکترومغناطیسی تنها جمله هامیلتونی که به

A وابسته است عبارت است از :

(۳-۷۴)

بنا بر این عملگر چگالی شامل دو مولفه خواهد بود :

(۳-۷۵)

با استفاده از عملگرهای میدان :

(۳-۲۸)

می توانیم عملگر چگالی جریان را به فرم کوانتش ثانی بنویسیم ، زمانی که پتانسیل برداری کل فقط

وابستگی زمانی داشته باشد . خواهیم داشت :

(۳-۷۶)

عملگر چگالی جریان در نمایش فضای اندازه حرکت از طریق تبدیل فوریه چگالی جریان در فضای نمایش مختصات بدست می آید .

(۳-۷۷)

میانگین ترمودینامیکی عملگر چگالی جریان را می توان بصورت زیر نمایش داد

(۳-۷۸)

که در آن n چگالی الکترون دوبعدی می باشد .اولین جمله درطرف راست معادله فوق به پراکندگی الکترونها سیستم وابسته است و شامل تمام برهم کنشها می باشد . جمله دوم چگالی مستقل از جریان پراکندگی می باشد .

فصل چهارم

رسانندگی الکترونها در نانوسیم نیمرسانا

تحت اثر تابش الکترومغناطیسی

۴-۱ بدست آوردن حالتهای الکترونی تابع موج ۴۶

۵-۲ Density Matrix ۵۵

۴-۳ رسانندگی ۶۰

۴-۴ محاسبات عددی ۶۷

بدست آوردن حالتهای الکترونی تابع موج

برای آغاز [۱] کاررهیافت عملی استفاده ازویژه توابع تک الکترون محصوردر یک چاه به طول بی نهایت و دارای پتانسیل دیواره ای $1/2KY^2$ می باشد که این پتانسیل بسیار شبیه پتانسیل مربوط به "تابع کار" الکترون در فلزات می باشد ، جوابهای مربوطه برای قسمت طولی بصورت توابع موج الکترون آزاد و برای قسمت عرضی ویژه توابع هرمیت خواهند بود ، آشکار است که تاثیر یونها بر حرکت الکترون با تعیین جرم موثر الکترون اعمال گردیده است برای احتساب تاثیر فوتونها میدان لیزری را از طریق پتانسیل برداری به شکل زیر وارد مسئله می کنیم :

(۴-۱)

$A_\Upsilon(t)$ پتانسیل برداری وابسته به فوتون میدان لیزری ، $E_\Upsilon(t)$ دامنه میدان لیزری ، c سرعت نور، ω فرکانس میدان لیزری ، e_x بردار یکه در راستای محور x و t پارامتر زمان و x و y مختصه مکانی می باشند ؛ شکل هامیلتونی تک الکترون بصورت زیر خواهد بود :

(۴-۲)

H_{se} هامیلتونین تک الکترون ، p_x تکانه الکترون در راستای محور x ، p_y تکانه الکترون در راستای محور y ، m^* جرم موثر الکترون ، e بار الکتریکی الکترون ، ω_0 فرکانس ذاتی قطعه مربوط به پتاسیل محدود کننده حرکت الکترون در راستای محور y ؛ و معادله مکانی زمانی شرودینگر مربوطه :

(۴-۳)

$\psi(x,y,t)$ تابع موج الکترون در بلور در حضور میدان لیزری و $\hbar$ ثابت پلانک بخش بر 2Π می باشد .

این رابطه در عدم حضور میدان لیزری به شکل زیر می بود :

(۴-۴)

$\phi(x,y,t)$ تابع موج الکترون در بلوردرعدم حضور میدان لیزری می باشد ؛ که دارای جواب عمومی :

(۴-۵)

$\xi_n(y)$ ویژه تابع هامیلتونین الکترون در غیاب میدان مغناطیسی و محدودیت اعمال شده در راستای y ، k_x بردار موج الکترون در راستای x ، $\varepsilon_{kx,n}$ ویژه مقادیر هامیلتونین الکترون در راستای محور x با بردار موج k_x وعدد کوانتومی n و L طول بلوردر راستای محور x است؛ شکل صریح ویژه تابع قسمت عرضی بصورت:

(۴-۶)

H_n تابع هرمیت مرتبه n ام می باشد ؛ وطیف ویژه مقادیر انرژی بصورت زیر خواهد بود :

(۴-۷)

حال برای بدست آوردن جوابهای عمومی معادله شرودینگرباحضور میدان لیزری با استفاده از تبدیل

یکانی : (۴-۸)

رابطه بین معادلات شرودینگر بین قبل و بعد از اعمال میدان لیزری به شکل زیر خواهد بود :

(۴-۹)

پس از ساده سازی و برابر قرار دادن ضرایب جملات یکسان از دو طرف معادله بدست می آوریم :

(۴-۱۰)

(۴-۱۱)

با حل معادلات دیفرانسیل فوق جواب ها به صورت زیر خواهند بود :

(۴-۱۲)

(۴-۱۳)

که در آن :

(۴-۱۴)

(۴-۱۵)

بنابر این ویژه توابع الکترونی در حضور تابش بصورت زیر خواهند بود :

(۴-۱۶)

با بسط ویژه توابع دستگاه بس ذره ای در رهیافت کوانتش ثانی بر پایه ویژه توابع الکترونی در حضور تابش به دست می آوریم،

(۴-۱۷)

$\alpha_{kx,n}(t)$ دامنه تابع موج الکترون با بردار موج k_x و عدد کوانتومی n مربوط به ویژه بردارهای هامیلتونی تک الکترون در حضورمیدان لیزری می باشد رابطه دوم ترانهاده رابطه قبلی می باشد .

می توان ویژه توابع دستگاه بس ذره ای را بر پایه ویژه توابع الکترونی در غیاب تابش نیز بسط داد،

(۴-۱۸)

$b_{kx,n}(t)$ دامنه تابع موج الکترون با بردار موج k_x و عدد کوانتومی n مربوط به ویژه بردارهای هامیلتونی تک الکترون در غیاب میدان لیزری می باشد رابطه دوم ترانهاده رابطه قبلی می باشد .

در یک دستگاه فرمیونی برای عملگرهای میدان داریم :

(۴-۱۹)

که در آن $\delta(r-r')$ تابع دلتای دیراک نسبت به مختصات مکانی می باشد .

ارتباط پایه قدیم با پایه جدید از طریق رابطه زیر قابل حصول است :

(۴-۲۰)

می توان اثرات میدان الکتریکی منتج ازاعمال ولتاژ بین ابتدا و انتهای نمونه و نیز برهم کنش بین الکترون-الکترون و الکترون-یون را در حضور تابش محاسبه نمود.

آشکار است که شکل کلی هامیلتونی بصورت زیر بخش پذیر می باشد:

(۴-۲۱)

H_0 هامیلتونی تک الکترون آزاد در بلور می باشد که تلویحا در راستای y پتانسیل نوسانگر هماهنگ را به الکترون اعمال کرده و در راستای x پتانسیل میدان لیزری و پتانسیل میدان آزمون(Probe) اعمال می شود ، اثرات برهم کنش الکترون با یونهای شبکه از طریق ضریب جرم موثر الکترون منظور می-گردد و H_{ee} هامیلتونی برهم کنش الکترون - الکترون و H_{eI} هامیلتونین بر هم کنش الکترون با یون اتم ناخالصی درون شبکه بلوری می باشد ، H هامیلتونی کل الکترون که قیدی در راستای y بر حرکت آن اعمال می شود و لیزر عمود بر راستای x بر سطح نمونه می تابد و میدان الکتریکی در راستای x تولید می کند و نیز میدان الکتریکی که از طریق اعمال اختلاف پتانسیل بین دو انتهای میله (قطعه) اعمال شده ، و با یونهای اتمهای ناخالصی و الکترونهای دیگربرهم کنش می کند .می توانیم اثر میدان الکتریکی اعمالی را از طریق پتانسیل برداری به شکل زیر وارد معادلات کنیم :

(۴-۲۲)

Ω فرکانس میدان آزمون و E دامنه آن میدان می باشد ، $A(t)$ پتانسیل برداری همان میدان هست .

هامیلتونی الکترون آزاد بدون برهم کنش در پایه های جدید وقدیم از طریق رابطه زیر نمایان می شود :

(۴-۲۳)

(۴-۲۴)

محاسبه جملات برهم کنشی الکترون - الکترون و الکترون-یون از اهمیت خاصی برخوردارند . یونهای ناخالصی ها/اثرات یونهای عادی قبلا از طریق جاگذاری جرم موثر بجای جرم الکترون در هامیلتونی منظور گردیده است ، فرض بر این بوده که سیستم همسانگرد می باشد.

بر هم کنش الکترون-الکترون از طریق جمله زیر قابل محاسبه می باشد :

(۴-۲۵)

مختصات r و r' موقعیت مکانی الکترونهای واقع در موقعیتهای r و r' می باشند ؛ که در آن :

(۴-۲۶)

V_q دامنه پتانسیل برهم کنش دو الکترون و یا تبدیل فوریه پتانسیل برهم کنش دو الکترون نسبت به بردار موج q می باشد ؛ و یا :

(۴-۲۷)

با جایگذاری شکل صریح ویژه توابع الکترونی بر حسب بردارهای پایه به رابطه زیر می رسیم :

(۴-۲۸)

اندیس ۱ مر بوط به الکترون ۱ و اندیس ۲ مربوط به الکترون ۲ و متغیرهای پریم دار مربوط به مقادیر بعد از برخورد و متغیرهای بدون پریم مربوط به مقادیر قبل از برخورد می باشند و مقدار q_x در طی فرآیند برخورد از تکانه ذره ۱ در راستای x کم شده و به تکانه ذره ۲ در همان راستا اضافه گردیده است ؛ که در آن از رابطه تعامد زیر بهره جسته ایم :

(۴-۲۹)

برای راحتی انجام محاسبات بعدی تابع $M_{nn'}(q_y)$ را تعریف می کنیم :

(۴-۳۰)

اعداد $n_<$ مربوط به عدد کوانتومی کوچکتر ، $n_>$ مربوط به عدد کوانتومی بزرگتر بردار موج الکترون در راستای y بلور می باشد ؛ که در آن :

(۴-۳۱)

تابع وابسته لاگور می باشد .

دراین صورت هامیلتونی الکترون-الکترون شکل ساده تر زیر را خواهد داشت:

(۴-۳۲)

به همین ترتیب هامیلتونی برهم کنش الکترون-یون به شکل زیر خواهد بود :

(۴-۳۳)

R_i مختصه مکانی یون اتم ناخالصی i ام و Z درجه یونش یونهای اتمهای ناخالصی می باشد؛ و شکل صریح آن بر حسب ویژه توابع به صورت زیر می باشد :

(۴-۳۴)

پس از ساده سازی خواهیم داشت :

(۴-۳۵)

حال که شکل کلی هامیلتونی بدست آمده است راه برای بدست آوردن پارامترهای مشخصه سیستم الکترونی هموار می باشد گرچه همچنان مسائلی در پیش رو می باشند ، برای چگالی جریان داریم :

(۴-۳۶)

چگالی جریان را با j نمایش می دهیم ؛ و یا :

(۴-۳۷)

نامگذاری :

می توان با جداسازی رابطه بالا را به مجموع سه بخش زیرین تقسیم نمود. اولین عبارت جمله مربوط به جریان ناشی از میدان لیزری در سیستم مورد مطالعه می باشد .

(۴-۳۸)

در عبارت بالا n چگالی الکترونها می باشد.

جمله بعدی در رابطه با حرکت الکترونی ناشی از اعمال ولتاژ (میدان آزمون) در دو سر نمونه خواهد بود .

(۴-۳۹)

در بالا σ_0 معرف رسانندگی درود می باشد ؛ وسرانجام این جمله نشانگرعبارت مربوط به حرکت ذاتی الکترونهادرغیاب میدانهای لیزری و(آزمون)می باشد.

(۴-۴۰)

چگالی جریان j_γ و میدان لیزری E_γ در یک راستا بوده ولی به اندازه $\pi/2$ دارای اختلاف فاز بوده ، بنابران j_γ یک جریان واکنشی بوده و نمی تواند سهمی در جذب داشته باشد . چگالی جریان j_0 ، یعنی جریان کل ناشی از اعمال میدان آزمون E(t) ،نمایانگر هدایت "درود / Drude " است.اثرات واکنش-های الکترون – الکترون، الکترون - یون (ناخالصی)، و همچنین گذارهای "کنار نواری" (side band) واسطه چگالی جریان j_1 در جریان الکترونی کل سهیم خواهند بود .

۴-۲ Density Matrix/ تحول زمانی ماتریس چگالی

چگالی [۱] جریان j_1 را می توان با بدست آوردن ماتریس چگالی سیستم در فضای تکانه بدست آورد . ماتریس چگالی الکترونی را می توان از طریق زیر بدست آورد :

(۴-۴۱)

عنصر n′ و n ماتریس چگالی $n_{n'n}$ می باشد که نشان می دهد دامنه احتمال فنای یک الکترون با عدد کوانتومی n و بردار موج k_x در راستای محور x و بردار موج k_y در راستای محور y و تولید یک الکترون با عدد کوانتومی n′ و بردار موج k_x+q_x در راستای محور x و بردارموج k_y در راستای محور y چقدرمی باشد؛معرفی می کنیم:

(۴-۴۲)

$F_{n'n}(k_x+q_x,k_x)$ بخش طولی مولفه n′n تابع چگالی می باشد . و

(۴-۴۳)

شایان ذکر است که بجز عملگرهامیلتونی که اندیس صفر آن مربوط به حالت عدم وجود میدانهای برهم کنشی الکترون - الکترون و الکترون-یون می باشد بعد از این اندیس صفر در تمامی عملگرها نشان دهنده فرم نمایش آنها بر حسب ویژه بردارهای جدید و بدون داشتن اندیس صفر نشان دهنده نمایش آنها بر حسب ویژه بردارهای حالت قدیم (ویژه بردارهای مربوط به الکترون در غیاب میدان برهم کنشی لیزر و میدان آزمون خواهد بود) ؛ که خواهیم داشت :

(۴-۴۴)

دیدیم که فقط دو جمله برهم کنش الکترون-الکترون و اثرات ناخالصی ها روی حرکت الکترونی دارای برآورد غیر صفری روی جریان الکتریکی می باشند ، بدین منظوربه محاسبه تابع چگالی جریان القایی می پردازیم :

(۴-۴۵)

داریم :

(۴-۴۶)

که از تعریف زیر بهره جسته ایم :

(۴-۴۷)

برای حل مسئله نخست باید به محاسبه عبارت زیر بپردازیم :

(۴-۴۸)

مسئله محاسبه عبارت بالا و بدست آوردن شکل ساده و جمع و جور دارای اهمیت بالایی بوده و نیازمند دقتی مضاعف می باشد . روابط پاد جابجایی زیرین بر فضای عملگرهای خلق و فنا حاکم می باشند :

(۴-۴۹)

(۴-۵۰)

(۴-۵۱)

(۴-۵۲)

در محاسبات به عباراتی برخورد می کنیم که باید با استفاده از روابط پادجابجایی فوق الذکر ساده سازی شوند که به یک نمونه از آنها در ذیل اشاره می شود :

(۴-۵۳)

در محاسبات بعد از شکستن عبارات فوق الذکر به فرم هایی همچون عبارات زیر برخورد می کنیم :

$$\bullet$$

(۴-۵۴)

و یا :

$$\Gamma \quad \lambda$$

(۴-۵۵)

بطور مثال عبارت (۵۳) در ساده ترین حالت به شکل زیر تبدیل خواهد شد :

$$\blacksquare$$

(۴-۵۶)

با اعمال تقریب RPA[32] [22] تقریب فاز کاتوره ای جمله آخر حذف شده به صورت ذیل تقلیل خواهد یافت :

(۴-۵۷)

نیز با اعمال تقریب فاکتور گیری[33][21] می توانیم ساده سازی بیشتری انجام دهیم ، دراین حالت گزاره-های چهارعضوی مقدار چشمداشتی به حاصلضرب مقدار چشمداشتی دو گزاره دو عضوی تبدیل می-شوند ، معادله به شکل زیر در می آید :

(۴-۵۸)

درنهایت برای قسمت شامل برهم کنش الکترون - الکترون که دارای پیچیده ترین محاسبات بود رابطه زیر بدست می آید ، در طی محاسبات نهایت ساده سازی با استفاده از کمی اعمال تغییرات در اندیسها و تعاریف عناصر تابع چگالی انجام گردیده است :

(۴-۵۹)

32 Random Phase Approximation
33 Factorization Approximation

عملیات مشابهی برای بدست آوردن جملات مربوط به عناصر برهم کنش الکترون – اتم ناخالصی و جمله مربوط به الکترون آزادعملگر هامیلتونین خواهیم داشت و در نتیجه تغییرات عناصر قطری ماتریس چگالی از رابطه زیر قابل محاسبه می باشد :

(۴-۶۰)

که در آن :

(۴-۶۱)

۴-۳ محاسبه رسانندگی

حال [۱] که عناصر ماترس چگالی مشخص شدند می توانیم کمیتهای دیگر فیزیکی من الجمله چگالی جریان را محاسبه کنیم . برای قسمت غیر صفر چگالی جریان خواهیم داشت :

(۴-۶۲)

با توجه به اینکه $n^*(q,t) = n(-q,t)$ و اینکه V_q به راستای q وابسته نمی باشد داریم :

(۴-۶۳)

در نهایت به فرم ساده زیر خواهیم رسید :

(۴-۶۴)

حال برای اینکه بتوانیم عبارات دیفرانسیلی را به عبارات جبری تبدیل کنیم تبدیل فوریه عبارات فوق را انجام می دهیم .

(۴-۶۵)

عبارت فوق یک اتحاد جبری می باشد که برای بسط جمله $\sum_i e^{-iq.R_i}$ از آن سود خواهیم برد .

(۴-۶۶)

(۴-۶۷)

(۴-۶۸)

(۴-۶۹)

(۴-۷۰)

(۴-۷۱)

(۴-۷۲)

(۴-۷۳)

(۴-۷۴)

(۴-۷۵)

(۴-۷۶)

(۴-۷۷)

اگر به رابطه ۶۰ توجه کنیم می بینیم که برای بدست آوردن چگالی حالات باید آنها داشته باشیم و بنابراین، این مسئله رافقط با تقریب می توان حل کرد پس مسئله رااول بدون حضور میدان الکتریکی آزمون (probe) حل کنیم و بعد میدان فوق الذکر را بصورت یک اختلال وارد مسئله کنیم ؛ پس اول فرض می-کنیم که $E=0$ باشد . معادله (۶۰-۴) بصورت زیر در خواهد آمد :

(۴-۷۸)

رابطه عناصرماتریس چگالی الکترونهای حالت پایه و الکترونهای درحضور میدان لیزری به شکل زیر می باشد:

(۴-۷۹)

می دانیم که در تقریب فاز کاتوره ای داریم :

(۴-۸۰)

(۴-۸۱)

با اعمال تقریب فوق و استفاده از رابطه (۴-۷۹) و روابط تعامد ویژه توابع بسل و جمع زنی روی حالات رابطه (۴-۷۸) به شکل زیر تبدیل می شود :

(۴-۸۲)

تعاریف زیر را داریم :

(۴-۸۳)

(۴-۸۴)

با جمع زنی روی حالات و استفاده از خاصیت تعامد ویژه توابع بسل به رابطه زیر می رسیم :

(۴-۸۵)

عناصر ماتریس چگالی در تقریب مرتبه اول الکترون با یون به شکل زیر می باشند :

(۴-۸۶)

حال میدان آزمون را روشن می کنیم ($E\neq 0$) با جاگذاری رابطه حاصل رابطه ۸۶ در رابطه ۶۰

تقریب مرتبه دوم عناصر ماتریس چگالی بصورت زیر می باشند :

(۴-۸۷)

برای بدست آوردن چگالی جمع زنی روی حالات را انجام می دهیم ؛

(۴-۸۸)

و مشابه حالت قبل تعریف زیر را داریم :

(۴-۸۹)

(۴-۹۰)

با جمع زنی روی حالات و استفاده از خاصیت تعامد ویژه توابع بسل به رابطه زیر می رسیم :

(۴-۹۱)

بسط فوریه تابع چگالی جریان را داریم :

(۴-۹۲)

با استفاده از روابط ۹۲ و ۹۱ و ۶۴ رابطه زیر را بدست می آوریم :

(۴-۹۳)

با استفاده از تعریف تابع چگالی الکترونی داریم :

(۴-۹۴)

با جایگذاری رابطه ۹۴ در رابطه ۹۳ به رابطه زیر می رسیم :

(۴-۹۵)

چگالی جریان کل بصورت زیر می باشد :

(۴-۹۶)

با جایگذاری رابطه ۹۵ در رابطه ۹۶ رابطه زیر بدست می آید :

(۴-۹۷)

و در نهایت خواهیم داشت :

(۴-۹۸)

رابطه ۹۸ به شکل ساده زیر در می آید :

(۴-۹۹)

که در آن از تعریف زیر استفاده کرده ایم :

(۴-۱۰۰)

تبدیل فوریه پتانسیل کولنی در دو بعد

(۴-۱۰۱)

را در رابطه ۱۰۰ جاگذاری کرده و برای مقاصد بعدی به اصطلاح این رابطه را بی بعد[۴۰۳] می کنیم :

(۴-۱۰۲)

که در آن :

(۴-۱۰۳)

۴-۴ محاسبات عددی

برای بدست آوردن شکل صریح تابع رسانندگی بر حسب فرکانس لیزر اعمال شده و سایر پارامترها نیاز است تا به محاسبات عددی متوسل شویم ، در قسمت قبل دیدیم که فرمول رسانندگی به شکل زیر بدست می آید :

(۴-۹۹)

که در آن " I " عبارت است از :

(۴-۱۰۲)

و برای عبارات $D(q,m\omega)$ و $D(q,m\omega+\Omega)$ داریم :

(۴-۸۴)

(۴-۹۰)

که در آن :

(۴-۱۰۱)

و برای Q ها داریم :

(۴-۸۳)

(۴-۸۹)

نیز دیدیم که اثرات عرضی به شکل جمله زیر ظهور پیدا می کنند :

(۴-۳۰)

که جمله آخری اشاره به توابع وابسته لاگور دارد . حاصل کار رابطه زیر را داریم :

(۴-۱۰۴)

که در قالب برنامه زیر به برآورد آن می پردازیم ، لازم به ذکر است که اول در قالب برنامه ویژوال بیسیک این برنامه نوشته و اجرا شد (source آن برنامه موجود است) ولی به دلیل ناکارآمدی آن این برنامه دوباره به زبان C# به تحریر درآمده و اجرا شد .

می دانیم در نخست باید به محاسبه عمل جمع زنی روی رابطه (۳۰) بر حسب n' انجام شود ، نیز بدلیل ماهیت مختلط بودن تابع انتگرالده نیاز است تا دو رشته محاسبات جداگانه در قالب برنامه برای دو جزء حقیقی و موهومی آن انجام شود ، پس از آن نوبت به جمع زنی روی متغیر های n و k_x می رسد ولی این جمع دوگانه در هم کوپل شده اند طوری که نمی توان آنها را از هم جدا کرد ،مسئله از این قرار است که مقدار انتگراند اگر فقط k_x تغییر کند با توجه به تابع توزیع یا صفر است و یا یک می باشد بنا براین می توان عمل جمع زنی را با یک عمل انتگرال گیری روی بازه k_x جایگزین کرد و سپس عمل جمع زنی روی n را انجام داد .

حال نوبت به محاسبه Q ها و پس از آن D ها می رسد ، با واردن کردن ضریب شامل جمله بسل عمل جمع زنی روی q ها و m را انجام می دهیم ، نتیجه حاصل $I(\omega,\Omega)$ خواهد بود ، حال تنها با یک تبدیل کسری σ بدست می آید ؛ باید توجه کرد که در تمام مراحل محاسبات عددی بدلیل ماهیت مختلط توابع به ناچار برای محاسبه هر تابع بناچار از دو تابع که یکی مسئول محاسبه بخش حقیقی و دیگری مجری محاسبه بخش موهومی آن بود نیز موقع محاسبه تابع جدید از توابع قبلی و برخورد با عملیات کسری باید تبدیلات لازمه جهت جداسازی قسمت های حقیقی و موهومی انجام می شد .

ویژگی برنامه استفاده شده :

در ابتدای کار از روتین ویژوال بیسیک ۲۰۰۰ برای برنامه نویسی استفاده شد ، در RUN جزء به جزء برنامه و درقسمت محاسبه تابع آشنای بسل بعد از انجام دویست دور محاسبه ، همانطور که احتمال می رفت خطای درونی برنامه بنام " Roundoff Error " باعث غیر متعارف بودن جواب با واقعیت شد بدین منظور تصمیم گرفته شد از برنامه " C " برای این کار استفاده شود. با توجه به اینکه اغلب برنامه های شی گرا مشابه C و Fortran و از مشکلی بنام پر شدن حافظه در اثر ایجاد اشیا موقت و حذف نکردن آنها توسط روتین برنامه نوشته شده رنج برده و حتی برنامه نویسان حرفه ای نیز گهگاه با این معضل برخورد می کنند لذا برنامه C# [23,24,25] که بطور ذاتی خودبخود این مشکل را رفع می کند انتخاب شد اشیائ ساخته شده توسط برنامه دراین روتین برنامه نویسی بعد از مقدار دهی و خروج از زیر روال مربوطه بطور اتوماتیک حذف شده و باعث آزادشدن حافظه اختصاص یافته برای آنها و افزایش قابل توجه سرعت اجرای برنامه خواهند شد نیز در آغاز زیرساخت " کنسول[۳۴]" از این برنامه نویسی انتخاب شد، زیرساخت کنسول مشابه فرترن بوده ودارای فرم نمی باشد با توجه به زمان کم ریسک انتخاب روال های"SDI,MDI،Form "پذیرفتنی نبود ولی پس ازآن که سرعت برنامه قابل قبول بود ترجیح داده شد برای اهداف بلند مدت کار برنامه نویسی درزیر روال :

"FormApplications" یا به اصطلاح همان زیر روال "فرم" دنبال شود.ویژوال سی شارپ برنامه شی گرا می باشد وبهتر است که ساختار برنامه نوشته شده در آن شی گرا باشد یعنی اینکه اولا برنامه از بلوک های جداگانه ای تشکیل شده که هر کدام بطورمستقل قابل ویرایش وتغییرباشند و ویرایش آنها

34 Console Applications

باعث بهم ریختگی سایر قسمتها و کل برنامه نگردد و در ثانی برای اجرای برنامه باید نخست در قالب کلی برنامه "شی"تعریف شده / خلق شده / مقدار دهی شود . به منظور گریز از مواجه شدن با خطای ذاتی و مهم محاسبات عددی یعنی " Round off Error " و از طرف دیگر نیاز به دقت مضاعف این محاسبات و اعتبار بخشیدن به آنها از یک طرف تمام متغیرها بصورت "دقت مضاعف" تعریف شدند و از سوی دیگر تعداد جملات مورد نیاز برای محاسبه توابع فوق ، تا اطمینان از حصول دقت کافی وارد محاسبات گردیدند ، از طرف دیگر برای راحتی کار و بحث در نتایج ، با توجه به اینکه توانایی اجرای برنامه بالا بوده طوری که هیچ خللی در سرعت اجرای برنامه پیش نمی آید و خطای تولید شده در محاسبات عددی قابل کنترل بوده و ناچیز می باشد و نیز از قبل تدبیرلازم بصورت " بی بعد " نمودن فرمول توابع مورد محاسبه در برنامه بر حسب پارامترها انجام شده بود ، مقادیر ثوابت فیزیکی تعریف شده در دل برنامه و پارامترهای توابع بطور مستقیم بر حسب مقادیر آنها در سیستم "cgs" وارد برنامه شدند .

فصل پنجم

۵ - نتایج

۵-۱ مقدمه ۷۲

۵-۲ نتایج ۷۳

۵-۳ بحث در نتیجه ۷۷

۵-۴ پیشنهاد برای ادامه کار بعدی ۷۸

مقدمه

مطالعه اثرات تابش بر روی ویژگی های ترابرد الکترونی در سیم کوانتومی برای فهم فیزیک بنیادین ساختارهای کوانتومی و فیزیک قطعات مفید خواهد بود . دامنه و فرکانس میدان تابشی ، ویژگی های ترابرد الکترونی ساختارها با خصوصیات کوانتومی را معین می کنند. از این رو در اینجا جذب تابش و تغییرات آن با تغییر دامنه و یا فرکانس میدان تابشی مورد بررسی قرار می گیرد .

نیز لازم است که در آخر نتایج بدست آمده با اثر قبلی [۱] ، که صرفا این پایان نامه بسط و توسعه آن در نانو ساختارهای تک بعدی بوده و فقط جنبه ترابرد الکتریکی را مد نظر قرار داده ، مقایسه شوند. حال که مقصود ما انجام محاسبات عددی می باشد تا نتایج نظری به چالش کشیده شده و مورد بررسی قرار گیرند ، لذا اولین گام انتخاب نمونه پر کاربرد مد نظر می باشد که اولا مقادیر پارامترهای اولیه برای جاگذاری در فرمولها برای آن از قبل کاملا شناخته شده و مشخص باشند و نیز برای نتایج حاصل نظری مقادیر تجربی معادل در دسترس باشند و در آخر فیزیک ماده مورد مطالعه با فرضیات نظری در این رهیافت همراستا باشند. به این منظور "گالیم آرسناید" به عنوان کاندیدای مناسب انتخاب شده است. پارامترهای اولیه مورد استفاده در محاسبات عددی از مقادیر گزارش شده به شرح جدول زیر می باشند [۱] ، [۱۰] :

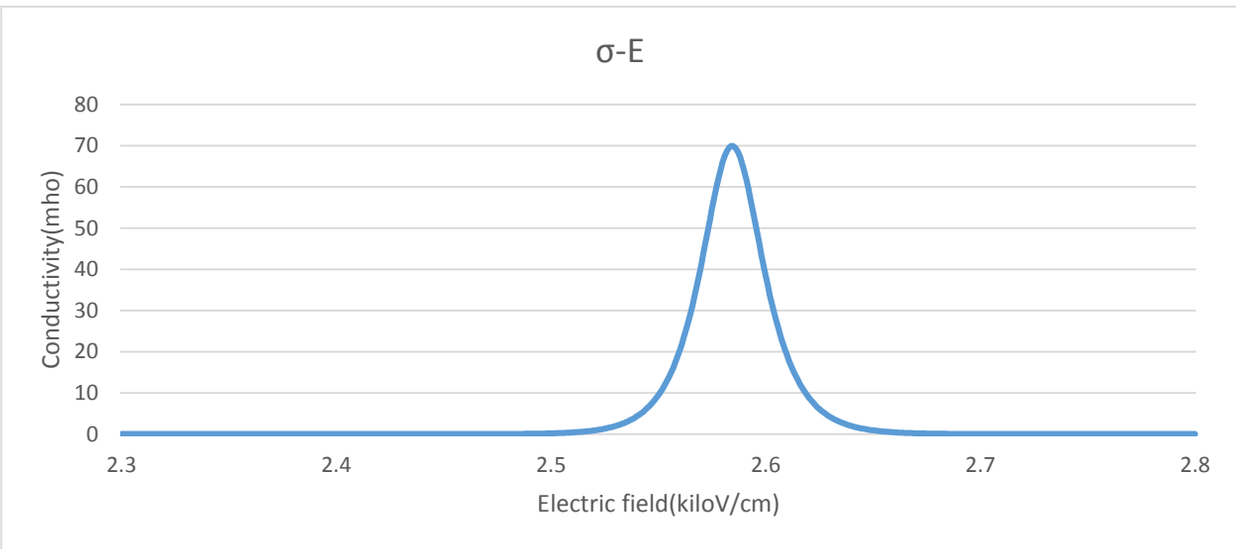
جدول ۱-۵ : بعضی از مقادیر کمیت های فیزیکی مربوط به گالیم آرسناید در یک شبه ساختار دو بعدی

کمیت	علامت	گالیم آرسنتاید (۱۰۰)[۳۵]
جرم موثر	m^*	۰/۰۶۷
واگنی اسپین	g_s	۲
واگنی مقدار	g_v	۱
ثابت دی الکتریک	ε	۱۳/۱
چگالی حالات	$D(E)$	۰/۲۸
بردار موج فرمی	k_F	۱/۵۸
سرعت فرمی	v_F	۲/۷
انرژی فرمی	E_F	۱۴
زمان پراکندگی	τ	۳۸-۰/۳۸
طول موج فرمی	λ_F	۴۰
پویش آزاد میانگین	$\bar{l}$	۱۰۰۰۰۰- ۱۰۰

۱-۵ نتایج :

با جاگذاری مقادیر مربوط به گالیم آرسناید و انجام تقریب تا اولین همسایه نزدیک در محاسبه پارامتر وابسته به جمله عرضی و نیز تقریب مربوط به مدهای طولی با احتساب پنج جمله بسل در محاسبات ، مقدار دادن به پارامتر میدان الکتریکی نقطه ای در حدود سه کیلو ولت بر سانتیمتر و جمع زنی روی الکترونها با بردار موج طولی از صفر تا هفتاد درصد طول بردار موج فرمی و جمع زنی روی الکترونها با بردار موج صفر الی سی درصد طول بردار موج فرمی انجام پذیرفت و مقادیر فرکانس لیزر و فرکانس آزمون در حدود یک ترا هرتز اختیار گردیدند ، چنانکه برای رسم منحنی به یکی از

سه پارامتر میدان الکتریکی نقطه ای ، فرکانس لیزر و یا فرکانس آزمون به عنوان متغیر در نظر گرفته شدند ومقدار ترابرد برای بازه ای از مقادیر مختلف جهت بررسی های خاص محاسبه و منحنی مربوطه رسم گردید .ذکر این نکته لازم است که رایانه مورد استفاده از نوع نوت بوک با پردازنده چهار هسته ای ، سرعت سی پی یو ۲/۲ گیگا هرتز و رم شش گیگا بایتی و سیستم ۶۴ بیتی، زمان پردازش و استخراج اطلاعات در هر دوره حدود ده دقیقه برآورد شد . حال نتایج بدست آمده به شرح زیر می باشند .

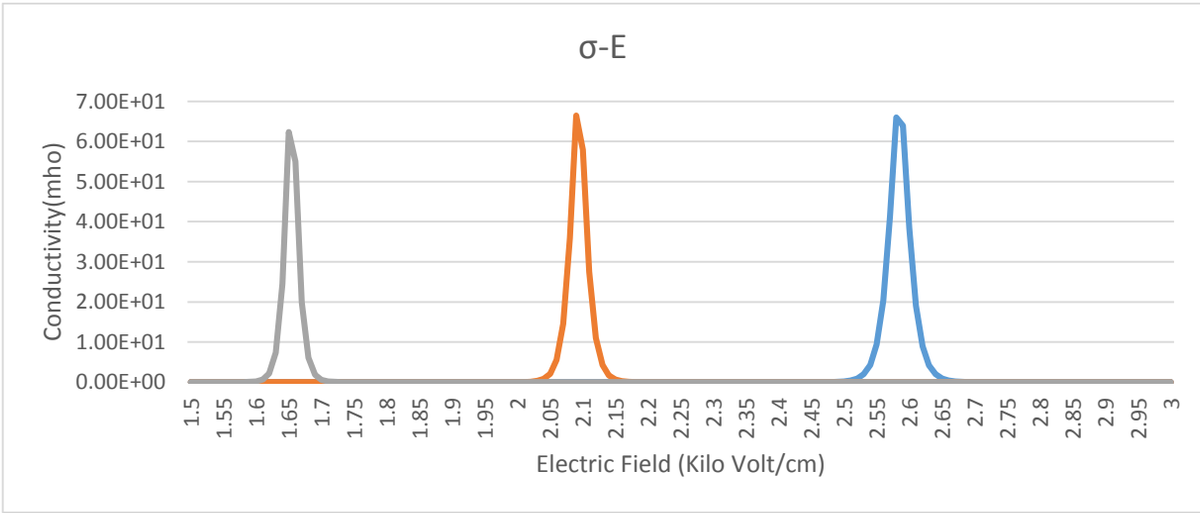


شکل (۱-۵) نمودار تغییرات رسانش بر حسب دامنه میدان الکتریکی آزمون در جذب تابشی با دامنه ثابت و فرکانس متغیر

شکل (۱-۵) نمایانگر بروز تشدید در جذب تابشی با دامنه ثابت و فرکانس متغیر است .مشاهده می شود که با افزایش فرکانس تابش ، ابتدا جذب افزایش یافته و سپس کاهش می یابد . این شکل از تغییرات تحت عنوان پراکندگی تشدیدی نیز شناخته می شود .

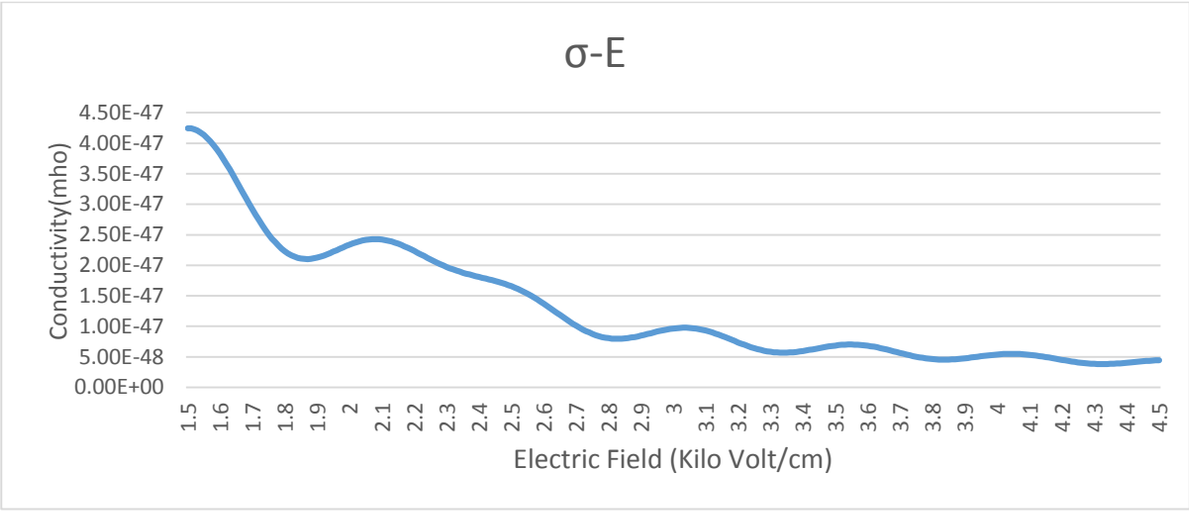
مهمترین عامل در کاهش میزان جذب، کاهش و یا توقف پراکندگی های الکترون – الکترون بوده وعامل

اصلی در افزایش میزان جذب جفت شدگی غیر خطی بین تابش و الکترون ها است . این جفت شدگی موجب گرم شدن الکترونها و بنابراین تقویت پراکندگی های الکترون – یون می باشد .



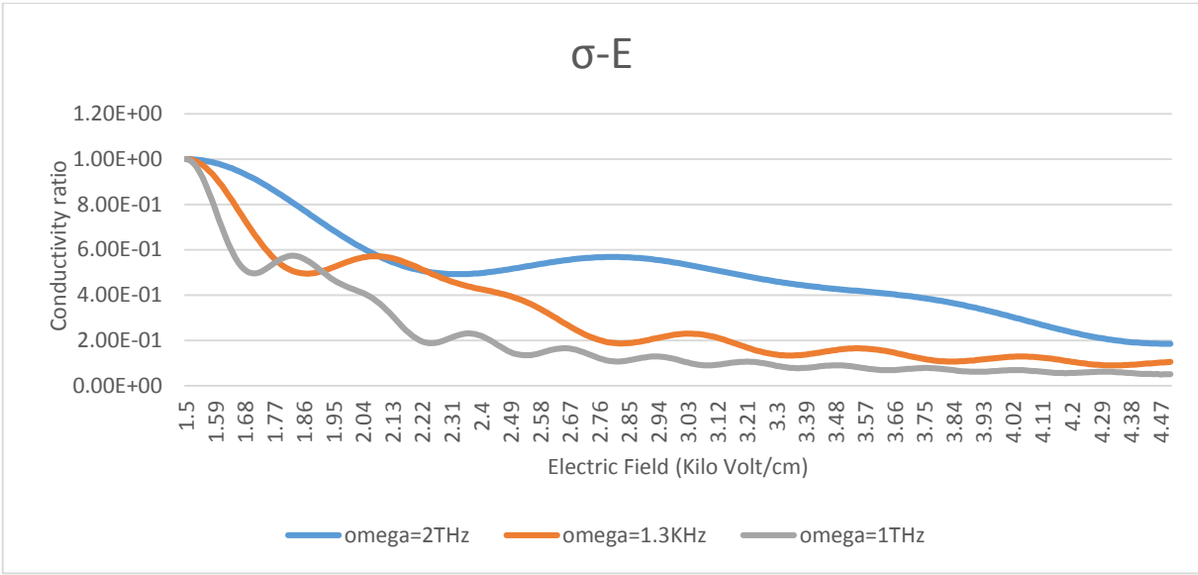
شکل (۲-۵) تغییر در محل و ارتفاع قله تشدید در جذب با تغییر در فرکانس میدان آزمون

شکل (۲-۵) نحوه تغییر در محل و ارتفاع قله تشدید در جذب را با تغییر در فرکانس میدان آزمون نمایش می دهد. مشاهده می شود که با کاهش فرکانس میدان آزمون محل بیشینه (قله) جذب به فرکانس های پایین تر جابجا شده ، ارتفاع قله جذب کاهش می یابد .



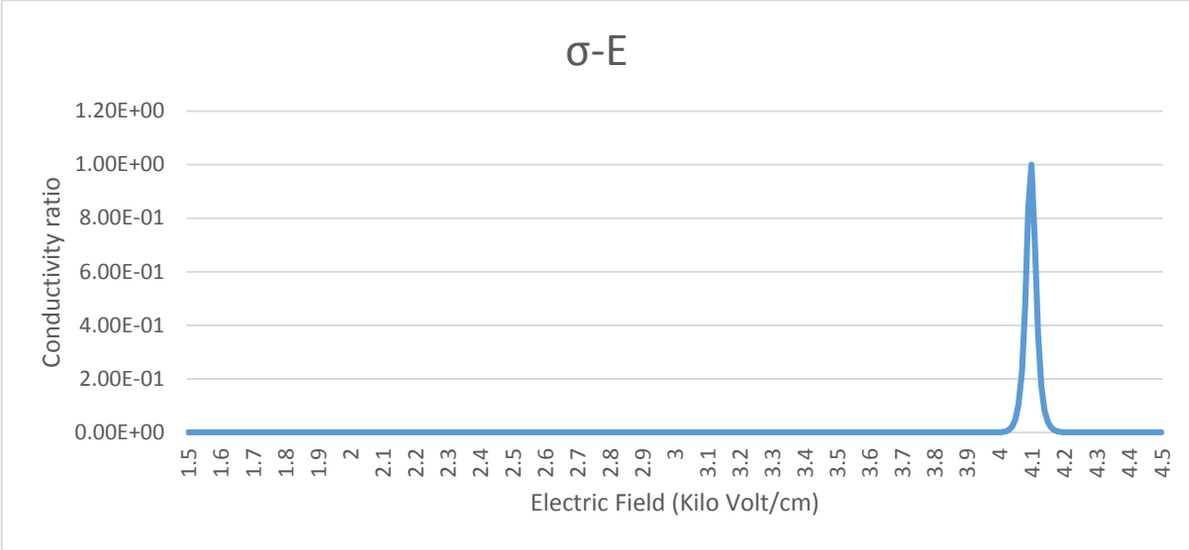
شکل (۳-۵) وابستگی میزان جذب تابش به دامنه میدان تابشی

شکل (۳-۵) نحوه تغییرات جذب تابش را با دامنه میدان تابشی نشان می دهد . شکل نمایانگر حالات تشدیدی چند تایی در جذب تابش است . بسته به برآیند اثر دامنه میدان تابشی و جفت شدگی های خطی بین الکترونها و تابش که سهم فرآیند های جذب و گسیل چند فوتونی کنار نواری رادرجذب کلی مشخص می نماید و حالت های الکترونی شبه مقید ناشی از حضور یون های جاذب ناخالصی،و با توجه به محدودیت فضایی و تغییردر چگالیحالتها که توسط پتانسیل محدود کننده عرضی ایجاد می شود ، نوسانات فوق در جذب تابش مشاهده می شود .



شکل (۴-۵) مقایسه نحوه تغییرات جذب با دامنه تابش در فرکانس های متفاوت

شکل (۴-۵) به مقایسه نحوه تغییرات جذب با دامنه تابش در فرکانس های متفاوت می پردازد.مشاهده می شود که با کاهش فرکانس تابش (تعداد بیشینه ها و کمینه ها) دربازه افزایش یافته و قله ها و دره های جذب جابجا شده اند.



شکل (۵-۵) اثر جذب تابش با دامنه بزرگ در ترابرد الکترونی

شکل (۵-۵) نحوه جذب تابش با دامنه بزرگ را نشان می دهد. با افزایش چشمگیر دامنه میدان تابش وبنا براین سهم آن در جذب در مقایسه با اثرات پتانسیل یونی ، یک حالت تشدیدی کاملا واضح بوجود می-آید . می توان دلیل این امر را جفت شدگی شدید الکترون و تابش و بنابراین افزایش چشمگیر نرخ پراکندگی ها دانست.

۵-۲ بحث در نتیجه :

می دانیم عوامل موثر در ترابرد الکترونی ، پراکندگی الکترون – الکترون ،جذب تابش توسط الکترونها ،پراکندگی الکترون – یون ناخالصی ، شکل تابع چگالی حالات الکترونی درنانوسیم ها می باشند .

در این تحقیق مهمترین پدیده مشاهده شده پراکندگی تشدیدی بود ، مشاهده گردید که در شکل (۵-۱) با وجود ثابت نگه داشتن دامنه تابش ، به ازای تغییر در فرکانس تابش ، پراکندگی تشدیدی چند تایی مشاهده می شود که بسته به برآیند اثر دامنه میدان تابشی و جفت شدگی های خطی بین الکترونها و تابش که سهم

فرآیند های جذب و گسیل چند فوتونی کنار نواری رادرجذب کلی مشخص می نماید و حالت های الکترونی شبه مقید ناشی از حضور یون های جاذب ناخالصی ، و با توجه به محدودیت فضایی و تغییردر چگالی حالتها که توسط پتانسیل محدود کننده عرضی ایجاد می شود ، نوسانات فوق در جذب تابش مشاهده می-شود . نیز زمانیکه فرکانس میدان آزمون از فرکانس لیزر بالاتر رفت یک تشدید تک قله ای با شدت خیلی زیاد رخ می دهد که تاکنون چنین موضوعی در مقالات مشابه گزارش نشده است همچنین توانستیم به بررسی اثر میدان الکتریکی ناشی از ولتاژ آزمون اعمالی به دو سر قطعه را مورد بررسی قرار دهیم ، بدین ترتیب که با اختصاص مقادیرمختلف به فرکانس لیزر و فرکانس میدان آزمون تغییر در دامنه ترابرد را در اثر تغییر در شدت میدان الکتریکی ثبت کنیم و مشاهده شد که با ثابت نگه داشتن فرکانس میدان آزمون و انتخاب مقادیر مختلف افزایشی به فرکانس لیزر اعمالی قله تشدیدی به سمت ولتاژ های پائین سوق پیدا می کند .

۳-۵ پیشنهاد برای ادامه کار بعدی :

درطی محاسبات عددی دما تقریبا صفر مطلق و تابع توزیع فرمی-دیراک به شکل تابع پله ای منظور شده است. به جهت دستیابی به نتیجه ای با نطباق بیشتر به واقعیت می توان از توزیع فرمی دیراک در دماهای بالاتر استفاده کرده و محدوده بررسی را به دماهای عادی رساند. نیز می توان اثرات حائل سازی الکترونهای آزاد بر روی بار یونهای ناخالصی را با تغییر در شکل پتانسیل اعمالی مختص یونهای ناخالصی مورد نظر قرار داد. همچنین می توان به بررسی سایر اثرات اپتو الکتریکی در نمونه تحت تابش و بررسی پارامتر های مربوطه پرداخت.

پیوست ها

نوسانگر هماهنگ[26]

هامیلتونی با "پتانسیل نوسانی" زیر را در نظر می گیریم :

(۱- م)

شکل صریح معادله شرودینگر به صورت زیر خواهد بود ،

(۲- م)

پارامتر "فرکانس نوسان" به صورت زیر را تعریف می کنیم :

(۳- م)

و تغییر متغییر زیر را انجام می دهیم ،

(۴- م)

نیز جواب فرضی را به دو بخش تجزیه می کنیم :

(۵- م)

بعد از این تغییرات شکل معادله شرودینگر به صورت زیر در خواهد آمد :

(۶- م)

که در آن :

(۷- م)

فرض می کنیم جوابه بصورت چند جمله ای های جبری باشند :

(۸- م)

با جایگذاری جواب فرضی در معادله دیفرانسیل بالا به رابطه زیر می رسیم :

(۹- م)

شرط اینکه چند جمله ای واگرا نباشد باید داشته باشیم :

(۱۰- م)

بنا بر این رابطه بازگشتی زیر در بین ضرایب برقرار خواهد بود .

(۱۱- م)

مراجع

1 Electronic Properties of Semiconductor nanostructures under terahertz radiation– Saeid Hessami-Pilehrood-Wollongang University-2006-Library of Wollongang University / Sydney/Australia

۲ جهان کوانتومی نوین-تونی هی-محمد رضا محجوب-شرکت سهامی انتشار-۹۷۸/۱۳۸٦-۹٦٤-۳۲٥-۰-۲۰۹

۳ مقدمه ای بر نانو فناوری"چارلز بی پول /نیما تقوی نیا/موسسه انتشارات علمی دانشگاه صنعتی شریف/ شابک٥-۹٥-۷۹۸۲-۹٦٤-۹۷۸

4 Introduction To Nanoscience / Gabor L.Harnyak et al. /ISBN 978-I-4200-4805-6 /CRC Press

۵ فیزیک و تکنولوژی قطعات نیمرسانا \ اس ام زی \ محمد حسینی \ آستان قدس دانشگاه امام رضا \ ۱۳۷۵

۶ مقدمه ای بر نانو فن آوری /رامین رحمانی اهرنجانی/شابک : ۰-۳٤-۵۱۰۷-٦۰۰-۹۷۸

7 Electronic Transport in Mesoscopic Systems-Datta Suppriyo-Cambridge Uni. Press,1999/0521 41604 3,pages Data pages 17-22,17-19,R-1-3-1

8 Quantum Wells ,Wires and Dots-Harrison Paul-Jon Willey&sons Ltd.-2005/978-0-470-0179-2

9 Quantum Transport- Galperin Y.M.-Lund Uni.-1998-yurig@teorfys.lu.se

10 Quantum Transport in Semiconductor Nanostructures-Beenakker C.W.J.-Solid State Physics 44,1-228(1991)

۱۱ فیزیک ماده چگال-نیل اشکرافت-خانلری محدرضا-دانش نگار-۹۷۸/۱۳۸۷-۶۹۴-۲۹۲۷-۲۰-۳

12 Kadanoff, L. P. (2009). "More is the Same; Phase Transitions and Mean Field Theories". *Journal of Statistical Physics* 137 (5–6): 777–797. arXiv:0906.0653. Bibcode:2009JSP ...137..777K. doi:10.1007/s10955-009-9814-1. edit

13 Weiss,Pierre(1907)."L'hypothèse,du champ moléculaire et la propriété ferromagnéti-que". *J. Phys. Theor. Appl.* 6 (1): 661–690.

14 Boudec,J.Y.L.;McDonald,D.;Mundinger, J. (2007). "A Generic Mean Field Convergence Result for Systems of Interacting Objects". *Fourth International Conference on the Quantitative Evaluation of Systems (QEST 2007)*. p. 3.

doi:10.1109/QEST.2007.8. ISBN 0-7695-2883-X. edit

15 Baccelli, F.; Karpelevich, F. I.; Kelbert, M. Y.; Puhalskii, A. A.; Rybko, A. N.; Suhov, Y. M. (1992). "A mean-field limit for a class of queueing networks". *Journal of Statistical Physics* 66 (3–4): 803. Bibcode:1992JSP....66..803B. doi:10.1007/BF01055703. edit

16 Lasry, J. M.; Lions, P. L. (2007). "Mean field games". *Japanese Journal of Mathematics* 2: 229. doi:10.1007/s11537-007-0657-8. edit

17 Chaikin, P. M.; Lubensky, T. C. (2007). *Principles of condensed matter physics* (4th print ed.). Cambridge: Cambridge University Press. ISBN 978-0-521-79450-3.

18 HE Stanley (1971). "Mean field theory of magnetic phase transitions". *Introduction to phase transitions and critical phenomena*. Oxford University Press. ISBN 0-19-505316-8.

۱۹ نانوتکنولوژی-کانانگارا-جعفر وطن خواه دولت سرا-نشر طراح-۱۳۸٦/۹٦٤-۷۰۸۹-٦٤-۳

۲۰ مکانیک آماری-پتریا ر.ک.-میرزایی علی اکبر-انتشارات علمی فرهنگی-۱۳۸۸/۹۷۸-۹۶۴-۶۲۱۵-۴۸-۱

21 Many Particle Physics-Mahan G.D.-Plenum Press-1990/QC 176.M24

22 Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors ,Hartmut Haug ,Antti-Pekka Jauho ,Springer 1997,ISBN 12081660

۲۳ چگونه با #C برنامه نویسی کنیم- دیتل & دیتل-پروین صفاحی-شرکت ناقوس اندیشه-۹۷۸/۱۳۸۶-۶-۲۴-۲۸۷۸-۹۶۴

۲۴ آموزش برنامه نویسی Visual C#.NET 2005 -هاشمیان سید محمد-۱۳۸۷-انتشارات صفار-اشراقی/۹۷۸-۹۶۴-۳۸۸-۱۴۸-۱

۲۵ مرجع کامل برنامه نویسی C#.NET –دیتل هاروی-موسسه فنی هنری دیباگران تهران-۹۶۴/۱۳۸۶-۴-۴۱۸-۳۵۴ و ۹۶۴-۳۵۴-۴۱۹-۲

26 Quantum Physics-Stephen Gasiorowicz-John Willey/QC174.12.G37

Abstract

The electromagnetic absorption of a quantum-well wire which has been illuminated by Terahertz laser field has been investigated theoretically. By calculating the exact time-dependent electronic states and determining the time evolution of single electron density matrix of the system, the contribution of electron-photon interactions to the electrical current has been obtained. At the end, numerical computations have been performed for a GaAs quantum-well wire and the achieved results have been studied.

Keywords

Nanowitres - Quantum Well - Electromagnetic Absorption – GaAs –

Density Matrix – Terahertz Laser Field – Quantization Effects

Contents

1-1 Figures List ……ت

1-2 Table List ...……ث

1-3 Preface ……..……..2

2 Semiconductors Nanostructures

2-1 Semiconductors

2-2 Semiconductors in Low Dimensions

2-3 Electronical Properties of semiconductors

3 Theoretical aspects of illuminiscens absorption in semiconductors

3-1 Some methos of compution of conductivity in semiconductors

3-2 Density Matrix Methods

4 Conductivity of electrons in seminconductor nanowires under terahertz radiation

4-1 Getting of electron states of the wave function

4-2 Density Matrix

4-3 Conductivity

4-4 Numerical Computations

5 Results

5-1 Preface

5-2 Results

5-3 Discussion in Results

5-4 Propsed for the next steps of this research

Refrences

Enclosed

Shahrood University of Technology

School of Physics

Master of Science Thesis In

Nano Physics

Electronic Transport in a Quantum Wire under Electromagnetic Radiation

Behzad Karimmaslak

Supervisor:

Dr. Saeid Hesami Pilehrood

February 2014