

حاشا  
الرحمن الرحيم





دانشکده فیزک و مهندسی هسته‌ای

رشته فیزیک، گرایش حالت جامد

پایان‌نامه کارشناسی ارشد

# ترابرد الکترونی وابسته به اسپین در یک سیم کوانتومی

نگارنده: حمید تیموری یاریجانی

استاد راهنما

دکتر سعید حسامی پيله رود

استاد مشاور

دکتر مهدی انصاری راد

بهمن ۱۳۹۷



## تقدیم به:

خانواده عزیزم که با صبر و شکیبایی در تهیه این پایان نامه یاری‌ام کردند.....

## سپاس‌گزاری...

پیش از هر چیز از خداوند متعال سپاس‌گذارم که توفیق انجام این دوره را به گونه‌ای شایسته بر من ارزانی داشت. از استاد گرامی جناب آقای دکتر سعید حسامی سپاس‌گذارم که انجام این رساله بدون لطف و همیاری ایشان میسر نبود. همچنین از زحمات و دلسوزی‌های پدر و مادر مهربانم و خانواده عزیزم از صمیم قلب سپاس‌گذاری می‌کنم و از تمام دوستان و عزیزانی که در این دوره همراه و همگام من بودند و اتمام این مرحله بدون همراهی و همدلی ایشان میسر نبود کمال تشکر و سپاس‌گذاری را دارم.

حمید تیموری یاریجانی

بهمن ۱۳۹۷

## تعهد نامه

اینجناب حمید تیموری یاریجانی دانشجوی کارشناسی ارشد رشته فیزیک فیزک و مهندسی هسته‌ای دانشگاه شاهرود، نویسنده پایان نامه با عنوان **ترابرد الکترونی وابسته به اسپین در یک سیم کوانتومی**، تحت راهنمایی سعید حسامی پيله رود متعهد می‌شوم:

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجناب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهش‌های دیگر پژوهش‌گران، به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب این پایان نامه، تا کنون توسط خود، یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارایه نشده است.
- حقوق معنوی این اثر، به دانشگاه صنعتی شاهرود تعلق دارد، و مقالات مستخرج با نام “دانشگاه صنعتی شاهرود” یا “Shahrood University of Technology” به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آوردن نتایج اصلی پایان نامه تاثیرگذار بوده‌اند، در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می‌گردد.
- در تمام مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که از موجود زنده (یا بافت‌های آنها) استفاده شده است، ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در تمام مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته (یا استفاده شده است)، اصل رازداری و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است.

حمید تیموری یاریجانی

بهمن ۱۳۹۷

### مالکیت نتایج و حق نشر

- تمام حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه‌های رایانه‌ای، نرم‌افزارها و تجهیزات ساخته شده) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی، در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در این پایان نامه بدون ذکر منبع مجاز نمی‌باشد.





## چکیده

در این تحقیق به بررسی انتقال وابسته به اسپین در پراکندگی الکترون اسپین قطبیده با استفاده از یک ناخالصی در میان یک سیم کوانتومی پرداخته می‌شود. محاسبات در رهیافت مبتنی بر معادله لیپمن-شوینگر و از طریق محاسبه تابع گرین انجام می‌شود. نتایج تحقیق نشان می‌دهد بخشی از الکترون‌ها بدون چرخش اسپینی و بخشی از الکترون‌ها همراه با چرخش اسپینی عبور می‌کنند. همچنین نشان داده شده است زمانی که انرژی فرمی به کمینه انرژی هر زیرنوار نزدیک می‌شود ضریب عبور الکترون‌هایی که بدون چرخش اسپینی (همراه با چرخش اسپینی) عبور می‌کنند یک کاهش (افزایش) شدید را نشان می‌دهد سپس با همتراز شدن انرژی فرمی با کمینه هر زیرنوار ضریب عبور دوباره روند افزایشی (کاهش) را نشان می‌دهد. همچنین رسانندگی و نسبت موقعیت محل پراکندگی بر نرخ عبور الکترون‌هایی که بدون چرخش اسپینی (همراه با چرخش اسپینی) عبور کرده‌اند بررسی شده است.

کلمات کلیدی: تابع گرین، اسپینترونیک، معادله لیپمن-شوینگر، ترابرد الکترونی وابسته به اسپین.



# فهرست مطالب

م	فهرست تصاویر
ف	فهرست جداول
۱	۱ مقدمه
۳	۱.۱ مروری بر مطالعات پیشین
۷	۲ مفاهیم پایه
۸	۱.۲ اسپینترونیک
۱۰	۲.۲ ترابرد الکترونی وابسته به اسپین
۱۱	۳.۲ نیمرسانا
۱۲	۴.۲ برخی ویژگی‌های نیمرساناها
۱۴	۵.۲ آلایش نیمرسانا
۱۵	۶.۲ سیم کوانتومی
۱۹	۷.۲ ویژه حالات اسپینی یک الکترون در حضور پراکندگی
۲۳	۳ رهیافت
۲۳	۱.۳ مقدمه
۲۴	۲.۳ معادله لیپمن-شوینگر در سیم کوانتومی دو بعدی
۲۹	۳.۳ پتانسیل پراکندگی تابع دلتا

۳۴	تاثیر موقعیت عرضی پراکندگی بر ضریب عبور	۴.۳
۳۷	ترابرد الکترونی وابسته به اسپین در یک سیم کوانتومی	۴
۳۷	پراکندگی چند مدی وابسته به اسپین در سیم کوانتومی	۱.۴
۴۱	پتانسیل پراکندگی تابع دلتای وابسته به اسپین	۲.۴
۴۳	نتایج و بحث	۳.۴
۵۲	نتیجه گیری	۴.۴
۵۳	مراجع	

# فهرست تصاویر

۱۳	مقایسه رسانا با نیم‌رسانا و نارسانا و نوارهای رسانش آن‌ها	۱.۲
۱۷	شبیه سازی مراحل ساخت یک سیم کوانتومی به صورت طرح وار	۲.۲
۱۸	یک سیم کوانتومی با سطح مقطع مستطیلی و عمق بی‌نهایت	۳.۲
۲۵	یک موج الکترونی که از سمت چپ فرود می‌آید و توسط یک ناخالصی پراکنده می‌شود	۱.۳
	نمودار مد انتشاری (خطوط پیوسته) و ناپایدار (خطوط تیره) که برای انرژی $E = E_n + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$	۲.۳
۲۷	برای مد منتشر شونده و با تغییر $k_n = ik_n$ برای مد ناپایدار بدست می‌آید	۲.۳
	$T_{11}$ احتمال عبور بر حسب انرژی فرمی برای پتانسیل دافع (سمت راست، $\gamma = 10^6 \text{ eV cm}^2$ )	۳.۳
۳۴	و برای پتانسیل جاذب (سمت چپ، $\gamma = -2 \times 10^6 \text{ eV cm}^2$ )	۳.۳
	رسانایی بر حسب انرژی فرمی برای پتانسیل تابع دلتا در یک سیم کوانتومی دوبعدی در واحد $\frac{2e^2}{h}$ . خطوط پیوسته برای پتانسیل دافع $\gamma = 10^6 \text{ eV cm}^2$ و خطوط تیره برای پتانسیل جاذب $\gamma = -6 \times 10^6 \text{ eV cm}^2$	۴.۳
۳۵		۳.۵
۳۶	ضریب عبور $T_{11}$ بر حسب موقعیت عرضی پراکندگی در سیم دو بعدی که در انرژی $E = E_2$	۵.۳
	ضریب عبور $T_{11}$ اسپین بالا بر حسب انرژی فرمی در بازه انرژی $E_1 \leq E \leq E_2$ برای پتانسیل جاذبه $\gamma = -18 \text{ feV cm}^2$ و $\gamma = -12 \text{ feV cm}^2$ در حالی که ناخالصی مغناطیسی در $y_i = \frac{5}{13} W$ قرار دارد. خطوط پیوسته مربوط به قسمت بدون چرخش اسپین و خطوط خط چین مربوط به قسمت با چرخش اسپین است	۱.۴
۴۴		۴.۴

- ۲.۴ ضریب عبور  $T_{11}$  اسپین بالا برحسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_2$  برای پتانسیل جاذبه  $\gamma = -12 \text{ f eV cm}^2$  در حالت با چرخش اسپین در حالی که ناخالصی مغناطیسی در  $y_i = \frac{5}{13} W$  قرار دارد. . . . . ۴۵
- ۳.۴ ضریب عبور  $T_{11}$  اسپین بالا برحسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_2$  برای پتانسیل جاذبه  $\gamma = -12 \text{ f eV cm}^2$  و  $\gamma = -6 \text{ f eV cm}^2$  در حالی که ناخالصی مغناطیسی در  $y_i = \frac{5}{13} W$  قرار دارد. خطوط پیوسته مربوط به قسمت بدون چرخش اسپین و خطوط خط چین مربوط به قسمت با چرخش اسپین است. . . . . ۴۶
- ۴.۴ ضریب عبور  $T_{22}$  اسپین بالا برحسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_5$  برای پتانسیل جاذبه در حالی که  $\gamma = -18 \text{ feV cm}^2$  و  $\gamma = -12 \text{ feV cm}^2$  ناخالصی مغناطیسی در  $y_i = \frac{5}{13} W$  قرار دارد. خطوط پیوسته مربوط به قسمت بدون چرخش اسپین و خطوط خط چین مربوط به قسمت با چرخش اسپین است. . . . . ۴۶
- ۵.۴ ضریب عبور  $T_{22}$  اسپین بالا برحسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_5$  برای پتانسیل جاذبه در حالی که  $\gamma = -12 \text{ feV cm}^2$  برای حالت با چرخش اسپین در حالی که ناخالصی مغناطیسی در  $y_i = \frac{5}{13} W$  قرار دارد. . . . . ۴۷
- ۶.۴ ضریب عبور  $T_{11}$  اسپین بالا برحسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_5$  برای پتانسیل دافعه  $\gamma = 15 \text{ feV cm}^2$  در حالی که ناخالصی مغناطیسی در  $y_i = \frac{5}{13} W$  قرار دارد. خطوط پیوسته مربوط به قسمت بدون چرخش اسپین و خطوط خط چین مربوط به قسمت با چرخش اسپین است. . . . . ۴۷
- ۷.۴ ضریب عبور  $T_{11}$  اسپین بالا برحسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_5$  برای پتانسیل دافعه  $\gamma = 15 \text{ feV cm}^2$  برای حالت با چرخش اسپین در حالی که ناخالصی مغناطیسی در  $y_i = \frac{5}{13} W$  قرار دارد. . . . . ۴۸
- ۸.۴ ضریب عبور  $T_{22}$  اسپین بالا برحسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_5$  برای پتانسیل دافعه  $\gamma = 15 \text{ feV cm}^2$  در حالی که ناخالصی مغناطیسی در  $y_i = \frac{5}{13} W$  قرار دارد. خطوط پیوسته مربوط به قسمت بدون چرخش اسپین و خطوط خط چین مربوط به قسمت با چرخش اسپین است. . . . . ۴۸

- ۹.۴ ضریب عبور  $T_{22}$  اسپین بالا برحسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_5$  برای پتانسیل دافعه  $15 \text{ feV cm}^2$   $\gamma =$  برای حالت با چرخش اسپین در حالی که ناخالصی مغناطیسی در  $y_i = \frac{5}{14} W$  قرار دارد. . . . . ۴۹
- ۱۰.۴ رسانندگی اسپین بالا برحسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_5$  برای پتانسیل جاذبه در حالی که ناخالصی مغناطیسی در  $y_i = \frac{5}{14} W$  قرار دارد. خطوط پیوسته مربوط به قسمت بدون چرخش اسپین و خطوط خط چین مربوط به قسمت با چرخش اسپین است. ۵۰
- ۱۱.۴ رسانندگی اسپین بالا برحسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_5$  برای پتانسیل جاذبه با مقدار  $\gamma = -12$  برای حالت با چرخش اسپین در حالی که ناخالصی مغناطیسی در  $y_i = \frac{5}{14} W$  قرار دارد. . . . . ۵۱
- ۱۲.۴ ضریب عبور  $T_{11}$  برحسب موقعیت عرضی پراکندگی در سیم دو بعدی که در انرژی  $E = E_2$  خطوط پیوسته مربوط به قسمت بدون چرخش اسپین و خطوط خط چین مربوط به قسمت با چرخش اسپین است. . . . . ۵۱





# فهرست جداول



# فصل ۱

## مقدمه

در سال‌های اخیر، تحقیقات تجربی و نظری گسترده‌ای در زمینه رسانش در نانو ساختارهای مغناطیسی انجام شده است. در این راستا پدیده ترابرد اسپینی در نانو ساختارهای مغناطیسی از قبیل سیم کوانتومی مغناطیسی توجه زیادی را از لحاظ علمی و تکنولوژیکی به خود جلب کرده است. خواص رسانش الکتریکی این ساختارها، از طریق محدود کردن آن‌ها بین دو الکتروود فلزی و عبور جریان از میان آن مورد بررسی قرار می‌گیرد.

الکترونیک اسپینی شاخه‌ای جوان در علم نانوالکترونیک است که بر درجات آزادی اسپین پایه گذاری شده است و هدف اصلی آن بررسی پدیده‌های الکترونیکی با در نظر گرفتن اسپین الکترون‌ها می‌باشد. به عبارت دیگر در گستره اسپینترونیک<sup>۱</sup> ترابرد را وابسته به اسپین نگریسته و برهمکنش‌های اسپینی را در مطالعات منظور می‌کنند [۱]. در مواد مغناطیسی، جمعیت اکثریت اسپین‌ها یک راستای مشخص را برای جهت‌گیری بر می‌گزینند و با اعمال میدان مغناطیسی خارجی برای الکترون‌های با اسپین بالا و الکترون‌های با اسپین پایین دو پیکربندی مجزا بوجود می‌آید، در حالی که در مواد غیر مغناطیسی جهت‌گیری اسپین‌ها کاتوره‌ای بوده و راستای مشخصی

---

<sup>۱</sup>Spintronics

برای مغناطش کل ماده وجود ندارد. در سال‌های اخیر، ترابرد قطبیده اسپینی به درون سیستم‌هایی با اندازه محدود مورد توجه قرار گرفته است. به طوریکه امروزه شاهد پیدایش ابزارهایی مانند حافظه‌های مغناطیسی، فیلم‌های ریز ساختار مغناطیسی و ترانزیستورهای اسپینترونیکی که در این گستره وارد چرخه دنیای صنعتی امروز شده‌اند هستیم. این ابزارها با سرعت انتقال بالا، جایگزین مناسب و بهینه‌ای برای هم‌تاهای الکترونیکی خود هستند [۲].

در یک سیم کوانتومی ایده‌آل هدایت الکتریکی کامل است اما زمانی که ناخالصی داشته باشیم یا در سیم یک نقص وجود داشته باشد تحرک الکترون‌ها کاهش یافته و هدایت کامل الکتریکی از بین می‌رود [۳، ۴]. بنابراین مطالعه اینکه چطور نقص‌ها و ناخالصی‌ها در یک سیم کوانتومی روی پراکندگی الکترون‌ها و هدایت الکتریکی اثر می‌گذارند، یک موضوع مهم است [۵، ۶]. قبلاً از فوتون‌ها و بار الکترون‌ها در حضور و یا غیاب میدان مغناطیسی، برای پردازش اطلاعات استفاده شده است. در این پایان نامه قصد داریم با در نظر گرفتن اسپین الکترون به بررسی اثرات و برهمکنش‌های آن با یک ناخالصی مغناطیسی با استفاده از معادله لیپمن-شوینگر ( $LSE$ )<sup>۲</sup> پردازیم و با محاسبه دامنه‌ی گذار الکترونی، تاثیر اسپین الکترون در انتقال جریان الکتریکی از یک سیم کوانتومی را مورد مطالعه قرار دهیم. یکی از مزایای این روش آن است که در آن اثر موقعیت مکانی نسبی ناخالصی بر ترابرد الکترونی قابل بررسی می‌باشد. در این بین ذکر این نکته الزامیست که با توجه به پیشرفت و بهینه‌سازی نانو قطعات مبتنی بر ترابرد اسپینی و لزوم فهم دقیق برهمکنش‌های بنیادی که در این ساختارها اتفاق می‌افتد بررسی و تحقیق پیرامون ترابرد اسپینی در سیستم‌های کوانتومی بصورت جدی ضروری بنظر می‌رسد. بنابراین این تحقیق می‌تواند هم در پیشرفت و بهینه‌سازی نانو قطعات مبتنی بر ترابرد اسپینی و فهم دقیق این ساختارها و هم در بهبود فرآیند انتقال الکتریکی در یک سیم کوانتومی، مفید واقع شود.

در سال‌های اخیر اسپینترونیک رشد قابل توجهی داشته است که در آن علاوه بر الکترون‌های باردار، اسپین الکترون‌ها نیز منتقل کننده اطلاعات هستند [۲]. همچنین در ابزارهای اسپینترونیک ترابرد وابسته به اسپین از طریق ساختارهای حاوی اتم‌های مغناطیسی مورد توجه است. در نظر گرفتن اسپین الکترون‌ها می‌تواند ما را در درک فرآیندهای بنیادی که در حوزه اسپینترونیک اتفاق می‌افتد یاری کند و کاربردهای وسیعی در حوزه‌ی

<sup>2</sup>Lippmann-Schwinger

نانوالکترونیک را به دنبال داشته باشد [۷].

## ۱.۱ مروری بر مطالعات پیشین

مطالعه‌ی ترابرد الکترونی وابسته به اسپین اهمیت زیادی در فهم و توسعه‌ی دامنه‌ی اسپینترونیک دارد. ترابرد الکترونی وابسته به اسپین در نانو ساختارهای فرومغناطیس به طور جدی مورد توجه بوده است [۸]. همچنین تاکنون مطالعات زیادی در مورد چگونگی رسانش وابسته به اسپین در اتصال انواع سامانه‌های مغناطیسی به رساناهای غیرمغناطیسی و اتصال انواع سامانه‌های غیرمغناطیسی به رساناهای مغناطیسی انجام شده است [۹، ۱۰].

ترابرد الکترونی وابسته به اسپین در نانو ساختارها از قبیل نقطه کوانتومی مغناطیسی و سیم کوانتومی مغناطیسی نیز از نظر علمی و فن آوری یکی از موضوعاتی است که بررسی‌های بسیاری در رابطه با آن انجام شده است. در این سامانه‌ها مقاومت الکتریکی وابسته به اسپین را می‌توان با اعمال یک میدان مغناطیسی کنترل کرد، که خود به علت عدم تعادل در احتمال گذار برای الکترون‌های با اسپین بالا و پایین از سامانه است. ویژگی‌های ترابردی این ساختارها می‌تواند با جفت شدن آن‌ها با هادی‌ها و عبور جریان از میان مجموعه اندازه گیری شود. سامانه سیم کوانتومی مغناطیسی معمولاً به عنوان یکی از اجزای مهم در قطعات الکترونیکی اسپینی در نظر گرفته می‌شوند. همچنین امکان ایجاد پدیده اسپین وارون در قطعات با استفاده از سیم کوانتومی مغناطیسی وجود دارد. بنابراین کنترل جریان وابسته به اسپین در قطعات اسپینترونیک از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است [۱۲، ۱۳].

بررسی مسئله پراکندگی الکترون به عنوان حامل بار در یک سیم کوانتومی دوبعدی در فهم مبانی ترابرد الکترونی بسیار حائز اهمیت بوده است [۱۴]. پیش از این مطالعه مسئله فوق به روش‌های متعددی از جمله با استفاده از معادله لیپمن-شوینگر انجام پذیرفته است. مطالعات مذکور نقشی اساسی در فهم و بهینه‌سازی دستگاه‌های الکترونی و دستیابی به کاربردهای جدید و تفسیر نتایج مطالعات تجربی دارد. در این بین بررسی مسئله پراکندگی الکترون با استفاده از معادله لیپمن-شوینگر نشان می‌دهد که موقعیت ناخالصی بر روی انتقال الکترون و رسانش کوانتومی دستگاه تأثیری اساسی می‌گذارد [۱۵]. همچنین بررسی مسئله پراکندگی وابسته به اسپین الکترون در یک سیم کوانتومی دوبعدی حاکی از تغییراتی اساسی در ساختار پله‌ای رسانش کوانتومی

سیستم است [۱۶]. بررسی عبور الکترون از یک ناخالصی نشان می‌دهد زمانی که الکترون از یک ناخالصی در یک سیم کوانتومی عبور می‌کند می‌تواند بواسطه تشکیل حالت‌های شبه-مقید موجب افزایش در مقاومت دستگاه شود [۱۷].

انتقال الکترون از طریق سیم‌های کوانتومی که اغلب نانوسیم نامیده می‌شوند، به صورت نظری و آزمایشگاهی به طور گسترده‌ای مورد مطالعه قرار گرفته است [۱۸، ۵]. در سیم کوانتومی کامل (ایده آل)، جایی که انتقال الکترونی بالستیک است، رسانایی بصورت پله‌ای و ضریبی از  $G_0 = \frac{2e^2}{h}$  را نشان می‌دهد [۱۹، ۴]. یکی از مهم‌ترین موضوعات، نقص در سیم‌های کوانتومی است که در دامنه پراکندگی تاثیر می‌گذارد و باعث می‌شود انتقال الکترونی کاهش یافته و کیفیت کامل رسانایی خراب شود [۴، ۳]. یکی از مهم‌ترین مسائل این است که چگونه نقص در سیم کوانتومی بر دامنه پراکندگی و رسانایی اثر می‌گذارد [۶، ۵]. این موضوع در پژوهش‌های مختلفی بحث شده است و یکی از نتایج مهم آن این است که ناخالصی یا نقص در سیم باعث کاهش رسانایی می‌شود.

مسئله پراکندگی الکترونی در سیم کوانتومی دوبعدی با نقص تابع دلتا در گذشته با استفاده از دو روش مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته بود [۲۰، ۶]. چو و سولبور [۶] یک روش بر اساس قیاس با روش تصویر در الکترواستاتیک برای مدهای منتشر شده به کار بردند، در حالی که کاندر، ایمری و سیوان [۳] روش تطبیق مد را به کار بردند. تابع مد و مشتقات آن در محل نقص به هم مرتبط هستند. در این تحقیق با استفاده از معادله لیپمن-شوینگر به مطالعه پراکندگی الکترون خواهیم پرداخت. مزیت روش لیپمن-شوینگر بحث خواهد شد. یکی از مزیت‌های آن این است که معادله انتگرالی برای تابع موج می‌تواند به طور خودسازگار تکرار شود و این باعث تشکیل سری بورن می‌شود که برای شکل تقریب مفید است و می‌تواند برای مطالعه پتانسیل‌های پراکندگی پیچیده‌تر مورد استفاده قرار گیرد.

انتقال کوانتومی در سیستم مزوسکوپیک در چند دهه اخیر در مطالعات بسیاری مورد بررسی قرار گرفته است [۲۱]. از زمانی که ویز [۲۲] و آرام [۲۳] پدیده اختلال رسانایی یک الکترون از میان یک سیم دوبعدی باریک را کشف کردند کارهای بسیاری انجام شد که بر مطالعه پراکندگی الکترون از ناخالصی‌ها در یک سیم رسانای کوانتومی متمرکز بود [۲۵، ۲۴]. باگول [۲۶، ۲۴] تاثیر پراکندگی ناخالصی‌ها را بر روی انتقال الکترون در سیم کوانتومی آزمایش کرد. آن‌ها یافتند که پراکندگی تابع موج الکترون در هندسه محدود به طور کیفی

از هندسه‌ی آزاد متفاوت است، که ناشی از وجود مدهای ناپایدار است [۲۶، ۲۷]. در سیم کوانتومی، پتانسیل پراکندگی ناخالصی می‌تواند منجر به ایجاد حالت‌های شبه-مقید همراه با مدهای ناپایدار در هر زیر لایه شود. در دستگاه‌های اسپینترونیکی انتقال وابسته به الکترون از میان نانو ساختارهای شامل اتم‌های مغناطیسی، به طور خاص در آزمایشات و مطالعات مورد علاقه است. از عناصر اصلی در مطالعه ترابرد وابسته با اسپین، برهمکنش مبادله اسپین بین الکترون و ناخالصی مغناطیسی موضعی است.





## فصل ۲

### مفاهیم پایه

در عصر دانش و فناوری نانو، ترابرد وابسته به اسپین شاخه جدیدی در فیزیک ماده چگال نظری و تجربی ایجاد کرده است که اسپینترونیک نام دارد. کلمه اسپینترونیک (ترابرد الکترونی وابسته به اسپین) در سال ۱۹۹۱ طی ظهور یک قطعه‌ی الکترونیکی جدید که بر اساس نقش اسپین حامل‌ها به جای بار آن‌ها یا همراه با آن‌ها ساخته شده بود، به وجود آمد. بهبود فناوری تولید و ساخت نانو ساختارهای چندگانه ما را قادر می‌سازد تا ترابرد وابسته به اسپین در سامانه‌های با بعد کم مانند سیم کوانتومی، نقطه کوانتومی و آرایش نقطه‌های کوانتومی را در یک محیط کاملاً قابل کنترل بررسی کنیم.

ویژگی‌های تراپردی این ساختارها می‌تواند با اتصال آن‌ها با هادی‌ها و عبور جریان از میان مجموعه اندازه‌گیری شود. در اغلب مواقع برای مطالعه‌ی خواص تراپردی نانو ساختارهای کوانتومی، رسانش با تقریب لاندائور محاسبه می‌شود. تقریب لاندائور رسانش الکتریکی وابسته به اسپین را توسط ضریب  $\frac{e^2}{h}$  به ضریب عبور در دمای صفر مربوط می‌سازد. نانو سیم‌های مغناطیسی معمولاً از طرفی به عنوان قطعات الکتریکی بر پایه‌ی اسپین الکترون در نظر گرفته می‌شوند و از طرف دیگر چرخش اسپینی نیز در آن‌ها رخ می‌دهد. بنابراین کنترل جریان وابسته به

اسپین در ادوات اسپینترونیک بسیار مهم است. تاکنون مطالعاتی روی رسانش و سامانه‌های مغناطیسی وابسته به اسپین در انواع سامانه‌های نانو از قبیل سامانه‌های مغناطیسی متصل به هادی‌های غیرمغناطیسی صورت گرفته است. به طور مثال نشان داده شده است که رسانش الکتریکی یک نانو سیم غیرمغناطیسی متصل به هادی‌های مغناطیسی قویاً به آرایش گشتاورهای مغناطیسی در یک یاخته‌ی نانو سیم وابسته است [۹].

## ۱.۲ اسپینترونیک

اسپین یکی از خواص ذاتی ذرات بنیادی است که ماهیتی کاملاً کوانتومی دارد و نقش کلیدی در بوجود آمدن ماده، اتم‌ها و مشخصاً جامدات بازی می‌کند. اما اثر اسپین را در بارزترین شکل خود می‌توان در بوجود آمدن خواص مغناطیسی مواد دید. مطالعه پدیده‌های مغناطیسی با تمرکز روی درک چگونگی بوجود آمدن فازهای مختلف مغناطیسی، زمان زیادی است که به جد در حال انجام است. با این حال تنها در کمتر از سه دهه‌ی اخیر به دلیل پیشرفت‌های فناوری، بررسی دینامیک اسپینی، پدیده‌های غیرتعادلی در سیستم‌های مغناطیسی و ترابرد الکترونی وابسته به اسپین نیز آغاز شده که از آن‌ها به اسپینترونیک یاد می‌شود.

اسپینترونیک در واقع استفاده از اسپین الکترون به جای بار آن در پردازش و انتقال داده‌ها می‌باشد و از طرفی چون اسپین الکترون‌ها در نانو ساختارهای کوانتومی مقید دارای زمان واهلش فاز طولانی و طول همدوسی فاز قابل ملاحظه می‌باشد، لذا بر این مبنا قطعاتی مانند حافظه‌های اسپینی و ترانزیستورهای اسپینی و فیلترهای اسپینی طراحی و ساخته می‌شوند. تراشه‌های اسپینترونیکی نسبت به تراشه‌های میکروالکترونیکی با انرژی کمتر، قدرت و سرعت بیشتر کار می‌کنند. تمام وسایل اسپینترونیکی بر مبنای رویه‌ای ساده عمل می‌کنند:

(الف) اطلاعات در اسپین‌ها به صورت جهت اسپین (بالا یا پایین) ذخیره می‌شوند.

(ب) اسپین‌ها به الکترون‌های متحرک متصل می‌باشند و اطلاعات درون سیم حمل می‌شود.

(ج) اطلاعات در پایانه خوانده می‌شود.

جهت اسپین الکترون‌های انتقالی برای زمانی نسبتاً طولانی ثابت می‌ماند (در حد چند نانوثانیه در مقایسه با ده‌ها فمتوثانیه) که این زمان، وسایل اسپینترونیکی و حسگرهای مغناطیسی را خصوصاً برای ذخیره اطلاعات و

بطور بالقوه برای محاسبات کوانتومی، مناسب می‌سازد. در اسپینترونیک از حالت بالا یا پایین اسپینی به جای صفر و یک یا مثبت و منفی استفاده می‌شود. در آینده، بکارگیری اسپین تحولی در دستگاه‌های میکروالکترونیکی بوجود خواهد آورد. این ویژگی برای ساخت دستگاه‌های دوتایی بسیار کوچک، یعنی در مقیاس اتمی، مورد استفاده قرار می‌گیرد که انرژی کمتری لازم خواهند داشت.

به علاوه با استفاده از طبیعت کوانتومی منحصر به فرد اسپین در انتقال اطلاعات، سرعت بالاتری برای کامپیوترهای کوانتومی در دسترس خواهد بود. وسایل الکترونیکی سنتی بر مبنای انتقال حامل‌های بار الکتریکی بصورت الکترون-حفره در یک نیمه هادی مانند سیلیکون ایجاد شده‌اند. در هر حال اکنون فیزیکدانان سعی دارند برای خلق نسلی جدید و جالب از وسایل اسپینترونیکی، به جای بار الکترون از اسپین آن‌ها استفاده کنند. این وسایل جدید کوچک‌تر تطبیق پذیرتر و قوی‌تر از وسایل حاضر می‌باشند، که بر مبنای تراشه‌های سیلیکونی و قطعات الکترونیکی قرار دارند.

هدف اساسی دانش الکترونیک تولید مدارها و ادوات الکترونیکی است. امروزه دانش الکترونیک بر مبنای فیزیک حالت جامد و نانوفیزیک موفق به تولید مدارها، آی‌سی‌ها، ترانزیستورها و ادوات الکترونیکی گوناگون بر مبنای میکروساختارها و نانو ساختارها شده است. که از ضریب اطمینان بالایی برخوردار بوده و از لحاظ اقتصادی نیز مقرون به صرفه ترند. در این بین اسپینترونیک به عنوان یک شاخه از فیزیک حالت جامد سعی در بکارگیری خاصیت ذاتی اسپین الکترون برای انتقال اطلاعات در قطعات الکترونیکی به منظور تولید نسل جدیدی از این قطعات را دارد. در این بین یکی از مهم‌ترین چالش‌هایی که در اسپینترونیک با آن مواجه هستیم عبارتند از: تزریق اسپین و آشکارسازی اسپین پس از انتقال و کنترل انتقال اسپین. از دیگر چالش‌های مهم در این زمینه وابستگی دمایی است چرا که انتظار می‌رود یک دستگاه بتواند در دمای اتاق و بالاتر بدرستی عمل کند.

هدف اسپینترونیک را می‌توان به صورت دو روی یک سکه دید که در یک سو به دنبال کنترل دینامیک اسپینی با روش‌های الکتریکی است و در سوی دیگر اثر اسپین را در رفتار الکتریکی و الکترونیکی مواد بررسی می‌کند که اکنون در فناوری دیسک‌های سخت از آن استفاده می‌شود. وجود اسپین یا مهم‌تر از آن وجود دسته‌ای از اسپین‌های هم جهت امکان طراحی دستگاه‌های مبتنی بر اسپین را به ما می‌دهد. بخصوص با وجود اصل طرد

پائولی که بیان می‌کند هیچ دو الکترونی را نمی‌توان یافت که در حالت‌های کوانتومی کاملاً یکسان حضور داشته باشند [۲۸]. ارتباط بین درجه آزادی اسپین که توسط اصل طرد پائولی تحمیل می‌شود و بار الکترون می‌تواند منجر به طراحی و تولید نسل جدیدی از ابزارهای کوانتومی شود. هنوز تا هدف نهایی اسپینترونیک که کنترل کامل اسپین و ترابرد آن است به گونه‌ای که الکترونیک داشته باشیم که به جای ترابرد بار، براساس ترابرد اسپینی کار کند راهی دراز در پیش است [۲۹، ۳۰].

## ۲.۲ ترابرد الکترونی وابسته به اسپین

در مطالعه‌ی ترابرد سامانه‌های وابسته به اسپین، به علت وجود برهمکنش میان اسپین الکترون فرودی و پتانسیل ناخالصی دامنه‌ی تابع موج انتقال یافته و ضریب عبور به نوع اسپین الکترون فرودی وابسته خواهد بود. بنابراین در نوشتن هامیلتونی چنین سامانه‌های باید اثر این برهمکنش‌ها نیز در نظر گرفته شود.

هامیلتونی = انرژی جنبشی + انرژی پتانسیل با در نظر گرفتن اثر اسپین

به عنوان مثال، یک ناخالصی مغناطیسی را در نظر بگیرید که یک میدان مغناطیسی تولید می‌کند. این میدان مغناطیسی با اسپین الکترون برهمکنش خواهد داشت. گشتاور مغناطیسی الکترونی وابسته به اسپین از رابطه زیر تعریف می‌شود:

$$\vec{\mu} = -\frac{eg\vec{S}}{2m^*} \quad (۱.۲)$$

که در آن  $e$  بار الکترون،  $m^*$  جرم موثر الکترون و  $g$  را نسبت ژیرومغناطیسی گویند (برای الکترون  $g = ۲$  است). در نتیجه هامیلتونی حاصل از برهمکنش میدان مغناطیسی  $\vec{B}$  با اسپین الکترون  $\vec{S}$  به صورت زیر بدست می‌آید.

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{eg\vec{B} \cdot \vec{S}}{2m^*} \quad (۲.۲)$$

اگر اسپین  $\vec{S}$  را برحسب ماتریس‌های پائولی بنویسیم، خواهیم داشت:

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \Rightarrow H = \frac{eg\hbar\vec{B} \cdot \vec{\sigma}}{4m^*} = \vec{h} \cdot \vec{\sigma} \quad (۳.۲)$$

که در آن  $\vec{h}$  عملگر تعویض اسپینی است. این هامیلتونی باعث تغییر اسپین الکترون در برهمکنش با میدان مغناطیسی می‌شود. بردار  $\vec{h}$  را می‌توان برحسب بردارهای یکه در مختصات دکارتی بصورت زیر نوشت:

$$\vec{h} = h \sin(\theta) \cos(\varphi) \hat{i} + h \sin(\theta) \sin(\varphi) \hat{j} + h \cos(\theta) \hat{k} \quad (4.2)$$

که در آن  $\theta$  زاویه با محور  $z$  و  $\varphi$  زاویه با محور  $x$  در صفحه  $x - y$  است. همچنین  $\vec{\sigma}$  را نیز در مختصات دکارتی می‌توان چنین نوشت:

$$\vec{\sigma} = \sigma_x \hat{i} + \sigma_y \hat{j} + \sigma_z \hat{k} \quad (5.2)$$

بنابراین می‌توان نوشت

$$\vec{h} \cdot \vec{\sigma} = h \sigma_x \sin(\theta) \cos(\varphi) + h \sigma_y \sin(\theta) \sin(\varphi) + h \sigma_z \cos(\theta) \quad (6.2)$$

با جایگزاری مولفه‌های ماتریس پائولی

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (7.2)$$

بدست می‌آید

$$\vec{H} = \vec{h} \cdot \vec{\sigma} = h \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) e^{-i\varphi} \\ \sin(\theta) e^{i\varphi} & -\cos(\theta) \end{pmatrix} \quad (8.2)$$

ماتریس فوق هامیلتونی حاصل از برهمکنش اسپین الکترون با میدان مغناطیسی را می‌دهد که در نوشتن هامیلتونی وابسته به اسپین مقدار این عملگر نیز باید منظور شود.

## ۳.۲ نیم‌رسانا

نیم‌رسانا یا نیمه‌هادی<sup>۱</sup> عنصر یا ماده‌ای است که در حالت عادی عایق باشد، ولی با افزودن مقداری ناخالصی قابلیت هدایت الکتریکی پیدا کند (منظور از ناخالصی عنصر یا عناصر دیگری است غیر از عنصر اصلی یا پایه. مثلاً اگر عنصر پایه سلیسیوم باشد ناخالصی می‌تواند آلومنیوم یا فسفر باشد). میزان مقاومت الکتریکی نیم‌رساناها بین

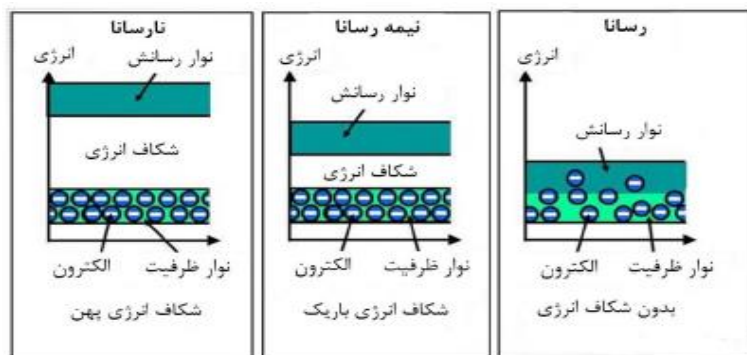
<sup>1</sup>Semiconductor

رساناها و نارساناها می‌باشد. از نیم‌رساناها برای ساخت قطعاتی مانند دیود، ترانزیستور، تریستور، آی سی، سیلیکون و... استفاده می‌شود. ظهور نیم‌رساناها در علم الکترونیک انقلاب عظیمی را در این علم ایجاد کرده که اختراع کامپیوتر یکی از دستاوردهای این انقلاب است.

## ۴.۲ برخی ویژگی‌های نیم‌رساناها

یکی از ویژگی‌های جالب مواد نیم‌رسانا، که آن‌ها را از مواد رسانا متمایز می‌کند، چگونگی تغییر مقاومت ویژه الکتریکی آن‌ها با تغییرات دما است. همانطور که می‌دانیم افزایش دما موجب افزایش مقاومت ویژه الکتریکی مواد رسانا می‌شود. علت این پدیده نیز افزایش تعداد و شدت برخورد الکترون‌های آزاد با اتم‌های در حال نوسان در جسم رسانا است. با افزایش دما، جنبش ذرات تشکیل‌دهنده‌ی جسم بیشتر می‌شود و بنابراین تعداد و شدت برخورد الکترون‌های آزاد با اتم‌های جسم افزایش می‌یابد. یعنی الکترون‌ها که حاملان بار الکتریکی در جسم جامد رسانا هستند، برای انتقال بار الکتریکی با موانع بیشتری برخورد می‌کنند و در نتیجه رسانایی الکتریکی جسم کاهش می‌یابد. آزمایش نشان می‌دهد، برخلاف رسانا، در نیم‌رسانا افزایش دما موجب کاهش مقاومت ویژه الکتریکی نیم‌رسانا می‌شود. توجیه این پدیده در نیم‌رسانا تنها با استفاده از نظریه‌ی نواری امکان‌پذیر است.

در شکل ۱.۲ ساختار نواری یک نیم‌رسانا نشان داده شده است. همان‌گونه که در تصویر می‌بینیم در دماهای پایین نوار ظرفیت نیم‌رسانا کاملاً پر از الکترون و نوار رسانش کاملاً خالی از الکترون است. از این رو نه نوار ظرفیت در رسانش نقشی دارد (چون نوار کاملاً پر است و هیچ الکترونی امکان‌گذار درون نوار را ندارد) و نه در نوار رسانش الکترونی هست تا موجب رسانایی الکتریکی شود. بنابراین در دماهای پایین، نیم‌رسانا مشابه نارسانا رفتار می‌کند. با افزایش دما، تعدادی از الکترون‌های نوار ظرفیت به نوار رسانش گذار می‌کنند. بدین ترتیب هم الکترون‌هایی که در نوار رسانش قرار می‌گیرند، موجب رسانایی الکتریکی می‌شوند و هم تعدادی تراز خالی در نوار ظرفیت ایجاد می‌شود. از این رو امکان‌گذار برای الکترون‌های نوار ظرفیت نیز (در همان نوار) فراهم می‌شود. به بیان دیگر، در این حالت هم نوار رسانش در رسانایی الکتریکی نقش دارد و هم نوار ظرفیت. به همین ترتیب با افزایش دما هم تعداد الکترون‌های نوار رسانش بیشتر می‌شود و هم ترازهای خالی نوار ظرفیت افزایش می‌یابد. این مسئله سبب افزایش رسانایی الکتریکی نیم‌رسانا می‌شود. اما مسئله به همین جا ختم نمی‌شود در نیم‌رسانا علاوه بر الکترون‌هایی که در نوار رسانش قرار می‌گیرند و در رسانایی الکتریکی نقش دارند، جای خالی ایجاد شده



شکل ۱.۲: مقایسه رسانا با نیم‌رسانا و نارسانا و نوارهای رسانش آن‌ها

در نوار ظرفیت نیز (که به دلیل گذار الکترون‌ها به نوار رسانش تشکیل شده)، موجب رسانایی الکتریکی می‌شود.

با گذار الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش، تعدادی جای خالی الکترون در نوار ظرفیت ایجاد می‌شود. جای خالی الکترون در نوار ظرفیت را حفره می‌گوییم. حالا با ایجاد این جاهای خالی در نوار ظرفیت، الکترون‌های این نوار هم می‌توانند گذار انجام دهند و از تراز انرژی پایین‌تر به تراز انرژی بالاتر بروند که این مسئله موجب رسانایی الکتریکی می‌شود.

گذار الکترون از تراز اولیه خود به تراز خالی، مشابه آن است که بگوییم حفره از تراز بالاتر به تراز اولیه الکترون گذار کرده است. بنابراین به جای آن که بگوییم الکترون درون نوار ظرفیت گذار کرده است، می‌گوییم حفره تراز خود را تغییر داده است. در واقع زیاد بودن تعداد الکترون‌ها، بررسی گذار آن‌ها را دشوار می‌کند اما چون تعداد حفره‌ها کم است، در نظر گرفتن آن‌ها ساده‌تر است. نکته دیگری که باید به آن اشاره کرد، نحوه تعیین بار حفره‌های نوار ظرفیت است. از آنجایی که حفره‌ها، برخلاف الکترون‌ها، از تراز بالاتر به تراز پایین‌تر گذار می‌کنند، قرارداد می‌کنیم که بار آن‌ها را مثبت در نظر بگیریم. پس در نیم‌رسانا دو نوع حامل بار الکتریکی داریم، یکی الکترون‌های نوار رسانش و دیگری حفره‌های نوار ظرفیت.

## ۵.۲ آرایش نیم‌رسانا

نیم‌رسانایی را که ناخالصی نداشته باشد، نیم‌رسانای ذاتی می‌گوییم. در نیم‌رسانای ذاتی تعداد الکترون‌های موجود در نوار رسانش با تعداد حفره‌های موجود در نوار ظرفیت با هم برابرند. با افزایش دما می‌توان تعداد حاملان بار الکتریکی و در نتیجه رسانایی الکتریکی را در مواد نیم‌رسانا افزایش داد. علاوه بر افزایش دما، با اضافه کردن مقادیر کمی ناخالصی به ماده‌ی نیم‌رسانا نیز می‌توان تعداد حامل‌های بار الکتریکی را به طور قابل ملاحظه‌ای افزایش داد. منظور از ناخالصی، اتم‌های غیر هم‌جنس با اتم‌های نیم‌رسانا است. به عمل اضافه کردن ناخالصی به نیم‌رسانا «آرایش نیم‌رسانا» می‌گویند و نیم‌رسانایی را که به آن اتم‌های ناخالصی اضافه شده است، نیم‌رسانای غیرذاتی می‌نامند. با افزودن ناخالصی به نیم‌رسانا، مقاومت ویژه‌ی الکتریکی آن کاهش می‌یابد و در نتیجه رسانایی الکتریکی نیم‌رسانا به صورت قابل توجهی بیشتر می‌شود.

آرایش نیم‌رسانا به دو روش مختلف انجام می‌شود. یک روش آن است که اتم ناخالصی یک الکترون ظرفیت بیشتر از اتم‌های نیم‌رسانای ذاتی داشته باشد و روش دیگر آن است که اتم ناخالصی یک الکترون ظرفیت کمتر از اتم‌های نیم‌رسانای ذاتی داشته باشد. به عنوان مثال دو نیم‌رسانای معروف که در بسیاری از قطعات الکترونیکی استفاده می‌شوند، عناصر سیلیسیوم ( $Si$ ) و ژرمانیوم ( $Ge$ ) هستند که هر دو چهار الکترون ظرفیت دارند. با اضافه کردن مقادیری ناخالصی از جنس فسفر ( $Ge$ ) یا آرسنیک ( $As$ ) که دارای پنج الکترون ظرفیت هستند به سیلیسیوم یا ژرمانیوم، نیم‌رسانا را به روش اول آرایش کرده‌ایم. همچنین با افزودن مقادیری ناخالصی از جنس بور ( $B$ ) یا آلومینیوم ( $Al$ ) که دارای سه الکترون ظرفیت هستند به سیلیسیوم یا ژرمانیوم، نیم‌رسانا را به روش دوم آرایش کرده‌ایم.

نیم‌رسانایی را که به روش اول آراییده می‌شود، یعنی اتم ناخالصی یک الکترون ظرفیت بیشتر از اتم نیم‌رسانا داشته باشد، نیم‌رسانای نوع  $n$  می‌گوییم و نیم‌رسانایی را که به روش دوم آراییده می‌شود، یعنی اتم ناخالصی یک الکترون ظرفیت کمتر از اتم نیم‌رسانا داشته باشد، نیم‌رسانای نوع  $p$  می‌گوییم [۳۶].



## ۶.۲ سیم کوانتومی

اگر توده‌ای از اتم‌ها و مولکول‌ها داشته باشیم که هیچ نوع محدودیتی نداشته باشند و الکترون‌ها بتوانند در جهت دلخواه حرکت کنند، در چنین جسمی اثرات کوانتومی نمود نخواهند داشت، انرژی این دستگاه کاملاً پیوسته است و هر مقداری می‌تواند باشد. چاه کوانتومی از محدود کردن توده بالا در یک جهت بدست می‌آید. بدین معنی که ماده دارای مجموعه‌ای از سطوح مختلف انرژی است که هر مجموعه را به اسم نوار می‌شناسیم، مانند نوار ظرفیت و نوار رسانش. الکترون‌هایی که در نوار ظرفیت هستند، در واقع مقید به هسته بوده و نمی‌توانند به آسانی در ماده حرکت کنند و برای اینکه بتوانند از قید هسته رهایی پیدا کنند، باید به یک نوار رسانش بروند. بدین منظور باید انرژی لازم برای رفتن از نوار ظرفیت به نوار رسانش را داشته باشند. به فاصله بین این دو نوار گاف انرژی می‌گویند. در فلزات این گاف صفر است، در مواد عایق از مرتبه چندین الکترون ولت و در مواد نیم‌رسانا بین این دو انرژی است. در یک ماده رسانا الکترون‌ها به راحتی می‌توانند در هر جهتی حرکت کنند. حال اگر در یک راستا مثلاً در چپ و راست این ماده، ماده‌ای دیگر قرار دهیم، سامانه تبدیل به یک چاه کوانتومی می‌شود. بدین معنی که سطح انرژی ماده اولیه پایین‌تر از ماده محدودکننده است و الکترون‌ها در ماده اولیه باید به یک سطح انرژی بالاتری برسند و این یعنی چاه کوانتومی، بررسی چاه کوانتومی از مهم‌ترین مسائل در فیزیک کوانتومی است که کاربردهای فراوانی در نیم‌رساناها دارد. توجه کنید که ما توده را در یک جهت محدود کردیم و در دو جهت دیگر الکترون‌ها می‌توانند آزادانه حرکت کنند. اما اگر چاه را در یک جهت دیگر مثل بالا و پایین محدود کنیم، به یک سیم می‌رسیم. سیمی که در یک جهت الکترون‌ها می‌توانند آزادانه حرکت کنند. سیم‌های معمولی هم همین‌گونه‌اند یعنی در یک جهت تا بی‌نهایت ادامه دارند و در دو جهت دیگر محدود هستند و به همین خاطر به این سامانه سیم کوانتومی می‌گویند.

اگر ابعاد یک ماده حجیم را تا حد نانومتر یا کمتر کوچک کنیم در خواص ماده تغییراتی بوجود می‌آید که بررسی آن‌ها تنها از دیدگاه کوانتومی امکان پذیر است. در صورتی که تنها یک بعد را کوچک کنیم و دو بعد دیگر همچنان در ابعاد ماکرو باشند ماده‌ی بدست آمده را چاه کوانتومی می‌نامند و اگر دو بعد را کوچک کنیم و تنها یک بعد در ابعاد ماکرو باقی بماند، ساختار بدست آمده را سیم کوانتومی می‌نامند و اگر هر سه بعد را محدود کنیم ساختار بدست آمده یک نقطه کوانتومی خواهد بود. در سیم‌های کوانتومی الکترون‌های محبوس شده رفتاری شبه-یک بعدی از خود نشان می‌دهند، به عبارت دیگر در این سامانه‌ها حرکت الکترون‌ها در دو راستا محدود بوده

و فقط در امتداد محور سیم آزادانه حرکت می‌کنند [۱۲].

روش‌های مختلفی برای ساخت سیم کوانتومی وجود دارد. شکل ۲.۲ چگونگی ساخت یک سیم را نشان می‌دهد. در ابتدا یک لایه نازک نشانده می‌شود که یک چاه کوانتومی است. این لایه می‌تواند توسط ماده‌ای که به عنوان سد پتانسیل برای حرکت حامل‌های بار به کار می‌رود، پر شود. سپس می‌توان با نازک کردن لایه در جهت محور  $x$  یا  $y$  به سیم کوانتومی دست یافت. در شکل ۳.۲ حرکت حامل‌های بار در دو جهت  $y$  و  $z$  محدود شده است. و حامل‌های بار تنها در راستای  $x$  می‌توانند حرکت کنند. برای محاسبه ویژه مقادیر انرژی و تابع موج از معادله شرودینگر استفاده می‌کنیم. معادله شرودینگر در سه بعد بصورت زیر است:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \psi(x, y, z) + V(x, y, z)\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (9.2)$$

که در آن  $m^*$  جرم موثر ذره است. با در نظر گرفتن محور  $x$  به عنوان راستای محور سیم (حامل‌های بار تنها در جهت  $x$  می‌توانند حرکت کنند) می‌توان انرژی پتانسیل  $V(x, y, z)$  را بصورت مجموع یک پتانسیل محدود کننده‌ی دو بعدی و یک پتانسیل در راستای سیم نوشت

$$V(x, y, z) = V(x) + V(y, z) \quad (10.2)$$

همچنین می‌توان تابع موج را به صورت زیر نوشت:

$$\psi(x, y, z) = \psi(x)\psi(y, z) \quad (11.2)$$

با جایگذاری معادله (۱۱.۲) و (۱۰.۲) در (۹.۲) و با نوشتن انرژی به صورت  $E = E_x + E_{y,z}$  رابطه زیر بدست می‌آید:

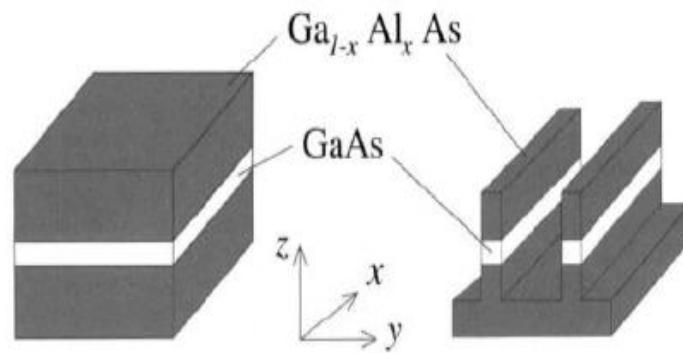
$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x)\psi(y, z) + [V(x) + V(y, z)]\psi(x)\psi(y, z) = [E(x) + E(y, z)]\psi(x)\psi(y, z) \quad (12.2)$$

معادله فوق را می‌توان به دو صورت زیر تفکیک کرد و نوشت:

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} (\psi(y, z) \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2}) + \psi(y, z)V(x)\psi(x) = \psi(y, z)E_x\psi(x) \quad (13.2)$$

و صورت دوم به صورت زیر است:

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left( \psi(x) \frac{\partial^2 \psi(y, z)}{\partial y^2} + \psi(x) \frac{\partial^2 \psi(y, z)}{\partial z^2} \right) + \psi(x)V(y, z)\psi(y, z) = \psi(x)E_{y,z}\psi(y, z) \quad (14.2)$$



شکل ۲.۲: شبیه سازی مراحل ساخت یک سیم کوانتومی به صورت طرح وار.

در اولین معادله  $\psi(y, z)$  و در دومین معادله  $\psi(x)$  از هیچ اپراتوری تاثیر نمی گیرند، بنابراین می توان آن ها را بر طرفین تقسیم کرد. همچنین فرض می کنیم  $V(x) = 0$  باشد در نتیجه دو معادله فوق را می توان بصورت زیر نوشت:

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} \right) = E_x \psi(x) \quad (15.2)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{\partial^2 \psi(y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(y, z)}{\partial z^2} \right) + V(y, z) \psi(y, z) = E_{y,z} \psi(y, z) \quad (16.2)$$

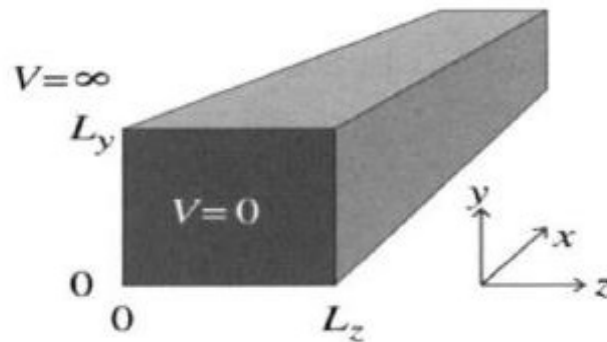
جواب معادله اول همان موج تخت خواهد بود. تابع موج و ویژه مقادیر انرژی متناظر با آن به صورت است:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \quad (17.2)$$

$$E_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} = \frac{p_x^2}{2m^*} \quad (18.2)$$

در این جا  $E_x$  پیوسته است زیرا در جهت  $x$  ذره می تواند تا بی نهایت حرکت کند. حالت های مقید زمانی روی می دهند که ذره نمی تواند به بی نهایت حرکت کند یعنی ذره مقید به حرکت در داخل یک ناحیه متناهی و محدود از فضاست در چنین شرایطی است که معادله شرودینگر تنها جواب هایی را قبول می کند که گسسته باشند.

دومین معادله (۱۶.۲) صرفاً یک معادله شرودینگر برای یک پتانسیل دو بعدی است که مختص به سیم کوانتومی است. حل این معادله به شکل هندسی سیم و توانایی ما در جداسازی معادله به مولفه‌های مستقل از هم بستگی دارد. در ساده‌ترین حالت، یک سیم کوانتومی با سطح مقطع مستطیل و عمق بی‌نهایت مانند شکل ۳.۲ را در نظر بگیرید. پتانسیل در داخل سیم را برابر با صفر  $V(x, y, z) = 0$  و پتانسیل در خارج از سیم را برابر



شکل ۳.۲: یک سیم کوانتومی با سطح مقطع مستطیلی و عمق بی‌نهایت.

بی‌نهایت در نظر می‌گیریم. بنابراین در خارج از سیم تابع موج صفر است. با توجه به معادله (۱.۲) خواهیم داشت  $V(y, z) = 0$  در نتیجه معادله (۱۶.۲) را می‌توان بصورت زیر نوشت:

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{\partial^2 \psi(y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(y, z)}{\partial z^2} \right) = E_{y,z} \psi(y, z) \quad (19.2)$$

شکل پتانسیل به ما این امکان را می‌دهد که بتوانیم تابع موج را به صورت زیر تفکیک کنیم:

$$\psi(y, z) = \psi(y)\psi(z) \quad (20.2)$$

در نتیجه

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left( \psi(z) \frac{\partial^2 \psi(y)}{\partial y^2} - \frac{(-\hbar^2)}{2m^*} \psi(y) \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} \right) = \psi(z) E_y \psi(y) + \psi(y) E_z \psi(z) \quad (21.2)$$

فرآیند جداسازی به صورت زیر کامل می‌شود:

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left( \psi(z) \frac{\partial^2 \psi(y)}{\partial y^2} \right) = \psi(z) E_y \psi(y) \quad (22.2)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*}(\psi(y)\frac{\partial^2\psi(z)}{\partial z^2}) = \psi(y)E_z\psi(z) \quad (23.2)$$

با تقسیم رابطه اول بر  $\psi(z)$  و رابطه دوم بر  $\psi(y)$  بدست می‌آوریم:

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*}(\frac{\partial^2\psi(y)}{\partial y^2}) = E_y\psi(y) \quad (24.2)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*}(\frac{\partial^2\psi(z)}{\partial z^2}) = E_z\psi(z) \quad (25.2)$$

شرایط مرزی ایجاب می‌کند که  $\psi(y)$  و  $\psi(z)$  در لبه‌های سیم برابر صفر باشند. اگر ابعاد سیم را  $L_y$  و  $L_z$  در نظر بگیریم شکل ۳.۲ با انتخاب مبدا در گوشه خواهیم داشت:

$$E_y = \frac{n_y^2\pi^2\hbar^2}{2m^*L_y^2} \psi(y) = \sqrt{\frac{2}{L_y}} \sin(\frac{n_y\pi y}{L_y}) \quad (26.2)$$

$$E_z = \frac{n_z^2\pi^2\hbar^2}{2m^*L_z^2} \psi(z) = \sqrt{\frac{2}{L_z}} \sin(\frac{n_z\pi z}{L_z}) \quad (27.2)$$

بنابراین در این حالت انرژی گسسته می‌شود و ترازهای انرژی در یک سیم کوانتومی توسط دو عدد  $n_z$  و  $n_y$  بیان می‌شود.

## ۷.۲ ویژه حالات اسپینی یک الکترون در حضور پراکندگی

یک الکترون فرودی را در نظر بگیرید که توسط یک یون بعنوان ناخالصی پراکنده می‌شود. اگر فرض شود که  $\sigma$  اسپین الکترون و  $S$  اسپین یون باشد در نتیجه با توجه به خواص کوانتومی این عملگرها داریم

$$[\sigma.S, \sigma_z] \neq 0 \quad [\sigma.S, S_z] \neq 0 \quad (28.2)$$

تابع پتانسیل ناخالصی را به صورت  $V_{imp} = \gamma(\vec{\sigma} \cdot \vec{S})\delta(x)\delta(y - y_i)$  در نظر می‌گیریم. که در  $\gamma$  نشان دهنده

قدرت پراکندگی است. اگر جمله  $\vec{\sigma} \cdot \vec{S}$  را به صورت ساده‌تر بنویسیم:

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{S} = \frac{(\vec{\sigma} + \vec{S})^2 - \sigma^2 - S^2}{2} \quad (29.2)$$

که در آن  $\vec{\sigma} + \vec{S} = I$  تعریف می‌شود.  $I$  عملگر اسپین کل است و ویژه توابع آن را  $\chi_{I,m}$  نشان می‌دهیم. که  $\chi_{I,m}$  تابع موج الکترون و یون است. سپس می‌توان رابطه (۲۹.۲) را بصورت زیر نوشت

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{S} = \frac{I^2 - \sigma^2 - S^2}{2} \quad (30.2)$$

اگر عملگر  $I^2$  بر روی  $\chi_{I,m}$  اثر کند:

$$I^2 \chi_{I,m} = I(I+1) \hbar^2 \chi_{I,m} \quad (31.2)$$

و همچنین برای الکترون  $\sigma = \frac{1}{2}$  است، بنابراین داریم:

$$\sigma^2 X_{\pm} = \pm \frac{3}{4} \hbar^2 X_{\pm} \quad (32.2)$$

$$\sigma_z X_{\pm} = \pm \frac{1}{2} X_{\pm} \quad (33.2)$$

که در آن  $X_{\pm}$  ویژه حالت‌های اسپین الکترون هستند. با فرض اینکه، اسپین یون یا ناخالصی مغناطیسی برابر  $S = \frac{1}{2}$  است در این صورت داریم:

$$S^2 \xi_{\pm} = \pm \frac{3}{4} \hbar^2 \xi_{\pm} \quad (34.2)$$

$$S_z \xi_{\pm} = \pm \frac{1}{2} \hbar \xi_{\pm} \quad (35.2)$$

که در آن  $\xi_{\pm}$  ویژه حالت‌های اسپین یون هستند. مقدار عملگر اسپین کل  $I = 0, 1$  است که در این صورت چهار حالت داریم:

$$I = 1 \Rightarrow m = 1, m = 0, m = -1 \quad , \quad I = 0 \Rightarrow m = 0 \quad (36.2)$$

در این صورت چهار ویژه تابع وجود دارد:

$$\chi_{1,1}, \chi_{1,0}, \chi_{1,-1}, \chi_{0,0} \quad (37.2)$$

که ویژه حالات بالا برابر با حاصلضرب ویژه تابع الکترون در یون هستند:

$$\begin{aligned} \chi_{1,1} &= X_+\xi_+ \\ \chi_{1,0} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(X_+\xi_+ + X_-\xi_+) \\ \chi_{1,-1} &= X_-\xi_- \\ \chi_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(X_+\xi_+ - X_-\xi_+) \end{aligned} \quad (38.2)$$

با استفاده از خصوصیات ویژه توابع که  $\langle X_n|X_m \rangle = \delta_{nm}$  و  $\langle \xi_n|\xi_m \rangle = \delta_{nm}$ ، برای  $\chi_{I,m}$  داریم:

$$\langle \chi_{I,m}|\chi_{I',m'} \rangle = \delta_{II'}\delta_{mm'} \quad (39.2)$$

بنا به روابط بالا اگر حالت‌های مختلف اسپین الکترون و یون را برحسب  $\chi_{I,m}$  بنویسیم:

$$\begin{aligned} X_+\xi_+ &= \chi_{1,1} \quad \text{اسپین یون بالا و الکترون بالا} \\ X_-\xi_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{1,0} - \chi_{0,0}) \quad \text{اسپین یون بالا و الکترون پایین} \\ X_-\xi_- &= \chi_{1,-1} \quad \text{اسپین یون پایین و الکترون پایین} \\ X_+\xi_- &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{1,0} + \chi_{0,0}) \quad \text{اسپین یون پایین و الکترون بالا} \end{aligned}$$

در حالت‌هایی که اسپین یون و الکترون موازی هستند  $(\chi_{1,1}, \chi_{1,-1})$ ، خود ویژه حالت‌ها بخش اسپینی پتانسیل ناخالصی  $V_{imp}$  (پتانسیل پراکندگی) هستند. بنابراین در اثر پراکندگی این ویژه حالت‌های اسپینی تغییر نمی‌کنند، یعنی پراکندگی حالات اسپینی آن‌ها را تغییر نمی‌دهد. اما اگر الکترون و یون اسپین پادموازی داشته باشند در اثر پراکندگی امکان چرخش اسپین وجود خواهد داشت.





## فصل ۳

# رهیافت

### ۱.۳ مقدمه

انتقال الکترون از طریق سیم‌های کوانتومی که اغلب نانوسیم نامیده می‌شوند، به صورت نظری و آزمایشگاهی به طور گسترده‌ای مورد مطالعه قرار گرفته است [۱۸، ۵]. در این بین وجود نقص در سیم و تاثیرات آن بر دامنه پراکندگی و رسانندگی از موضوعات مهم است [۴، ۳]. یکی از مهم‌ترین مسائل این است که چگونه نقص در سیم کوانتومی بر دامنه پراکندگی و رسانایی اثر می‌گذارد [۲۱، ۵]. این موضوع در تحقیقات مختلفی بحث شده است و یکی از نتایج مهم آن این است که وجود ناخالصی یا نقص در سیم، موجب کاهش رسانایی می‌شود.

مسئله پراکندگی الکترونی در سیم کوانتومی دوبعدی در حضور یک نقص تابع دلتا در گذشته با استفاده از دو روش مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته بود [۲۰، ۳۱]. چو و سولبور [۶] یک روش بر اساس قیاس با روش تصویر در الکترواستاتیک برای مدهای منتشر شده به کار بردند، در حالی که باگول [۲۰] روش تطبیق مد را به کار برد [۳۲، ۳۳] که در آن تابع موج و مشتقات آن در محل نقص به هم مرتبط هستند. می‌توان این کار را

با استفاده از معادله لیپمن-شوینگر ( $LSE$ ) انجام داد [۳]. یکی از مزیت‌های روش لیپمن-شوینگر این است که می‌توان بصورت خودسازگار مسئله را برای پتانسیل‌های مختلف حل کرد در این حالت معادله انتگرالی برای تابع موج می‌تواند به طور مکرر تکرار شود و این منجر به تشکیل سری بورن می‌شود که به عنوان تقریب مفید است و برای مطالعه پتانسیل‌های پراکندگی پیچیده مورد استفاده قرار می‌گیرد. از دیگر مزیت‌های این روش آن است که می‌توان تاثیر موقعیت ناخالصی روی انتقال کامل و تشکیل حالت‌های شبه مقید را بررسی نمود. نشان داده شده است برای موقعیت خاص در نظر گرفته شده، مدهای طبیعی گره‌هایی دارند که باعث می‌شود اثر انتقال کامل در کمینه هر زیر نوار<sup>۱</sup> از بین رفته و حالت‌های شبه-مقید<sup>۲</sup> نیز در پایین‌تر زیر نوار تشکیل شوند.

## ۲.۳ معادله لیپمن-شوینگر در سیم کوانتومی دو بعدی

یک سیم دو بعدی بی‌نهایت طویل را در نظر بگیرید بطوری که الکترون‌ها در جهت محور  $y$  محدود شده‌اند (جهت عرضی) اما در جهت محور  $x$  می‌توانند آزادانه حرکت کنند (جهت انتشار). همانطور که در شکل ۱.۳ نشان داده شده است. هامیلتونی کل سیستم به صورت زیر نوشته می‌شود

$$H = H_0 + V \quad (1.3)$$

که در آن  $H_0$  بیانگر جمع عملگر انرژی جنبشی به علاوه پتانسیل محدود کننده  $V_c(y)$  است بطوری که

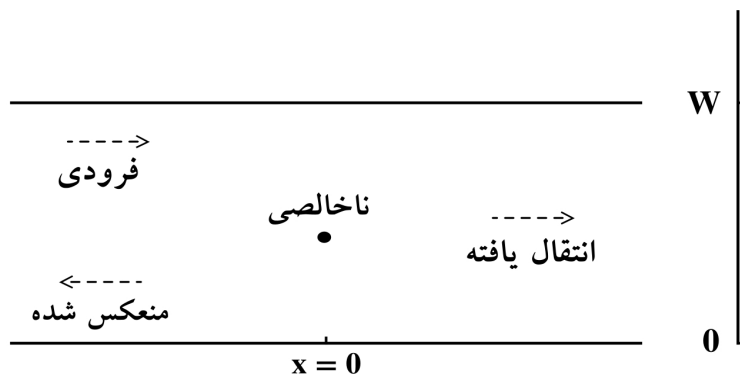
$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V_c(y) \quad (2.3)$$

پتانسیل محدود کننده  $V_c(y)$  فقط به جهت عرضی  $y$  بستگی دارد. همچنین پتانسیل  $V = V(x, y)$  پتانسیل پراکندگی هر نقص یا ناخالصی در سیم است. در غیاب یک پراکندگی،  $V$  باید صفر باشد و ویژه حالت‌های ذره همان ویژه حالت‌های ذره آزاد  $|p\rangle$  هستند که از معادله ویژه مقدراری  $H_0 |p\rangle = E |p\rangle$  تبعیت می‌کنند. اگر از  $\langle \psi^{(0)} |$  برای نمایش ویژه حالت ذره آزاد استفاده کنیم می‌توان تابع موج ذره آزاد را به صورت زیر نوشت

$$\langle x | \psi^{(0)} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ip_x x}{\hbar}} \phi_n(y) = \psi^{(0)}(x, y) \quad (3.3)$$

<sup>1</sup>Subband

<sup>2</sup>Quasi-bound



شکل ۱.۳: یک موج الکترونی که از سمت چپ فرود می‌آید و توسط یک ناخالصی پراکنده می‌شود.

که  $\phi_n(y)$  مدهای عادی (کانال‌های کوانتومی) سیم است که می‌تواند حقیقی انتخاب شود و به صورت راست هنجار است. ویژه مقادیر انرژی  $H_0$  برابر است با:

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + E_n = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + E_n \quad (4.3)$$

که در آن  $p_x = \hbar k_x$  پیوسته است،  $n$  نشان دهنده زیر نوارها و  $E_n$  انرژی زیر نوارهاست. در حضور پراکندگی، معادله شرودینگر به صورت زیر است که می‌بایست حل شود:

$$(H_0 + V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (5.3)$$

پاسخ از معادله زیر بدست می‌آید

$$|\psi_p^{(+)}\rangle = |\psi_p^{(0)}\rangle + \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon_0} V |\psi_p^{(+)}\rangle \quad (6.3)$$

که معادله لیپمن-شرودینگر در نظریه پراکندگی است. این حل مطابق با موج فرودی بعلاوه یک موج خروجی است. با ضرب معادله (۶.۳) در  $\langle x|$  و با استفاده از رابطه کاملیت:

$$\int d^2x' \langle x'| \langle x'| = 1 \quad (7.3)$$

معادله (۶.۳) به معادله انتگرالی پراکندگی زیر تبدیل می‌شود

$$\langle x|\psi_p^{(+)}\rangle = \langle x|\psi_p^{(0)}\rangle + \int d^2x' \langle x|\frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon_0}|x'\rangle \langle x'|V|\psi_p^{(+)}\rangle \quad (8.3)$$

ما باید انتشارگر معادله (۸.۳) را حساب کنیم. انتشارگر (تابع گرین) به صورت زیر نوشته می‌شود.

$$G_+(x, x') = \frac{\hbar^2}{2m} \langle x|\frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon_0}|x'\rangle \quad (9.3)$$

با دو مرتبه استفاده از رابطه کاملیت زیر

$$\int d^3 p' |p'\rangle \langle p'| = 1 \quad (10.3)$$

تابع گرین به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$G_+(x, x') = \frac{\hbar^3}{\sqrt{m}} \int d^3 p' \int d^3 p'' \langle x|p'\rangle \langle p'| \frac{1}{E - p'^2/\sqrt{m} + i\epsilon} |p''\rangle \langle p''|x'\rangle \quad (11.3)$$

اکنون نیاز داریم تا  $\langle p'|p''\rangle$  را محاسبه کنیم. دوباره از معادله (۷.۳) استفاده می‌کنیم و با توجه به این که

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ip_x x}{\hbar}} \phi_n(y) \quad (12.3)$$

$$\langle p'|p''\rangle = \int \langle p'|x\rangle \langle x|p''\rangle d^3 x = \int \int \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{ip'_x \cdot x}{\hbar}} \phi_{n'}(y) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ip''_x \cdot x}{\hbar}} \phi_{n''}(y) dx dy$$

با ساده کردن معادله بالا

$$\langle p'|p''\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\frac{i(p''_x - p'_x) \cdot x}{\hbar}} \int_0^w dy \phi_{n'}(y) \phi_{n''}(y) = \delta(p''_x - p'_x) \delta_{n'n''} \quad (13.3)$$

با قرار دادن معادله (۱۳.۳) در (۱۱.۳) و تبدیل زیر می‌توان  $G_+(x, x')$  را محاسبه کرد

$$\int d^3 p' \int d^3 p'' \rightarrow \sum_{n', n''} \int_{-\infty}^{\infty} dp'_x \int_{-\infty}^{\infty} dp''_x \quad (14.3)$$

برای محاسبه  $G_+(x, x')$  از معادله (۱۱.۳) داریم:

$$G_+(x, x') = \frac{\hbar^3}{\sqrt{m}} \sum_{n', n''} \int_{-\infty}^{\infty} dp'_x \int_{-\infty}^{\infty} dp''_x \langle x|p'\rangle \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\frac{i(p''_x - p'_x) \cdot x}{\hbar}} \frac{1}{E - \frac{p'^2}{m} + i\epsilon} \int_0^w dy \phi_{n'}(y) \phi_{n''}(y) \right\} \langle p''|x'\rangle \quad (15.3)$$

اگر رابطه بالا را با توجه به دو رابطه  $\delta_{n'n''} = \int_0^w dy \phi_{n'}(y) \phi_{n''}(y)$  و  $\delta(p''_x - p'_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\frac{i(p''_x - p'_x) \cdot x}{\hbar}}$

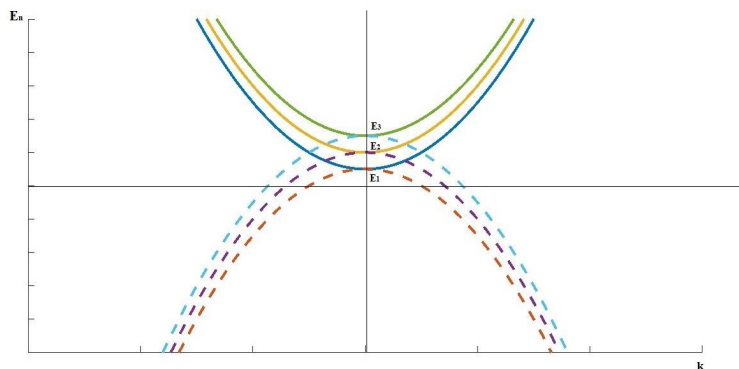
ساده‌تر کنیم، داریم:

$$G_+(x, x') = \frac{\hbar^3}{\sqrt{m}} \sum_{n', n''} \int_{-\infty}^{\infty} dp'_x \int_{-\infty}^{\infty} dp''_x \langle x|p'\rangle \frac{\delta(p''_x - p'_x)}{E - \frac{p'^2}{m} + i\epsilon} \delta_{n'n''} \langle p''|x'\rangle \quad (16.3)$$

اگر عبارت بالا با توجه به خواص تابع دلتا ساده شود، نتیجه زیر بدست می آید

$$G_+(x, x') = \frac{\hbar^2}{\sqrt{m}} \sum_{n'} \int_{-\infty}^{\infty} dp'_x \langle x|p' \rangle \frac{1}{E - \frac{p'^2}{m} + i\epsilon} \langle p'|x \rangle \quad (۱۷.۳)$$

سپس با استفاده از تابع موج ذره آزاد  $\langle x|p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ip_x x}{\hbar}} \phi_n(y)$  معادله تابع گرین به صورت زیر بدست



شکل ۲.۳: نمودار مد انتشاری (خطوط پیوسته) و ناپایدار (خطوط تیره) که برای انرژی  $E = E_n + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$  برای مد منتشر شونده و با تغییر  $k_n = ik_n$  برای مد ناپایدار بدست می آید.

می آید:

$$G_+(x, x') = \frac{\hbar^2}{\sqrt{m}} \sum_{n'} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \int_{-\infty}^{\infty} dp'_x \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{\frac{ip'_x(x-x')}{\hbar}}}{E - \frac{p'^2}{m} + i\epsilon} \quad (۱۸.۳)$$

همچنین  $E$  را از معادله (۴.۳) وارد می کنیم و به جای  $p'_x = \hbar q$  قرار می دهیم در نتیجه جواب کلی به صورت زیر خواهد بود

$$G_+(x, x') = \sum_{n'} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \left(-\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{e^{iq(x-x')}}{q^2 - k_{n'}^2 + i\epsilon} \quad (۱۹.۳)$$

که در آن  $k_{n'}^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - E_{n'})$  است. اگر  $E_{n'}$  کمتر (بزرگتر) از انرژی فرمی باشد مد پراکنده  $n'$  منتشر می شود (محو یا ناپایدار می شود) که در شکل (۲.۳) نشان داده شده است. برای مد ناپایدار داریم:

$$\kappa_{n'}^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E_{n'} - E) \quad (۲۰.۳)$$

این انتگرال به صورت مجزا برای دو نمونه محاسبه می‌شود. اگر مد  $n'$  یک مد منتشر شونده<sup>۳</sup> باشد انتگرال به وسیله معادله زیر داده می‌شود

$$I_{n'}(x, x') = -\frac{i}{\sqrt{k_{n'}}} e^{ik_{n'}|x-x'|} \quad (۲۱.۳)$$

اگر مد  $n'$  یک مد ناپایدار<sup>۴</sup> باشد انتگرال به وسیله رابطه زیر داده می‌شود

$$I_{n'}(x, x') = -\frac{1}{\sqrt{\kappa_{n'}}} e^{-\kappa_{n'}|x-x'|} \quad (۲۲.۳)$$

سپس می‌توان تابع گرین را به صورت زیر نوشت:

$$G_+(x, x') = \sum_{n'=1}^{n_F^{(max)}} \phi_{n'}(y)\phi_{n'}(y') \frac{e^{ik_{n'}|x-x'|}}{\sqrt{k_{n'}}} - \sum_{n'=n_F^{(max)}+1}^{\infty} \phi_{n'}(y)\phi_{n'}(y') \frac{e^{-\kappa_{n'}|x-x'|}}{\sqrt{\kappa_{n'}}} \quad (۲۳.۳)$$

که در آن  $n_F^{(max)}$  ماکسیمم مد انتشار در انرژی فرمی  $E$  است و  $n'$  در سری دوم در مورد مدهای ناپایدار به کار می‌رود. همچنین فرض می‌کنیم که پتانسیل موضعی در معادله (۸.۳) یک پتانسیل قطری برحسب  $x$  است و از رابطه  $\langle x'|V(x)|x'' \rangle = V(x)\delta(x' - x'')$  پیروی می‌کند. همچنین فرض می‌کنیم که پتانسیل یک پتانسیل محدوده کننده متناهی است بنابراین ناحیه‌ای که مربوط به مدهای منتشر شونده است، در فضا محدود است. اگر  $0 < x' < L$  و  $0 < y' < W$ ،  $V(x') \neq 0$  باشد سپس معادله انتگرالی (۸.۳) برای پتانسیل با برد متناهی موضعی در زبان تابع موج به صورت زیر می‌شود:

$$\psi_P^{(+)}(x, y) = \psi_P^{(o)}(x, y) + \frac{\sqrt{m}}{\hbar\sqrt{2}} \int_{x'=0}^{x'=L} dx' \int_{y'=0}^{y'=W} dy' G_+(x, y; x', y') V(x', y') \psi_P^{(+)}(x', y') \quad (۲۴.۳)$$

که  $\mathbf{x} = (x, y)$  و  $\mathbf{x}' = (x', y')$  است [۲۴]. از معادله فوق درمی‌یابیم که تابع موج کلی  $\psi_P^{(+)}(x, y)$  در حضور پراکندگی بر حسب جمع تابع موج، موج فرودی  $\psi_P^{(o)}(x, y)$  بعلاوه یک جمله که نشان دهنده اثر پراکندگی است، نوشته می‌شود. معادله (۲۴.۳) برای کل سیستم معتبر است. تفسیر فیزیکی معادله انتگرالی (۲۴.۳) نیز مفید است. تابع موج  $\psi_P^{(+)}(\mathbf{x})$  دامنه احتمال متناسب با یافتن ذره در  $\mathbf{x}$  است. اگر ذره در  $\mathbf{x}'$  (که وجود  $V(\mathbf{x}')$  را توضیح می‌دهد) برهمکنش کند، دامنه احتمال اینکه ذره در  $\mathbf{x}$  یافت شود، برابر با دامنه‌ای است که ذره در  $\mathbf{x}'$  برهمکنش می‌کند ضربدر دامنه احتمال انتشار از  $\mathbf{x}'$  به  $\mathbf{x}$  که جمع روی تمام  $\mathbf{x}$  است. بنابراین ما تابع گرین را به

<sup>3</sup>Propagating mode

<sup>4</sup>Evanescient mode

صورت  $G_+(x, y; x', y')$  تفسیر می‌کنیم که برابر است با دامنه احتمال اینکه ذره بعد از پراکندگی در  $(x', y')$  به  $(x, y)$  منتشر شود.

### ۳.۳ پتانسیل پراکندگی تابع دلتا

حالتی را در نظر می‌گیریم که الکترون در پتانسیل تابع دلتا پراکنده می‌شود. پتانسیل پراکندگی تابع دلتا را به صورت زیر در نظر می‌گیریم

$$V(x, y) = \gamma \delta(x) \delta(y - y_i) \quad (25.3)$$

که در آن  $\gamma$  می‌تواند مثبت یا منفی باشد. معادله (۲۴.۳) برای تابع موج  $\psi_P^{(+)}(x, y)$  به صورت زیر تبدیل می‌شود:

$$\psi_P^{(+)}(x, y) = \psi_P^{(\circ)}(x, y) + \frac{\gamma m \gamma}{\hbar^2} G_+(x, y; \circ, y_i) \psi_P^{(+)}(\circ, y_i) \quad (26.3)$$

با قرار دادن  $x = \circ$  و  $y = y_i$  در جمله آخر می‌توانیم  $\psi_P^{(+)}(\circ, y_i)$  را بیابیم. در معادله (۲۶.۳) به‌ازای  $x = \circ$  و  $y = y_i$  خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \psi_P^{(+)}(\circ, y_i) - \frac{\gamma m \gamma}{\hbar^2} G_+(\circ, y_i; \circ, y_i) \psi_P^{(+)}(\circ, y_i) &= \psi_P^{(\circ)}(\circ, y_i) \\ \Rightarrow \psi_P^{(+)}(\circ, y_i) &= \frac{\psi_P^{(\circ)}(\circ, y_i)}{1 - \frac{\gamma m \gamma}{\hbar^2} G_+(\circ, y_i; \circ, y_i)} \end{aligned} \quad (27.3)$$

می‌توان تابع موج را از قرار دادن (۲۷.۳) در معادله (۲۶.۳) به صورت زیر نوشت:

$$\psi_P^{(+)}(x, y) = \psi_P^{(\circ)}(x, y) + \frac{1}{D} \frac{\gamma m \gamma}{\hbar^2} G_+(x, y; \circ, y_i) \psi_P^{(\circ)}(\circ, y_i) \quad (28.3)$$

که  $D$  به صورت زیر محاسبه می‌شود

$$\begin{aligned}
 D &= 1 - \frac{\gamma m \gamma}{\hbar^2} G_+(\circ, y_i; \circ, y_i) \\
 &= 1 - \frac{\gamma m \gamma}{\hbar^2} \left\{ \sum_{n'=1}^{n_F^{(max)}} \phi_{n'}(y_i) \phi_{n'}(y_i) \frac{e^{i k_{n'}(\circ)}}{\sqrt{i k_{n'}}} - \sum_{n'=n_F^{(max)}+1}^{n_c} \phi_{n'}(y_i) \phi_{n'}(y_i) \frac{e^{i \kappa_{n'}(\circ)}}{\sqrt{\kappa_{n'}}} \right\} \\
 \Rightarrow D &= 1 - \frac{\gamma m \gamma}{\hbar^2} \left\{ \sum_{n'=1}^{n_F^{(max)}} \phi_{n'}(y_i) \phi_{n'}(y_i) \frac{1}{\sqrt{i k_{n'}}} - \sum_{n'=n_F^{(max)}+1}^{n_c} \phi_{n'}(y_i) \phi_{n'}(y_i) \frac{1}{\sqrt{\kappa_{n'}}} \right\} \\
 \Rightarrow D &= 1 - \sum_{n'=1}^{n_F^{(max)}} \left( \frac{S_{n'n'}}{\sqrt{i k_{n'}}} \right) + \sum_{n'=n_F^{(max)}+1}^{n_c} \left( \frac{S_{n'n'}}{\sqrt{\kappa_{n'}}} \right) \quad (29.3)
 \end{aligned}$$

که در رابطه بالا  $D$  یک ثابت است.

همچنین  $n_c$  در سری دوم ماکزیمم مد ناپایدار است که در محاسبات وجود دارد. برای شامل شدن تمام مدهای ناپایدار  $n_c$  باید به اندازه کافی بزرگ در نظر گرفته شود تا مطمئن شویم که دامنه پراکندگی همگراست. در محاسبات عددی با در نظر گرفتن صد مد نتیجه بهتری حاصل می‌شود. ثابت جفت شدگی را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$S_{lm} = \frac{\gamma m \gamma}{\hbar^2} \phi_l(y_i) \phi_m(y_i) \quad (30.3)$$

که در آن  $S_{lm}$  متناسب با شدت ناخالصی و اندازه تابع موج در موقعیت ناخالصی است. معادله (28.3) به ما تابع موج کلی برای مورد پتانسیل پراکندگی تابع دلتا در سیم دو بعدی را می‌دهد. تابع موج از معادله (28.3) در میان کل سیم معتبر است.

همانطور که قبلاً اشاره شد تابع موج به صورت تابع موج فرودی  $\psi_P^{(\circ)}(x, y)$  به علاوه یک جمله که نشان دهندهی اثر پراکندگی است، نوشته می‌شود. معادله (28.3) می‌گوید که دامنه احتمال پیدا کردن ذرات در  $(x, y)$  معادل دامنه‌ای است که ذره در موقعیت ناخالصی ضرب در دامنه احتمال پراکندگی در نقطه  $(x, y)$  دور از ناخالصی دارد. سرانجام با قرار دادن تابع گرین در معادله (28.3) می‌توانیم در یک شکل تابع موج کلی را بنویسیم که به ما اجازه می‌دهد تا دامنه پراکندگی را برای هر جفت مد بدست آوریم، در ابتدا  $G_+(x, y; \circ, y_i)$  را بر حسب



$S_{lm}$  محاسبه می کنیم:

$$G_+(x, y; \circ, y_i) = \sum_{n'=1}^{n_F^{(max)}} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y_i) \frac{e^{ik_{n'}|x|}}{\sqrt{ik_{n'}}} - \sum_{n'=n_F^{(max)+1}}^{n_c} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y_i) \frac{e^{i\kappa_{n'}|x|}}{\sqrt{\kappa_{n'}}}$$

$$= \frac{\hbar^2}{\sqrt{m\gamma}} \left\{ \sum_{n'=1}^{n_F^{(max)}} S_{n'n'} \frac{e^{ik_{n'}|x|}}{\sqrt{ik_{n'}}} - \sum_{n'=n_F^{(max)+1}}^{n_c} S_{n'n'} \frac{e^{i\kappa_{n'}|x|}}{\sqrt{\kappa_{n'}}} \right\} \quad (31.3)$$

اگر رابطه بالا را در  $\frac{\sqrt{m\gamma}}{\hbar^2} \frac{1}{D}$  ضرب کنیم:

$$\frac{\sqrt{m\gamma}}{\hbar^2} \frac{1}{D} G_+(x, y; \circ, y_i) = \sum_{n'=1}^{n_F^{(max)}} S_{n'n'} \frac{e^{ik_{n'}|x|}}{\sqrt{iDk_{n'}}} - \sum_{n'=n_F^{(max)+1}}^{n_c} S_{n'n'} \frac{e^{i\kappa_{n'}|x|}}{\sqrt{D\kappa_{n'}}} \quad (32.3)$$

اگر رابطه بالا را در معادله (28.3) قرار دهیم:

$$\psi_P^{(+)}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2}\pi}} e^{ik_n x} \phi_n(y) + \sum_{n'=1}^{n_F^{(max)}} \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2}\pi}} e^{ik_{n'}|x|} \phi_{n'}(y) \left[ \frac{-i}{\sqrt{Dk_{n'}}} \right] S_{nn'} +$$

$$\sum_{n'=n_F^{(max)+1}}^{n_c} \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2}\pi}} e^{-\kappa_{n'}|x|} \phi_{n'}(y) \left[ \frac{-1}{\sqrt{D\kappa_{n'}}} \right] S_{nn'} \quad (33.3)$$

در توصیف معادله (33.3) سری اول نشان دهنده مدهای انتشار است درحالی که سری دوم مربوط به مدهای ناپایدار است. همچنین  $n$  مد فرودی است و  $n'$  مد پراکنده است. دامنه انتقال تابع موج از معادله (33.3) به دست می آید و به وسیله معادله‌ی زیر داده می شود:

$$t_{nn'}(E) = \delta_{nn'} + \left[ \frac{-i}{\sqrt{Dk_{n'}}} \right] S_{nn'} \quad (34.3)$$

که در آن  $n'$  نشان دهنده مدهای انتشاری است. اگر  $n'$  یک مد ناپایدار باشد، با قرار دادن  $k_{n'} = i\kappa_{n'}$  در معادله (34.3) تابع موج انتقال یافته به دست می آید. همچنین اگر  $n'$  یک مد منتشر شونده باشد دامنه بازتاب تابع موج از معادله (33.3) به دست می آید و به وسیله رابطه زیر داده می شود

$$r_{nn'} = \left[ \frac{-i}{\sqrt{Dk_{n'}}} \right] S_{nn'} \quad (35.3)$$

که در آن مد  $n'$  نشان دهنده مدهای انتشاری است. اگر  $n'$  یک مد ناپایدار باشد، با قراردادن  $k_{n'} = i\kappa_{n'}$  در معادله (35.3) دامنه‌ی تابع موج بازتاب یافته به دست می آید. اگر  $n \neq n'$  باشد یا اگر  $n'$  یک مد ناپایدار باشد: اگرچه  $r_{nn'} = t_{nn} - 1$  برای  $n = n'$  است که یک بیان از پایستگی جریان است. دامنه‌ی انتقال

درون زیرنواری<sup>۵</sup>  $t_{nn'}(E)$  نشان دهنده‌ی نتیجه‌ای از ذرات باقیمانده است که از نقص پراکنده نمی‌شوند.

دامنه‌ی انتقال بین زیرنواری<sup>۶</sup>  $t_{nn'}(E)$  نشان دهنده‌ی اثر پراکندگی خارج از مد  $n$  به مد  $n'$  است. دامنه‌ی جریان انتقال به وسیله ضرب  $t_{nn'}(E)$  در  $\sqrt{\frac{k_{n'}}{k_n}}$  به دست می‌آید. دامنه انتقال جریان  $\tilde{t}_{nn'} = \sqrt{\frac{k_{n'}}{k_n}} t_{nn'}$  نشان دهنده دامنه احتمال آن است که یک الکترون فرودی در مد چپ در زیر نوار  $n$  به مد راست در زیر نوار  $n'$  انتقال یابد. نتایج تجزیه و تحلیل معادله (۳۴.۳) و (۳۵.۳) باید به عنوان نتایج بنیادی از روشی که استفاده شد در نظر گرفته شود (که بر پایه فرمول بندی معادله لیپمن-شوینگر است).

ضریب انتقال جریان از میان نقص به وسیله رابطه زیر بدست می‌آید

$$T_{nn'} = \frac{k_{n'}}{k_n} t_{nn'} t_{nn'}^* \quad (36.3)$$

آخرین فرمول احتمال این را بدست می‌دهد که یک الکترون منتشر شونده در مد چپ  $n$  در مد راست  $n'$  یافت شود. رسانایی مطابق رابطه لاندائو به این صورت می‌تواند نوشته شود [۳۱، ۳۵]:

$$G = \frac{e^2}{\pi \hbar} \sum_{n,n'} T_{nn'} = \frac{e^2}{\pi \hbar} \sum_{n,n'} \frac{k_{n'}}{k_n} t_{nn'} t_{nn'}^* \quad (37.3)$$

که  $n$  و  $n'$  در معادله (۳۷.۳) فقط در بالای مدهای عادی انتشار در سیم به کار می‌رود.

یک مقایسه ساده بین روش لیپمن-شوینگر و روش تطبیق مد [۳۱، ۳۵، ۲۰] گویای مزیت استفاده از رهیافت لیپمن-شوینگر خواهد بود. در روش تطبیق مد با مجموعه نامحدودی از ضرایب که از انطباق توابع موج و شار در مرزها برای مدهای مختلف بدست می‌آیند مواجه خواهیم بود. به هر جهت تلاش برای کاهش ضرایب مذکور، به الزام تکرار محاسبات در دفعات متعدد را در پی خواهد داشت. این تکرار محاسبات علاوه بر پیچیدگی مستلزم صرف زمان بسیاری است.

در رهیافت مبتنی بر حل معادله لیپمن-شوینگر معادله (۳۴.۳) با استفاده از تابع گرین تکرارپذیر در سیم غیر اختلالی بدست می‌آید. این تابع گرین در اصل به عنوان هر شکلی از پتانسیل پراکنده می‌تواند استفاده شود. مدهای ناپایدار به داخل تابع گرین وارد می‌شوند [۳۵]. به علاوه در قالب یک روش خودسازگار، حل معادله

<sup>5</sup>Intraband

<sup>6</sup>Intersubband

لیپمن-شوینگر (۲۴.۳)، به طور طبیعی به سری بورن منتهی می‌شود که تقریب مفیدی برای مطالعه پتانسیل‌های پراکندگی پیچیده با برد محدود است. با نگر داشتن بسیاری از جملات همانطور که ما در سری بورن می‌خواهیم، می‌توان تقریب تابع موج پراکنده را محاسبه کرد. برخی از این تقریب‌ها نمی‌توانند در روش تطابق مد به کار گرفته شوند.

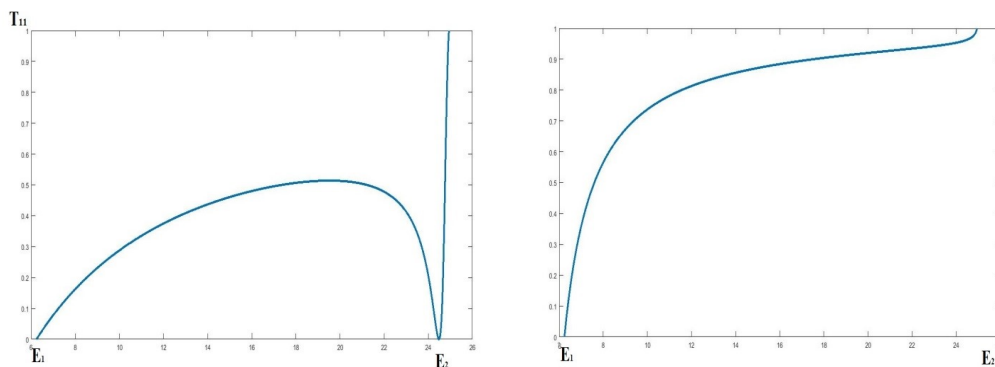
اکنون اثر انتقال کامل را با در نظر گرفتن یک نمونه ساده بررسی می‌کنیم که در آن یک مد منتشر شونده و دو مد ناپایدار با در نظر گرفتن محدوده انرژی  $E_1 < E < E_2$  داریم. احتمال انتقال یا عبور  $T_{11}$  از معادله (۳۶.۳) به صورت زیر داده می‌شود.

$$T_{11} = |t_{11}|^2 = \left[ 1 + \left( \frac{S_{11}}{2k_1} \right)^2 \left( \frac{2\kappa_2}{2\kappa_2 + S_{22}} \right)^2 \right]^{-1} \quad (38.3)$$

احتمال عبور  $T_{11}$  از معادله (۳۸.۳) در شکل ۳.۳ برای هر دو پراکندگی تابع دلتای جاذب و دافع نشان داده شده است. فرض می‌شود که  $y$  به مقدار  $W = 3 \text{ nm}$  محدود شده است. جرم الکترون برابر با  $67m_e$  در نظر گرفته شده است و ناخالصی در فاصله  $\frac{5}{14}$  عرض سیم قرار دارد. با این پارامترها انرژی کف زیرنوارها در استای محور  $y$  همان انرژی ذره در جعبه است:  $E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mW^2}$ ، که بدین ترتیب انرژی ۵ لایه اول برابر است با:

$$E_1 = 6/236 \text{ meV}, E_2 = 24/94 \text{ meV}, E_3 = 56/12 \text{ meV}, E_4 = 99/78 \text{ meV}, E_5 = 155/9 \text{ meV}.$$

وقتی که انرژی فرمی به مقدار کمینه انرژی زیر نوار دوم می‌رسد  $E = E_2$ ، در معادله (۳۸.۳)  $\kappa_2 = 0$  است و مد فرودی انتقال کامل خواهد داشت:  $T_{11} = 1$ . این اثر انتقال کامل که برای اولین بار توسط [۳۱] اشاره شد، در هر دو پراکندگی جاذبه و دافعه وجود دارد. الکترون‌ها از مد فرودی  $n = 1$  می‌توانند پراکنده شده و در مد ناپایدار  $n = 2$  جمع شده و این جمع شدگی (انباشته شدن) در زیر نوار دوم باعث افزایش انتقال می‌شود. برای پراکندگی جاذب که  $\gamma < 0$  است، احتمال دارد در معادله (۳۸.۳) داشته باشیم:  $2\kappa_2 + S_{22} = 0$ . انرژی در این حالت مطابق با حالت‌های شبه-مقید که از زیر لایه دوم جدا هستند، پیروی می‌کند. در این مورد، معادله (۳۸.۳) احتمال عبور صفر را می‌دهد،  $T_{11} = 0$  و چون انعکاس کامل است:  $R_{11} = 1$ . باعث انباشته شدن الکترون‌ها در زیرنوار می‌شود. این انباشته شدن الکترون‌ها یک دافعه بسیار قوی در عبور کانال فرودی تولید می‌کند. اشاره می‌کنیم که ماتریس عبور  $T_{nn'}$  در معادله (۳۴.۳) شامل هر انتقال فاز احتمالی است که الکترون‌ها در انتقال با سیم به دست آوردند. یک نمونه ساده شامل یک مد منتشر شونده و مد ناپایدار را در نظر بگیرید شکل ۳.۳.



شکل ۳.۳: احتمال عبور بر حسب انرژی فرمی برای پتانسیل دافع (سمت راست،  $\gamma = 10 \text{ fev cm}^2$ ) و برای پتانسیل جاذب (سمت چپ،  $\gamma = -20 \text{ fev cm}^2$ )

دامنه عبور می‌تواند بر حسب فاز  $\phi_T$  از الکترون‌های عبوری نوشته شود:

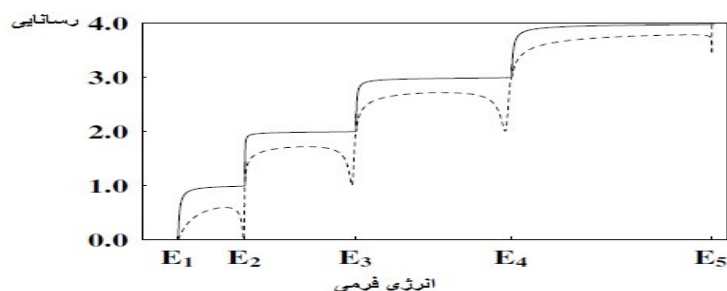
$$t_{11} = (1 + a^2)^{-\frac{1}{2}} e^{i\phi_T} \quad (39.3)$$

که در آن  $a = \left(\frac{S_{11}}{2k_1}\right) \left(\frac{2k_2}{S_{22} + 2k_2}\right)$  و  $\phi_T = \cos^{-1} \left[ \frac{1}{(1 + a^2)^{\frac{1}{2}}} \right]$ . دامنه انعکاس می‌تواند مشابه آن به صورت  $r_{11} = e^{-\frac{i\pi}{2}} at_{11}$  نوشته شود، که در آن فاز دامنه بازتاب و انتقال همیشه به اندازه  $\frac{\pi}{2}$  یعنی  $\phi_R = \phi_T - \frac{\pi}{2}$  باهم تفاوت دارند که در آن فاز الکترون بازتاب شده است. به طور طبیعی  $\phi_R$  و  $\phi_T$  بستگی به انرژی الکترون و شدت پراکندگی دارند و به طور عمومی برای پراکندگی‌های قویتر افزایش می‌یابند.

رسانایی به عنوان تابعی از انرژی فرمی برای هر دو پراکندگی تابع دلتای دافع (خط توپر) و پراکندگی تابع دلتای جاذب (خط نقطه چین) در شکل ۴.۳ نشان داده شده است. صد مد کلی در این محاسبات برای اطمینان از همگرایی دامنه پراکندگی استفاده می‌شود. افزایش تعداد مدها یک اختلاف کیفی جزئی در نتایج ایجاد می‌کند [۳۴].

### ۴.۳ تاثیر موقعیت عرضی پراکندگی بر ضریب عبور

در این بخش تاثیر موقعیت عرضی پراکندگی تابع دلتا بر انتقال الکترون مورد مطالعه قرار خواهد گرفت. ضرایب انتقال و رسانایی برای یک موقعیت خاص از پراکندگی در شکل ۳.۳ و ۴.۳ نشان داده شده‌اند که نشان می‌دهد،

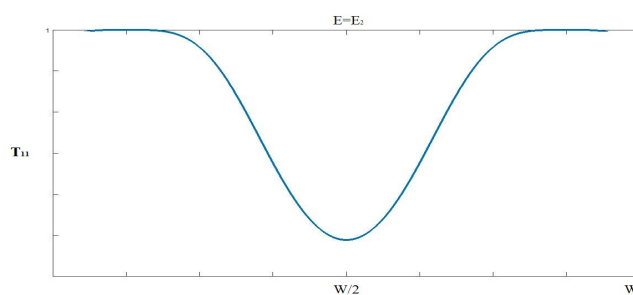


شکل ۴.۳: رسانایی بر حسب انرژی فرمی برای پتانسیل تابع دلتا در یک سیم کوانتومی دوبعدی در واحد  $\frac{2e^2}{h}$ . خطوط پیوسته برای پتانسیل دافع  $\gamma = 10 \text{ fev cm}^2$  و خطوط تیره برای پتانسیل جاذب  $\gamma = -6 \text{ fev cm}^2$ .

برای یک موقعیت خاص از پراکندگی، انتقال کامل زمانی اتفاق می‌افتد که انرژی فرمی با کمینه انرژی هر زیرنوار هم تراز شود. به علاوه اگر پراکندگی جاذبه باشد و در این موقعیت قرار داشته باشد، حالت‌های شبه-مقید از هر زیر نوار جدا می‌شوند. در اینجا نشان خواهیم داد که اثر انتقال کامل (شفافیت) همانند تشکیل حالت‌های شبه-مقید به محلی که پراکندگی قرار دارد، بستگی دارد.

برای مورد  $y_i = \frac{5}{14}W$  انتقال کامل در هر زیرنوار از روی نمودار در شکل‌ها مشخص است که در چه انرژی اتفاق می‌افتد. برای این حالت تمام مدهای عادی در موقعیت پراکندگی ناپدید می‌شوند زیرا این موقعیت یک گره از این مدهاست. همچنین ثابت جفت شدگی مطابق با آن نیز ناپدید می‌شود، که  $S_{22} = S_{44} = \dots = 0$ . این به این معنی است که احتمال اینکه الکترون هر کدام از مدهای ناپایدار را اشغال کند صفر است، چون تابع موج در این موقعیت پراکندگی صفر است. این همچنین بدین معنی است که در آنجا در محل پراکندگی در این مدها، انباشتگی الکترون وجود ندارد.

در شکل ۵.۳ ضریب عبور  $T_{11}$  بر حسب موقعیت عرضی پراکندگی در انرژی  $E = E_2$  نشان داده شده است. مطابق با این نمودار برای انرژی  $E = E_2$  (مینیمم انرژی زیر نوار دوم) تقریباً به ازای تمام موقعیت‌های پراکننده، انتقال کامل اتفاق می‌افتد به جز در یک ناحیه کوچک حول  $y_i = \frac{w}{4}$ . در این ناحیه ضریب عبور یک تورفتگی ناگهانی را نشان می‌دهد که به معنی شکست اثر انتقال کامل در این ناحیه است یعنی  $T_{11} < 1$ .



شکل ۵.۳: ضریب عبور  $T_{11}$  بر حسب موقعیت عرضی پراکندگی در سیم دو بعدی که در انرژی  $E = E_0$ .

## فصل ۴

# ترابرد الکترونی وابسته به اسپین در یک سیم کوانتومی

در این فصل، انتقال وابسته به اسپین در پراکندگی الکترون از یک ناخالصی واقع در یک سیم کوانتومی باریک را مورد مطالعه قرار می‌دهیم. برهمکنش بین اسپین الکترون و یون می‌تواند منجر به انتقالی شود که در آن اسپین الکترون پراکنده شده چرخیده باشد.

### ۱.۴ پراکندگی چند مدی وابسته به اسپین در سیم کوانتومی

یک سیم کوانتومی را در نظر بگیرید که در آن گاز الکترونی غیر برهمکنشی به طور آزادانه در جهت  $x$  حرکت می‌کند اما در جهت  $y$  محصور شده است. همچنین یک اتم ناخالصی مغناطیسی را در این سیم در نظر بگیرید که در آن وجود دارد. در چنین سیم کوانتومی معادله شرودینگر برای الکترون متحرک به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} \right) + V_c(y) + V_{imp}(x, y)\right] \psi(x, y) \chi_{I,m} = E \psi(x, y) \chi_{I,m} \quad (1.4)$$

$V_{imp}(x, y)$  پتانسیل ناخالصی مغناطیسی است که اگر مقدار آن را صفر بگیریم به معادله الکترون آزاد خواهیم رسید. پتانسیل محدودکننده عرضی  $V_c(y)$  یکسری مدهای طبیعی به صورت زیر را تعریف می‌کند.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_c(y)\right] \phi_n(y) = E \phi_n(y) \quad (2.4)$$

یک پتانسیل پراکندگی وابسته به اسپین  $V_{imp}(x, y)$  به عنوان یک برهمکنش اسپین موضعی به صورت زیر را در نظر بگیرید:

$$V_{imp}(x, y) = \gamma(\vec{\sigma} \cdot \vec{S}) \delta(x) \delta(y - y_i) \quad (3.4)$$

که  $\vec{S}$  و  $\vec{\sigma}$  عملگر اسپین الکترون و ناخالصی هستند. بدون حضور ناخالصی تابع موج الکترون در مد  $n$  به صورت زیر خواهد بود که همان تابع موج ذره‌ی آزاد است (مشابه با معادله (۳.۳)).

$$\langle x | \psi^{(\circ)} \rangle \chi_{I,m} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ip_x x}{\hbar}} \phi_n(y) \chi_{I,m} = \psi^{(\circ)}(x, y) \chi_{I,m} \quad (4.4)$$

که در آن  $\chi_{I,m}$  ویژه توابع عملگر اسپین کل ( $\vec{I} = \vec{\sigma} + \vec{S}$ ) است و  $m$  نشان دهنده مولفه  $z$  عملگر اسپین کل خواهد بود. حل معادله (۱.۴) به صورت زیر است

$$|\psi_P^{(+)} \rangle \chi_{I,m} = |\psi_P^{(\circ)} \rangle \chi_{I,m} + \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V_{imp} |\psi_P^{(+)} \rangle \chi_{I,m} \quad (5.4)$$

که معادله لیپمن-شوینگر در نظریه پراکندگی است. با ضرب معادله (۵.۴) در  $\langle x |$  و با استفاده از رابطه کاملیت:

$$\int d^3x' |x' \rangle \langle x'| = 1 \quad (6.4)$$

معادله (۵.۴) به صورت انتگرالی زیر تبدیل می‌شود

$$(7.4)$$

$$\langle x | \psi_P^{(+)} \rangle \chi_{I,m} = \langle x | \psi_P^{(\circ)} \rangle \chi_{I,m} + \int d^3x' \langle x | \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} |x' \rangle \langle x' | V_{imp} | \psi_P^{(+)} \rangle \chi_{I,m}$$

معادله اصلی برای تابع گرین به صورت زیر نوشته می‌شود

$$G_+(x, x') = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3p' \int d^3p'' \langle x | p' \rangle \langle p' | \frac{1}{E - p'^2/2m + i\epsilon_0} | p'' \rangle \langle p'' | x' \rangle \quad (8.4)$$

با استفاده از خواص ویژه کت‌ها و استفاده از تابع موج ذره آزاد و خواص تابع دلتا که در فصل قبل ذکر شد می‌توان تابع گرین را محاسبه کرد. پس از ساده کردن مشابه با رابطه (۲۳.۳) فصل قبل تابع گرین به صورت زیر خواهد



شد.

$$G(x, x') = \sum_{n'=1}^{n_F^{(max)}} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \frac{e^{ik_{n'}|x-x'|}}{2ik_{n'}} - \sum_{n'=n_F^{(max)}}^{\infty} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \frac{e^{-\kappa_{n'}|x-x'|}}{2\kappa_{n'}} \quad (9.4)$$

سهم مدهای ناپایدار به کار می‌رود. پتانسیل موضعی در معادله (۷.۴) یک پتانسیل قطری بر حسب  $x$  است و از رابطه‌ی  $\langle x'|V(x)|x'' \rangle = V(x)\delta(x' - x'')$  پیروی می‌کند. همچنین فرض می‌کنیم که پتانسیل یک پتانسیل محدوده کننده متناهی است بنابراین ناحیه‌ای که مربوط به مدهای منتشر شونده می‌شود، در فضا محدود است. اگر  $0 < x' < L$  و  $0 < y' < W$  ،  $V(x') \neq 0$  باشد. سپس معادله انتگرالی (۷.۴) برای پتانسیل با برد متناهی موضعی در زبان تابع موج به صورت زیر خواهد بود

$$\psi_P^{(+)}(x, y) \chi_{I,m} = \psi_P^{(0)}(x, y) \chi_{I,m} + \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x'=0}^{x'=L} dx' \int_{y'=0}^{y'=W} dy' G_+(x, y; x', y') V_{imp}(x', y') \psi_P^{(+)}(x', y') \chi_{I,m} \quad (10.4)$$

یک الکترون اولیه با حالت اسپینی  $X_+$  در مد  $n$  و انرژی فرمی  $E_f$  را در نظر بگیرید که از سمت چپ وارد سیم کوانتومی می‌شود. در اثر پراکندگی دو حالت ممکن است روی دهد: یا اسپین بدون تغییر خواهد ماند یا چرخش اسپینی روی می‌دهد که هر دو به وسیله پایستگی اسپین کل و مولفه‌ی  $z$  اسپین مشخص می‌شوند. اگر چرخش اسپینی روی دهد و ناخالصی در ابتدا در حالت اسپین پایین  $\xi_-$  باشد در نتیجه حالت اسپینی دستگاه الکترون فرودی-ناخالصی به صورت زیر خواهد بود

$$X_{+\xi_-} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{1,0} + \chi_{0,0}) \quad (11.4)$$

که در آن حالت اسپینی دستگاه الکترون-یون است با اسپین کل یک ( $I = \sigma + S = 1$ ) و مولفه  $z$  صفر ( $m = 0$ ) و حالت اسپینی دستگاه الکترون-یون است با اسپین کل صفر ( $I = \sigma + S = 0$ ) و مولفه  $z$  صفر ( $m = 0$ ). سایر حالت‌های ممکن نیز عبارتند از:

$$X_{+\xi_+} = \chi_{1,1} \quad \text{اسپین یون بالا و الکترون بالا}$$

$$X_{-\xi_+} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{1,0} - \chi_{0,0}) \quad \text{اسپین یون بالا و الکترون پایین}$$

$$X_{-\xi-} = \chi_{1,-1} \text{ : اسپین یون پایین و الکترون پایین}$$

$$X_{+\xi-} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{1,0} + \chi_{0,0}) \text{ : اسپین یون پایین و الکترون بالا}$$

شدت پراکندگی ناشی از اثر اسپین روی هر یک از حالت‌های  $\chi_{1,0}$  و  $\chi_{0,0}$  را می‌توان به صورت زیر در نظر گرفت:

$$\gamma(\vec{\sigma} \cdot \vec{S})\chi_{1,m} = \frac{1(1+1)\hbar^2 - \frac{3}{4}\hbar^2 - \frac{3}{4}\hbar^2}{2}\gamma\chi_{1,m} = \frac{\gamma}{4}\hbar^2\chi_{1,m} \quad (12.4)$$

اگر فرض کنیم  $\gamma_1 = \frac{\gamma}{4}\hbar^2$ ، در نتیجه برای پتانسیل پراکندگی در حالت  $\chi_{1,m}$  داریم:

$$V_{imp} = \gamma_1 \delta(x)\delta(y - y_i) \quad (13.4)$$

همچنین اگر پتانسیل پراکندگی را برای حالت  $\chi_{0,0}$  محاسبه کنیم خواهیم داشت:

$$\gamma(\vec{\sigma} \cdot \vec{S})\chi_{0,0} = \frac{0 - \frac{3}{4}\hbar^2 - \frac{3}{4}\hbar^2}{2}\gamma\chi_{0,0} = -\frac{3\gamma}{4}\hbar^2\chi_{0,0} \quad (14.4)$$

اگر فرض کنیم  $\gamma_0 = -\frac{3\gamma}{4}\hbar^2$ ، در نتیجه برای پتانسیل پراکندگی در حالت  $\chi_{0,0}$  داریم:

$$V_{imp} = \gamma_0 \delta(x)\delta(y - y_i) \quad (15.4)$$

که در آن  $\gamma_0$  و  $\gamma_1$  در واقع همان اثر اسپین روی ویژه حالت‌های  $\chi_{I,m}$  هستند. بنابراین می‌توان نوشت

$$V_{imp}\psi(x, y)\chi_{1,m} = \gamma_1 \delta(x)\delta(y - y_i)\psi(x, y)\chi_{1,m}$$

$$V_{imp}\psi(x, y)\chi_{0,0} = \gamma_0 \delta(x)\delta(y - y_i)\psi(x, y)\chi_{0,0} \quad (16.4)$$

واضح است که بین  $\gamma_0$  و  $\gamma_1$  رابطه  $\gamma_0 = -3\gamma_1$  برقرار است. این رابطه بدین معناست که اگر پتانسیل پراکندگی برای یکی از دو حالت دافعه باشد، برای دیگری جاذبه است. مطابق با رابطه (۳۰.۲)  $\chi_{I,m}$  ها به صورت همزمان ویژه توابع اثر برهمکنش اسپین  $\sigma \cdot S$  نیز هستند سپس می‌توان با استفاده از روابط زیر جهت اسپین پس از پراکندگی را تعیین کرد.

$$\chi_{1,1} = X_{+\xi+}$$

$$\chi_{1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}(X_{+\xi+} + X_{-\xi+})$$

$$\chi_{1,-1} = X_{-\xi-}$$

$$\chi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}(X_{+\xi+} - X_{-\xi+}) \quad (17.4)$$

موضوع پراکندگی زمانی که الکترون و یون اسپین موازی دارند مشابه پراکندگی الکترون یون بدون اسپین با قدرت پتانسیل پراکندگی  $\gamma_1$  است. اما زمانی که یون و الکترون اسپین پادموازی دارند (مثل  $X_{+\xi_-}$  و  $X_{-\xi_+}$ ) دامنه پراکندگی در بخش  $\chi_{1,0}$  و  $\chi_{0,0}$  با هم متفاوت بوده و بنابراین سهم نهایی هر کدام از آن‌ها در تابع موج پراکنده متفاوت خواهد بود. این بدین معناست که وقتی حالت اسپینی  $X_{-\xi_+}$  یا  $X_{+\xi_-}$  باشد، در اثر پراکندگی حالت‌های اسپینی الکترون و یون به صورت ترکیبی از  $X_{-\xi_+}$  و  $X_{+\xi_-}$  خواهد بود. اگر دامنه‌های پراکندگی مذکور را به ترتیب  $t_{nn'}^{\circ\circ}$  و  $t_{nn'}^{\circ\prime}$  بنامیم در نتیجه برای حالت  $X_{+\xi_-}$  (به عنوان مثال) داریم: جمله  $e^{ik_n x} \chi_{1,0}$  در اثر پراکندگی به  $t_{nn'}^{\circ\prime} e^{ik_{n'} x} \chi_{1,0}$  تبدیل می‌شود. همچنین جمله  $e^{ik_n x} \chi_{0,0}$  در اثر پراکندگی به  $t_{nn'}^{\circ\circ} e^{ik_{n'} x} \chi_{0,0}$  تبدیل می‌شود. در این صورت جمله

$$e^{ik_n x} X_{+\xi_-} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{ik_n x} (\chi_{1,0} + \chi_{0,0})$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} e^{ik_{n'} x} (t_{nn'}^{\circ\prime} \chi_{1,0} + t_{nn'}^{\circ\circ} \chi_{0,0}) \quad (18.4)$$

در نتیجه می‌توان نوشت:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{ik_{n'} x} (t_{nn'}^{\circ\prime} \chi_{1,0} + t_{nn'}^{\circ\circ} \chi_{0,0}) &= e^{ik_{n'} x} (t_{nn'}^{\circ\prime} (\frac{X_{+\xi_-} + X_{-\xi_+}}{2}) + t_{nn'}^{\circ\circ} (\frac{X_{+\xi_-} - X_{-\xi_+}}{2})) \\ &= e^{ik_{n'} x} X_{+\xi_-} (\frac{t_{nn'}^{\circ\prime} + t_{nn'}^{\circ\circ}}{2}) + e^{ik_{n'} x} X_{-\xi_+} (\frac{t_{nn'}^{\circ\prime} - t_{nn'}^{\circ\circ}}{2}) \quad (19.4) \end{aligned}$$

در رابطه بالا جمله  $(\frac{t_{nn'}^{\circ\prime} - t_{nn'}^{\circ\circ}}{2})$  دامنه انتقال از زیر نوار  $n$  به  $n'$  همراه با چرخش اسپین و جمله  $(\frac{t_{nn'}^{\circ\prime} + t_{nn'}^{\circ\circ}}{2})$  دامنه انتقال از زیر نوار  $n$  به  $n'$  بدون چرخش اسپین است.

## ۲.۴ پتانسیل پراکندگی تابع دلتای وابسته به اسپین

با قرار دادن پتانسیل وابسته به اسپین معادله (۳.۴) در (۱۰.۴)، تابع موج  $\psi_P^{(+)}(x, y)$  به صورت رابطه زیر تبدیل می‌شود:

$$\psi_P^{(+)}(x, y) \chi_{I,m} = \psi_P^{(\circ)}(x, y) \chi_{I,m} + \frac{2m\gamma}{\hbar^2} G_+(x, y; \circ, y_i) \psi_P^{(+)}(\circ, y_i) \chi_{I,m} \quad (20.4)$$

در روابط بالا  $G_+(x, y; \circ, y_i)$  مقدار تابع گرین وابسته به پتانسیل اختلالی است. همانند فصل قبل با قرار دادن  $x = \circ$  و  $y = y_i$  در جمله آخر می‌توانیم  $\psi_P^{(+)}(\circ, y_i)$  را بیابیم:

$$\begin{aligned} \left[ \psi_P^{(+)}(\circ, y_i) - \frac{\Upsilon m \gamma}{\hbar^2} G_+(\circ, y_i; \circ, y_i) \psi_P^{(+)}(\circ, y_i) \right] \chi_{I,m} &= \psi_P^{(\circ)}(\circ, y_i) \chi_{I,m} \\ \Rightarrow \psi_P^{(+)}(\circ, y_i) - \frac{\Upsilon m \gamma}{\hbar^2} G_+(\circ, y_i; \circ, y_i) \psi_P^{(+)}(\circ, y_i) &= \psi_P^{(\circ)}(\circ, y_i) \\ \Rightarrow \psi_P^{(+)}(\circ, y_i) &= \frac{\psi_P^{(\circ)}(\circ, y_i)}{1 - \frac{\Upsilon m \gamma}{\hbar^2} G_+(\circ, y_i; \circ, y_i)} \end{aligned} \quad (21.4)$$

می‌توان تابع موج را از قرار دادن (21.4) در معادله (20.4) به صورت زیر نوشت:

$$\psi_P^{(+)}(x, y) = \psi_P^{(\circ)}(x, y) + \frac{1}{D} \frac{\Upsilon m \gamma}{\hbar^2} G_+(x, y; \circ, y_i) \psi_P^{(\circ)}(\circ, y_i) \quad (22.4)$$

که در آن  $D$  به شکل زیر تعریف شده است:

$$\begin{aligned} D &= 1 - \frac{\Upsilon m \gamma}{\hbar^2} G_+(\circ, y_i; \circ, y_i) \\ &= 1 - \frac{\Upsilon m \gamma}{\hbar^2} \left\{ \sum_{n'=1}^{n_F^{(max)}} \phi_{n'}(y_i) \phi_{n'}(y_i) \frac{e^{ik_{n'}(\circ)}}{\Upsilon ik_{n'}} - \sum_{n'=n_F^{(max)+1}}^{n_c} \phi_{n'}(y_i) \phi_{n'}(y_i) \frac{e^{-\kappa_{n'}(\circ)}}{\Upsilon \kappa_{n'}} \right\} \\ \Rightarrow D &= 1 - \frac{\Upsilon m \gamma}{\hbar^2} \left\{ \sum_{n'=1}^{n_F^{(max)}} \phi_{n'}(y_i) \phi_{n'}(y_i) \frac{1}{\Upsilon ik_{n'}} - \sum_{n'=n_F^{(max)+1}}^{n_c} \phi_{n'}(y_i) \phi_{n'}(y_i) \frac{1}{\Upsilon \kappa_{n'}} \right\} \\ \Rightarrow D &= 1 - \sum_{n'=1}^{n_F^{(max)}} \left( \frac{S_{n'n'}}{\Upsilon ik_{n'}} \right) + \sum_{n'=n_F^{(max)+1}}^{n_c} \left( \frac{S_{n'n'}}{\Upsilon \kappa_{n'}} \right) \end{aligned} \quad (23.4)$$

همچنین  $n_c$  در سری دوم ماکزیمم مد ناپایدار است که در محاسبات وجود دارد. جهت دستیابی به جوابی پایدار، در محاسبات عددی صد مد بحساب خواهند آمد. ثابت جفت شدگی را به صورت زیر تعریف می‌کنیم

$$S_{l,m} = \frac{\Upsilon m \gamma}{\hbar^2} \phi_l(y_i) \phi_m(y_i) \quad (24.4)$$

$S_{l,m}$  برای ناخالصی با اسپین است که با شدت ناخالصی و اندازه تابع موج آن متناسب است. دامنه انتقال و بازتاب برای مد انتشار عبارتند از:

$$t_{nn'} = \sigma_{nn'} + \left[ \frac{-i}{\Upsilon D k_{n'}} \right] S_{n,n'} \quad (25.4)$$

$$r_{nn'} = \left[ \frac{-i}{\Upsilon D k_{n'}} \right] S_{n,n'} \quad (26.4)$$

با قراردادن  $k_{n'} = ik_{n'}$  در معادله (۲۵.۴) و (۲۶.۴) دامنه انتقال و بازتاب برای مد ناپایدار بدست می‌آید.  $G_+(x, y; \circ, y_i)$  بر حسب  $S_{l,m}$  به صورت معادله (۳۱.۳) فصل قبل نوشته می‌شود.

دامنه‌های عبور و بازتاب شار وابسته به اسپین به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$T_{n,n'}^{\uparrow\uparrow} = \left(\frac{k_{n'}}{k_n}\right) t_{n',n}^{\uparrow\uparrow} t_{n,n'}^{*\uparrow\uparrow} \quad (۲۷.۴)$$

$$R_{n,n'}^{\uparrow\uparrow} = \left(\frac{k_{n'}}{k_n}\right) r_{n',n}^{\uparrow\uparrow} r_{n,n'}^{*\uparrow\uparrow} \quad (۲۸.۴)$$

لاندائور رسانندگی وابسته به اسپین از رابطه زیر بدست می‌آید.

$$G = \frac{e^2}{\pi\hbar} \sum_{n',n} T_{n,n'} = \frac{e^2}{\pi\hbar} \sum_{n',n} \left(\frac{k_{n'}}{k_n}\right) t_{n,n'}^{\uparrow\uparrow} t_{n,n'}^{*\uparrow\uparrow} \quad (۲۹.۴)$$

## ۳.۴ نتایج و بحث

در محاسبات عددی که در ادامه انجام شده است، پتانسیل محدود کننده در یک دیوار مربعی نامتناهی به پهنای  $W = 30 \text{ nm}$  در نظر گرفته شده است. جرم الکترون برابر با جرم موثر الکترون در گالیوم آرسناید ( $GaAs$ ) در نظر گرفته شده است که برابر با  $m = 0.067 m_e$  جرم الکترون آزاد است. در نتیجه انرژی‌ها به صورت زیر خواهد شد.

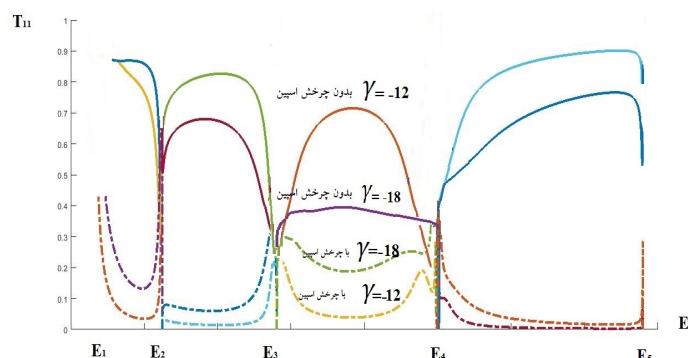
$$E_1 = 6/236 \text{ meV}, E_2 = 24/94 \text{ meV}, E_3 = 56/12 \text{ meV}, E_4 = 99/78 \text{ meV}, E_5 = 155/9 \text{ meV}.$$

در اینجا بر روی مورد پراکندگی اسپینی یک الکترون با اسپین بالا که از سمت چپ به سمت ناخالصی مغناطیسی وارد شده است تمرکز می‌کنیم. شکل‌های ۱.۴ تا ۹.۴ ضرایب عبور وابسته به اسپین در انتقال درون‌زیرنوارایی به عنوان تابعی از انرژی فرمی برای حالتی که چرخش اسپینی روی می‌دهد و حالت بدون چرخش را، نشان می‌دهند.

ضرایب عبور وابسته به اسپین مدهای انتشار بر حسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_5$

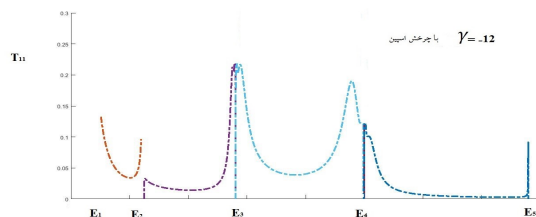
در شکل ۱.۴ مقدار ضریب عبور  $T_{11}$  برای پتانسیل جاذبه با در نظر گرفتن مقدار  $\gamma = -12, -18 \text{ f eV cm}^2$  در حساب انرژی فرمی برای الکترون‌هایی که دچار چرخش اسپینی شده‌اند و الکترون‌هایی که بدون چرخش اسپینی عبور کرده‌اند رسم شده است. مشاهده می‌شود که نرخ عبور هم برای  $\gamma = -12 \text{ f eV cm}^2$  و هم برای

$\gamma = -18 \text{ f eV cm}^2$  برای الکترون‌هایی که بدون چرخش عبور می‌کنند بسیار بیشتر از الکترون‌هایی است که دچار چرخش اسپینی شده‌اند و این نشان می‌دهد که نرخ عبور الکترون‌های بدون چرخش اسپینی غالب خواهد بود. زمانی که انرژی فرمی به کف انرژی هر زیر نوار نزدیک می‌شود افت شدیدی در عبور برای الکترون‌های بدون



شکل ۱.۴: ضریب عبور  $T_{11}$  اسپین بالا برحسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_2$  برای پتانسیل جاذبه  $\gamma = -18 \text{ f eV cm}^2$  و  $\gamma = -12 \text{ f eV cm}^2$  در حالی که ناخالصی مغناطیسی در  $y_i = \frac{5}{13} W$  قرار دارد. خطوط پیوسته مربوط به قسمت بدون چرخش اسپین و خطوط چین مربوط به قسمت با چرخش اسپین است.

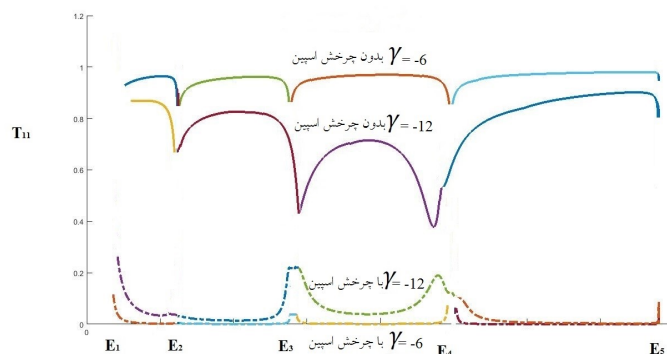
چرخش اسپینی مشاهده می‌شود که می‌تواند ناشی از تشکیل حالت‌های شبه-مقید باشد سپس با کمی افزایش انرژی دوباره ضریب عبور روند افزایشی از خود نشان می‌دهد. همچنین برای الکترون‌هایی که با چرخش اسپینی عبور می‌کنند مشاهده می‌شود زمانی که انرژی فرمی به کف انرژی هر زیرنوار نزدیک می‌شود شاهد یک روند افزایشی سریع در عبور هستیم و سپس با کمی فاصله گرفتن دوباره روند کاهشی در ضریب عبور اتفاق می‌افتد. با رسم هر یک از نمودارها به صورت مجزا، می‌توان روند تغییرات را به شکل دقیق‌تری مشاهده کرد. این کار برای ضریب عبور  $T_{11}$  با در نظر گرفتن مقدار  $\gamma = -12 \text{ f eV cm}^2$  برای الکترون‌هایی که دچار چرخش اسپینی شده‌اند در شکل ۲.۴ رسم شده است. در شکل ۳.۴ مقدار ضریب عبور  $T_{11}$  برای پتانسیل جاذبه با در نظر گرفتن مقدار  $\gamma = -6, -12 \text{ f eV cm}^2$  برحسب انرژی فرمی رسم شده است. نتایج حاکی از اتفاق افتادن بیش‌ترین تغییرات در کف انرژی هر زیرنوار می‌باشد که در تشابه با شکل ۱.۴ است. در شکل ۴.۴ مقدار ضریب عبور  $T_{22}$  برای پتانسیل جاذبه با در نظر گرفتن مقدار  $\gamma = -12, -18 \text{ f eV cm}^2$  برحسب انرژی فرمی رسم شده است. در این حالت یک گذار درون زیرنواری از زیرنوار  $n = 2$  به زیر نوار  $n' = 2$  در نظر گرفته شده است. نتایج



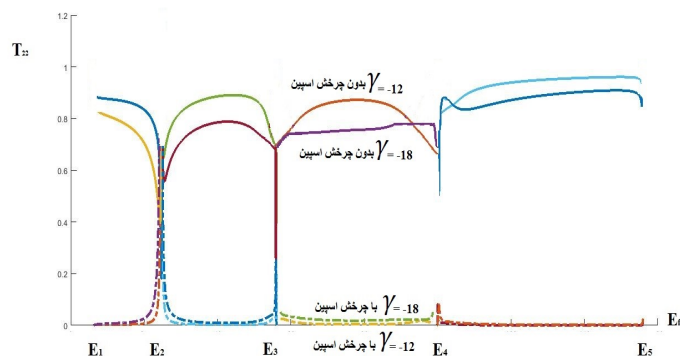
شکل ۲.۴: ضریب عبور  $T_{11}$  اسپین بالا برحسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_2$  برای پتانسیل جاذبه  $\gamma = -12 \text{ f eV cm}^2$  در حالت با چرخش اسپین در حالی که ناخالصی مغناطیسی در  $y_i = \frac{5}{12}W$  قرار دارد.

در تشابه زیادی با گذار  $T_{11}$  هستند. در اینجا نیز با نزدیک شدن انرژی فرمی به کف انرژی هر زیر نوار شاهد افت شدیدی در عبور برای الکترون‌های بدون چرخش اسپینی هستیم که می‌تواند ناشی از تشکیل حالت‌های شبه-مقید باشد. در مدهای بالاتر و در یک گذار درون زیرنواری مشاهده می‌شود که یک کاهش کلی در ضریب عبور اتفاق افتاده است. بنابراین می‌توان گفت که با رفتن به زیر نوار بالاتر یک افت کوچک در ضریب عبور نسبت به حالت قبل خواهیم داشت. برای مشاهده جزئی‌تر روند تغییرات، مقدار ضریب عبور  $T_{22}$  برای پتانسیل جاذبه با در نظر گرفتن مقدار  $\gamma = -12 \text{ f eV cm}^2$  برحسب انرژی فرمی برای الکترون‌هایی که دچار چرخش اسپینی شده‌اند، در شکل ۵.۴ رسم شده است. در شکل ۶.۴ مقدار ضریب عبور  $T_{11}$  برای یک پتانسیل دافعه و با در نظر گرفتن  $\gamma = +15 \text{ f eV cm}^2$  رسم شده است. مشاهده می‌شود که الکترون‌های بدون چرخش اسپینی، دارای مقدار ضریب عبور بالایی هستند که در تناسب با پتانسیل دافعه در نظر گرفته شده است. در شکل ۷.۴ مقدار ضریب عبور  $T_{11}$  برای پتانسیل دافعه با در نظر گرفتن مقدار  $\gamma = +15 \text{ f eV cm}^2$  برحسب انرژی فرمی، برای الکترون‌هایی که دچار چرخش اسپینی شده‌اند به صورت مجزا رسم شده است.

مقدار ضریب عبور  $T_{22}$  برای یک پتانسیل دافعه و با در نظر گرفتن  $\gamma = +15 \text{ f eV cm}^2$  در شکل ۸.۴ رسم شده است. مشاهده می‌شود که الکترون‌های بدون چرخش اسپینی، دارای مقدار ضریب عبور بالایی هستند که در تناسب با پتانسیل دافعه در نظر گرفته شده است. همچنین نمودار ضریب عبور  $T_{22}$  با در نظر گرفتن  $\gamma = +15 \text{ f eV cm}^2$  برای الکترون‌هایی که دچار چرخش اسپینی شده‌اند در شکل ۹.۴ رسم شده است.

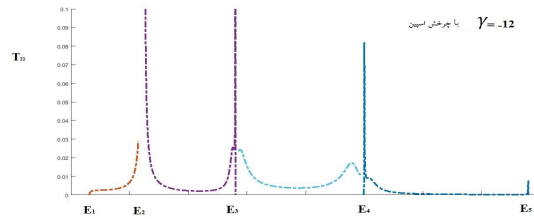


شکل ۳.۴: ضریب عبور  $T_{11}$  اسپین بالا برحسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_2$  برای پتانسیل جاذبه  $\gamma = -12 \text{ f eV cm}^2$  و  $\gamma = -6 \text{ f eV cm}^2$  در حالی که ناخالصی مغناطیسی در  $y_i = \frac{5}{14}W$  قرار دارد. خطوط پیوسته مربوط به قسمت بدون چرخش اسپین و خطوط چین مربوط به قسمت با چرخش اسپین است.

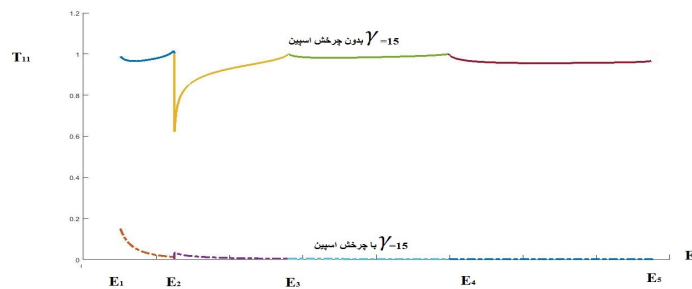


شکل ۴.۴: ضریب عبور  $T_{22}$  اسپین بالا برحسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_5$  برای پتانسیل جاذبه در حالی که  $\gamma = -12 \text{ f eV cm}^2$  و  $\gamma = -18 \text{ f eV cm}^2$  ناخالصی مغناطیسی در  $y_i = \frac{5}{14}W$  قرار دارد. خطوط پیوسته مربوط به قسمت بدون چرخش اسپین و خطوط چین مربوط به قسمت با چرخش اسپین است.

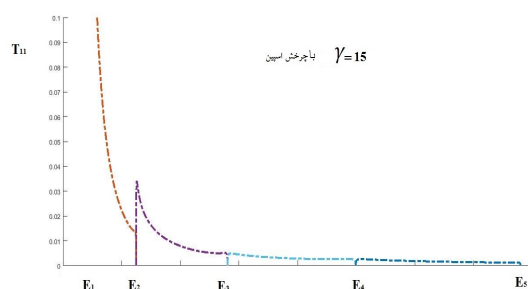




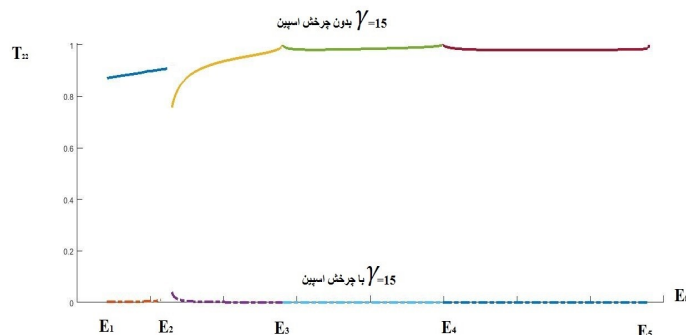
شکل ۵.۴: ضریب عبور  $T_{22}$  اسپین بالا برحسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_5$  برای پتانسیل جاذبه در حالی که  $\gamma = -12 \text{ feVcm}^2$  برای حالت با چرخش اسپین در حالی که ناخالصی مغناطیسی در  $y_i = \frac{5}{12} W$  قرار دارد.



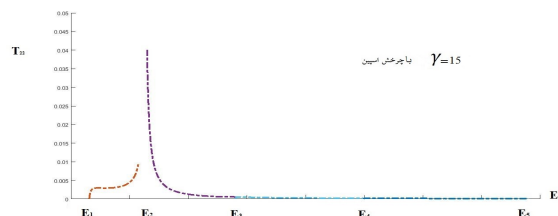
شکل ۶.۴: ضریب عبور  $T_{11}$  اسپین بالا برحسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_5$  برای پتانسیل دافعه  $\gamma = 15 \text{ feVcm}^2$  در حالی که ناخالصی مغناطیسی در  $y_i = \frac{5}{12} W$  قرار دارد. خطوط پیوسته مربوط به قسمت بدون چرخش اسپین و خطوط خط چین مربوط به قسمت با چرخش اسپین است.



شکل ۷.۴: ضریب عبور  $T_{11}$  اسپین بالا برحسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_5$  برای پتانسیل دافعه  $\gamma = 15 \text{ feVcm}^2$  برای حالت با چرخش اسپین در حالی که ناخالصی مغناطیسی در  $y_i = \frac{5}{12} W$  قرار دارد.



شکل ۸.۴: ضریب عبور  $T_{22}$  اسپین بالا برحسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_5$  برای پتانسیل دافعه  $\gamma = 15 \text{ feVcm}^2$  در حالی که ناخالصی مغناطیسی در  $y_i = \frac{5}{12} W$  قرار دارد. خطوط پیوسته مربوط به قسمت بدون چرخش اسپین و خطوط خط چین مربوط به قسمت با چرخش اسپین است.

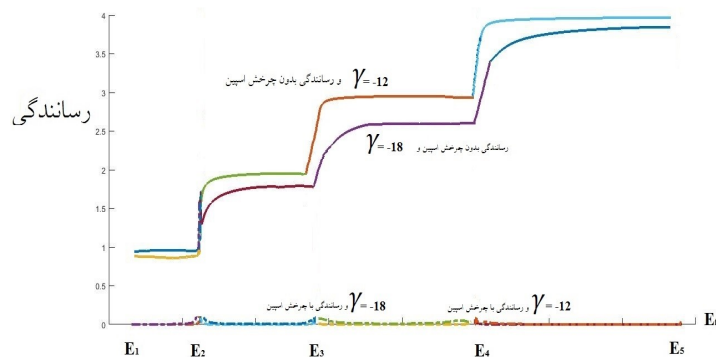


شکل ۹.۴: ضریب عبور  $T_{۲۲}$  اسپین بالا برحسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_5$  برای پتانسیل دافعه  $\gamma = 15 \text{ feVcm}^2$  برای حالت با چرخش اسپین در حالی که ناخالصی مغناطیسی در  $y_i = \frac{5}{12} W$  قرار دارد.

رسانندگی برحسب انرژی فرمی و تاثیر موقعیت عرضی ناخالصی در ضریب عبور در انرژی  $E_1 \leq E$

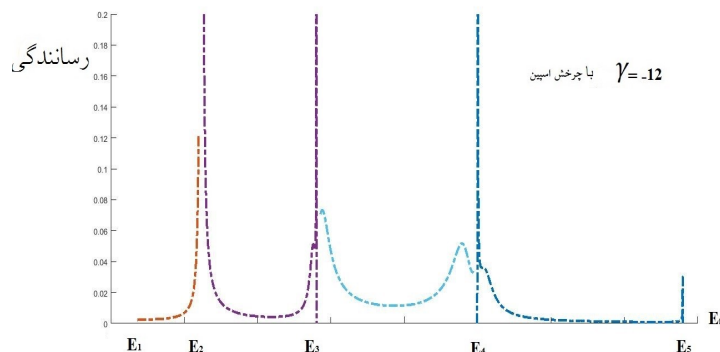
$$E \leq E_5$$

در شکل ۱۰.۴ میزان رسانندگی برای یک پتانسیل جاذبه برای مقادیر  $\gamma = -12, -18 \text{ feVcm}^2$  رسم شده است. مشاهده می شود که رسانندگی کوانتومی است و بصورت مضربی از  $\frac{2e^2}{h}$  می باشد. روند نمودار نشان می دهد که با افزایش قدرت پراکندگی رسانندگی کاهش یافته اما شکل کوانتومی آن از بین نمی رود. همچنین در شکل ۱۱.۴ به منظور مشاهده بیشتر جزئیات، میزان رسانندگی برای مقدار  $\gamma = -12 \text{ feVcm}^2$  برای الکترون هایی که دچار چرخش اسپینی شده اند رسم شده است. مقدار ضریب عبور  $T_{\uparrow\downarrow}$  برحسب محل پراکندگی ( $W$ ) برای یک

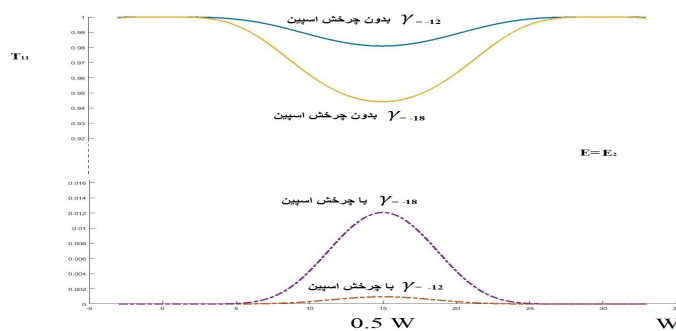


شکل ۱۰.۴: رسانندگی اسپین بالا برحسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_5$  برای پتانسیل جاذبه در حالی که ناخالصی مغناطیسی در  $y_i = \frac{5}{12}W$  قرار دارد. خطوط پیوسته مربوط به قسمت بدون چرخش اسپین و خطوط خط چین مربوط به قسمت با چرخش اسپین است.

پتانسیل جاذبه با در نظر گرفتن  $\gamma = -12, -18 \text{ feVcm}^2$  در شکل ۱۲.۴ رسم شده است. تقریباً در میانه سیم شاهد تغییرات در ضریب عبور هستیم به طوری که اگر ناخالصی را به لبه ها نزدیک کنیم ضریب عبور به سمت صفر خواهد رفت. یک علت چنین رفتاری می تواند ناشی از احتمال ناچیز حضور الکترون در لبه ها باشد. تغییرات درست در نقطه میانی به اوج خود خواهد رسید. با افزایش قدرت پراکندگی میزان تغییرات در ضریب عبور نیز افزایش می یابد بطوری که ضریب عبور برای الکترون های بدون چرخش اسپینی کاهشی چشمگیر و ضریب عبور برای الکترون های با چرخش اسپینی افزایش قابل توجهی خواهد داشت.



شکل ۱۱.۴: رساندگی اسپین بالا برحسب انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 \leq E \leq E_5$  برای پتانسیل جاذبه با مقدار  $\gamma = -12$  برای حالت با چرخش اسپین در حالی که ناخالصی مغناطیسی در  $y_i = \frac{5}{11} W$  قرار دارد.



شکل ۱۲.۴: ضریب عبور  $T_{11}$  برحسب موقعیت عرضی پراکندگی در سیم دو بعدی که در انرژی  $E = E_2$ . خطوط پیوسته مربوط به قسمت بدون چرخش اسپین و خطوط چین مربوط به قسمت با چرخش اسپین است.

## ۴.۴ نتیجه گیری

رفتار الکترون در مواجهه با یک یون به عنوان ناخالصی مغناطیسی همانطور که بررسی شد نشان می‌دهد برخی از الکترون‌ها دچار چرخش اسپینی شده و برخی بدون چرخش اسپینی عبور می‌کنند. با مطالعه ضریب عبور  $T_{11}$  و  $T_{22}$  دریافتیم زمانی که انرژی فرمی به نزدیکی انرژی کف هر زیرنوار نزدیک می‌شود، ضریب انتقال تغییراتی سریع از خود نشان می‌دهد. همانگونه که از شکل‌ها مشخص است در انرژی برابر با انرژی هر زیرنوار نرخ تغییرات ضرایب عبور بسیار بالا است.

با بررسی نمودار  $T_{22}$  نشان داده شد که با افزایش تراز انرژی الکترون فرودی، ضریب عبور درون زیرنواری یک کاهش کوچک در روند کلی عبور را از خود نشان می‌دهد بنابراین دریافتیم که هرچه الکترون‌های فرودی در ترازهای بالاتری قرار داشته باشند نرخ عبور کمتر شده اما رفتار یکسانی خواهند داشت.

با بررسی روند نمودار رسانندگی برحسب انرژی، نشان داده شد که رسانندگی کوانتیزه است و با افزایش انرژی الکترون فرودی، بصورت پله‌ای افزایش می‌یابد. مشخص شد الکترون‌هایی که بدون چرخش اسپینی عبور می‌کنند سهم بیشتری در رسانندگی خواهند داشت. همچنین وابستگی ضریب عبور به محل پراکننده را مورد مطالعه قرار دادیم و نشان داده شد که اگر پراکننده در نقطه‌ای درست در وسط سیم قرار داشته باشد تغییرات ضریب عبور برای  $T_{11}$  بیشترین مقدار را دارد.

در نتیجه در این تحقیق انتقال وابسته به اسپین الکترون در مواجهه با یک یون به عنوان ناخالصی مغناطیسی مورد مطالعه قرار گرفت. مشاهده شد زمانی که انرژی الکترون فرودی با کف انرژی هر زیرنوار هم‌تراز می‌شود شاهد بیشترین تغییرات در ضرایب عبور هستیم. دریافتیم که رسانندگی کوانتومی بوده و ضرایب عبور وابسته به محل پراکننده هستند بطوری که هرچه به سمت مرکز می‌رویم تغییرات بیشتر خواهند شد.

# مراجع

- [1] Igor Zutic, Jaroslav Fabian, and S. Das Sarma, Spintronics: Fundamentals and applications, Rev. Mod. Phys. 76, 323, (2004).
- [2] D.D. Awschalom, D. Loss, N. Samarth (ed.), Semiconductor Spintronics and Quantum Computation (Springer, Berlin, 2002).
- [3] I. Kander, Y. Imry, and U. Sivan, Effects of channel opening and disorder on the conductance of narrow wires, Phys. Rev. B 41, 12 941, (1990).
- [4] A. Szafer and A. D. Stone, Phys, Theory of Quantum Conduction through a Constriction, Phys. Rev. Lett. 62, 300, (1989).
- [5] D. Boese, M. Lischka, and L. E. Reichl, Scaling behavior in a quantum wire with scatterers, Phys. Rev. B 61, 5632, (2000).
- [6] C. S. Chu and R. S. Sorbello, Effect of impurities on the quantized conductance of narrow channels, Phys. Rev. B 40, 5941, (1989).
- [7] P.W. Shor, Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory, Phys. Rev. A 52, R2493(R), (1995).
- [8] L. Gravier and S. Serrano-Guisan and F. Reuse and J.P. Ansermet, Thermodynamic description of heat and spin transport in magnetic nanostructures, Phys. Rev. B 73, (2006).

- [9] A. A. Shokri, A. Daemi, Eur, Quantum transport of spin-polarized carriers in quasi paramagnetic quantum wires: Green's function formalism, Phys. J. B 69, (2009).
- [10] W. Rudzinski, J. Barnas, R. Swirkowicz, and M. Wilczyński, Spin effects in electron tunneling through a quantum dot coupled to noncollinearly polarized ferromagnetic leads, Phys. Rev. B 71, (2005).
- [11] B. Hiltcher, M. Governale and J. König, Spin-dependent transport through quantum-dot Aharonov-Bohm interferometers, Phys. Rev. B 82, 165452 (2010).
- [12] M. Dey, S. K. Maiti and S. N. Karmakar, Magnetic quantum wire as a spin filter: An exact study, Phys. Lett. A, 374, 1522, (2010).
- [13] M. Mardaani, A. A. Shokri, Theoretical approach on spin-dependent conductance in a magnetic-quantum wire Phys. 324, 541 (2006).
- [14] C. W. J. Beenakker and H. van Houten, Quantum Transport in Semiconductor Nanostructures, Solid State Physics, 44, 1, (1991).
- [15] V. Vargiamidis, O. Valassiades, and D. S. Kyriakos, Lippmann-Schwinger equation approach to scattering in quantum wires, phys. stat. sol. (b) 236, No. 3, 597, (2003).
- [16] Y. Wang, X. Song, H. Huang and Y. Shi, Spin-dependent transport through a quantum wire with magnetic impurity, J. of Shanghai Univ., 9, 485, (2005).
- [17] C. Kunze, L. Chang, and P. Bagwell, Resistance resonances from a magnetic impurity in an electron waveguide, Phys. Rev. B 53, 10171, (1996)
- [18] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C. T. Foxon, Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas, Phys. Rev. Lett. 60, 848, (1988).



- [19] L. Escapa and N. Garcia, Is the observed quantized conductance on small contacts due to coherent ballistic transport?, *Phys. Lett.* 56, 901 (1990).
- [20] P. F. Bagwell, Evanescent modes and scattering in quasi-one-dimensional wires, *Phys. Rev. B* 41, 10 354, (1990).
- [21] JGEM Fraaije, BAC Van Vlimmeren, NM Maurits, M Postma, OA Evers, C Hoffmann, P Altevogt and G Goldbeck-Wood , The dynamic mean-field density functional method and its application to the mesoscopic dynamics of quenched block copolymer melts, *chemical physics* 10, 106, (1997).
- [22] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. Beenakker, Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas, *Phys. Rev. Lett.*, (1988).
- [23] D. A. Wharam, T. J. Thornton, R. Newbury, One-dimensional transport and the quantization of the ballistic electronic conductance, *Journal of Physics C: Solid State Physics*, Volume 21, Number 8, (1988).
- [24] A. vrshai, Y. B. Band, Ballistic electronic conductance of an orifice, *Phys. Rev B*40, 12 535, (1989).
- [25] E. R. Race, U. Wulf, Resonant quantum transport in semiconductor nanostructures, *Phys. Rev. B* 64, 115 318, (2001).
- [26] A. Kumar, P. F. Bagwell, Resonant tunneling in a quasione dimensional wire Influence of evanescent modes. *Phys. Rev. B* 43, 11 843 (1991).
- [27] P. F. Bagwell, Evanescent modes and scattering in quasi one-dimensional wires. *Phys. Rev. B* 41, 15 841, (1990).
- [28] D.J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics* (Prentice Hall, Upper Saddle River, 1995).
- [29] P. Ball, *Nature* volume 404, pages 918–920, (2000).
- [30] A. M. Bratkovsky, P. E. Kornilovitch, *Phys. Rev. B* 67, 115307 (2003).

- 
- [31] S. Datta, M. Cahay, and M. McLennan, Scatter-matrix approach to quantum transport, Phys. Rev. B 36, 5655 (1987).
- [32] M. Brandbyge, K. W. Jacobsen, and J. K. Nørskov, Scattering and conductance quantization in three-dimensional metal nanocontacts, Phys. Rev. B 55, (1997).
- [33] E. N. Bogachev, A. G. Scherbakov, and Uzi Landman, Nonlinear magnetoconductance of nanowires, Phys. Rev. B 56, (1997).
- [34] W. Yuan, S. Xiao-long , H. Hao, S. Yao-ming, Spin-Dependent Transport through a Quantum Wire with Magnetic Impurity, Department of Physic, College of Sciences, Shanghai University, Shanghai (2005).
- [35] M. Cahay, M. McLennan, and S. Datta, Conductance of an array of elastic scatterers: A scattering-matrix approach, Phys. Rev. B 37, 10 125, (1988).

[۳۶] محمد فرهادی پور، مجموعه مقالات سایت باشگاه نانو، فصل دوم، انتشارات کوچک آموز، ۱۳۹۶.

## **Abstract**

In this research, we investigate spin-dependent electronic transmission through a quantum well wire by considering the scattering of spin polarized electrons by an embedded magnetic impurity. The calculations are based on the Lippmann-Schwinger equation approach. The results show drastic differences between two possibilities of transmission through the wire; via scattering of electrons with and without spin-flip. Also it is shown that in each subsequent subband threshold, the electronic transmission coefficient for the case of transferring without spin-flip drops rapidly, while with spin-flip exhibits a nearly ballistic behavior. Also the conductance of the wire and the dependence of the transport on the transversal position of the magnetic impurity on the electron transmission are determined. The way in which the transmission depends on the position of the impurity in the wire, is demonstrated.

Keywords: Green's function, Spintronics, Lippmann-Schwinger equation, Spin-dependent transmission



**Shahrood University of Technology**

**Faculty Of Physics and Nuclear Engineering**

**MSc Thesis in: Solid State**

**Spin-dependent electronic transport in a  
quantum wire**

**By: Hamid Teymouri Yarijani**

**Supervisor**

**Saeid Hessami Pilehrood**

**Advisor**

**Mehdi Ansari-Rad**

**February 2018**