

مِنْ رَحْمَةِ رَبِّكَ
كَرِيمٍ



دانشکده فیزیک

گروه نانو فیزیک

پایان نامه کارشنارسی ارشد

پراکندگی در سیم های کوانتومی تحت تابش الکترومغناطیس

بهاره اصغرپور

اساتید راهنما :

دکتر سعید حسامی پيله رود

دکتر طيبه مولاروی

تیر ۹۴

دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده: فیزیک

گروه: حالت جامد

پایان نامه کارشناسی ارشد خاتم بهاره اصفریور به شماره دانشجویی: ۹۱۰۰۶۳۴
تحت عنوان: پراکندگی در سیم های کوانتومی تحت تابش میدان الکترومغناطیس

در تاریخ ۱۳۹۴/۴/۲۳ توسط کمیته تخصصی زیر جهت اخذ مدرک کارشناسی ارشد مورد ارزیابی و با درجه بسیار خوب مورد پذیرش قرار گرفت.

| امضاء | اساتید مشاور | امضاء | اساتید راهنما |
|-------|---------------------|--|--|
| | نام و نام خانوادگی: |  | نام و نام خانوادگی: دکتر سعید حسامی پیله رولا |
| | نام و نام خانوادگی: |  | نام و نام خانوادگی: دکتر طیبه مولاروی |

| امضاء | نماینده تحصیلات تکمیلی | امضاء | اساتید داور |
|---|---|---|---|
|  | نام و نام خانوادگی: دکتر سید ایمان حسینی |  | نام و نام خانوادگی: محمد ابراهیم قاضی |
| | |  | نام و نام خانوادگی: دکتر مهدی انصاری راد |
| | | | نام و نام خانوادگی: |
| | | | نام و نام خانوادگی: |

سپاس خدای را که سخوران، در ستودن او بماند و شمارندگان، شمردن نعمت های او ندانند و کوشندگان حق او را گزاردن توانند، و سلام و درود بر محمد و خاندان پاک او، طاهران مصوم، هم آنان که وجودمان و امدار وجودشان است. به نشانه سپاس از الطافش، دستان مهربان ترین بندگانش، پدر و مادر عزیزم را بوسه می زنم. پایان نامه خود را تقدیم می کنم به پدر و مادرم، همسر مهربانم و دو برادر عزیزم.

پاس گزاری

بدون شک جایگاه و منزلت معلم، اجل از آن است که در مقام قردانی از زحمات بی‌شائبه او، بازبان قاصر و دست ناتوان، چیزی بخاریم. اما از انجایی که قردانی از معلم، پاس از انسانی است که هدف و غایت آفرینش را تاین می‌کند و سلامت امانت بانی را که به دستش سپرده اند، تضمین، لذا از اساتید بزرگوارم، که همواره بر کوتاهی و درشتی من، قلم عنوکشیده و کریانه از کنار غفلت بایم گذشته اند "جناب آقای دکتر سعید حامی پله رود" و "سرکار خانم دکتر طیبیه مولاروی" کمال تشکر را دارم. باشد که این خردترین، بخشی از زحمات آنان را پاس گوید.

بهاره اصغرپور

شهریور ۱۳۹۴

تعهد نامه

اینجانب بهاره اصغریپور دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته نانوفیزیک دانشکده علوم دانشگاه شاهرود نویسنده پایان نامه پراکندگی در سیم های کوانتومی تحت تابش الکترومغناطیس تحت راهنمایی جناب آقای دکتر سعید حسامی پیله رود و سرکار خانم دکتر طیبه مولاروی متعهد می شوم.

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهشهای محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه شاهرود می باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه شاهرود » و یا « Shahrood University » به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می گردد.
- در کلیه 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 کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است

تاریخ

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه شاهرود می باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی، مربوطه ذکر شود.

چکیده

بهره برداری از تابش تراهرتز مبتنی بر شناخت دقیق چگونگی و پیامدهای برهم کنش آن با قطعات و ساختارهایی در مقیاس نانو است. در این راستا یکی از مسائل مورد توجه، بررسی ترابرد الکترونی تحت تابش تراهرتز از میان سیم کوانتومی به عنوان یکی از اجزاء آشکارسازهای نوری و ادوات تصویر برداری می‌باشد. بنابراین، مطالعه ترابرد الکترونی از میان سیم کوانتومی تحت تابش تراهرتز حائز اهمیت خواهد بود. در این تحقیق، یک سیم کوانتومی دو بعدی با محدودیت فضایی عرضی که تحت اثر میدان الکترومغناطیسی قرار گرفته است، در نظر گرفته شده است. از معادله لیپمن - شوینگر برای محاسبه ترابرد الکترون استفاده کردیم. همچنین از رابطه لاندائور برای محاسبه رسانندگی دستگاه بهره گرفته می‌شود. نتایج بدست آمده حاکی از کاهش آهنگ ترابرد الکترون در حضور تابش می‌باشد. همچنین نتایج دلالت بر غلبه نقش پراکندگی های تک فوتونی و دو فوتونی بر نقش پراکندگی های فوتونی مرتبه بالاتر دارند.

کلمات کلیدی: ترابرد الکترونی، سیم کوانتومی، نانو ساختار، تابش تراهرتز، رسانندگی، لیپمن -

شوینگر.

لیست مقالات مستخرج

اصغرپور، بهاره؛ حسامی پيله رود، سعید؛ مولاروی، طیبه؛ (۱۳۹۳)، پراکندگی الکترونی در سیم های کوانتومی تحت تابش الکترومغناطیس، دوازدهمین کنفرانس ماده چگال، دانشگاه صنعتی اصفهان.

فهرست مطالب

فصل اول : مقدمه ای بر نانوساختارها و مروری بر کارهای انجام شده در زمینه محاسبه ترابرد و

رسانندگی کوانتومی

۱-۱ مقدمه ۲

۲-۱ مروری بر کارهای انجام شده در زمینه محاسبه ترابرد و رسانندگی کوانتومی ۴

فصل دوم: نانو ساختارهای نیمرسانا و تابش تراهرتز

۱-۲ مقدمه ۱۲

۲-۲ نیمرسانا ۱۲

۱-۲-۲ ساختار نواری نیمرسانا ۱۲

۲-۲-۲ تابع موج الکترون در ساختار نواری ۱۳

۳-۲-۲ جذب و گسیل داخل نواری نیمرسانا ۱۴

۳-۲ گاز الکترون دو بعدی ۱۵

۴-۲ تقسیم بندی های مختلف در نانو ساختارها ۱۶

۱-۴-۲ چاه کوانتومی ۱۷

۲-۴-۲ سیم کوانتومی ۱۷

۳-۴-۲ نقطه کوانتومی ۱۷

۵-۲ جرم موثر ۱۸

۶-۲ چگالی حالت ها ۱۹

۸-۲ تابش تراهرتز ۲۲

فصل سوم: بررسی نظری ترابرد و رسانندگی در سیم های کوانتومی

۱-۳ بررسی هامیلتونی گاز الکترون آزاد دوبعدی ۲۶

۲-۳ ترابرد در سیم های کوانتومی ۲۸

۳-۳ خواص اپتیکی سیم های کوانتومی ۳۳

| | | |
|-----|---|----|
| ۳-۴ | برهم کنش تابش با مواد..... | ۳۴ |
| ۳-۵ | محاسبه رسانندگی دستگاه توسط فرمول لاندائور | ۳۶ |
| ۳-۶ | تابع گرین و معادله لیپمن - شوینگر در سه بعد | ۳۸ |

فصل چهارم: پراکندگی در سیم های کوانتومی تحت تابش الکترومغناطیس

| | | |
|-----|---------------------------------------|----|
| ۴-۱ | مقدمه | ۴۴ |
| ۴-۲ | معادله شرودینگر | ۴۴ |
| ۴-۳ | معادله لیپمن - شوینگر در دو بعد | ۴۶ |
| ۴-۴ | پتانسیل پراکندگی تابع دلتا | ۵۱ |

فصل پنجم: بحث و نتایج

| | | |
|-----|---|----|
| ۵-۱ | مقدمه | ۵۸ |
| ۵-۲ | بررسی مسئله ترابرد و رسانندگی در حالتی که قطبش میدان تابش موازی با راستای سیم کوانتومی باشد | |
| ۵-۳ | و در حالت بدون تابش | ۵۸ |
| ۵-۳ | بررسی مسئله ترابرد و رسانندگی در حالتی که قطبش میدان تابش عمود بر راستای سیم کوانتومی باشد..... | ۶۶ |
| | جمع بندی | ۷۱ |

فهرست اشکال

- شکل (۱-۲): چگالی حالت های الکترون ها در نانوساختارهای مختلف ۲۱
- شکل (۲-۲): طرح شماتیک امواج الکترومغناطیس در ناحیه فرکانس تراهرتز که بین ناحیه های فرکانسی الکترونیک و فوتونیک قرار گرفته است [۱۷]..... ۲۳
- شکل (۱-۳): هندسه استاندارد برای سیم کوانتومی با دو اتصال، چشمه L ، درگاه تخلیه R ، که به نمونه M متصل شده اند [۱۲]..... ۲۹
- شکل (۲-۳): نمایش هندسی رابطه پراش در رساناها [۱۲]..... ۳۱
- شکل (۳-۳): نمودار نواری ناپیوسته بین سیم کوانتومی GAAS و سد GAALAS. ردیف های عمودی عبور نور را از زیرنوارهای حفره به زیرنوارهای الکترون نشان می دهند [۲۴]..... ۳۴
- شکل (۱-۴): الکترون فرودی از سمت چپ توسط ناخالصی در سیم کوانتومی دو بعدی پراکنده می شود. طول سیم محدود است و پهنای آن با $W=30\text{nm}$ نمایش داده شده است [۹]..... ۴۷
- شکل (۲-۴): رابطه پراکندگی حالت های انتشاری و ناپایدار در سیم کوانتومی یک بعدی. خطوط پر مربوط به مدهای انتشاری و خط چین ها مربوط به مدهای ناپایدار می باشد [۹]..... ۴۹
- شکل (۱-۵): احتمال عبور T_{11} بر حسب تابعی از انرژی فرمی از میان نقص تابع دلتا در سیم کوانتومی دو بعدی در حالت بدون تابش در بازه انرژی E_1-E_2 ۵۹
- شکل (۲-۵): احتمال عبور T_{11} بر حسب تابعی از انرژی فرمی از میان نقص تابع دلتا در سیم کوانتومی دو بعدی در حالت تابش موازی با راستای سیم در بازه انرژی E_1-E_2 ۶۰
- شکل (۳-۵): نمودار رسانندگی بر حسب انرژی فرمی از میان نقص تابع دلتا در سیم کوانتومی دو بعدی در حالت بدون تابش موازی با راستای سیم..... ۶۱
- شکل (۴-۵): نمودار رسانندگی بر حسب انرژی فرمی از میان نقص تابع دلتا در سیم کوانتومی دو بعدی در حالت تابش موازی با راستای سیم..... ۶۲
- شکل (۵-۵): ضریب عبور T_{11} بر حسب تابعی از انرژی فرمی از میان پتانسیل تابع دلتا دافعه با شدت $\gamma = 10 f. ev. cm^2$ در حالت تابش موازی..... ۶۳
- شکل (۶-۵): ضریب عبور T_{11} بر حسب تابعی از انرژی فرمی از میان پتانسیل تابع دلتا دافعه با شدت $\gamma = -6 f. ev. cm^2$ در حالت تابش موازی..... ۶۴

- شکل (۷-۵): ضریب عبور T_{11} بر حسب تغییرات نقاط عرضی پراکننده در سیم کوانتومی دو بعدی با پراکننده تابع دلتای دافعه ($\gamma = 10 f. ev. cm2$) در تراز انرژی دوم و در حالت تابش مستقیم ۶۵
- شکل (۸-۵): احتمال عبور T_{11} بر حسب تابعی از انرژی فرمی از میان نقص تابع دلتا در سیم کوانتومی دو بعدی در حالت تابش عمودی در بازه انرژی E_1-E_2 ۶۶
- شکل (۹-۵): نمودار رسانندگی بر حسب انرژی فرمی از میان نقص تابع دلتا در سیم کوانتومی دو بعدی در حالت تابش عمود با راستای سیم ۶۷
- شکل (۱۰-۵): ضریب عبور T_{11} بر حسب تابعی از انرژی فرمی از میان پتانسیل تابع دلتا دافعه با شدت $\gamma = 10 f. EV. CM2$ در حالت تابش عمودی ۶۸
- شکل (۱۱-۵): ضریب عبور T_{11} بر حسب تابعی از انرژی فرمی از میان پتانسیل تابع دلتا دافعه با شدت $\gamma = -6 f. ev. cm2$ در حالت تابش عمودی ۶۹
- شکل (۱۲-۵): ضریب عبور T_{11} بر حسب تغییرات نقاط عرضی پراکننده در سیم کوانتومی دو بعدی با پراکننده تابع دلتای دافعه ($\gamma = 10 f. ev. cm2$) در تراز انرژی دوم و در حالت تابش عمودی ۷۰

فهرست جداول

جدول (۱-۲): تعداد درجات آزادی حرکت الکترون D_f و تعداد درجات محدودیت الکترون D_c [۱۸]..... ۱۸

جدول (۲-۲): چگالی حالت ها به صورت تابعی از انرژی، برای الکترون های رسانش بدون محدودیت در یک، دو، و سه بعد [۱۸]..... ۲۲

فصل اول

مقدمه ای بر نانوساختارها و مروری بر کارهای انجام شده در

زمینه محاسبه تراپرد و رسانندگی کوانتومی

تحول فعلی در علم نانو به دلیل همراه شدن پیشرفت های متعددی است که در فناوری به وقوع پیوسته است. نمونه ای از این پیشرفت ها توانایی روزافزون در تولید ساختارهای کوچک و کوچک تر و بهبود مداوم دقتی است که بر اساس آن چنین ساختارهایی تولید می شوند.

بهره مندی کنونی ما از فناوری های نوین و محصولات آنها مثل کامپیوتر، اینترنت، موبایل و...، مرهون مدارهای الکترونیکی کوچک است. گونه های کوچک این مدارها، می تواند با عملکرد بهتر و پاسخ گویی سریع تر ایجاد شود. کوچکترین ترانزیستورهایی که در آزمایشگاه ساخته می شوند دارای طول حدودا صد نانومتر هستند. در فیزیک نیمرسانا، جهان نانو، ساختارهای نیمرسانا از طول مشخصه ای از مرتبه بزرگی یک نانومتر شروع و تا مرتبه بزرگی یک میکرومتر را شامل می شود. اندازه سیستم های در ابعاد پایین حدودا از چند نانومتر تجاوز نمی کند و قابل مقایسه با طول موج فرمی این دستگاه هاست. قطعا تمایل به کوچک سازی قطعات، ماهیت تحقیقات علمی بر روی نیمرساناها در آزمایشگاه ها مؤسسات علمی و دانشگاه ها را تحت تاثیر خود قرار داده است و باعث شده تا فیریکدانان آزمایش های مرتبط نوینی انجام دهند. تحقیقات و تلاش برای درک بیشتر، نانو ساختارهای نیمرسانا را در اواسط سال ۱۹۸۰ به وجود آورد. مهم ترین دلیل برای کشف و تحقیق روی نانو ساختارها در علم مواد احتمال کاربرد آنها در حسگرها، نمایشگرها و مواد هوشمند بود [۱]. رفتار فیزیکی در مقیاس نانو اساسا توسط مکانیک کوانتومی پیش بینی می شود. معادله شرودینگر یک معادله اساسی در مکانیک کوانتومی محسوب می شود و امکان مطالعه ماهیت ساختار های با ابعاد پایین را فراهم می کند.

برانگیزش ها و برهم کنش های هسته ای، اتمی، مولکولی و ترابرد نوترون ها، الکترون ها و فوتون ها، از مسایل قابل توجه می باشند که کاربردهای سودمندی در مطالعه و توسعه فناوری دارند. به عنوان مثال می توان از ترابرد^۱ نوترون در رآکتورهای هسته ای، گذار یون و الکترون در پلاسما، ترابرد

¹ Transport

الکترون در قطعات الکترونیکی و کاربردهای فناورانه آنها نام برد [۲]. بخش قابل توجهی از دانشی که ما از دستگاه های نانو مقیاس داریم، متکی به تولید و آزمایش آنها می باشد. اما از آنجا که این دستگاه های کوچک، در حقیقت دستگاه های بس ذره ای هستند، تفسیر داده ها و اطلاعات بدست آمده از آنها نیازمند بهره مندی از تحقیقات نظری گسترده در این زمینه خواهد بود. در عمل دستیابی به دستگاه های در مقیاس نانوی قابل استفاده در قطعات، نیازمند توسعه نظریه های مرتبط و تحلیل کامل این دستگاه هاست [۳]. زمانی که یک نانو ساختار در محدوده کوانتومی به کار گرفته می شود، امکان مواجهه با سه اثر محدودیت کوانتومی^۱، محاصره کولنی^۲ و اثر تونل زنی^۳ وجود دارد.

اثر محدودیت کوانتومی زمانی اتفاق می افتد که حداقل یک بعد دستگاه قابل مقایسه با طول موج دوبروی آن شود. اگر حداقل یک بعد جامد قابل مقایسه با طول موج دوبروی ذره باشد، ذره رفتار کوانتوم مکانیکی از خود نشان می دهد.

زمانی که مقاومت در یک ولتاژ بایاس کوچک در یک قطعه الکترونیکی که شامل یک پیوندگاه تونلی (یک لایه عایق بین دو الکتروود رسانا) با توان کم باشد افزایش پیدا می کند، مقاومت قطعه به علت پدیده محاصره کولنی در یک ولتاژ بایاس پایین ثابت نمی باشد اما برای ولتاژهای بایاس تحت یک آستانه، تا بی نهایت افزایش می یابد. این پدیده مربوط به اثر محاصره کولنی می باشد [۴].

بیشترین مطالعات مربوط به ترابرد کوانتومی، فرایند تونل زنی می باشد. در حقیقت واژه «تونل زنی» اشاره به انتقال ذرات از میان ناحیه ممنوعه دارد. به عنوان مثال زمانی که یک لایه ایزوله شده در یک ترانزیستور شروع به کوچک شدن تا حد نانومتر می کند، الکترون ها می توانند از میان سد پتانسیل تونل زنی کنند. اثر تونل زنی در ترانزیستورها باعث پایین آمدن کیفیت عملکرد آنها می شود، اما در توسعه میکروسکوپ تونلی روبشی نقش مهمی بازی می کند. در گذشته پدیده تونل زنی

¹ Quantum confinement

² Coulomb blockade

³ Tunneling effect

بلافاصله پس از به رسمیت شناخته شدن پایه های نظریه کوانتومی، در ارتباط با زمینه یونیزاسیون اتم ها و واپاشی ذرات آلفا ایجاد شد. کمی پس از آن تونل زنی در جامدات توسط فولر^۱ و نوردهیم^۲ در زمینه الکترون های گسیلی از فلزات مورد مطالعه قرار گرفت. بعداً مطالعه تونل زنی از میان لایه های عایق باریک بین فلزات و بین نیم رساناها و فلزات توسعه یافت. پس از گسترش تئوری نواری جامدات، تونل زنی بین نواری پیشنهاد شد که الکترون ها از یک نوار به نوار دیگری از ناحیه گاف ممنوعه^۳ تونل زنی می کردند [۵]. در بهره گیری از انواع نانو ساختارهای مورد توجه در فناوری قطعات الکترونیکی، شناخت و کنترل ترابرد الکترونی متأثر از تمامی اثرات مذکور نقشی محوری ایفا می کند. از میان نانو ساختارهای مورد توجه، سیم های کوانتومی زمینه های کاربردی متعددی را نوید می دهند. پژوهش های متعددی در خصوص ترابرد الکترونی در سیم کوانتومی صورت پذیرفته است. بررسی نظری این ساختارها با استفاده از رهیافت های متعدد، مبتنی بر مکانیک کوانتومی بوده است. در بخش مهمی از این مطالعات، ترابرد الکترونی در حضور میدان های الکترومغناطیسی مورد بررسی قرار گرفته است.

۲-۱ مروری بر کارهای انجام شده در زمینه محاسبه ترابرد و رسانندگی کوانتومی

یانگ مویو^۴ و همکارانش گذار الکترون از میان سیم کوانتومی تحت تابش میدان الکترومغناطیس تراهرتز را مطالعه و بررسی کردند. آنها با استفاده از تقریب مدل الکترون آزاد و تقریب ماتریس پراکندگی در یک سیم کوانتومی بالیستیک^۵، نشان دادند اگرچه الکترون ها در معرض برخورد با فوتون ها هستند، بازتاب الکترون ها نیز در سیم کوانتومی بالیستیکی اتفاق می افتد. آنها مشاهده کردند، زمانی که فرکانس میدان الکترومغناطیسی در تشدید با فاصله کنار نوارها در سیم بود، انرژی الکترون ها تا یک مقدار آستانه افزایش پیدا می کرد و یک ساختار تیز پله ای در گذار الکترونی اتفاق

¹ Fowler

² Nordheim

³ Forbidden Gap

⁴ Yang Mou

⁵ Ballistic Quantum Wire

می افتد [۶].

فیلیپ. اف بگول^۱ دامنه عبور جریان و رسانندگی الکتریکی را بر حسب تابعی از انرژی فرمی برای الکترون‌های پراکنده شده از یک نقص منفرد در سیم کوانتومی شبه یک بعدی محاسبه کرد. در یک هندسه محدود، شرایط مرزی پراکندگی، مدهای انتشاری در سیم را به مدهای ناپایدار و غیر انتشاری جفت می‌کند. بنابراین جریان پایای به کار برده شده موجب می‌شود که مدهای ناپایدار اطراف هر ناخالصی در سیم ساخته شوند. هر زمان که انرژی الکترون با انرژی هر کدام از زیرنوارهای شبه یک بعدی جدید و یا حالت شبه مقید دوشکافی تقریباً برابر شد، این الکترون‌های ذخیره شده اضافی، شرایط مرزی پراکندگی را برای مدهای انتشاری به شدت تحت تاثیر قرار می‌دهند. وی در تحقیقی که انجام داد، نشان داد که حضور مدهای ناپایدار حتی در حضور نقص‌های پراکندگی می‌تواند منجر به شفافیت و یا تیرگی کامل برای مدهای انتشاری شود [۷].

اولهاس اس سوناوان^۲ و همکارانش معادله شرودینگر را به منظور بررسی رفتار الکترون محدود شده و تابع موج انتشاری آن در یک سیم کوانتومی حل کردند. آنها با استفاده از روش ماتریس انتقال، ویژه مقادیر انرژی را برای پهنایهای مختلف سیم و کسر مولی آلومینیوم مورد ارزیابی قرار دادند. برای 10% کسر مولی آلومینیوم ویژه مقادیر انرژی حدود 0.02139 e-v بود و برای 30% کسر مولی آلومینیوم، ویژه مقادیر انرژی تا مقدار 0.0325 e-v در سیم کوانتومی به ابعاد 10 nm افزایش یافته بود. تحلیل نتایج این طور نشان داده است که با افزایش کسر مولی آلومینیوم، شدت تابع موج، که با استفاده از حل معادله شرودینگر مستقل از زمان بدست آمده است، در ناحیه سیم افزایش می‌یابد [۸].

واسیلیوس^۳ و همکارانش از معادله لیپمن - شوینگر^۴ برای بدست آوردن دامنه‌های پراکندگی و رسانندگی بر حسب انرژی فرمی برای الکترون‌های پراکنده شده از یک و دو نقص نقطه‌ای در سیم

¹Philip F. Bagwell

²Ulhas s.Sonawane

³Vassilios Vargiamidis

⁴Lippmann-Schwinger

کوانتومی استفاده کردند. قبلا این طور نتیجه شده بود که ترابرد الکترون از میان نقص نقطه ای منفرد در سیم کوانتومی در هر کمینه زیر نوار مستقل از مکانی است که پراکننده واقع شده است، در حالیکه آنها در این کار مشاهده کردند که گذار کامل در هر کمینه زیر نوار شدیداً متأثر از نقاط نقص می باشد [۹].

ویدارگادمانسون^۱ و همکارش ترابرد الکترونیکی از میان سیم کوانتومی دوگانه را در یک میدان مغناطیسی عمودی همگن خارجی با استفاده از روش پراکندگی بر پایه معادله لیپمن - شوینگر مدل سازی کردند. در ناحیه پراکندگی یک درپچه بین دو سیم موازی برای فرایندهای پراکندگی داخل و بین دو سیم ایجاد شده بود. زمانی که تقارن میدان مغناطیسی شکسته می شود، طیف انرژی زیرنواری که به دنبال آن تشکیل می شود، با رژیمی از الکترون ها و حفره ها، همانند مدهای انتشاری، منجر به ساختاری با رسانندگی بالا بر حسب انرژی می شود که در مقایسه با یک سیم کوانتومی منفرد پارابولیک^۲ رسانندگی بهتری از خود نشان می دهد [۱۰].

سی. اس. تانگ^۳ و همکارش ترابرد کوانتومی را در یک کانال باریک و در حضور پتانسیل مدوله شده در بازه زمانی محدود مورد مطالعه قرار دادند. پتانسیل به شکل رابطه (۱-۱) در نظر گرفته شده بود.

$$v(x, t) = v_0 \theta(a - x) \cos \omega t \quad (1-1)$$

در رابطه فوق، a بازه پتانسیل، v_0 دامنه پتانسیل، θ تابع پله ای هویساید و x جهت انتقال می باشد. آنها نشان دادند زمانی که پتانسیل شیمیایی μ افزایش پیدا می کند، رسانندگی سیستم که با G نمایش داده می شود، یک ساختار با دره و قله از خود نشان می دهد که μ به اندازه $m\hbar\omega$ بالاتر از انرژی آستانه یک زیر نوار می باشد. این گونه ساختار رسانندگی در هر دو حالت، برای مقادیر a کوچک

¹ Vidar Gudmundsson

² Parabolically

³ C. S. Tang

$(a \ll \lambda_F)$ و a بزرگ $(a \gg \lambda_F)$ مشاهده می شود. دره ها مربوط به شکل حالت های شبه پیوندی است که برای مقادیر کوچکتر a و v_0 باریک تر می باشد. موقعیت قله ها ثابت بوده، فقط برای مقادیر بزرگ v_0 ، جابجایی بسیار کوچکی داشتند [۱۱].

کریستین تورفاسون^۱ ترابرد کوانتومی را در یک میدان مغناطیسی، در حضور پتانسیل گاوسی شکل تناوبی وابسته به زمان^۲، بررسی کرد. وی از نمایش مختصات اندازه حرکت به منظور بدست آوردن معادله انتگرالی جفت شده که معادله لیپمن شوینگر نامیده می شود، استفاده کرد. همچنین وی از روش لاندائور - بوتیکر^۳ به منظور محاسبه رسانندگی سیستم استفاده نمود. در محاسبات عددی که برای حل این معادله استفاده شده بود، نقش زیرنوارها و کنارنوارهای اپتیکی هم در نظر گرفته شده بود. محاسبات عددی که وی انجام داده بود نشان داد، زمانی که الکترون های فرودی عبور غیرکشسانی به لبه زیرنوار داشته باشند یک ساختار با دره و قله در رسانندگی در مورد پتانسیل گاوسی شکل وابسته به زمان مشاهده می شود [۱۲].

سی ژانگ^۴ با تبدیلات پی در پی یکانی، معادله وابسته به زمان شرودینگر را برای یک گاز الکترون تحت تأثیر میدان مغناطیسی کوانتیزه شده و در یک لیزر با شدت زیاد حل کرد. تابع موج بدست آمده برای محاسبه تابع گرین الکترونی، قطبش پذیری و تابع دی الکتریک دینامیک به کار برده شد. سی ژانگ، ویژگی های دی الکتریک و برانگیزش های جمعی برای گاز الکترونی تحت تابش لیزر و میدان مغناطیسی کوانتیزه شده را محاسبه کرد. در نتایجی که وی بدست آورد مشاهده کرد که فرایندهای چند فوتونی می توانند از برانگیزش های جمعی شناسایی شوند [۱۳].

¹ Kristinn Torfason

² Time-periodic Gaussian-shaped Potential

³ Landauer-Büttiker

⁴ C-Zhang

جنز باردارسون^۱ و همکارانش ترابرد همدوس الکترون را از میان یک کانال کوانتومی در حضور یک پتانسیل پراکننده با استفاده از تقریب ماتریس ترابرد با استفاده از روش لیپمن - شوینگر را مورد مطالعه قرار دادند. برای این منظور آنها از یک سیم کوانتومی با پتانسیل پراکننده گاوسی شکل استفاده کردند که می‌توانست به شکل یک تک ناخالصی، یک نقطه کوانتومی و یا ساختارهای پیچیده‌تری در سیم باشد. فرورفتگی‌هایی با عمق زیاد در حضور ناخالصی جاذبه در نمودار رسانندگی مشاهده شده بود. همچنین قله‌های تشدید در نمودار رسانندگی ظاهر شده بود که در نتیجه انطباق انرژی الکترون فرودی با یک تراز انرژی در نقطه کوانتومی اتفاق افتاده بود. علاوه بر این آنها رسانندگی از میان یک سیم کوانتومی را در حضور یک پتانسیل نامتقارن بررسی کرده بودند. زمانی که یک پتانسیل موازی با راستای سیم به کار برده بودند، دو دره با شیب تند و عمق زیاد در یک زیرنوار انرژی مشاهده کردند که به صورت حالت‌های شبه مقید ناشی از مد ناپایدار بعدی توصیف کرده بودند [۱۴].

با توجه به توسعه فناوری نانو و فراهم آمدن امکان بهره‌برداری از سیم‌های کوانتومی و به جهت فراهم آوردن درک عمیق از نتایج حاصل از تجربه بررسی نظری همه جانبه دستگاه‌های مذکور اجتناب ناپذیر است. بررسی دقیق ویژگی‌های سیم‌های کوانتومی از قبیل ترابرد الکترونی در آنها، با توجه به ابعاد این دستگاه‌ها، در چهارچوب مکانیک کوانتومی میسر خواهد شد. از عوامل مهم در ترابرد الکترونی در دستگاه‌های مذکور می‌توان به پراکندگی الکترون‌ها از عیوب و ناخالصی‌ها اشاره نمود. معادله انتگرالی لیپمن - شوینگر یکی از معادلات اساسی در نظریه پراکندگی کوانتومی است. این اهمیت از آنجا ناشی می‌شود که در بررسی کوانتومی فرایندهای برخورد، این معادله جایگزین معادله دیفرانسیلی شرودینگر و شرایط مرزی حاکم بر آن می‌شود. به عنوان مثال در مسائل فیزیک اتمی، هسته‌ای و ذرات بنیادی دانستن جایجایی‌های فاز الزامی است و این امر با دانستن پاسخ معادله انتگرالی لیپمن - شوینگر میسر می‌شود. بنا به همین اهمیت در سال‌های اخیر سعی شده است تا

¹Jens Hjørleifur Bardarson

روش های عددی مناسبی برای حل این معادله که دارای تکینگی ذاتی نیز می باشد ارائه گردد. قبلا پراکندگی و رسانش الکترونی در سیم کوانتومی با استفاده از معادله لیپمن - شوینگر در غیاب تابش الکترومغناطیس مطالعه شده است. با استفاده از رهیافتی مشابه تلاش می گردد تا پراکندگی و رسانش الکترونی در یک سیم کوانتومی در حضور تابش الکترومغناطیسی مطالعه گردد [۱۵].

فصل دوم

نانوساختارهای نیم رسانا و تابش تراهرتز

پیشرفت عالی در علم و فناوری، مرهون قابلیت های قطعات اپتوالکترونیک^۱ و الکترونیک می باشد. این قطعات اساساً بر پایه مولفه های نیمرسانا، ترابرد کوانتومی و تشدید در نیمرساناها توسعه پیدا کرده اند. آزمایش هایی که در زمینه نانو ساختارهای نیمرسانا برای پیشرفت صنعتی و کیفیت مواد به کار برده می شود به منظور تولید ساختارهایی است که تحت شرایطی طراحی می شوند که باعث می شود تا اثرات کوانتومی در آنها چیره شوند. شرایط آزمایشگاهی مورد نیاز، دمای پایین، تا اندازه میلی کلوین و میدان مغناطیسی در حد تسلا می باشد.

۲-۲ نیمرسانا

مواد از نظر الکتریکی به سه دسته نارسانا، نیمرسانا و عایق تقسیم بندی می شوند. به دلیل نقش نانوذرات ساخته شده از عناصری که از اجزای معمول نیمرساناها هستند، پژوهش های زیادی در مورد آنها و با تأکید بر خواص الکترونی آنها صورت گرفته است.

۱-۲-۲ ساختار نواری نیمرسانا

به منظور محاسبه خواص ترابرد الکترونی مواد دانستن ساختار نواری انرژی ضروری است. ساختار نواری یک ماده، معین کننده نوارهای مجاز انرژی و در نتیجه تعیین کننده حالت های مجازی است که در یک بلور ایجاد شده است. با توجه به ساختار نواری ما قادریم فلز، نیمرسانا یا عایق بودن یک ماده را تشخیص دهیم. بسیاری از ویژگی های اصلی که نیمرساناها را با عایق ها شبیه می سازد به خاطر ساختار نواری آنها است. ساختار نواری نیمرسانا در نتیجه حل معادله شرودینگر برای الکترون

¹ Optoelectronic

های بدون برهمکنش با هم، در یک پتانسیل دوره ای از شبکه بلوری معین می شود. در هر دو دسته از مواد، نوار ظرفیت در دمای صفر کلوین با الکترون ها کاملاً پر شده اند، در حالیکه نوار رسانش کاملاً خالی است و گاف نواری که با E_g نمایش داده می شود (ناحیه ای که در آن هیچ نواری نباشد) نوار رسانش را از نوار ظرفیت جدا می کند. در دمای اتاق گاف نواری نیمرسانا به اندازه کافی کوچک است، بنابراین تعداد چشمگیری از الکترون ها به صورت گرمایی از نوار ظرفیت به نوار هدایت برانگیخته می شوند، این الکترون ها در ناحیه ای از نوار هدایت جمع می شوند. اما یک رسانا ماده ایست که نوار ظرفیت آن پر است و بخشی از نوار رسانش آن پر از الکترون های رسانشی است که با تحرکشان در انتقال جریان الکتریکی مؤثرند [۱].

۲-۲-۲ تابع موج الکترون در ساختار نواری

برای بهره برداری خواص ترابرد الکترونی در یک بلور نیمرسانا، ضروری است که درک کاملی از تمامی عوامل تاثیر گذار بر حرکت الکترون ها بدست آورد. ساختار نواری و پراکندگی الکترون ها توسط عوامل پراکننده در بلور از مهمترین عواملی هستند که در ترابرد الکترون ها در بلور نقش دارند و بنابراین به طور دقیق مشخص می شوند، به عنوان مثال نقص ها در یک شبکه می توانند حرکت رو به جلوی الکترون های رسانش را مختل و مسیر آزاد میانگین را محدود کنند. برای مشخص کردن حالت الکترون ها در بلور کفایست معادله شرودینگر را حل نماییم.

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + u_k(r) \right) \psi_k = \varepsilon \psi_k \quad (1-2)$$

ε در رابطه فوق، ویژه مقدار انرژی می باشد و m^* جرم مؤثر الکترون ها می باشد. به خاطر طبیعت بلوری نیمرساناها $u_k(r)$ پتانسیل دوره ای ناشی از هسته های اتم ها و سایر الکترون ها است و اگر بردار R

را بردار شبکه مستقیم و \vec{k} را بردار موج الکترون در اولین منطقه بریلوئن^۱ در نظر بگیریم، برای این پتانسیل تناوبی رابطه (۲-۲) را خواهیم داشت:

$$u_k(r) = u_k(r + R) \quad (۲-۲)$$

با توجه به قضیه بلاخ^۲ نشان داده می‌شود که مجموع بردارهای موج الکترون در فضای فاز که بتوان آنها را به صورت $k' = k + G$ نوشت، تعیین کننده بردارهای موج مستقل می‌باشند. در این رابطه G بردار شبکه وارون، k' برداری از فضای فاز و k بردار موج واقع در منطقه اول بریلوئن است. بدین ترتیب می‌توان از بردارهای موج الکترون واقع در منطقه اول بریلوئن جهت مشخص کردن تمام خصوصیات الکترونی بلور استفاده کرد. با اعمال شرایط مرزی دوره ای بر روی تابع موج الکترون و به کمک قضیه بلاخ نشان داده می‌شود که تعداد حالت های مجاز در منطقه اول بریلوئن برابر تعداد یاخته های بنیادی بلور است. در نتیجه تعداد حالت های مجاز بردار k در منطقه اول بریلوئن بسیار زیاد است و با توجه به کوچک بودن حجم منطقه اول بریلوئن، مجموعه بردارهای k در این فضا فشرده می‌شوند. به همین علت بردار موج الکترون در محاسبات به صورت متغیر پیوسته در نظر گرفته می‌شود. طبق قضیه بلاخ پاسخ های معادله شرودینگر برای یک پتانسیل دوره ای باید به شکل زیر باشند:

$$\psi_k(r) = e^{ik.r} u_k(r) \quad (۳-۲)$$

با توجه به روابط ذکر شده، تابع موج الکترون تحت انتقال به اندازه R دارای خاصیت زیر است [۱۶]:

$$\psi_k(r + R) = e^{ik.(r+R)} u_k(r + R) = e^{ik.r} e^{ik.R} u_k(r) = e^{ik.R} \psi_k(r) \quad (۴-۲)$$

۳-۲-۲ جذب و گسیل داخل نواری نیمرسانا

نیمرساناها می‌توانند فوتون‌های درگیر در گذار الکترونیکی را که بین نوار ظرفیت و رسانش

¹ Brillouin

² Bloch

هستند، جذب و گسیل کنند. این گذار الکترونیکی از پایستگی انرژی و تکانه پیروی می‌کند. انرژی فوتون برابر با اختلاف انرژی بین نوار ظرفیت و رسانش است.

$$h\nu = E_c(k_c) - E_v(k_v) \quad (5-2)$$

در رابطه فوق E_c انرژی نوار رسانش و E_v انرژی نوار ظرفیت می‌باشد. تکانه فوتون می‌تواند توسط سیستم الکترونی افزایش و یا کاهش پیدا کند، به این معنی که

$$\hbar k = \hbar k_c - \hbar k_v \quad (6-2)$$

بسته به نوع ماده فوتون دارای طول موجی از مرتبه چندین میکرون (فروسرخ)، برای کاربردهای اپتیکی، تا چند هزار نانومتر (مرئی)، برای کاربردهایی مثل دیودهای گسیلنده نور و لیزرهای نیمرسانا می‌باشد. اندازه گیری جذب نزدیک گاف نواری یک روش مناسب برای تعیین گاف نواری نیمرسانا به طور تجربی می‌باشد. برای مثال جذب اپتیکی GaAs در دمای اتاق به اهستگی به حدود 1.42eV نزدیک می‌شود، به این معنی که بلافاصله انرژی فوتون از گاف نواری تجاوز می‌کند. پایین تر از این مقدار انرژی، نیمرسانا شفاف است [۱].

۳-۲ گاز الکترون دو بعدی

نیمرساناهای با ساختار ناهمگن با حامل های باری که در فصل مشترک آنها در دو بعد محدود شده اند، توجه زیادی را در فیزیک بنیادی و در قطعات کاربردی به خود اختصاص داده اند. الکترون های واقع در فصل مشترک ساختار ناهمگن، همانند گاز الکترون ناهمگن عمل می‌کنند. آنها یک حرکت کوانتیزه شده عمود بر لایه دارند، در حالیکه در دو بعد دیگر در لایه آزادی حرکت دارند. طیف انرژی مربوط به گاز الکترون دو بعدی محدود شده در ساختار ناهمگن با طیف انرژی گاز الکترون سه بعدی در یک نیمرسانای کپه ای که شامل نوارهای پیوسته است، متفاوت است. چگالی

حالت های الکترون های آزاد حرکتی در گاز الکترون سه بعدی بر حسب تابعی از انرژی متناسب با مجذور ریشه انرژی است، در حالیکه چگالی حالت های الکترون ها در زیر نوار گاز الکترون دو بعدی مستقل از انرژی می باشد. از جمله سیستم های دو بعدی مهم، چاه های کوانتومی، ابرشبکه ها و ساختار ناهمگن مدوله شده - آرایش یافته می باشد [۱۷]. اگر بخواهیم یک قطعه با ابعاد پایین بسازیم، معمولا از گاز الکترون دو بعدی شروع می کنیم. به عنوان نمونه می توان گاز الکترون دو بعدی در فصل مشترک ناهمگن $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ ایجاد نمود [۱۳]. ساختارهای کوانتومی با محدود کردن درجات آزادی حرکت ذرات ایجاد می شوند. آنچه که ساختارهای کوانتومی را بسیار قابل توجه می کند و به آنها خواص منحصر به فردی می دهد، این است که اندازه آنها از طول پراکندگی (مسافت متوسطی که الکترون قبل از پراکنده شدن طی می کند) که ویژگی منحصر به فرد بسیاری از پدیده های فیزیکی است، کوچکتر می باشد. اگر اندازه ذرات از این طول های مشخصه کمتر باشد، ممکن است فیزیک و یا شیمی جدیدی پدیدار شود.

۴-۲ تقسیم بندی های مختلف در نانو ساختارها

کاهش در ابعاد که توسط محدود کردن الکترون ها و حفره ها در یک لایه نازک نیمرسانا ایجاد می شود، منجر به تغییر در رفتار آنها می شود. این قاعده می تواند با کاهش بیشتر ابعاد محیط اطراف الکترون از چاه کوانتومی دو بعدی به سیم کوانتومی یک بعدی اتفاق بیفتد و سرانجام به نقطه کوانتومی بدون بعد (صفر بعدی) می رسیم. قطعا منظور از ابعاد، تعداد درجات آزادی حرکت در تکانه الکترون می باشد. اگر تعداد درجات آزادی به صورت D_f برچسب گذاری کنیم و همچنین تعداد جهت های محدود شده را با D_c برچسب گذاری شود، واضح است که خواهیم داشت [۱۸]:

$$D_f + D_c = 3 \quad (۷-۲)$$

۲-۴-۱ چاه کوانتومی

اگر یکی از ابعاد ماده تا محدوده نانو کوچک شود و ابعاد دیگر بزرگ باقی بماند، ساختاری حاصل می‌شود که چاه کوانتومی^۱ نامیده می‌شود. محدودیت کوانتومی یک بعدی در این ساختارها باعث گسستگی ترازهای انرژی می‌شود و ویژگی‌های الکترونی و نوری جدیدی که در مواد کپه ای وجود ندارد را تولید می‌کند. از جمله کاربردهای گسترده چاه های کوانتومی نیمرسانا می‌توان به قطعات الکترونی، اپتوالکترونی، لیزرهای نیمرسانا و دیودهای نور گسیل اشاره کرد.

۲-۴-۲ سیم کوانتومی

اگر دو بعد ماده تا محدوده نانو کوچک شوند و فقط یک بعد دیگر بزرگ باقی بماند، ساختار حاصل سیم کوانتومی^۲ نامیده می‌شود. سیم های کوانتومی قطعات مزوسکوپیک هستند که در یک جهت رسانندگی خوبی از خود نشان می‌دهند و در جهت عرضی رسانندگی کوانتیزه شده ای دارند. از کاربردهای آن می‌توان به نانو بارکدهایی که در پزشکی استفاده می‌شوند نام برد.

۲-۴-۳ نقطه کوانتومی

یک نقطه کوانتومی^۳ دربردارنده ۱ تا ۲۰۰ اتم در قطر می‌باشد و طول و عرض و ارتفاع آن اساساً کمتر از صد نانومتر می‌باشد. اگر هر سه بعد ماده به محدوده نانو نزدیک شود در این وضعیت نقطه کوانتومی خواهیم داشت. از جمله کاربردهای نقطه کوانتومی می‌توان دیودهای لیزر آبی و

¹ Quantum Well

² Quantum Wire

³ Quantum Dot

ترانزیستور تک الکترونی را نام برد. جدول ۱-۲ تعداد درجات آزادی را برای تقسیم بندی های مختلف نانوساختارها به طور خلاصه بیان می کند [۴].

جدول ۱-۲ تعداد درجات آزادی حرکت الکترون D_f و تعداد درجات محدودیت الکترون D_c

| System | D_c | D_f |
|--------------|-------|-------|
| Bulk | 0 | 3 |
| Quantum well | 1 | 2 |
| Quantum wire | 2 | 1 |
| Quantum dot | 3 | 0 |

۵-۲ جرم موثر

ساختار نواری یک بلور اغلب توسط مدل الکترون تقریباً آزاد توضیح داده می شود، که برای الکترون های نواری یک اختلال ضعیف در نظر گرفته شده است. این مدل تقریباً به همه سوالات درباره رفتار الکترون در فلزات پاسخ می دهد. وقتی که الکترون به جرم m داخل یک بلور قرار داده می شود نسبت به میدان های اعمالی واکنش نشان می دهد، بطوریکه رفتار آن معادل رفتار ذره آزادی است که جرم آن m^* می باشد. یک الکترون منفرد در یک نوار انرژی ممکن است جرم موثر^۱ مثبت و یا منفی داشته باشد. حالت های جرم موثر مثبت نزدیک انتهای نوار اتفاق می افتد. جرم موثر مثبت به این معنی است که نوار یک انحنا به طرف بالا دارد $\left(\frac{d^2\epsilon}{dk^2} > 0\right)$. حالت های جرم موثر منفی، بالای نوار اتفاق می افتد. جرم موثر منفی به این معنی است که با تغییر حالت k به $k + \Delta k$ تکانه ای که از الکترون به شبکه منتقل می شود بزرگ تر از تکانه ایست که از نیروی اعمالی به الکترون انتقال پیدا می کند. اگرچه k به اندازه Δk توسط میدان الکتریکی افزایش پیدا کرده است، در

¹ Effective Mass

نتیجه با توجه به انعکاس براگ، کاهشی در تکانه الکترون اتفاق می افتد و این زمانی رخ می دهد که جرم موثر منفی باشد. زمانی که ما در نوار دوم دور از مرز پیش می رویم، دامنه $\exp[i(k - G)x]$ به سرعت کاهش پیدا می کند و m^* دارای جرم موثر مثبت کوچک می شود. در این حالت افزایش در سرعت الکترون که از تکانه خارجی داده شده نتیجه می شود، بزرگ تر از آنست که الکترون آزاد تجربه می کند. اگر انرژی در یک نوار فقط وابسته به k باشد، جرم موثر خیلی بزرگ می شود. اگر توابع موج روی اتم های همسایه متمرکز شده باشند، همپوشانی بسیار کوچک، پهنای نوار باریک و جرم موثر بزرگ می شود [۱۹].

۶-۲ چگالی حالتها

چگالی حالت ها به صورت تعداد حالت های الکترونی قابل دسترس بر واحد انرژی بر واحد حجم از فضای حقیقی تعریف شده است. چگالی حالت ها مفهوم پراهمیتی است که می تواند خواص فیزیکی مهمی نظیر جذب اپتیکی، خواص ترابرد و خواص مغناطیسی ماده را توصیف کند. برای یک فلز چگالی حالت ها برای نوار رسانش به طور جزئی پر است و برای نیمرساناها و عایق ها نوار رسانش خالی و نوار ظرفیت پر است و به وسیله گاف انرژی از هم جدا شده اند و گاف انرژی عایق ها بیشتر از نیمرساناها است.

$$\rho(E) = \frac{dN}{dE} \quad (۸-۲)$$

در فضای k تعداد کل حالت های N برابر با حجم کره ای به شعاع k تقسیم بر حجم اشغال شده توسط یک حالت، تقسیم بر حجم فضای حقیقی تعریف شده است :

$$N = 2 \frac{4\pi k^3}{3} \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{L^3} \Rightarrow N = 2 \frac{4\pi k^3}{3(2\pi)^3} \quad (۹-۲)$$

یک الکترون، یک فرمیون می باشد و می تواند دو حالت اسپین ممکن با یک انرژی داشته باشد. با

بازگشت به رابطه (۲-۸) خواهیم داشت :

$$\rho(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{dN}{dk} \frac{dk}{dE} \quad (۲-۱۰)$$

و با توجه به رابطه (۲-۹) رابطه (۲-۱۱) به شکل زیر خواهد بود.

$$\frac{dN}{dk} = 2 \frac{4\pi k^2}{(2\pi)^3} \quad (۲-۱۱)$$

با استفاده از نظریه جرم موثر، $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ و $K = \left(\frac{2m^*E}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}$ بدست می‌آوریم:

$$\frac{dk}{dE} = \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{E^{-\frac{1}{2}}}{2} \quad (۲-۱۲)$$

در نهایت چگالی حالت ها به صورت کلی زیر نوشته می‌شود:

$$\rho(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} \quad (۲-۱۳)$$

بنابراین چگالی حالت ها در یک نوار و پیرامون کمینه جایی که انرژی می‌تواند به صورت تابع سهمی از تکانه نشان داده شود، پیوسته است و متناسب با مجذور ریشه انرژی می‌باشد. چگالی حالت ها در سیستم چاه کوانتومی رفتاری مشابه دارد، با این وجود چون دو درجه آزادی وجود دارد، حالت‌های متوالی با مقادیر n_x ، n_y در مرکز فضای k نمایش داده می‌شود. این موقعیت های مکانی به عنوان گاز الکترون دو بعدی شناخته می‌شوند. از این رو تعداد کل حالت ها بر واحد سطح مقطع توسط فاکتور تبهگنی اسپین ضرب در ناحیه دایره ای با شعاع k ، تقسیم بر ناحیه اشغال شده توسط هر حالت به صورت زیر داده می‌شود:

$$N = 2\pi k^2 \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{L^2} = 2\pi k^2 \frac{1}{(2\pi)^2} \quad (۲-۱۴)$$

و چون $\frac{dN}{dk} = \frac{k}{\pi}$ ، خواهیم داشت :

$$\rho(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{dN}{dk} \frac{dk}{dE} \quad (۲-۱۵)$$

همان طور که منحنی های پراکندگی به صورت سهمی توصیف شده اند، با استفاده مجدد از رابطه (۲-۲)

۸) خواهیم داشت :

$$\rho(E) = \frac{k}{\pi} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{E^{-1/2}}{2} \quad (16-2)$$

با جایگزین کردن k در قالب انرژی، با استفاده از روابط $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ و $K = \left(\frac{2m^* E}{\hbar^2} \right)^{1/2}$ چگالی حالت ها برای یک تک زیر نوار در سیستم چاه کوانتومی به شکل رابطه زیر بدست می آید :

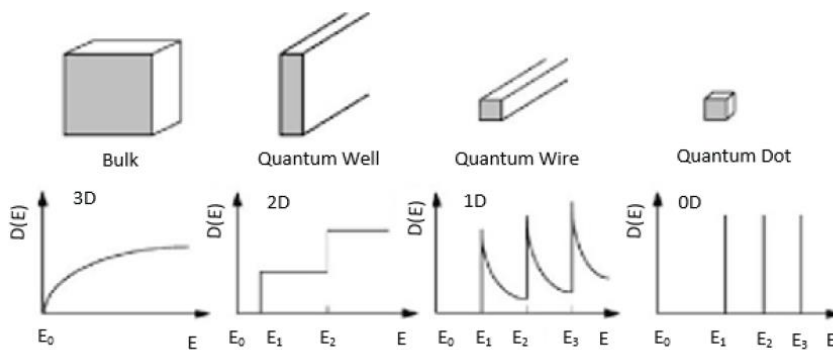
$$\rho(E) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \quad (17-2)$$

و در نهایت در حالت یک بعدی و یا سیم کوانتومی، یعنی زمانی که فقط یک درجه آزادی داریم رابطه چگالی حالت ها به شکل زیر خواهد بود:

$$\rho(E) = \frac{\sqrt{2} m^*}{E^{1/2} \pi \hbar} \quad (18-2)$$

در شکل (۱-۲) چگالی حالت های مربوط به یک ماده حجمی، نانوساختارهای چاه کوانتومی،

سیم کوانتومی و نقطه کوانتومی نشان داده شده است.



شکل (۱-۲): چگالی حالت های الکترون ها در نانوساختارهای مختلف

جدول (۲-۲) چگالی حالت های الکترون را بر حسب تابعی از انرژی E نشان می دهد. با افزایش

انرژی، چگالی حالت ها برای یک بعد کم، دو بعد ثابت است و برای سه بعد افزایش می یابد [۱۸].

جدول (۲-۲): چگالی حالت ها به صورت تابعی از انرژی، برای الکترون های رسانش بدون محدودیت در یک، دو، و سه بعد [۱۸]

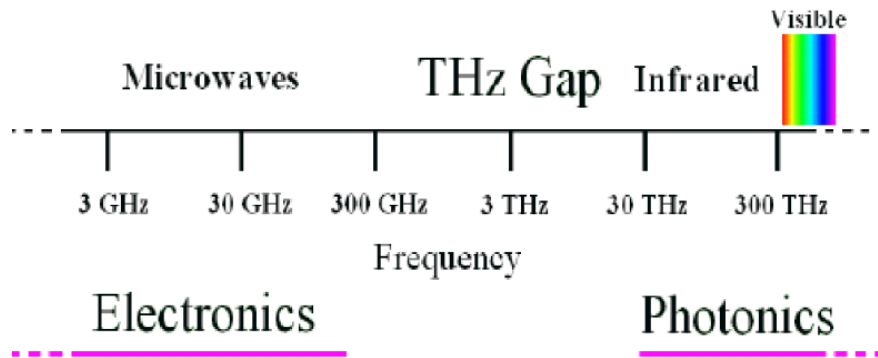
| Dimensionality | $\rho(E)$ |
|----------------|--|
| 3D | $\frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}}$ |
| 2D | $\frac{1}{2\pi} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^1 E^0$ |
| 1D | $\frac{1}{\pi} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} E^{-\frac{1}{2}}$ |

۲-۲ تابش تراهرتز

تابش تراهرتز در ناحیه زیر مادون قرمز^۱ و در فصل مشترک الکترونیک و فوتونیک قرار دارد. در تکنولوژی الکترونیک که بر اساس تراپرد حامل ها در نیمرساناهای نوعی است، کاربردها به ناحیه فرکانسی کمتر از ۰/۳ تراهرتز نزدیک می شود، در حالیکه در فوتونیک، قطعات نیمرسانا در فرکانس های بالاتر از ۳۰ تراهرتز عمل می کنند [۲۱]. این ناحیه فرکانسی زمانی که با انرژی های مشخصه فرایندهای خیلی مهم فیزیکی، شیمیایی و زیستی شامل گاف های ابررسانا و فرایندهای دینامیکی پروتئین همپوشانی می کند مورد اهمیت قرار می گیرد [۲۲].

شکل (۲-۲) یک طرح کلی از ناحیه فصل مشترک الکترونیک و فوتونیک را نشان می دهد. از نقطه نظر کاربردی، توسعه چشمه های تراهرتز موزون و همدوس اهمیت زیادی در اسپکتروسکوپی حالت جامد، رادیواخترشناسی، تصویربرداری پزشکی دارد. کشف لیزرهای نیمرسانا در ناحیه مادون قرمز و تراهرتز یکی از دلایل کلیدی برای توسعه و مطالعه ساختارهای ناهمگن بود.

¹ Mid-Infrared



شکل (۲-۲): طرح شماتیک امواج الکترومغناطیس در ناحیه فرکانس تراهرتز که بین ناحیه های فرکانسی الکترونیک و فوتونیک قرار گرفته است [۱۷].

با گذار حامل های بار بین زیرنوارها، برهمکنش با ترازهای ناخالصی یا نوسان های بلاخ در ابرشبهه های نیمرسانا شکل می گیرد و باعث ایجاد پرتوافکنی در ناحیه تراهرتز می شود. پس از کشف لیزرهای آبخاری کوانتومی^۱ که عملکرد آن بر اساس تونل زنی تشدید^۲ الکترون ها از چاه کوانتومی است، یک جابجایی به طرف لیزرهای با ساختار ناهمگن ایجاد شد. در سال های اخیر روند رو به افزایشی در توسعه چشمه های لیزری با قدرت بالا، طول موج بلند همانند لیزرهای الکترون آزاد وجود دارد. این چشمه های لیزری، تابش پلاریزه شده خطی در ناحیه تراهرتز فراهم می کنند که به منظور بررسی آزمایشگاهی گذار غیرخطی و ویژگی های نوری در گازهای الکترونی، همانند سیستم های با ابعاد پایین، به کار برده می شوند [۲۳].

¹ Quantum Cascade Laser

² Resonant Tunneling

فصل سوم

بررسی نظری تراپرد و رسانندگی در سیم های کوانتومی

۱-۳ بررسی هامیلتونی گاز الکترون آزاد دو بعدی

در بررسی رفتار دستگاه گاز الکترون دو بعدی حل معادله شرودینگر بس ذره ای دستگاه گامی مهم به شمار می آید. این معادله می تواند با استفاده از عملگر هامیلتونی دستگاه، H ، که انرژی کل سیستم را بدست می دهد، تحول زمانی دستگاه را تعیین کند. معادله وابسته به زمان شرودینگر به شکل زیر می باشد:

$$H\Psi(r, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) \quad (1-3)$$

که در رابطه فوق، $\Psi(r, t)$ تابع موج بس ذره ای دستگاه است. این معادله به سبب در بر گرفتن جمله های دیفرانسیلی جفت شده در آن نسبتاً پیچیده بوده، لذا تقریب های سازگاری در ساده سازی این معادله مورد نیاز هستند. یک تقریب مرسوم، احتساب پتانسیل شبکه روی حرکت الکترون درون شبکه با استفاده از مفهوم جرم موثر می باشد. در این تقریب می توان حرکت یک الکترون در شبکه را با حرکت یک الکترون در خلأ ولی با جرمی متفاوت که جرم موثر m^* نامیده می شود معادل سازی و جایگزین نمود. پس برای یک شبکه کامل، هامیلتونی گاز الکترون دو بعدی به صورت جمع هامیلتونی حرکات مستقل تک ذره ای، H_0 و هامیلتونی برهمکنش های بین الکترون ها، H_{ee} نوشته می شود.

$$H = H_0 + H_{ee} \quad (2-3)$$

حالت های الکترونی تک ذره ای الکترون ها پایه های مناسب برای بنا نهادن عملگرهای میدان را فراهم خواهند کرد. در غیاب میدان های خارجی، H_0 بر حسب عملگرهای تکانه تک الکترونی p_i و به شکل ساده زیر نوشته می شود:

$$H_0 = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} \quad (3-3)$$

در حضور میدان تابشی یا تحت تاثیر یک میدان مغناطیسی متناظر با پتانسیل برداری، $A(r, t)$ ، H_0 به شکل رابطه (۴-۳) خواهد بود:

$$H_0 = \frac{1}{2m^*} \sum_i [p_i + \frac{e}{c} A(r_i, t)]^2 \quad (4-3)$$

در رابطه فوق $\{r_i\}$ موقعیت الکترون ها، e بار بنیادی و c سرعت نور در فضای آزاد (خلاً) می باشد. هامیلتونی بر همکنش الکترون - الکترون H_{ee} به این صورت می باشد :

$$H_{ee} = \sum_{i < j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} \quad (5-3)$$

می توان هامیلتونی دستگاه را در نمادگذاری کوانتشی دوم با استفاده از مجموعه کامل حالت های تک ذره ای برای عملگرهای میدان الکترونی بسط داد. در غیاب میدان های خارجی، بسط عملگرهای میدان بر حسب توابع موج ذره آزاد در نمونه ای با ابعاد L یعنی $\phi_k(r) = \frac{e^{ik.r}}{L}$ مناسب است.

$$\begin{cases} \Psi(r, t) = \frac{1}{L} \sum_k a_k(t) e^{ik.r} \\ \Psi^\dagger(r, t) = \frac{1}{L} \sum_k a_k^\dagger(t) e^{-ik.r} \end{cases} \quad (6-3)$$

عملگرهای تک ذره ای $a_k(t)$ و $a_k^\dagger(t)$ در رابطه فوق به ترتیب عملگرهای فنا و خلق الکترون ها در زمان t و در حالت k می باشند، البته برای سادگی اسپین الکترون ها نادیده گرفته شده است. عملگرهای خلق و فنا فوق همزمان در روابط پادجابجایی زیر صدق می کنند.

$$\{a_k(t), a_{k'}(t)\} = \{a_k^\dagger(t), a_{k'}^\dagger(t)\} = 0 \quad (7-3)$$

$$\{a_k(t), a_{k'}^\dagger(t)\} = \delta_{k, k'}$$

عملگرهای میدان $\Psi(r, t)$ و $\Psi^\dagger(r, t)$ به ترتیب عملگرهای فنا و خلق در زمان t و در موقعیت r می باشند که در روابط پادجابجا (3-8) و (3-9) صدق می کنند:

$$\{\Psi(r, t), \Psi^\dagger(r', t)\} = \delta(r - r') \quad (8-3)$$

$$\{\Psi(r, t), \Psi(r', t)\} = \{\Psi^\dagger(r, t), \Psi^\dagger(r', t)\} = 0 \quad (9-3)$$

هامیلتونی H_0 ، معادله $H_0 = \sum_i \frac{p_i^2}{2m^*}$ ، با استفاده از عملگرهای میدان به شکل زیر بیان می شود:

$$H_0 = \int dr \Psi^\dagger(r, t) \frac{p^2}{2m^*} \Psi(r, t) = \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} a_k^\dagger(t) a_k(t) \quad (10-3)$$

در رابطه (۱۰-۳) عملگر عدد اشغال، $a_k^\dagger(t)a_k(t)$ ، تعداد الکترون ها با بردار موج k را

مشخص می کند. برهمکنش الکترون - الکترون نیز به شکل زیر قابل بیان خواهد بود:

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \sum_q V_q \int dr dr' \Psi^\dagger(r, t) \Psi^\dagger(r', t) e^{iq \cdot (r-r')} \Psi(r', t) \Psi(r, t) \quad (۱۱-۳)$$

در رابطه فوق V_q تبدیل فوریه پتانسیل کولنی دو بعدی است که به شکل زیر است:

$$V_q = \int d^2r \left(\frac{e^2}{r}\right) e^{-iq \cdot r} = \frac{2\pi e^2}{q} \quad (۱۲-۳)$$

با جایگذاری عملگرهای میدان از رابطه (۳-۶)، معادله (۱۱-۳) اشکال پی در پی زیر را به خود خواهد

گرفت:

$$H_{ee} = \quad (۱۳-۳)$$

$$\frac{1}{2} \sum_{k_1, k_2, k', k, q} V_q a_{k_1}^\dagger(t) a_{k_2}^\dagger(t) a_{k'}(t) a_k(t) \frac{1}{L^2} \int dr e^{-i(k_1 - k - q) \cdot r} \frac{1}{L^2} \int dr' e^{-i(k_2 - k' + q) \cdot r'}$$

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{k_1, k_2, k', k, q} V_q a_{k_1}^\dagger(t) a_{k_2}^\dagger(t) a_{k'}(t) a_k(t) \delta(k_1 - k - q) \delta(k_2 - k' + q) \quad (۱۴-۳)$$

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{k, k', q} V_q a_{k+q}^\dagger(t) a_{k'-q}^\dagger(t) a_{k'}(t) a_k(t) \quad (۱۵-۳)$$

در غیاب میدان های خارجی هامیلتونی کل، $H = H_0 + H_{ee}$ ، به شکل زیر نوشته می شود:

$$H = \quad (۱۶-۳)$$

$$\sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} a_k^\dagger(t) a_k(t) + \frac{1}{2} \sum_{k, k', q} V_q a_{k+q}^\dagger(t) a_{k'-q}^\dagger(t) a_{k'}(t) a_k(t)$$

دینامیک گاز الکترونی دو بعدی در یک شبکه کامل و در غیاب میدان های خارجی با قرار گرفتن

هامیلتونی معادله (۱۶-۳) در معادله شرودینگر $H\Psi(r, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t)$ ، و حل آن بدست

می آید [۱۷].

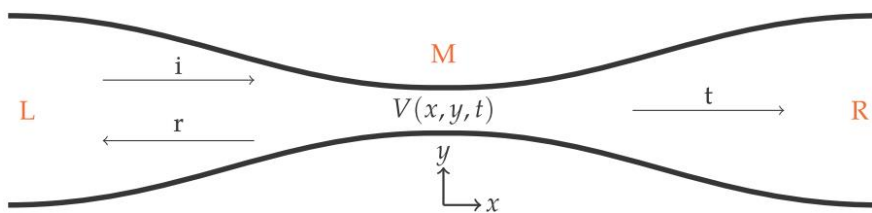
۲-۳ ترابرد در سیم های کوانتومی

در سال های اخیر نانو ساختارهای نیم رسانا یک مدل انتخابی برای بررسی رسانندگی الکتريکی

در مقیاس طول کوتاه شده است. بیشتر مواد نیم رسانایی که در این زمینه مورد استفاده قرار می گیرد،

موادی با خلوص بسیار بالا و بلورین می‌باشد. این مواد به گونه ای ساخته می‌شوند که لایه باریکی از الکترون ها با تحرک پذیری بالا را در بردارند. حرکت عمودی در این لایه ها کوانتیزه می‌باشد. گاز الکترون دو بعدی به عنوان یک مدل این گونه سیستم ها، در بردارنده ویژگی های مطلوبی است که فیلم های فلزات نازک شامل آن نمی‌باشد. گاز الکترون دو بعدی چگالی الکترونی پایینی دارد که ممکن است به وسیله میدان الکتریکی به راحتی تغییر کند. چگالی پایین دلالت بر طول موج فرمی بزرگ (نوعاً 40 nm) دارد که قابل مقایسه با ابعاد کوچکترین ساختارهایی (نانوساختارها) هستند که امروزه ساخته می‌شوند. مسافت آزاد میانگین می تواند کاملاً بزرگ باشد (تقریباً $10\ \mu\text{m}$).

به خاطر ترکیب طول موج فرمی بزرگ و همچنین مسافت آزاد میانگین بزرگ تراپرد کوانتومی در گاز الکترون دو بعدی به راحتی مورد مطالعه قرار می‌گیرد. سیستم های با ابعاد پایین از محدودیت کوانتومی بوجود می‌آیند. این محدودیت ممکن است به خاطر ساختارهای ناهمگن اکسید - نیمرسانا، یا به بیان ساده از فصل مشترک نیمرسانا - هوا، باشد. یک پیکربندی معمولی برای یک سیم کوانتومی به گونه ای است که نمونه ای را به دو مخزن الکترون، چشمه و دریچه خروجی متصل می‌کند، که در شکل (۱-۳) نشان داده شده است.



شکل (۱-۳): هندسه استاندارد برای سیم کوانتومی با دو اتصال، چشمه L، درگاه تخلیه R، که به نمونه M متصل شده اند [۱۲].

چشمه در سمت چپ و دریچه خروجی سمت راست قرار دارد. در قسمت میانی پتانسیل پراکندگی که در اینجا وابسته به زمان می‌باشد، قرار دارد. الکترون‌هایی که از چشمه تغذیه می‌شوند، به طرف راست در جهت x رانده می‌شوند تا به قسمت میانی سیستم، جایی که پتانسیل پراکندگی آنجا قرار دارد برسند. در آنجا الکترون‌ها یا به سمت عقب برمی‌گردند و یا به سمت دریچه خروجی عبور می‌کنند. در راستای y الکترون‌ها با پتانسیل محدود کننده محدود شده‌اند. این محدودیت باعث بوجود آمدن ویژه حالت‌های $\phi_n(y)$ می‌شود که از حل معادله ویژه مقاداری بدست می‌آید :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + V_c(y) \right] \phi_n(y) = E_n \phi_n(y) \quad (17-3)$$

پتانسیل $V_c(y)$ ، پتانسیل محدود کننده است که فقط به راستای عرضی y وابسته است. E_n ویژه مقادیر انرژی می‌باشد. برای نقاط دور از ناحیه پراکندگی، پتانسیل پراکندگی صفر در نظر گرفته می‌شود و تابع موج از حل معادله زیر بدست می‌آید :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_c(y) \right] \psi(x, y, t) \quad (18-3)$$

حال بخش وابسته به زمان تابع موج در سری فوریه با فرکانس ω را به شکل زیر بسط می‌دهیم :

$$\psi(x, y, t) = \sum_m \psi^m(x, y) e^{i\left(\frac{E_0}{\hbar} + m\omega\right)t} \quad (19-3)$$

فاکتور کلی $e^{i\frac{E_0}{\hbar}t}$ بیانگر انرژی اولیه الکترون است که به سمت راست در حرکت است. برچسب‌های m حالت‌های احتمالی هستند که الکترون‌ها به طور غیر کشسان درون آنها پراکنده می‌شوند. معمولاً به این حالت‌ها، نوارهای جانبی¹ گفته می‌شود. به آسانی دیده می‌شود که $\psi^m(x, y)$ از حل معادله زیر بدست می‌آید :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V_c(y) \right] \psi^m(x, y) = (E_0 + m\hbar\omega) \psi^m(x, y) \quad (20-3)$$

¹ Sideband

حال $\psi^m(x, y)$ را بر حسب ویژه توابع پتانسیل محدود کننده بسط می‌دهیم:

$$\psi^m(x, y) = \sum_n \varphi_n^m(x) \phi_n(y) \quad (21-3)$$

$\varphi_n^m(x)$ ضرایب بسط می‌باشند که از حل معادله (۲۰-۳) مشاهده می‌شوند. ضرایب بسط در واقع

ویژه توابعی برای ذره آزاد در جهت x می‌باشند که به m و n وابسته هستند:

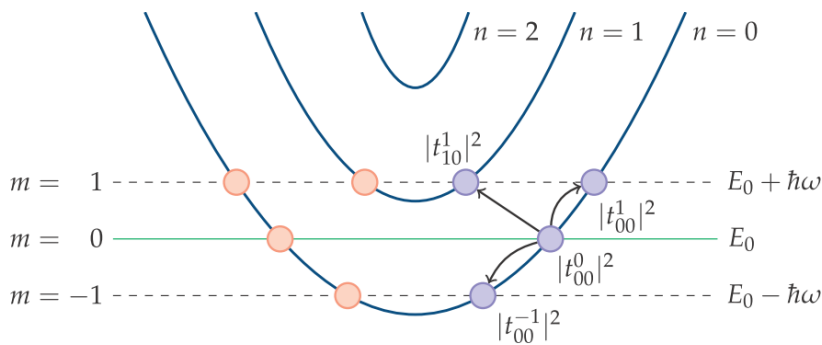
$$\psi(x, y, t) = \sum_m \sum_n c_n^m e^{i\left(\frac{E_0}{\hbar} + m\omega\right)t} e^{\pm ik_n^m x} \phi_n(y) \quad (22-3)$$

در اینجا k_n^m بردار موج برای انتشار در جهت x است که با رابطه زیر مشخص می‌شود:

$$\frac{\hbar^2 k_n^m{}^2}{2m^*} = E + m\hbar\omega - E_n \rightarrow k_n^m = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} (E + m\hbar\omega - E_n)} \quad (23-3)$$

شکل (۲-۳) توصیف هندسی از معادله (۲۳-۳) را نشان می‌دهد و فرایند احتمال پراکندگی برای ذره

فرودی را به پایین‌ترین زیرنوار و نوار جانبی ($m=0$) نشان می‌دهد.



شکل (۲-۳): نمایش هندسی رابطه پاشندگی در رساناها [۱۲].

پراکندگی بین دو نقطه روی یک خط یکسان، کشسان است در حالیکه پرش بین دو خط

متفاوت، پراکندگی غیر کشسان را نشان می‌دهد که علت آن حضور پتانسیل پراکننده وابسته به زمان

می‌باشد. همان‌طور که در معادله (۲۳-۳) می‌توان دید، یک پرش کشسان می‌تواند در نتیجه یک مد

ناپایدار باشد. اگر تغییرات E_n به گونه ای باشد که $E + m\hbar\omega < E_n$ با m ثابت باشد، در نتیجه بردار موج موهومی خواهد شد. پیدا کردن تابع موج در ناحیه پراکندگی، زمانی که به پتانسیل پراکندگی وابسته باشد، تقریباً مشکل خواهد بود و باید به کمک محاسبات عددی انجام شود. با این وجود برای پیدا کردن رسانندگی دستگاه، ما نیازی به شکل دقیق تابع موج پراکندگی نداریم. تابع موج کلی دستگاه مورد نظر به صورت زیر خواهد بود :

$$\Psi_E(x, y, t) = \begin{cases} \sum_m \sum_n \left\{ a_n^m e^{i(\frac{E_0}{\hbar} + m\omega)t} e^{ik_n^m x} \phi_n(y) + b_n^m e^{i(\frac{E_0}{\hbar} + m\omega)t} e^{-ik_n^m x} \phi_n(y) \right\}, & (x, y) \in L \\ \Psi_{M,E}(x, y, t) & , (x, y) \in M \\ \sum_m \sum_n \left\{ c_n^m e^{i(\frac{E_0}{\hbar} + m\omega)t} e^{-ik_n^m x} \phi_n(y) + d_n^m e^{i(\frac{E_0}{\hbar} + m\omega)t} e^{ik_n^m x} \phi_n(y) \right\}, & (x, y) \in R \end{cases} \quad (24-3)$$

اکنون تابع موج پراکنده شده را به صورت زیر می‌نویسیم :

$$\Psi_E(x, y, t) = \begin{cases} e^{i(\frac{E_0}{\hbar})t} e^{ik_n^0 x} \phi_n(y) + \sum_{m'} \sum_{n'} r_{n'n}^{m'0} e^{i(\frac{E_0}{\hbar} + m'\omega)t} e^{-ik_{n'}^{m'} x} \phi_{n'}(y) , & (x, y) \in L \\ \psi_{M,E}(x, y, t) & , (x, y) \in M \\ \sum_{m'} \sum_{n'} t_{n'n}^{m'0} e^{i(\frac{E_0}{\hbar} + m'\omega)t} e^{ik_{n'}^{m'} x} \phi_{n'}(y) & , (x, y) \in R \end{cases} \quad (25-3)$$

در ناحیه پراکندگی، موج فرودی (الکترون) را از سمت چپ با انرژی E_0 ، در زیر نوار n انتخاب کرده ایم. این امواج به زیر نوار n' و نوار جانبی m' ، در سمت چپ با احتمال $|r_{n'n}^{m'0}|^2$ و یا در سمت راست با احتمال $|t_{n'n}^{m'0}|^2$ پراکنده می‌شوند. این ضرایب معمولاً، ضرایب بازتاب $(r_{n'n}^{m'0})$ و عبور $(t_{n'n}^{m'0})$ نامیده می‌شوند [۱۲].

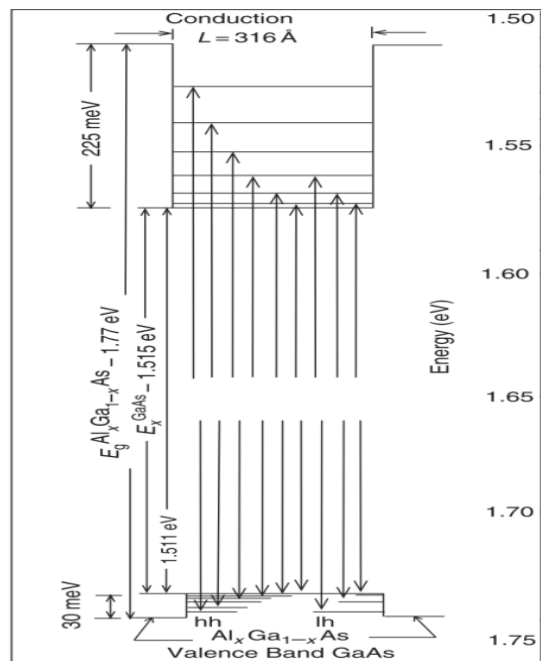
۳-۳ خواص اپتیکی سیم های کوانتومی

علاوه بر کاربردهای بسیار زیادی که نیمرساناها دارند، خواص نوری آنها که در سطح وسیع مورد مطالعه قرار گرفته است، به درک ما از خواص الکتریکی نیمرساناها و فیزیک آن کمک می کند. مطالعه طیف نوری اتم ها و مولکول ها به پایه ریزی بنیاد مکانیک کوانتومی کمک کرده است. طیف های نوری نیمرساناها در پیش بینی مکانیک کوانتومی نه تنها در فضای سه بعدی بلکه در یک و دو بعد مورد ارزیابی قرار گرفته است. ویژگی های اپتیکی نیمرساناها شدیداً وابسته به اکسیتون های (شدت جاذبه کولنی بین الکترون و حفره) آنهاست. شدت جاذبه کولنی بین الکترون ها و حفره ها وابسته به بعد است. وقتی که ابعاد حرکت الکترون و حفره کاهش پیدا می کند برهم پوشانی تابع موج الکترون و حفره افزایش پیدا می کند، در حالیکه سد پتانسیل کولنی توسط الکترون های ظرفیت کاهش می یابد. برای مثال انرژی های حالت مقید یک الکترون به یک پروتون در دو بعد برابرست با

$$E_n = \frac{E_\infty - R_y}{(n + \frac{1}{2})^2} \quad (۲۶-۳)$$

در رابطه فوق R_y همان ثابت ریذبرگ در سه بعد می باشد. بنابراین برای پایین ترین حالت انرژی ($n=0$) اکسیتون، انرژی بستگی در دو بعد چهار برابر انرژی بستگی مربوط در سه بعد می باشد. شعاع بوهر نیز به همان نسبت کاهش پیدا می کند. بیشتر شدت نوسان ها در اکسیتون دوبعدی نسبت به اکسیتون سه بعدی در پایین ترین حالت انرژی متمرکز شده است. بنابراین در سیستم های دو بعدی معمولاً فقط پایین ترین حالت انرژی اکسیتون مشاهده می شود. این چنین اکسیتون های دو بعدی اولین بار در نیمرساناهایی با ساختار لایه ای پیشنهاد شد مثل GaSe. توانایی ایجاد تغییر در خواص نوری، توسط تولید اکسیتون های دو بعدی در سیستم های نیمرسانا، به یکی از زمینه های در حال رشد ساختارهای نیمرسانای دو بعدی مثل سیم های کوانتومی تبدیل شده است. به عنوان یک مثال، می توان به سیم کوانتومی که متشکل از یک لایه نازک GaAs (به شکل یک چاهی که در آن الکترون ها و حفره ها محدود شده اند) که بین دو لایه AlGaAs ساندویچ شده است اشاره کرد. چون ثابت

های شبکه GaAs و AlGaAs تقریباً با هم برابر است، لایه های AlGaAs روی زیر لایه GaAs رشد مولکولی خوبی می تواند داشته باشد. طیف گسیلی از این نوع سیم کوانتومی به شدت وابسته به اکسیتون های دو بعدی است. ساختار نواری حاصل از الکترون ها و حفره ها شامل زیرنوارهایی است که در جهت عمود بر چاه می باشند و گسسته اند اما بدون الکترون، زیرنوارها هم سطح با چاه می باشند. این زیرنوارها با برچسب $n=1,2,3,..$ شماره گذاری شده اند و انرژی آنها می تواند با حل معادله یک بعدی شرودینگر با پتانسیل محدود کننده پله ای محاسبه شود. عبور اپتیکی بین زیرنوارهای الکترون و حفره در شکل (۳-۳) نشان داده شده است. به خاطر کوچک بودن انرژی اکسیتون (10meV) برای GaAs در مقایسه با انرژی های محدود کننده الکترون (100meV) توافق خوبی در انرژی قله های مشاهده شده بین نتایج بدست آمده از تئوری و تجربه وجود دارد [۲۴].



شکل (۳-۳): نمودار نواری ناپیوسته بین سیم کوانتومی GaAs و سد GaAlAs. ردیف های عمودی عبور نور را از زیرنوارهای حفره به زیرنوارهای الکترون نشان می دهند [۲۴].

۴-۳ برهمکنش تابش با مواد

هرموقع که بخواهیم تابش را اندازه گیری کنیم، لازم است که برهمکنش آن را با برخی مواد در

نظر بگیریم. بر طبق درک کنونی ما نمی توان تابش و خواص آن را بدون دست یابی به برهمکنش آن با وسایل اندازه گیری، آشکار کرد. برای مثال چشم های ما تصویری که بر روی شبکیه بعد از بازگشت از اشیاء برخورد می کند احساس می کند. همین موضوع در مورد آشکارسازی تابش هم صدق می کند، که از شکل سیگنال های بدست آمده از برهم کنش تابش، قابل تشخیص است. هر ذره همراه با خود مقداری انرژی حمل می کند و بنابراین می تواند بر سایر ذرات از طریق فرایندهای برهمکنش ذرات، نیرو اعمال کند. احتمال دارد این برهم کنش ها حالت و خواص ذرات درگیر را تغییر دهد. برهم کنش ذرات با ماده فقط وابسته به نوع برخورد و هدف ذرات نیست، بلکه علاوه بر آن وابسته به خواص آنها مثل تکانه و انرژی هم می باشد. چون فوتون ها در معرض نیروهای هسته ای یا کولنی نیستند، اثرات برهم کنش آنها در فواصل کوتاه متمرکز شده است. این بدین معنی است که اگرچه شدت پرتو فوتون هنگام عبور از میان ماده کاهش پیدا می کند، انرژی مخصوص فوتون ها که در هیچ برهم کنشی شرکت پیدا نمی کند، تحت تأثیر واقع نمی شود. فوتون ها می توانند با مواد در سه شکل متفاوت بر هم کنش داشته باشند :

۱- اثر فوتوالکتریک،

۲- پراکندگی کامپتون،

۳- تولید زوج الکترون - حفره

این مکانیزم های برهم کنش دارای انرژی های آستانه متفاوت و سطح مقطع بزرگ برای مواد مختلف می باشند. هر زمان که پرتو فوتون ها انرژی کافی هنگام عبور از میان مواد را داشته باشند، تعدادی از فوتون های طیف، درگیر برهم کنش های مشابهی می شود. اگر ما بخواهیم بدانیم که چطور بیشتر فوتون ها در یک طیف با مواد برهم کنش می کنند، می توانیم به سطح مقطع برهم کنش ها توجه داشته باشیم و موردی را پیدا کنیم که بیشترین مقدار را در انرژی فوتون دارد [۲۵]. فوتون ها جرم ندارند و اغلب با توده الکترون های ماده برهم کنش می کنند. برخی از پدیده هایی که منجر به

گسیل تابش الکترومغناطیس می شود عبارتند از:

۱- گذار الکترونی الکترون های لایه خارجی یک اتم که منجر به گسیل نور، فوتون های UV، فوتون های IR می شود.

۲- گذار الکترونی الکترون های لایه داخلی که منجر به گسیل پرتوی اشعه X می شود.

۳- وبرانگیختگی هسته اتم های ناپایدار و یا برانگیخته که منجر به تولید اشعه گاما می شود.

۴- شتاب کاهنده الکترون ها در ماده که منجر به گسیل یک طیف پیوسته الکترومغناطیس می شود [۲۶].

۳-۵ محاسبه رسانندگی دستگاه توسط فرمول لاندائور

یکی از روش های محاسبه رسانندگی، توسط لاندائور^۱ معرفی شده است. او رابطه ای بین ویژگی های پراکندگی سیستم و رسانندگی پیدا کرد. لاندائور یک دستگاه مدل مختل شده در نظر گرفته بود که توسط یک هادی جریان ایده آل به مخزن های مجزا متصل شده بود. این تقریب مناسب ترابرد از میان سیستم های مزوسکوپیک بود. لاندائور رسانندگی در یک بعد را به صورت زیر استنتاج کرد.

$$\widetilde{g}_L = \frac{\widetilde{G}_L}{e^2} = \frac{T}{1-T} \quad (۳-۲۷)$$

که \widetilde{G}_L به شکل رابطه زیر می باشد:

$$\widetilde{G}_L = \frac{I}{\mu_A - \mu_B} \quad (۳-۲۸)$$

^۱Landauer

می باشد. μ_A و μ_B در رابطه فوق پتانسیل های شیمیایی هادی جریان هستند. T ضریب عبور از میان ناحیه مختل شده می باشد. از طرف دیگر اکونومو^۱ و سوکولیس^۲، تلاش کردند تا این فرمول را از تئوری پاسخ خطی (فرمول کوبو) استنتاج کنند :

$$g_L = \frac{G_L}{e^2} = T \quad (29-3)$$

که G_L به شکل زیر می باشد:

$$G_L = \frac{1}{\mu_1 - \mu_2} \quad (30-3)$$

μ_1 و μ_2 پتانسیل شیمیایی مخزن ها می باشد. معادله (۳-۲۷) اندازه گیری چهار ترمینالی در یک بعد را توصیف می کند. معادله (۳-۲۹) اندازه گیری دو کاوشی^۳ را توصیف می کند که فقط دو هادی جریان به نمونه متصل شده است. مقاومت محدود باقی مانده در مرتبه صفر اختلال، $g_L = 1$ ، مقاومت ثابت نامیده می شود. بنابراین مقاومت کلی G_L^{-1} ، جمع مقاومت ثابت h/e^2 و مقاومت کپه ای \widetilde{G}_L^{-1} می باشد. وقتی که اختلال به صفر می رسد خواهیم داشت :

$$G_L^{-1} = \widetilde{G}_L^{-1} + \frac{h}{e^2} \quad (31-3)$$

بعدها فیشر^۴ و لی^۵ معادله (۳-۲۹) را به ساختار چند کانالی تعمیم دادند.

$$g_L = g_k = \sum_{i=1}^M T_i = tr(tt^\dagger) \quad (32-3)$$

T_i احتمال گذار کل، در i مین کانال، t ماتریس گذار و M تعداد کانال ها می باشد. فرمول لاندائوور برای مورد کانال های چندگانه، ناحیه با پراکندگی کشسان در نمونه و برای کاربردهای مختلف آزمایشگاهی با هندسه متفاوت تعمیم داده شده است. از نتایج بدست آمده کلی این طور استنتاج شده است که رسانندگی برای هر الکترون برابر است با e^2/h . از این رو رسانندگی سیم کوانتومی برابر

¹ Economou

² Soukoulis

³ Two probe

⁴ Fisher

⁵ Lee

است با $M \frac{2e^2}{h}$ ، که M تعداد مدها در بازه انرژی، $\mu_1 < E < \mu_2$ ، می‌باشد. ضریب دو مربوط به اسپین الکترون می‌باشد [۲۷].

۳-۶ تابع گرین و معادله لیپمن - شوینگر در سه بعد

یکی از مسائل اصلی در حل معادله لیپمن - شوینگر برای مسئله پراکندگی اینست که چطور شرایط مرزی را ترکیب کنیم. یک روش برای انجام این کار اینست که روش تابع گرین را به کار ببریم. یک امتیاز اصلی این روش، ارتباط مستقیم بین پتانسیل و دامنه پراکندگی $f(\theta, \phi)$ است. ما به طور مختصر تابع گرین را برای پتانسیل پراکندگی معرفی می‌کنیم و از آن برای بدست آوردن یک معادله انتگرالی برای تابع موج پراکندگی استفاده می‌کنیم. به منظور تعریف تابع گرین، یک عملگر هامیلتونی به صورت $H = H_0 + V$ در نظر می‌گیریم. ترم اول آن H_0 بسیار ساده است و ویژه مقادیر و ویژه حالت های آن بدون هیچ مشکلی به راحتی بدست می‌آید. در مسئله پتانسیل پراکندگی استاندارد، H_0 عملگر انرژی جنبشی است که به شکل زیر می‌باشد:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad (۳-۳۳)$$

ابتدا ما جواب عملگرهای H_0 و H مربوط به تابع گرین که در ادامه تعریف شده است را محاسبه می‌کنیم. این ها عملگرهایی هستند که طبق فضای هیلبرت عمل می‌کنند و وابسته به پارامتر مختلط Z می‌باشد (که واحد انرژی دارد) و به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$G(Z) = (Z - H)^{-1} \quad (۳-۳۴)$$

$$G_0(Z) = (Z - H_0)^{-1} \quad (۳-۳۵)$$

در ادامه ما ماتریس عناصر این عملگرها را از بین حالت های تعریف شده در فضای هیلبرت در نظر می‌گیریم. عناصر این ماتریس توابعی از مقدار متغیر Z با ویژگی های تحلیلی در صفحه Z هستند.

این ماتریس عناصر می‌توانند به منظور تعریف ویژگی‌های تحلیلی عملگرهای خودشان استفاده شوند. ویژگی‌های تحلیلی $G(Z)$ و $G_0(Z)$ وابسته به طیف‌های H و H_0 می‌باشد. اگر Z وابسته به طیف هامیلتونی باشد، $G(Z)$ و $G_0(Z)$ تکین هستند. برای مسائل پراکندگی با پتانسیل V که در مقادیر بزرگ r ناپیوستگی ایجاد می‌شود، طیف H شامل بخش پیوسته در طول محور حقیقی مثبت $0 \leq E < \infty$ می‌باشد. ممکن است H دارای یک طیف گسسته در قسمت منفی محور حقیقی داشته باشد. اگر H_0 فقط شامل انرژی جنبشی باشد، طیف آن هم فقط شامل بخش پیوسته‌ای در طول قسمت مثبت محور حقیقی است، $0 \leq E < \infty$.

عملگرهای $G(Z)$ و $G_0(Z)$ یک ناپیوستگی در طول محور حقیقی مثبت دارند. زمانی این عملگرها به مسئله پراکندگی حقیقی مرتبط می‌شوند که مقدار مختلط Z حقیقی و مثبت می‌شود $Z \rightarrow E > 0$. E انرژی پراکندگی است. برای مثال معادله شرودینگر وابسته به زمان $(H_0 + V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ را در یک فرم بدیهی متفاوت مجدداً می‌نویسیم:

$$(E - H_0)|\psi\rangle = V|\psi\rangle \quad (36-3)$$

اکنون عملگر $(E - H_0)$ را معکوس کرده و عکس آن را به دو طرف معادله (36-3) اعمال می‌کنیم. وقتی که E وابسته به طیف H_0 است، معکوس $(E - H_0)$ بد تعریف است (که معمولاً شامل بخش مثبت حقیقی محور است). برای جلوگیری از تکینگی، به دلخواه بخش موهومی کوچکی را به انرژی اضافه می‌کنیم $E \rightarrow E + i\eta$ که در انتهای محاسبات $\eta \rightarrow 0$ میل می‌دهیم. همان‌طور که در رابطه زیر مشاهده می‌شود علامت جلوی η معنادار هست.

$$G_0^\pm(E) \equiv (E \pm i\eta - H_0)^{-1} \quad (37-3)$$

با به کار بردن G_0^+ به دو طرف معادله (36-3) بدست می‌آوریم:

$$|\psi\rangle = G_0^+(E)V|\psi\rangle \quad (38-3)$$

$|\psi\rangle$ مناسب با معادله شرودینگر (36-3) است. اما ما به دنبال جوابی هستیم که با شرایط مرزی برای

موج کروی زیر مناسب باشد.

$$\psi_k^+(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \left[e^{ik.r} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right] \quad (39-3)$$

این مشکل با اضافه کردن یک صفحه موج $|\mathbf{k}\rangle$ از معادله شرودینگر آزاد که در رابطه زیر آورده شده است، به سمت راست $G_0^+(E)V|\psi\rangle$ رفع خواهد شد.

$$H_0|\mathbf{k}\rangle = E|\mathbf{k}\rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} |\mathbf{k}\rangle \quad (40-3)$$

این شیوه روی صحت معادله شرودینگر تاثیر نمی گذارد چون، $(E + i\eta - H_0)|\mathbf{k}\rangle = 0$ صفر خواهد بود. بنابراین رابطه زیر حل معادله شرودینگر (36-3) خواهد بود:

$$|\psi_k^+\rangle = |\mathbf{k}\rangle + G_0^+(E)V|\psi_k^+\rangle \quad (41-3)$$

رابطه فوق شامل یک صفحه موج فرودی است. در ادامه نشان داده شده است که G_0^+ با شرایط مرزی موج کروی خروجی $\psi_k^+(r)$ مرتبط است. در حالیکه G_0^- با شرایط مرزی موج کروی فرودی $\psi_k^-(r)$ مرتبط است. ما از G_0^- به جای G_0^+ استفاده کردیم، و به معادله ای برای $|\psi_k^-\rangle$ دست پیدا کرده ایم، یعنی موجی با شرایط مرزی موج کروی فرودی. از این رو برای $|\psi_k^\pm\rangle$ بدست می آوریم:

$$|\psi_k^\pm\rangle = |\mathbf{k}\rangle + G_0^\pm V|\psi_k^\pm\rangle \quad (42-3)$$

معادله (42-3)، معادله لیپمن - شوینگر در فضای هیلبرت¹ است. معادله لیپمن - شوینگر یک معادله کت مستقل از نمایش خاصی است. اینک با ضرب $\langle \mathbf{x} |$ ، از چپ، خود را به پایه های مکان محدود می کنیم.

$$\langle \mathbf{x} | \psi^\pm \rangle = \langle \mathbf{x} | \phi \rangle + \int d^3 \mathbf{x}' \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i} \right| \mathbf{x}' \right\rangle \langle \mathbf{x}' | V | \psi'^\pm \rangle \quad (43-3)$$

این یک معادله انتگرالی برای پراکندگی است زیرا کت نامعلوم $|\psi^{(\pm)}\rangle$ در انتگرال ظاهر شده است. اگر $|\phi\rangle$ معرف حالت موج تخت با تکانه p باشد، می توان نوشت

¹ Hilbert Space

$$\langle \mathbf{x} | \phi \rangle = \frac{e^{\frac{i p \cdot \mathbf{x}}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \quad (44-3)$$

از طرف دیگر، اگر معادله لیپمن - شوینگر را با استفاده از پایه های تکانه بنویسیم، رابطه زیر را بدست می آوریم:

$$\langle p | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle p | \phi \rangle + \frac{1}{E - \left(\frac{p^2}{2m}\right) \pm i\epsilon} \langle p | V | \psi^{(\pm)} \rangle \quad (45-3)$$

اینک به طور خاص پایه های مکان را در نظر می گیریم و با توجه به رابطه (43-3) محاسباتمان را انجام می دهیم. قبل از انجام هر کاری، ابتدا باید هسته معادله انتگرالی که با رابطه زیر تعریف می شود را محاسبه کنیم:

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \equiv \frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle \quad (46-3)$$

ادعا می کنیم که $G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ به شکل زیر تعریف می شود:

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|x-x'|}}{|x-x'|} \quad (47-3)$$

که در رابطه فوق $E \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ است. برای نشان دادن این مطلب، رابطه (45-3) را به شکل رابطه (48-3) می نویسیم:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 p' \int d^3 p'' \langle \mathbf{x} | p' \rangle \times \left\langle p' \left| \frac{1}{E - \left(\frac{p^2}{2m}\right) \pm i\epsilon} \right| p'' \right\rangle \langle p'' | \mathbf{x}' \rangle \quad (48-3)$$

در رابطه (48-3)، H_0 روی $\langle p' |$ عمل می کند. اینک با استفاده از روابط (49-3) و (50-3) به شکل زیر:

$$\left\langle p' \left| \frac{1}{E - \left(\frac{p^2}{2m}\right) \pm i\epsilon} \right| p'' \right\rangle = \frac{\delta^{(3)}(p' - p'')}{E - \left(\frac{p^2}{2m}\right) \pm i\epsilon} \quad (49-3)$$

$$\langle \mathbf{x} | p' \rangle = \frac{e^{\frac{i p' \cdot \mathbf{x}}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}, \quad \langle p'' | \mathbf{x}' \rangle = \frac{e^{-\frac{i p'' \cdot \mathbf{x}'}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \quad (50-3)$$

سمت راست معادله (۴۷-۳) به شکل زیر بدست خواهد آمد:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \int \frac{d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3} \frac{e^{\frac{ip' \cdot (x-x')}{\hbar}}}{[E - (\frac{p'^2}{2m}) \pm i\epsilon]} \quad (۵۱-۳)$$

اینک می‌نویسیم $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ و قرار می‌دهیم $p' \equiv \hbar q$ معادله (۴۱-۳) به شکل رابطه (۵۲-۳) خواهد شد:

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty q^2 dq \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} \frac{d(\cos\theta) e^{i|q||x-x'|\cos\theta}}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon} = -\frac{1}{8\pi^2} \frac{1}{i|x-x'|} \quad (۵۲-۳)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} q dq \frac{(e^{iq|x-x'|} - e^{-iq|x-x'|})}{k^2 - q^2 \mp i\epsilon} = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|x-x'|}}{|x-x'|}$$

در پله آخر از روش حساب مانده‌ها استفاده کرده‌ایم، توجه کنید که انتگرالده، قطب‌هایی در صفحه q مختلط به صورت زیر دارد:

$$q = \pm \sqrt{1 \pm \left(\frac{i\epsilon}{k^2}\right)} \approx \pm k \pm i\epsilon' \quad (۵۳-۳)$$

بنابراین G_{\pm} چیزی جز تابع گرین معادله هلمهولتز^۱ به شکل زیر نیست :

$$(\nabla^2 + k^2)G_{\pm}(x, x') = \delta^3(x - x') \quad (۵۴-۳)$$

با کمک شکل صریح G_{\pm} به صورت معادله (۴۷-۳)، می‌توان با استفاده از (۴۶-۳) معادله (۴۳-۳) را به شکل رابطه (۵۵-۳) نوشت :

$$\langle x|\psi^{\pm}\rangle = \langle x|\phi\rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{\pm ik|x-x'|}}{4\pi|x-x'|} \langle x'|V|\psi'^{\pm}\rangle \quad (۵۵-۳)$$

تابع موج $\langle x|\psi^{\pm}\rangle$ در حضور پراکننده، به صورت مجموع تابع موجی برای موج فرودی $\langle x|\phi\rangle$ و جمله ای که نمایش دهنده اثر پراکندگی است نوشته شده است [۲۹، ۲۸].

^۱ Helmholtz

فصل چهارم

پراکنگی در سیم های کوانتومی تحت تابش الکترومغناطیس

با توجه به توسعه فناوری و فراهم آمدن امکان بهره برداری از ساختارها و قطعاتی در ابعاد نانو از قبیل چاه ها، سیم ها و نقاط کوانتومی و به جهت فراهم آوردن درک عمیق از نتایج حاصل از مطالعات تجربی بررسی نظری همه جانبه دستگاه های مذکور اجتناب ناپذیر است. در سال های اخیر مطالعه ترابرد حامل ها در سیم های کوانتومی بسیار مورد توجه قرار گرفته است. در مطالعه ترابرد الکترونی در دستگاه های نانو مقیاس، کوانتیزه بودن رسانندگی اهمیت دارد. می توان برای بررسی ویژگی های ترابرد در این دستگاه ها، از فرمول لاندائور بهره برد. در یک سیم کوانتومی ایده آل که در آن ترابرد الکترونی به صورت بالیستیک است، رسانندگی به صورت تابعی خوش تعریف از $G_0 = \frac{2e^2}{h}$ می باشد. در میان عوامل موثر در ترابرد الکترونی در دستگاه های مذکور، پراکندگی الکترون ها از عیوب و ناخالصی ها حائز اهمیت است. حضور ناخالصی ها و یا نقص ها در سیم کوانتومی، تحرک پذیری الکترون و رسانندگی سیم را کاهش می دهد. در بسیاری از مطالعات نظری احتساب اثرات ناخالصی ها با بهره گیری از پتانسیل برهم کنشی به شکل تابع دلتای دیراک صورت می پذیرد.

در این تحقیق در امتداد کارهای فوق از روشی مبتنی بر معادله لیپمن - شوینگر برای محاسبه ترابرد الکترون و محاسبه رسانندگی دستگاه تحت تابش میدان الکترومغناطیسی استفاده می شود.

۲-۴ معادله شرودینگر

دستگاه مورد مطالعه یک سیم کوانتومی دو بعدی در صفحه x-y تحت اثر پتانسیل محدود کننده سهمی گون در راستای محور y، $v_c = \frac{1}{2} m \omega_0^2 y^2$ ، می باشد و پتانسیل برداری میدان الکترومغناطیس تابشی در جهت x، به شکل زیر است :

$$A_y(t) = \frac{E_y C}{\omega} \sin(\omega t) e_x \quad (1-4)$$

در رابطه بالا ω و E_γ به ترتیب فرکانس و دامنه میدان تابشی و c سرعت نور می‌باشد. با وجود شرایط ذکر شده، الکترون های آزاد در سیم تنها می‌توانند در یک جهت آزادانه حرکت کنند. می‌توان تابع موج اولیه دستگاه، در غیاب پتانسیل پراکندگی را به کمک معادله شرودینگر وابسته به زمان پیدا کرد:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, t) = H\psi(x, y, t) \quad (2-4)$$

هامیلتونی معین کننده تحول زمانی دستگاه به صورت زیر می‌باشد:

$$H = \frac{1}{2m^*} (p_x + A_\gamma(t))^2 + \frac{p_y^2}{2m^*} + \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 y^2 \quad (3-4)$$

در رابطه فوق m^* و ω_0 به ترتیب جرم موثر و فرکانس پتانسیل محدود کننده که به شکل سهمی در نظر گرفته شده است می‌باشند. با استفاده از یک تبدیل یکانی می‌توان معادله (2-4) را به صورت معادله شرودینگر (4-4) در غیاب تابش میدان لیزر به شکل زیر بنویسیم.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 = U^\dagger(t) \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right\} U(t) \Rightarrow \quad (4-4)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, t) = H_0 \psi(x, y, t)$$

که H_0 در رابطه فوق به شکل زیر است :

$$H_0 = \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{p_y^2}{2m^*} + \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 y^2 \quad (5-4)$$

H_0 هامیلتونی معادله شرودینگر وابسته به زمان برای یک تک الکترون در یک میدان مغناطیسی کوانتیده کننده است. با استفاده از عملگر یکانی زیر می‌توان معادله (4-4) را محاسبه و ویژه توابع آن را بدست آورد.

$$U(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} u_1(t)\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} u_2(t) p_x\right) \quad (6-4)$$

استفاده از تبدیل مذکور منجر به معادلات دیفرانسیل زیر می‌شود:

$$\dot{u}_1(t) = -\frac{e^2 A^2}{2m^* c^2} = -\frac{e^2 E_\gamma^2 c^2}{2m^* c^2 \omega^2} \sin^2 \omega t \quad (7-4)$$

$$\dot{u}_2(t) = -\frac{eA}{m^*c} = -\frac{eE\gamma c}{m^*c\omega^2} \sin\omega t \quad (۸-۴)$$

با استفاده از شرایط اولیه $u_2(0) = u_1(0) = 0$ حل این معادلات به صورت زیر خواهد بود:

$$u_1(t) = \frac{e^2 E_Y^2}{8m^*\omega^3} (\sin 2\omega t - 2\omega t) = \hbar\gamma_1 (\sin 2\omega t - 2\omega t) \quad (۹-۴)$$

$$u_2(t) = \frac{eE\gamma}{m^*\omega^2} (\cos\omega t - 1) = \gamma_0 (\cos\omega t - 1) \quad (۱۰-۴)$$

بنابراین تابع موج مربوطه به صورت رابطه (۱۱-۴) می‌باشد:

$$\psi(x, y, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\gamma_1(\sin 2\omega t - 2\omega t)} e^{i\gamma_0 k_x (\cos\omega t - 1)} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} e^{ikx} \phi_n(y) \quad (۱۱-۴)$$

که در آن $\phi_n(y)$ ویژه توابع ناشی از پتانسیل محدود کننده در راستای y و انرژی الکترون که به صورت مجموع انرژی جنبشی و انرژی کوانتیده شده در راستای y می‌باشد [۱۷ و ۱۳]. حال با استفاده

از بسط تابع بسل که در رابطه (۱۲-۴) آمده است:

$$e^{i\nu \sin x} = \sum_l J_l(\nu) e^{ilx}, \quad (۱۲-۴)$$

$$e^{i\nu \cos x} = \sum_l J_l(\nu) e^{ilx}.$$

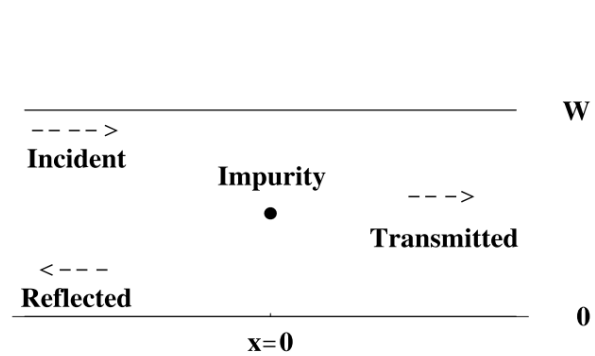
رابطه (۱۱-۴) را به شکل زیر می‌نویسیم:

$$\psi(x, y, t) = \quad (۱۳-۴)$$

$$\frac{1}{\sqrt{L}} \sum_n \sum_{l_1} \sum_{l_2} J_{l_1}(\gamma_1) J_{l_2} \left(-\gamma_0 \frac{p_x}{\hbar} \right) e^{2il_1\omega t} e^{-2i\omega\gamma_1 t} e^{i\gamma_0 \frac{p_x}{\hbar}} e^{il_2\omega t} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} e^{-ikx} \phi_n(y).$$

۳-۴ معادله لیپمن - شوینگر در دو بعد

همان طور که در بخش ۲-۴ گفته شد، دستگاه مدل، به صورت یک سیم کوانتومی دو بعدی در در نظر گرفته شده است که الکترون‌ها در راستای x آزادی حرکت دارند در حالی که حرکت آنها در راستای y توسط پتانسیل محدودکننده، محدود شده است. شکل دستگاه به صورت زیر می‌باشد.



شکل (۱-۴): الکترون فرودی از سمت چپ توسط ناخالصی در سیم کوانتومی دو بعدی پراکنده می شود. طول سیم محدود است و پهنای آن با $W=30\text{nm}$ نمایش داده شده است [۹].

در صورت وجود پتانسیل پراکنده هامیلتونی دستگاه به شکل زیر خواهد بود:

$$H = H_0 + V \quad (۱۴-۴)$$

که در آن H_0 جمع روی عملگر انرژی جنبشی و پتانسیل محدود کننده است.

$$H_0 = \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{p_y^2}{2m^*} + V_c(y) \quad (۱۵-۴)$$

پتانسیل محدود کننده $V_c(y) = \frac{1}{2}m^*\omega_0^2y^2$ ، به راستای عرضی y وابسته می باشد. همچنین $V(x,y)$

پتانسیل پراکنده هر نقص یا ناخالصی در سیم می باشد. در غیاب پراکنده و ویژه حالت انرژی ذره

آزاد، بردار $|\mathbf{p}\rangle$ متناسب با معادله ویژه مقداری $H_0|\mathbf{p}\rangle = E|\mathbf{p}\rangle$ است. با توجه به بخش (۲-۴) این

حالت های ذره آزاد در این وضعیت به صورت رابطه (۱۶-۴) تعریف می شوند:

$$\langle \mathbf{x} | \psi_p^0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\gamma_1(\sin 2\omega t - 2\omega t)} e^{i\gamma_0 k_x (\cos \omega t - 1)} e^{-i\frac{E}{\hbar} t} e^{ikx} \phi_n(y) \quad (۱۶-۴)$$

ویژه مقادیر انرژی مربوط به H_0 به شکل زیر می باشد:

$$E = \frac{p_x^2}{2m^*} + E_n \quad (۱۷-۴)$$

که $p_x = \hbar k$ پیوسته است و E_n به ترتیب شاخص و انرژی هر زیرنوار می باشد. در حضور پراکنده،

معادله شرودینگر اصلی که حل خواهیم کرد به شکل زیر می‌باشد:

$$(H_0 + V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (18-4)$$

که حل آن توسط رابطه زیر انجام می‌شود:

$$|\psi_p^{(+)}\rangle = |\psi_p^{(0)}\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} V |\psi_p^{(+)}\rangle \quad (19-4)$$

رابطه (۱۹-۴) تئوری پراکندگی لیپمن-شوینگر است که بیانگر ارتباط بین توابع موج ذرات فرودی $|\psi_p^{(0)}\rangle$ ، و پراکنده شده $|\psi_p^{(+)}\rangle$ می‌باشد. با ضرب رابطه (۱۹-۴) از سمت چپ در بردار $\langle x|$ و به کار بردن رابطه تکامل زیر

$$\int d^2x' |x'\rangle \langle x'| = 1 \quad (20-4)$$

می‌توان معادله (۱۹-۴) را به شکل معادله (۲۱-۴) نوشت:

$$\langle x|\psi_p^+\rangle = \langle x|\psi_p^0\rangle + \int d^2x' \langle x|\frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon}|x'\rangle \langle x'|V|\psi_p^+\rangle \quad (21-4)$$

حال باید معادله انتگرالی کرنل^۱ در رابطه فوق را محاسبه کنیم. برای این کار مجدداً از رابطه تکامل متناسب با ویژه کت‌های انرژی استفاده می‌کنیم:

$$\int d^2p' |p'\rangle \langle p'| = 1 \quad (22-4)$$

بنابراین انتگرال کرنل را به صورت زیر بازنویسی می‌کنیم:

$$G_+(x, x') = \frac{\hbar^2}{2m^*} \int d^2p' d^2p'' \langle x|p'\rangle \langle p'|\frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon}|p''\rangle \langle p''|x'\rangle. \quad (23-4)$$

با احتساب مقدار $\langle p'|p''\rangle$ و با استفاده از رابطه (۱۸-۴) بدست می‌آوریم:

$$\langle p'|p''\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\frac{i(p_x'' - p_x')x}{\hbar}} \int_{-\frac{W}{2}}^{\frac{W}{2}} dy \phi_{n'}(y) \phi_{n''}(y) = \delta(p_x' - p_x'') \delta_{n'n''}. \quad (24-4)$$

با جایگذاری رابطه (۲۴-۴) در معادله (۲۳-۴) و تبدیل رابطه (۲۵-۴):

¹ Kernel

$$\int d^2 p' \int d^2 p'' \rightarrow \sum_{n'n''} \int_{-\infty}^{\infty} dp'_x \int_{-\infty}^{\infty} dp''_x \quad (25-4)$$

و با جایگذاری $p'_x = \hbar q$ و استفاده از رابطه (۱۷-۴) نتیجه زیر بدست می‌آید:

$$G_+(x, x') = \frac{\hbar^2}{2m^*} \sum_{n'} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp'_x}{2\pi\hbar} \frac{e^{\frac{ip'_x(x-x')}{\hbar}}}{E - (\frac{p'^2}{2m^*}) + i\varepsilon} \quad (26-4)$$

که می‌توان پس از اندکی ساده سازی آن را به شکل زیر بیان کرد:

$$G_+(x, x') = \frac{\hbar^2}{2m^*} \sum_{n'} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \left(\frac{-1}{2\pi}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{e^{iq(x-x')}}{q^2 - k_{n'}^2 - i\varepsilon} \quad (27-4)$$

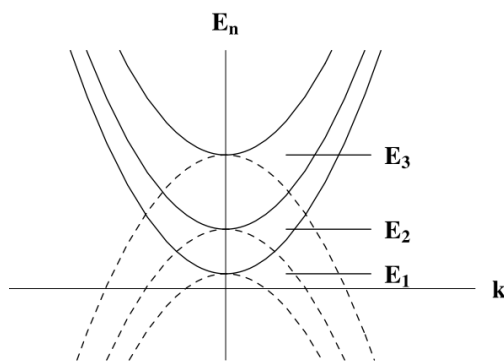
$$k_{n'}^2 = \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right) (E - E_{n'}) \quad .$$

اگر $E_{n'}$ کوچکتر (بزرگتر) از انرژی فرمی E باشد، مد پراکنده شده n' مد انتشاری (مد ناپایدار) می‌باشد.

همان‌طور که در شکل (۲-۴) نشان داده شده است، برای مدهای ناپایدار رابطه زیر را خواهیم داشت

$$\kappa_{n'}^2 = \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right) (E_{n'} - E) \quad (28-4)$$

بنابراین $k_{n'} = i\kappa_{n'}$ خواهد بود.



شکل (۲-۴): رابطه پاشندگی حالت‌های انتشاری و ناپایدار در سیم کوانتومی یک بعدی. خطوط پر مربوط به مدهای انتشاری و خط چین‌ها مربوط به مدهای ناپایدار می‌باشد [۹].

انتگرال رابطه (۲۷-۴) برای هر کدام از مدها به طور جداگانه محاسبه شده است. اگر مد n'

انتشاری باشد، محاسبه انتگرال به صورت $I_{n'}(x, x') = \left(\frac{-i}{2k_{n'}}\right) e^{ik_{n'}|x-x'|}$ خواهد بود. اگر n' مد

ناپایدار باشد، انتگرال به صورت $I_{n'}(x, x') = \left(\frac{-1}{2\kappa_{n'}}\right) e^{-\kappa_{n'}|x-x'|}$ بدست می‌آید. بنابراین ما می‌توانیم تابع گرین را به صورت زیر بنویسیم:

$$G_+(x, x') = \sum_{n'=1}^{n_F^{\max}} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \frac{e^{ik_{n'}|x-x'|}}{2ik_{n'}} - \sum_{n'=n_F^{\max}+1}^{\infty} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \frac{e^{-\kappa_{n'}|x-x'|}}{2\kappa_{n'}} \quad (29-4)$$

که در رابطه فوق n_F^{\max} بزرگترین مد انتشاری در انرژی فرمی E و n' در جمع دوم، روی همه مدهای ناپایدار بسته می‌شود. حال فرض خواهیم کرد که پتانسیل در معادله (۱۹-۴) موضعی و در نمایش x به صورت قطری باشد:

$$\langle x' | V(x) | x'' \rangle = V(x') \delta^2(x' - x'') \quad (30-4)$$

همچنین فرض می‌کنیم، پتانسیل دارای بازه تعریف شده محدودی باشد، به طوری که اگر (x', y') نقطه ای در بازه $-\frac{W}{2} < y' < \frac{W}{2}$ و $0 < x' < L$ باشد $V(x') \neq 0$ خواهد بود.

بنابراین انتگرال معادله (۲۱-۴) برای یک پتانسیل موضعی با بازه تعریف شده محدود به شکل تابع موجی زیر خواهد شد:

$$\psi_p^{(+)}(x, y) = \psi_p^{(0)}(x, y) + \frac{2m^*}{\hbar^2} \int_{x'=0}^{x'=L} dx' \int_{y'=-\frac{W}{2}}^{y'=\frac{W}{2}} dy' G_+(x, y; x', y') V(x', y') \psi_p^{(+)}(x', y') \quad (31-4)$$

که $x = (x, y)$ و $x' = (x', y')$. تابع موج کلی $\psi_p^{(+)}(x, y)$ در رابطه فوق در حضور پراکننده، به صورت مجموع تابع موج فرودی $\psi_p^{(0)}(x, y)$ و جمله ای که نشان دهنده اثر پراکندگی است، می‌باشد. تابع موج $\psi_p^{(+)}(x)$ دامنه احتمال پیدا شدن ذره در x را نشان می‌دهد. اگر ذره در x' برهمکنش کند، دامنه احتمال اینکه ذره در x یافت شود برابر خواهد بود با دامنه برهمکنش ذره در x' ضرب در احتمال دامنه انتشار ذره از x' به x ، که بر روی همه x' جمع شده است. بنابراین می‌توان تابع گرین $G_+(x, y; x', y')$ را به صورت دامنه احتمال انتشار ذره از (x', y') به (x, y) تعبیر کرد. حال به

بررسی یک الکترون پراکنده شده از پتانسیل تابع دلتا در سیم کوانتومی دو بعدی می‌پردازیم [۹ و ۱۴].

۴-۴ پتانسیل پراکندگی تابع دلتا

اکنون فرض می‌کنیم که الکترون از پتانسیل تابع دلتا به شکل زیر پراکنده شده است :

$$V(x, y) = \gamma \delta(x) \delta(y - y_i) \quad (۳۲-۴)$$

γ در رابطه فوق میزان شدت پراکندگی پتانسیل تابع دلتا و y_i مکان پراکنده را نشان می‌دهد که می‌تواند مثبت (پراکنده تابع دلتای دافعه) و منفی (پراکنده تابع دلتای جاذبه) باشد. بنابراین معادله (۳۱-۴) برای تابع موج $\psi_p^{(+)}(x, y)$ به صورت زیر نوشته خواهد شد:

$$\psi_p^{(+)}(x, y) = \psi_p^0(x, y) + \frac{2m^* \gamma}{\hbar^2} G_+(x, y; 0, y_i) \psi_p^{(+)}(0, y_i) \quad (۳۳-۴)$$

ما سعی داریم تا با قرار دادن $x = 0$ و $y = y_i$ در رابطه فوق $\psi_p^{(+)}(0, y_i)$ را پیدا کنیم. ما می‌توانیم تابع موج معادله (۳۱-۴) را به صورت زیر بنویسیم:

$$\psi_p^{(+)}(x, y) = \psi_p^0(x, y) + \frac{1}{D} \frac{2m^* \gamma}{\hbar^2} G_+(x, y; 0, y_i) \psi_p^0(0, y_i) \quad (۳۴-۴)$$

که D در رابطه فوق به شکل زیر است:

$$D = 1 - \sum_{n'=1}^{n_F^{max}} \left(\frac{S_{n'n'}}{2ik_{n'}} \right) + \sum_{n'=n_F^{max}+1}^{n_c} \left(\frac{S_{n'n'}}{2\kappa_{n'}} \right) \quad (۳۵-۴)$$

n_c در رابطه فوق در مجموع دوم بیشترین حد مد ناپایدار می‌باشد. به منظور اطمینان از همگرایی دامنه پراکندگی، لازم است که به اندازه لازم مد ناپایدار در نظر بگیریم. در محاسبات عددی ما تعداد ۱۰۰ مد در نظر گرفتیم. همچنین ثابت جفت شدگی را به صورت زیر محاسبه کردیم:

$$S_{lm} = \frac{2m^* \gamma}{\hbar^2} \phi_l(y_i) \phi_m(y_i) \quad (۳۶-۴)$$

S_{lm} در رابطه فوق متناسب با شدت ناخالصی و اندازه تابع موج در مکان ناخالصی است [۷]. حال با

جانشین کردن تابع گرین در معادله (۳۴-۴)، تابع موج کلی را به گونه ای می نویسیم تا بتوانیم دامنه پراکندگی را برای هر جفت مد استخراج کنیم:

$$\begin{aligned} \psi_p^{(+)}(x, y, t) = & \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_n \sum_{l_1} \sum_{l_2} j_{l_1}(\gamma_1) j_{l_2} \left(-\gamma_0 \frac{p_x}{\hbar} \right) M e^{ikx} \phi_n(y) + \quad (37-4) \\ & \sum_{n'=1}^{n_F^{max}} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \frac{S_{nn'}}{2ik_{n'} D \sqrt{L}} j_{l_1}(\gamma_1) j_{l_2} \left(-\gamma_0 \frac{p_x}{\hbar} \right) M e^{ik|x|} \phi_{n'}(y') + \\ & \sum_{n'=n_F^{max}+1}^{n_c} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \frac{-S_{nn'}}{2\kappa_{n'} D \sqrt{L}} j_{l_1}(\gamma_1) j_{l_2} \left(-\gamma_0 \frac{p_x}{\hbar} \right) M e^{-\kappa_{n'}|x|} \phi_{n'}(y') \end{aligned}$$

در رابطه فوق پارامتر دوم روی مدهای انتشاری و پارامتر سوم روی مدهای ناپایدار جمع بسته شده است. n مد فرودی است، در حالیکه n' مد پراکنده شده می باشد. برای پیدا کردن انرژی کل سیستم لازم است که از رابطه (۳۷-۴) در بازه $(0-2\pi)$ متوسط گیری کنیم:

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{2\pi/\Omega} \right) \int_0^{2\pi} \psi_p^{(+)}(x, y, t) d(\Omega t) = \quad (38-4) \\ \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_n \sum_{l_1} \sum_{l_2} j_{l_1}(\gamma_1) j_{l_2} \left(-\gamma_0 \frac{p_x}{\hbar} \right) e^{ikx} \phi_n(y) \left(\frac{1}{2\pi/\Omega} \right) \int_0^{2\pi} M e^{-iE \frac{t}{\hbar}} d(\Omega t) + \\ \sum_{n'=1}^{n_F^{max}} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \frac{S_{nn'}}{2ik_{n'} D \sqrt{L}} j_{l_1}(\gamma_1) j_{l_2} \left(-\gamma_0 \frac{p_x}{\hbar} \right) e^{ik|x|} \phi_{n'}(y') \left(\frac{1}{2\pi/\Omega} \right) \int_0^{2\pi} M e^{-iE \frac{t}{\hbar}} d(\Omega t) \\ + \\ \sum_{n'=n_F^{max}+1}^{n_c} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \frac{-S_{nn'}}{2\kappa_{n'} D \sqrt{L}} j_{l_1}(\gamma_1) j_{l_2} \left(-\gamma_0 \frac{p_x}{\hbar} \right) e^{-\kappa_{n'}|x|} \phi_{n'}(y') \left(\frac{1}{2\pi/\Omega} \right) \int_0^{2\pi} M e^{-iE \frac{t}{\hbar}} d(\Omega t) \end{aligned}$$

در روابط (۳۷-۴) و (۳۸-۴)، M به شکل زیر می شود:

$$M = e^{2il_1\omega t} e^{-2i\gamma_1\omega t} e^{il_2\omega t} e^{i\gamma_0 \frac{p_x}{\hbar}} \quad (39-4)$$

با استفاده از اصل پایستگی انرژی خواهیم داشت:

$$(2l_1\omega - 2\gamma_1\omega + l_2\omega - \frac{E}{\hbar})t = 0 \rightarrow E = \hbar(2l_1\omega - 2\gamma_1\omega + l_2\omega) \quad (40-4)$$

بنابراین انرژی کل به شکل رابطه (۴۱-۴) بدست می آید:

$$E_{n,k}^{l_1, l_2} = \hbar(2l_1\omega - 2\gamma_1\omega + l_2\omega) + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m^*} + (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 \quad (41-4)$$

دامنه عبور تابع موج را با توجه به رابطه (۴-۳۷) به صورت زیر محاسبه کرده‌ایم:

$$t_{nn'}(E) = \delta_{nn'} + \left(\frac{-i}{2k_{n'}D} \right) S_{nn'} . \quad (۴۲-۴)$$

همچنین دامنه ضریب بازتاب تابع موج به شکل زیر خواهد بود:

$$r_{nn'}(E) = \left(\frac{-i}{2k_{n'}D} \right) S_{nn'} \quad (۴۳-۴)$$

توجه داریم که اگر $n \neq n'$ و یا اگر n' مد ناپایدار باشد، $r_{nn'} = t_{nn'}$. دامنه ضریب عبوری داخل

نواری $t_{nn}(E)$ ، بیانگر ذرات باقی مانده ایست که از ناخالصی پراکنده نشده اند. دامنه ضریب عبور

داخلی $t_{nn'}(E)$ ، بیانگر اثر پراکنده‌گی و خروج ذره از مد n به مد n' می باشد. دامنه عبور جریان

داخلی $\tilde{t}_{nn'} = \sqrt{\frac{k_{n'}}{k_n}} t_{nn'}$ بیانگر عبور الکترون از مد n به مد n' می باشد. ضریب عبور جریان از میان

ناخالصی به صورت زیر بدست می آید:

$$T_{nn'} = \frac{k_{n'}}{k_n} t_{nn'} t_{nn'}^* \quad (۴۴-۴)$$

حال با توجه به فرمول رسانندگی لاندائور خواهیم داشت:

$$G = \frac{e^2}{\pi\hbar} \sum_{n,n'} T_{nn'} = \frac{e^2}{\pi\hbar} \sum_{n,n'} \frac{k_{n'}}{k_n} t_{nn'} t_{nn'}^* \quad (۴۵-۴)$$

در قسمت بعدی امتداد تابش میدان الکترومغناطیسی را تغییر می دهیم و آن را در جهت y در نظر

می گیریم (هم جهت با راستای پتانسیل محدودکننده) و ضمن حل مسئله همانند بخش قبل، به

محاسبه ضریب عبور و رسانندگی سیستم مورد نظر می پردازیم. دستگاه مورد مطالعه یک سیم

کوانتومی دو بعدی در صفحه $x-y$ تحت اثر پتانسیل محدود کننده سهمی گون در راستای محور y ،

$v_c = \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 y^2$ ، می باشد و میدان الکترومغناطیس تابشی در جهت y ، به شکل زیر است :

$$A_y(t) = \frac{E_y C}{\omega} \sin(\omega t) e_y \quad (۴۶-۴)$$

می توان تابع موج اولیه سیستم، قبل از اینکه پراکنده‌گی اتفاق بیفتد، را به کمک معادله شرودینگر

وابسته به زمان پیدا کرد.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, t) = H\psi(x, y, t) \quad (47-4)$$

که در آن هامیلتونی به شکل رابطه (48-4) است:

$$H = \frac{1}{2m^*} (p_y + A_y(t))^2 + \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 y^2 \quad (48-4)$$

در رابطه فوق m^* ، ω_0 و e به ترتیب جرم موثر، فرکانس پتانسیل محدود کننده که به شکل سهمی در نظر گرفته شده است و بار بنیادی¹ می‌باشند. با استفاده از یک تبدیل یکانی می‌توان معادله (47-4) را به صورت معادله شرودینگر (49-4) در غیاب تابش میدان لیزر بنویسیم.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 = U^\dagger(t) \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right\} U(t) \Rightarrow \quad (49-4)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, t) = H_0 \psi(x, y, t)$$

که H_0 به صورت رابطه (50-4) است.

$$H_0 = \frac{p_y^2}{2m^*} + \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 y^2 \quad (50-4)$$

عملگر یکانی در تبدیل ذکر شده به صورت زیر خواهد بود:

$$U(t) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} u_1(t) \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} u_2(t) y \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} u_3(t) p_y \right] \quad (51-4)$$

$$u_1(t) = \quad (52-4)$$

$$\frac{eE\gamma\gamma^*}{4m^*\omega_0} \left[2\omega_0 \sin(\omega - \omega_0) - 2\omega_0 \sin(\omega + \omega_0) t + \frac{(\omega_0^2 + \omega^2)}{2\omega} \sin(2\omega t) + \omega_0 \sin(2\omega_0 t) + (\omega^2 - \omega_0^2) t \right]$$

$$u_2(t) = \gamma^* \left[\frac{\omega_0}{\omega} \sin(\omega t) - \sin(\omega_0 t) \right] \quad (53-4)$$

$$u_3(t) = \frac{\gamma^*}{m^*\omega_0} [\cos(\omega t) - \cos(\omega_0 t)] \quad (54-4)$$

$$\gamma^* = \frac{eE\gamma\omega_0}{\omega^2 - \omega_0^2} \quad (55-4)$$

¹ Elementary Charge

با استفاده از رابطه (۴-۱۲) و حذف مواردی که توابع بسل ناچیزی دارند، تابع موج فرودی به شکل زیر خواهد بود:

$$\psi(x, y, t) = \quad (۴-۵۶)$$

$$\frac{1}{\sqrt{L}} \sum_n \sum_{l_1} \sum_{l_2} J_{l_1} \left(\frac{\gamma^* \omega_0 y}{\omega \hbar} \right) J_{l_2} \left(-\frac{\gamma^* y}{\hbar} \right) e^{il_1 \omega t} e^{il_2 \omega_0 t} e^{\frac{ieE\gamma\gamma^*}{4m^* \omega_0 \hbar} (\omega^2 - \omega_0^2) t} e^{ikx} e^{-iE \frac{t}{\hbar}} \phi_n(y)$$

مشابه قسمت اول مسئله، دستگاه مدل را به صورت یک سیم کوانتومی در راستای x در نظر می‌گیریم. جهت پتانسیل محدود کننده y است. این بار تابش را در جهت y در نظر گرفتیم. بنابراین هامیلتونی مسئله به صورت زیر خواهد بود:

$$H_0 = \frac{1}{2m^*} (p_y + A_\gamma(t))^2 + \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 y^2 \quad (۴-۵۷)$$

انرژی اولیه سیستم به صورت زیر است:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0 \quad (۴-۵۸)$$

روابط بدست آوردن تابع گرین مشابه قسمت اول مسئله می‌باشد که از تکرار آن خودداری می‌کنیم. تابع موج الکترون پس از پراکنده شدن به شکل زیر می‌باشد:

$$\psi_p^+(x, y, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_n \sum_{l_1} \sum_{l_2} J_{l_1} \left(\frac{\gamma^* \omega_0 y}{\omega \hbar} \right) J_{l_2} \left(-\frac{\gamma^* y}{\hbar} \right) M e^{ikx} \phi_n(y) + \quad (۴-۵۹)$$

$$\sum_{n'=1}^{n_F^{max}} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \frac{S_{nn'}}{2ik_{n'} D \sqrt{L}} J_{l_1} \left(\frac{\gamma^* \omega_0 y}{\omega \hbar} \right) J_{l_2} \left(-\frac{\gamma^* y}{\hbar} \right) M e^{ik|x|} \phi_{n'}(y')$$

$$\sum_{n'=n_F^{max}+1}^{n_C} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \frac{-S_{nn'}}{2\kappa_{n'} D \sqrt{L}} J_{l_1} \left(\frac{\gamma^* \omega_0 y}{\omega \hbar} \right) J_{l_2} \left(-\frac{\gamma^* y}{\hbar} \right) M e^{-\kappa_{n'} |x|} \phi_{n'}(y')$$

در رابطه فوق جمله دوم روی مدهای انتشاری و جمله سوم روی مدهای ناپایدار جمع بسته شده است. n مد فرودی است، در حالیکه n' مد پراکنده شده می‌باشد. برای پیدا کردن انرژی کل سیستم باید از رابطه فوق در بازه $(0-2\pi)$ رابطه فوق را به شکل زیر انجام می‌دهیم:

$$\left(\frac{1}{2\pi/\Omega} \right) \int_0^{2\pi} \psi_p^{(+)}(x, y, t) d(\Omega t) = \quad (۴-۶۰)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_n \sum_{l_1} \sum_{l_2} J_{l_1} \left(\frac{\gamma^* \omega_0 y}{\omega \hbar} \right) J_{l_2} \left(-\frac{\gamma^* y}{\hbar} \right) e^{ikx} \phi_n(y) \left(\frac{1}{2\pi/\Omega} \right) \int_0^{2\pi} Md(\Omega t) + \\ & \sum_{n'=1}^{n_F^{max}} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \frac{S_{nn'}}{2ik_{n'} D \sqrt{L}} J_{l_1} \left(\frac{\gamma^* \omega_0 y}{\omega \hbar} \right) J_{l_2} \left(-\frac{\gamma^* y}{\hbar} \right) e^{ik|x|} \phi_{n'}(y') \left(\frac{1}{2\pi/\Omega} \right) \int_0^{2\pi} Md(\Omega t) + \\ & \sum_{n'=n_F^{max}+1}^{n_C} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \frac{-S_{nn'}}{2\kappa_{n'} D \sqrt{L}} J_{l_1} \left(\frac{\gamma^* \omega_0 y}{\omega \hbar} \right) J_{l_2} \left(-\frac{\gamma^* y}{\hbar} \right) e^{-\kappa_{n'} |x|} \phi_{n'}(y') \left(\frac{1}{2\pi/\Omega} \right) \int_0^{2\pi} Md(\Omega t) \end{aligned}$$

در روابط (۴-۵۹) و (۴-۶۰)، M به شکل زیر می باشد:

$$M = e^{il_1 \omega t} e^{il_2 \omega_0 t} e^{\frac{ieE\gamma\gamma^*}{4m^* \omega_0 \hbar} (\omega^2 - \omega_0^2) t} e^{-iE \frac{t}{\hbar}} \quad (۴-۶۱)$$

با استفاده از اصل بقای انرژی خواهیم داشت:

$$(l_1 \omega + l_2 \omega_0 + \frac{eE\gamma\gamma^*}{4m^* \omega_0 \hbar} (\omega^2 - \omega_0^2) - \frac{E}{\hbar}) t = 0 \quad (۴-۶۲)$$

$$\rightarrow E = \hbar \left[l_1 \omega + l_2 \omega_0 + \frac{eE\gamma\gamma^*}{4m^* \omega_0 \hbar} (\omega^2 - \omega_0^2) \right]$$

بنابراین انرژی کل سیستم به شکل رابطه (۴-۶۲) بدست می آید:

$$E_{n,k}^{l_1, l_2} = \hbar \left[l_1 \omega + l_2 \omega_0 + \frac{eE\gamma\gamma^*}{4m^* \omega_0 \hbar} (\omega^2 - \omega_0^2) \right] + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m^*} + (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_0 \quad (۴-۶۳)$$

روابط ضریب عبور و بازتاب همانند بخش اول این فصل می باشد.

فصل پنجم

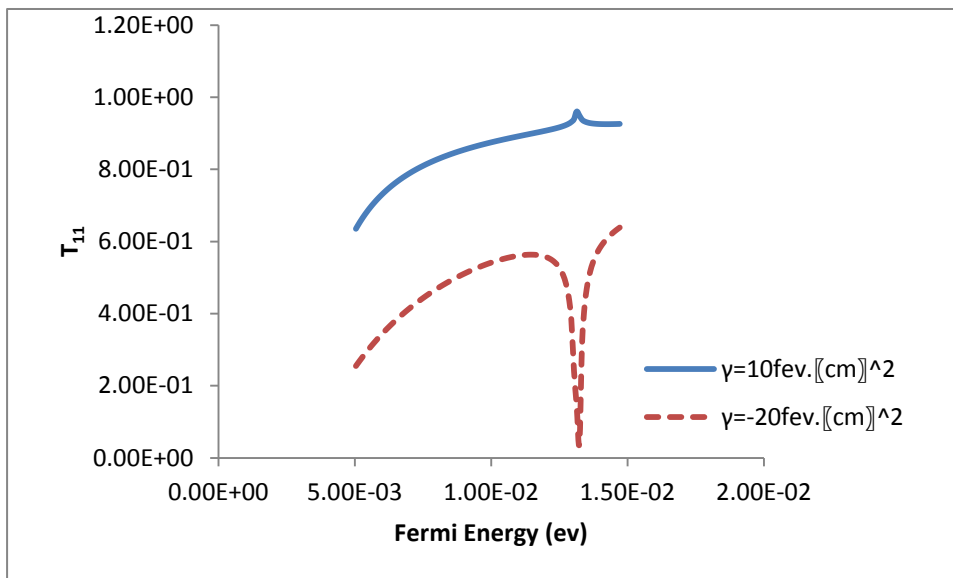
بحث و نتیجه گیری

فصل قبلی را به محاسبات نظری برای یک سیم کوانتومی با پتانسیل پراکنندگی تابع دلتا اختصاص دادیم. در این فصل قصد داریم با در دست داشتن مقادیر اولیه برای برخی پارامترهای ثابت، ضریب عبور و رسانندگی سیستم را برای سیم کوانتومی در حالت های مختلف محاسبه کنیم. به منظور خلاصه شدن مطلب ما به بررسی T_{11} که با توجه به رابطه (۴-۴۳) محاسبه می شود می پردازیم. برای انجام محاسبات عددی، کمیت های ثابت زیر را در نظر گرفتیم. حرکت الکترون ها در سیم کوانتومی دو بعدی GaAs در راستای x آزادانه صورت می گیرد اما در راستای y با قید و شرط خواهد بود. پتانسیل محدود کننده را در عرض سیم، در راستای y قرار داده و قطر سیم را $W=30\text{nm}$ فرض نمودیم. مکان پراکننده یک بار در فاصله $\frac{1}{12}$ از عرض سیم و بار دیگر روی خود مرکز سیم قرار داده شده است. جرم موثر $m^* = 0.067m_e$ ، فرکانس تابش میدان لیزر $\omega = 0.4 * 10^{13}$ و فرکانس مشخصه پتانسیل محدودکننده سهموی $\omega_0 = 1.5 * 10^{13}$ می باشد.

۲-۵ بررسی مسئله ترابرد و رسانندگی در حالتی که قطبش میدان تابش موازی با راستای سیم

کوانتومی باشد و در حالت بدون تابش

شکل (۱-۵) احتمال عبور T_{11} را بر حسب تابعی از انرژی فرمی از میان پتانسیل پراکننده تابع دلتا به ازای دو شدت تابش مختلف $\gamma = -20\text{fev.cm}^2$ و $\gamma = 10\text{fev.cm}^2$ نشان می دهد. در این نمودار اثر تابش در نظر گرفته نشده است. مکان پراکننده در فاصله $y_i = -\frac{1}{12}W$ قرار دارد. اگر پتانسیل پراکننده، دافعه باشد، $\gamma = 10\text{fev.cm}^2$ نمودار T_{11} با افزایش انرژی، به صورت پیوسته افزایش پیدا می کند.

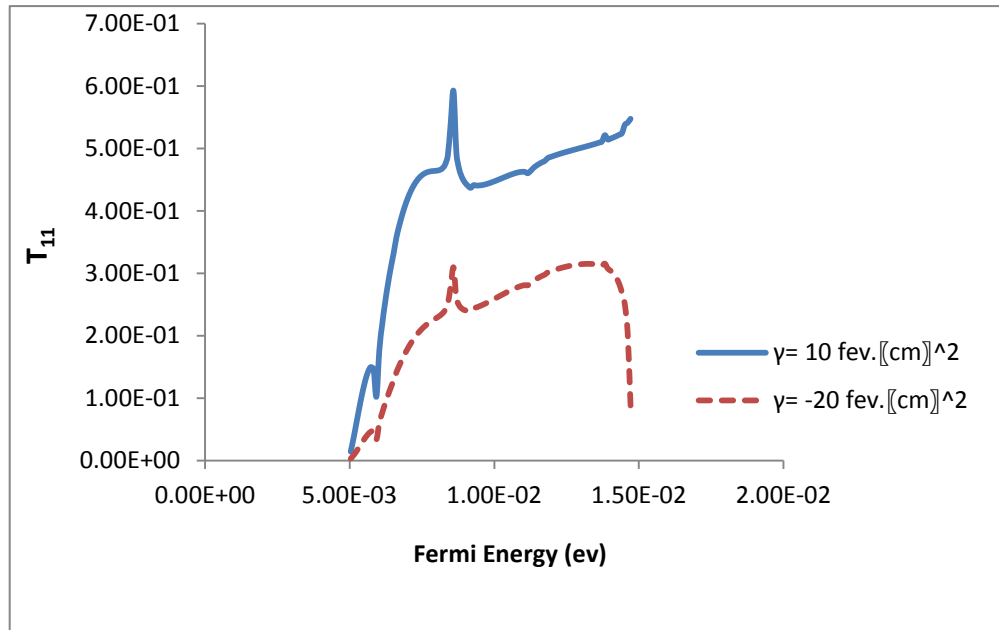


شکل (۱-۵): احتمال عبور T_{11} بر حسب تابعی از انرژی فرمی از میان نقص تابع دلتا در سیم کوانتومی دو بعدی در حالت بدون تابش در بازه انرژی E_1-E_2

زمانی که انرژی الکترون به کمینه زیرنوار دوم، $E = 0.0148\text{ev}$ می‌رسد، در این حالت الکترون‌ها از مد $n=1$ پراکنده می‌شوند و در مد ناپایدار $n=2$ ظاهر می‌شوند. در این وضعیت $T_{11} = 1$ به بیشترین مقدار خود می‌رسد و ترابرد تقریباً بالستیک و بدون برخورد می‌شود. قله به وجود آمده مربوط به حالت تشدید انرژی الکترون و تراز انرژی فرمی می‌باشد. در نمودار شکل (۱-۵)، فرورفتگی قبل از رسیدن به زیرنوار انرژی جدید مشاهده می‌شود که به فاصله انرژی بین این دره‌ها تا تراز انرژی زیرنوار بعدی، انرژی حالت شبه پیوندی گفته می‌شود. همچنین زمانی که پراکننده جاذبه باشد، این احتمال وجود دارد که مقدار $2\kappa_2 + s_{22}$ در رابطه (۱-۵) به کمترین مقدار خود برسد. در این حالت ضریب عبور به کمترین خود می‌رسد و ضریب بازتاب، R_{11} افزایش می‌یابد.

$$T_{11} = \left[1 + \left(\frac{s_{11}}{2\kappa_1} \right)^2 \left(\frac{2\kappa_2}{2\kappa_2 + s_{22}} \right)^2 \right]^{-1} \quad (1-5)$$

به طور مشابه نمودار شکل (۲-۵) با همان شرایط اولیه نمودار شکل (۱-۵)، $y_i = -\frac{1}{12}W$ و $\gamma = 10 \text{ fev. cm}^2$ و $\gamma = -20 \text{ fev. cm}^2$ به طوری که اثر تابش، موازی با راستای سیم در نظر گرفته شده، رسم شده است.

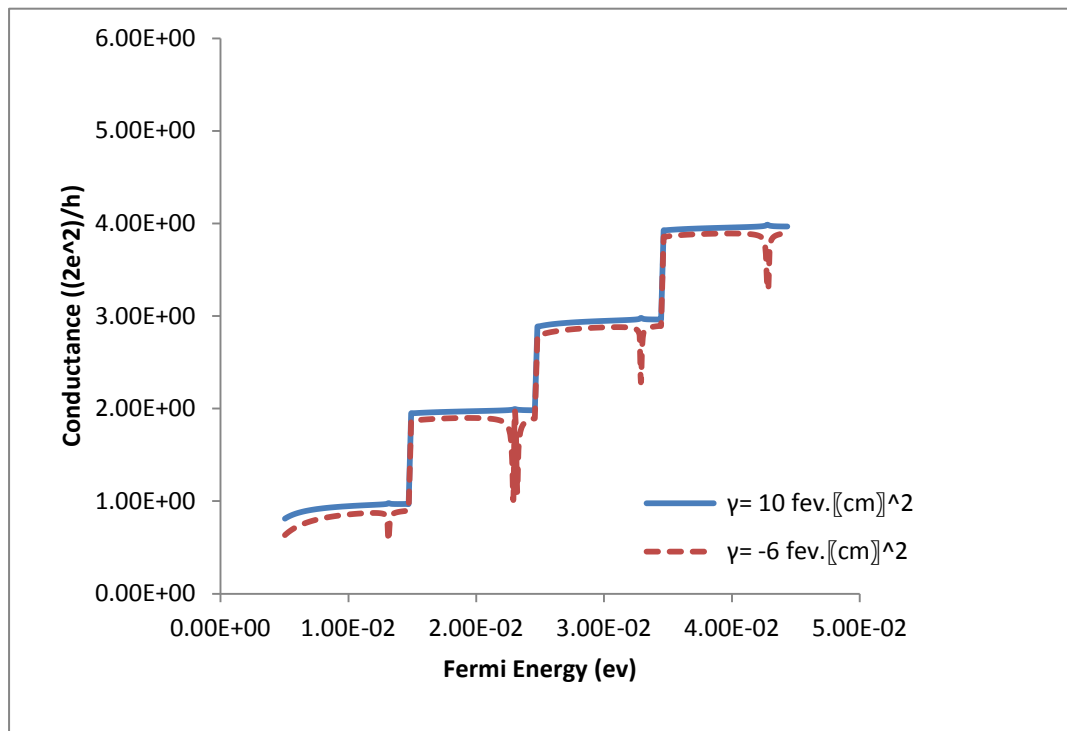


شکل (۲-۵): احتمال عبور T_{11} بر حسب تابعی از انرژی فرمی از میان نقص تابع دلتا در سیم کوانتومی دو بعدی در حالت تابش موازی با راستای سیم در بازه انرژی E_1-E_2

در مقایسه با نمودار شکل (۱-۵)، ملاحظه می‌شود اثر تابش باعث کاهش ترابرد الکترون و بنابراین کاهش کلی ضریب عبور می‌شود. قله‌های مشاهده شده در نمودار در حالت دافعه و جاذبه به خاطر حالت‌های شبه رزونانسی ایجاد شده است، که در حالت دافعه باعث ایجاد یک قله و در حالت جاذبه باعث ایجاد یک فرورفتگی می‌شود. افزایش حالت‌های شبه رزونانسی در نمودار شکل (۲-۵) در مقایسه با نمودار شکل (۱-۵) به خاطر ایجاد کنار نوارهای اپتیکی در اثر تابش می‌باشد.

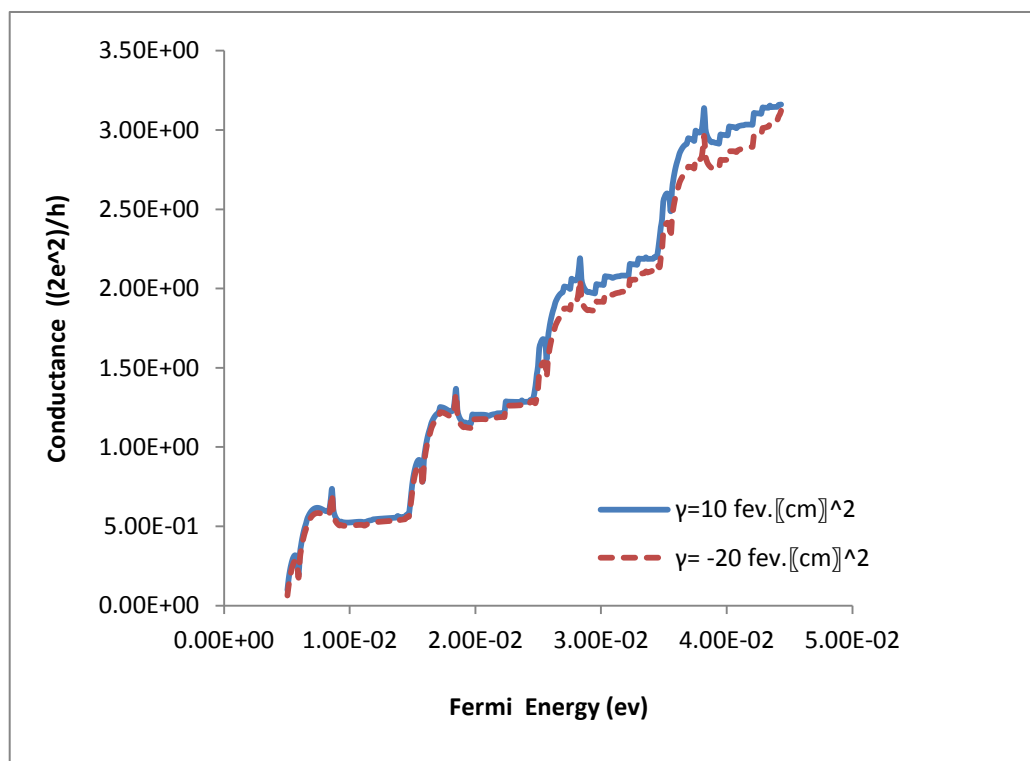
در شکل (۳-۵) نمودار رسانندگی دستگاه را بر حسب تابعی از انرژی فرمی برای هر دو حالت پراکننده تابع دلتا جاذبه و دافعه رسم شده است. به منظور اطمینان از همگرایی دامنه پراکنندگی، صد مد در

نظر گرفته شده است.



شکل (۳-۵) : نمودار رسانندگی بر حسب انرژی فرمی از میان نقص تابع دلتا در سیم کوانتومی دو بعدی در حالت بدون تابش

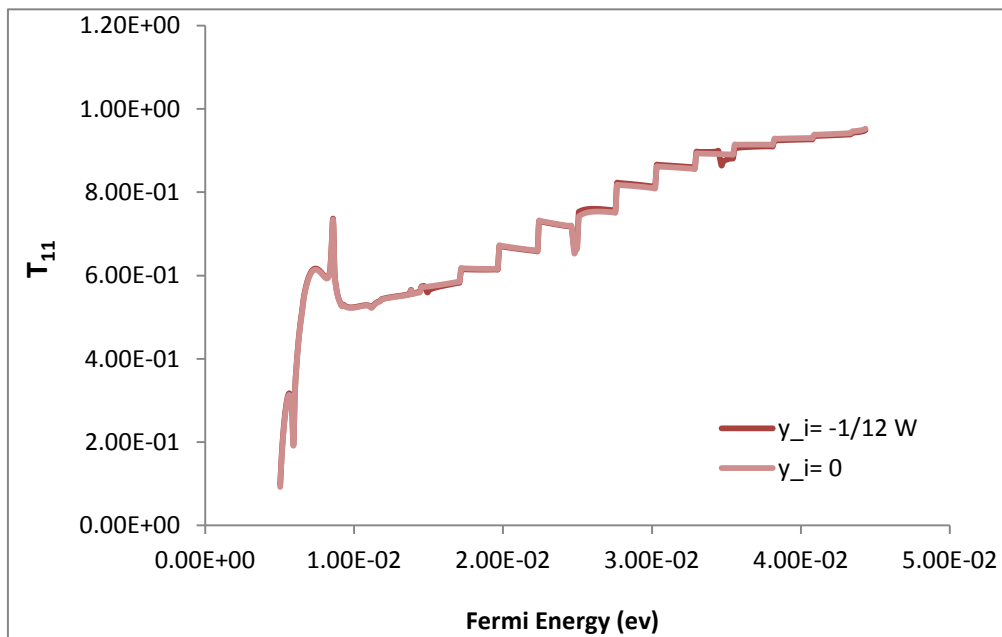
در شکل (۳-۵) ناخالصی در فاصله $\gamma_i = -\frac{1}{12}W$ قرار داشته و رسانندگی به ازای پراکننده دافعه (خطوط پر) با شدت $\gamma = 10 \text{ fev. cm}^2$ و پراکننده جاذبه (خط چین) با شدت $\gamma = -20 \text{ fev. cm}^2$ بررسی شده است. شانه های پله های رسانندگی تقریباً گرد هستند که این موضوع منجر به افزایش ضریب بازتاب بلافاصله بالای هر زیرنوار می شود. به طور مشابه نمودار رسانندگی برای حالتی که اثر تابش موازی با راستای سیم در نظر گرفته شده، در شکل (۴-۵) نشان داده شده است.



شکل (۴-۵): نمودار رسانندگی بر حسب انرژی فرمی از میان نقص تابع دلتا در سیم کوانتومی دو بعدی در حالت تابش موازی با راستای سیم

در مقایسه با شکل (۳-۵) حضور تابش باعث کاهش کلی میزان رسانندگی دستگاه مدل می‌شود. در هر دو نمودار شکل (۳-۵)، پراکندگی در غیاب تابش) و (۴-۵، پراکندگی در حضور تابش) میزان رسانندگی با افزایش انرژی زیاد می‌شود و همچنین مقدار رسانندگی برای پراکننده تابع دلتا در حالت جاذبه (خط چین) کمتر از حالت دافعه است. زمانی که انرژی الکترون با کمینه هر زیر نوار برابر می‌شود، رسانندگی دستگاه از میان نقص تابع دلتا برابر با رسانندگی بالیستیک می‌شود. اگر پتانسیل پراکندگی نبود، در این انرژی‌های خاص، سیم کوانتومی کاملاً شفاف می‌بود. رسانندگی پراکننده جاذبه در مقایسه با پراکننده دافعه به خاطر ظاهر شدن حالت‌های شبه پیوندی کوچک‌تر است.

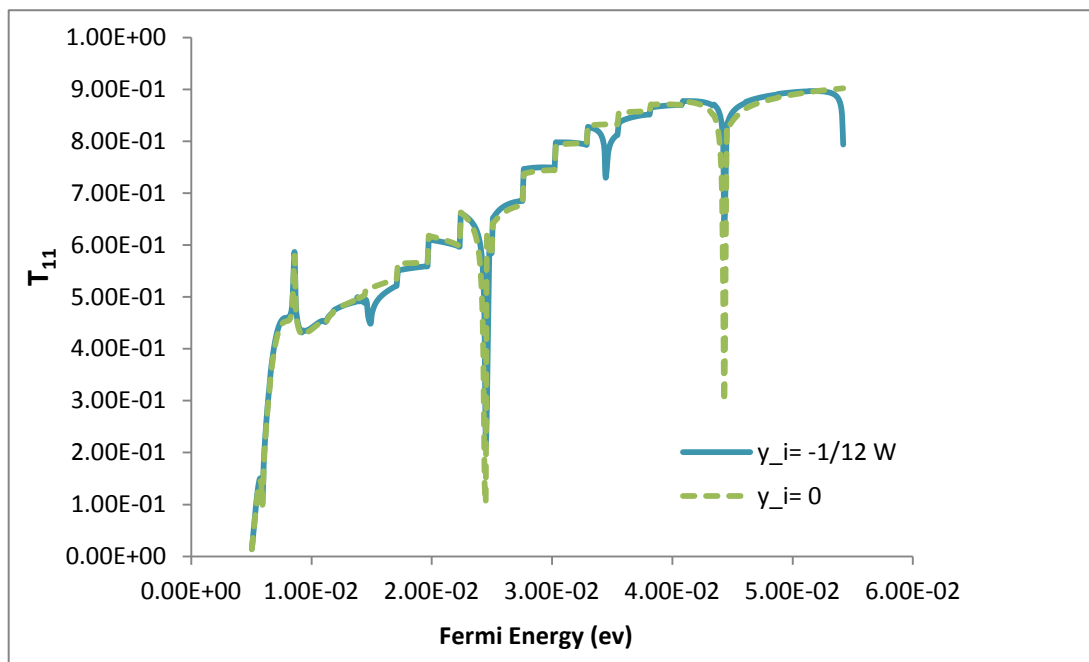
در این تحقیق، اثر نقاط عرضی مکان پراکننده تابع دلتا روی ضریب عبور نیز بررسی شده است. در این قسمت سعی بر آن است تا وابستگی ضریب عبور و رسانندگی به مکانی که در آن پراکننده واقع شده است نشان داده شود. در شکل (۵-۵) ما ضریب عبور، T_{11} ، را برای دو مکان مختلف از پراکننده رسم کرده ایم.



شکل (۵-۵): ضریب عبور T_{11} بر حسب تابعی از انرژی فرمی از میان پتانسیل تابع دلتا دافعه با شدت $\gamma = 10 f. ev. cm^2$ در حالت تابش موازی

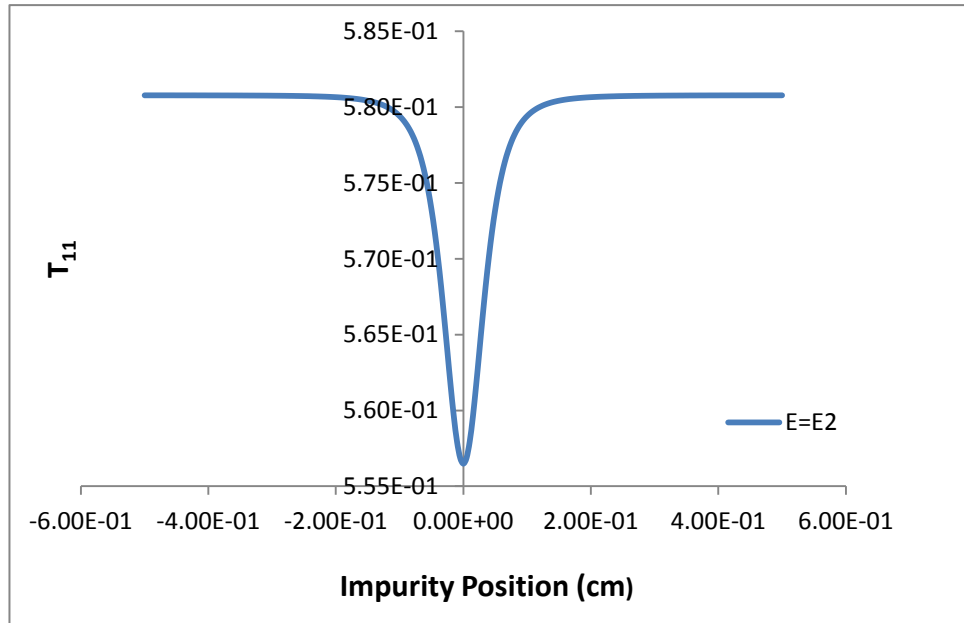
خطوط پرننگ مربوط به مکانی است که پراکننده در فاصله $\gamma_i = -\frac{1}{12}W$ واقع شده است و خطوط کمرنگ مربوط به مکانی است که پراکننده در مرکز سیم واقع شده است. زمانی که پراکننده در فاصله $\gamma_i = -\frac{1}{12}W$ واقع شده باشد، نمودار ضریب عبور در هر زیرنوار انرژی یک شیب رو به پایین دارد و بلافاصله شیب افزایشی به خود می گیرد. اما زمانی که پراکننده در مرکز سیم واقع شده باشد، در کمینه زیر نوارهای زوج هیچ حرکت رو به پایینی از خود نشان نمی دهد. این بدین معنی است که

زمانی که پراکننده در این مکان واقع شده باشد، همه مدهای نرمال زوج ناپدید می‌شوند. زمانی که حالت‌های الکترونی با تراز انرژی زوج (n زوج) داریم، احتمال حضور الکترون در $y_i = 0$ به صفر می‌رسد. بنابراین اگر پراکننده در $y_i = 0$ قرار داده شود احتمال برخورد الکترون‌هایی که در این حالت‌ها هستند با پراکننده به صفر می‌رسد. بنابراین ثابت‌های جفت شدگی زوج مربوط به آنها $S_{22} = S_{44} = \dots = 0$ صفر خواهد شد و این بدین معنی است که احتمال اشغال الکترون در هر کدام از مدهای ناپایدار زوج صفر خواهد شد و الکترون‌ها در مدهای زوج اطراف پراکننده، ظاهر نمی‌شوند، با این وجود الکترون‌ها می‌توانند در مدهای ناپایدار فرد ظاهر شوند. همچنین نمودار فوق برای پراکننده تابع دلتا جاذبه با همان شرایط ذکر شده در شکل (۵-۶) رسم شده است. مشابه با نمودار شکل (۵-۵) در حالت پراکننده تابع دلتا جاذبه، زمانی که پراکننده در فاصله $y_i = -\frac{1}{12}W$ واقع شده باشد، در هر کمینه زیرنوار انرژی، افت و خیزهای ناگهانی و یا حالت‌های شبه پیوندی مشاهده می‌شود، اما زمانی که پراکننده در مرکز سیم قرار گرفته باشد $y_i = 0$ ، در ترازهای انرژی زوج احتمال حضور الکترون صفر می‌شود.



شکل (۵-۶): ضریب عبور T_{11} بر حسب تابعی از انرژی فرمی از میان پتانسیل تابع دلتا دافعه با شدت $\gamma = -6 \text{ f.eV.cm}^2$ ، در حالت تابش موازی

بنابراین احتمال برخورد الکترون با پراکننده به صفر می‌رسد و حالت های شبه پیوندی در کمینه زیرنوارهای زوج E_2, E_4, \dots مشاهده نمی‌شوند. در شکل (۷-۵) ما نمودار ضریب عبور را بر حسب تغییرات مکان پراکننده برای یک تراز انرژی مشخص (E_2) رسم کرده ایم.



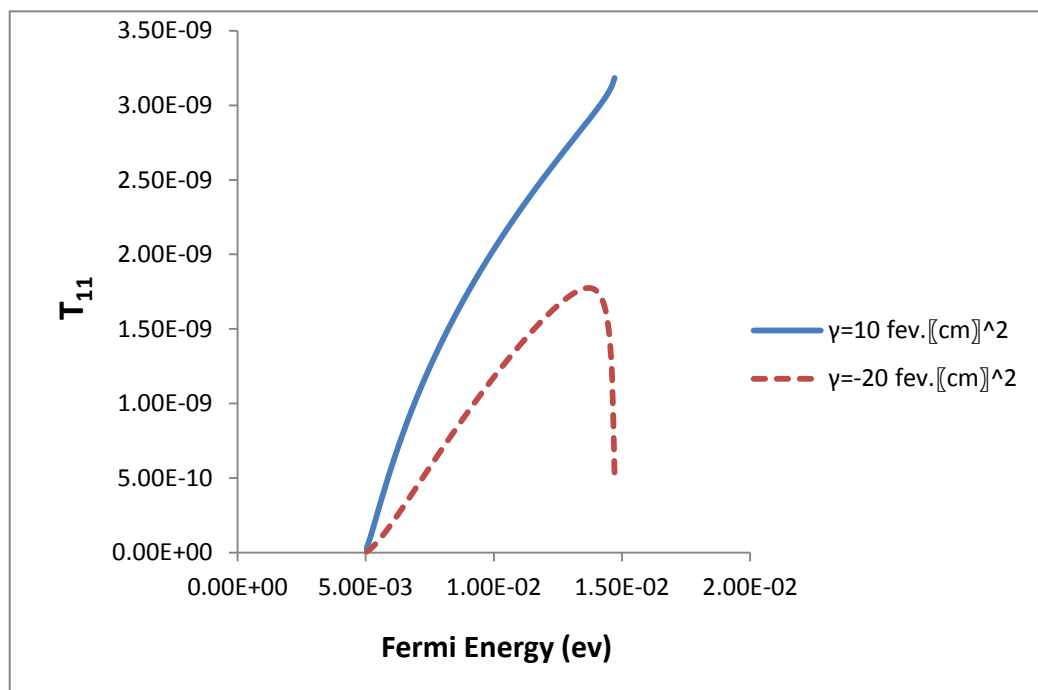
شکل (۷-۵): ضریب عبور T_{11} بر حسب تغییرات نقاط عرضی پراکننده در سیم کوانتومی دو بعدی با پراکننده تابع دلتای دافعه ($\gamma = 10 \text{ f. ev. cm}^2$) در تراز انرژی دوم و در حالت تابش مستقیم

همان طور که از نمودار شکل (۷-۵) مشاهده می‌شود، ضریب عبور در تراز انرژی دوم برای اکثر نقاط به جز فاصله بسیار کوچکی اطراف نقطه تقارن، تقریباً برابر می‌باشد. ضریب عبور T_{11} ، برای این نقطه از مکان پراکننده یک شیب ناگهانی از خود نشان می‌دهد که در این مکان تقریباً عبوری نداریم.

۳-۵ بررسی مسئله تراپرد و رسانندگی در حالتی که امتداد قطبش میدان تابش عمود بر راستای

سیم کوانتومی باشد

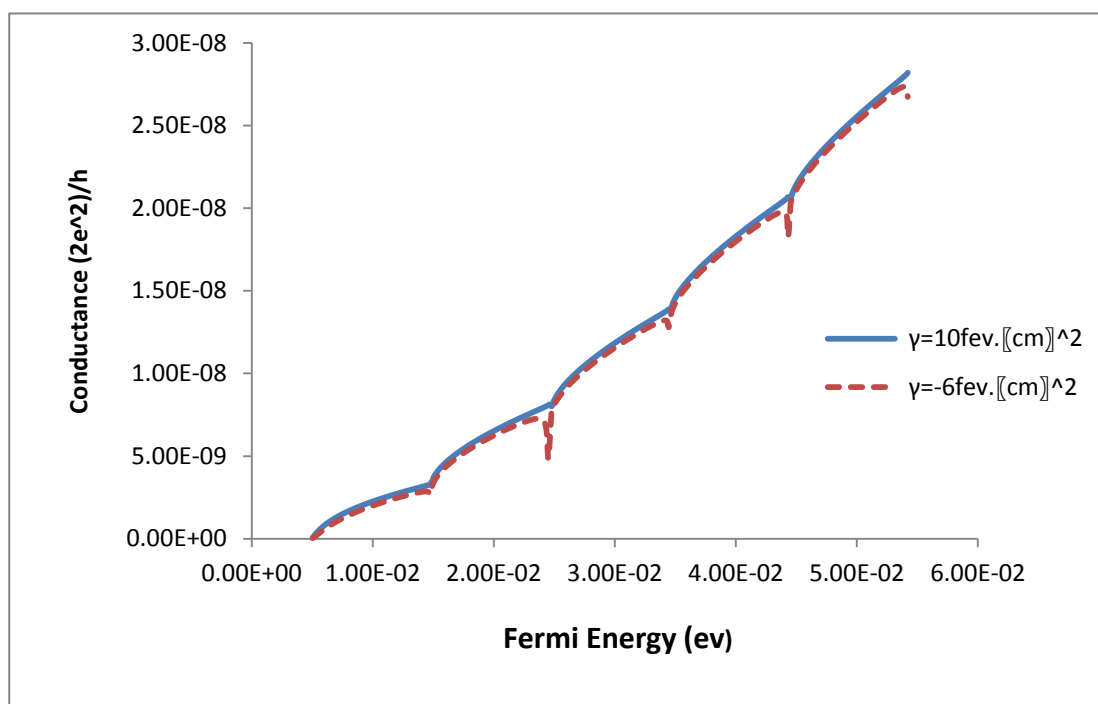
در قسمت دوم از تحقیقی که انجام داده ایم، جهت تابش را عمود بر راستای سیم و در راستای پتانسیل محدودکننده، γ قرار دادیم. مجددا نمودارهای قسمت اول این فصل را برای این شرایط تابش تکرار می کنیم.



شکل (۸-۵): احتمال عبور T_{11} بر حسب تابعی از انرژی فرمی از میان نقص تابع دلتا در سیم کوانتومی دو بعدی در حالت تابش عمودی در بازه انرژی E_1-E_2

شکل (۸-۵) احتمال عبور T_{11} را بر حسب تابعی از انرژی فرمی از میان نقص تابع دلتا به ازای دو شدت مختلف $\gamma = 10 \text{ fev. cm}^2$ و $\gamma = -20 \text{ fev. cm}^2$ نشان می دهد. پراکنده در فاصله $y_i = -\frac{1}{12}W$ قرار دارد. میزان ضریب عبور با افزایش انرژی نسبت مستقیم دارد. با مقایسه نمودارهای شکل (۲-۵) و (۸-۵) مشاهده می شود که ضریب عبور، زمانی که راستای قطبش میدان

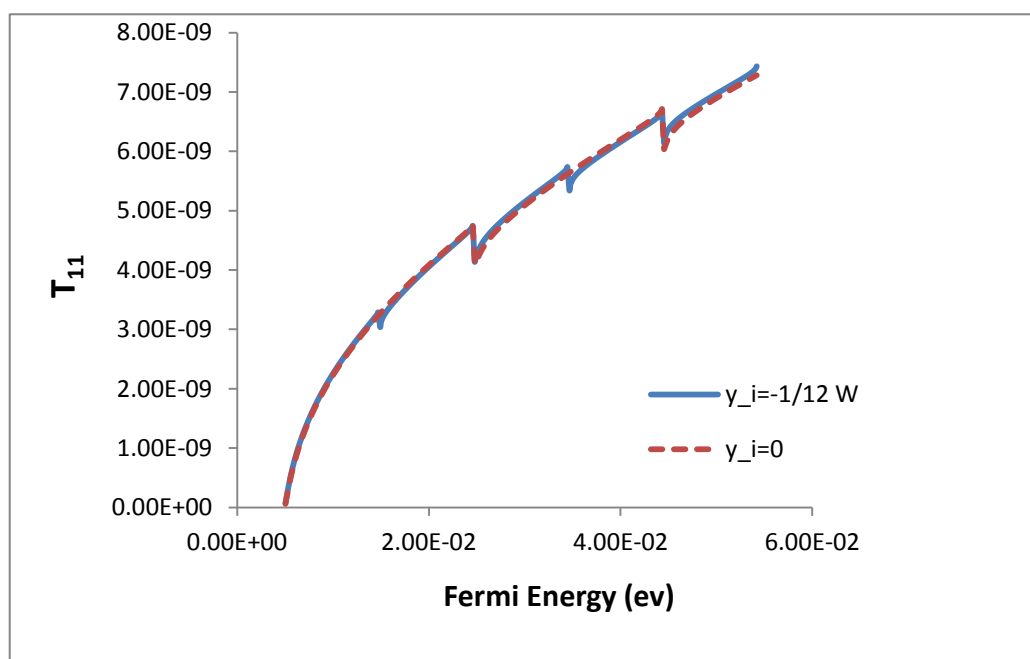
تابش در امتداد موازی با محور سیم باشد بزرگ‌تر از ضریب عبور در حالتی است که قطبش میدان تابش در امتداد عمود بر محور سیم باشد. دلیل آن می‌تواند به خاطر نیروی پاندروموتیو^۱ باشد. انرژی که الکترون‌ها از تابش میدان لیزر در حالت تابش موازی با راستای سیم کسب می‌کنند باعث می‌شود تا بتوانند اندکی در راستای آزاد سیم (امتداد محور x) جابجا شوند، اما اگر همین مقدار انرژی زمانی که امتداد قطبش میدان تابش در راستای محور y (عمود بر محور سیم) باشد، به الکترون‌ها داده شود، میزان جابجایی آن‌ها به خاطر پتانسیل محدود کننده‌ای که در راستای محور y (عمود بر محور سیم) قرار دارد بسیار ناچیز خواهد بود [۳۰]. در شکل (۵-۹) نمودار رسانندگی دستگاه را بر حسب تابعی از انرژی فرمی برای هر دو حالت پراکننده تابع دلتا جاذبه و دافعه به ازای صد مد رسم شده است.



شکل (۵-۹): نمودار رسانندگی بر حسب انرژی فرمی از میان نقص تابع دلتا در سیم کوانتومی دو بعدی در حالت تابش عمود با راستای سیم

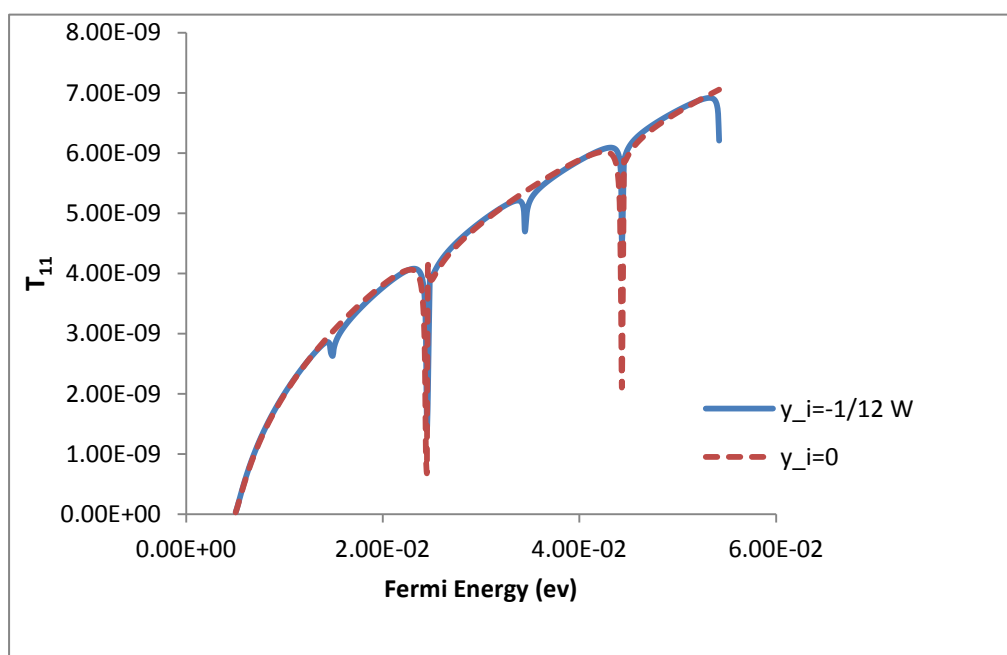
¹ Ponderomotive

در شکل (۹-۵) مشابه قسمت اول فصل مکان ناخالصی را در فاصله $y_i = -\frac{1}{12}W$ قرار دادیم و رسانندگی را به ازای پراکننده دافعه (خطوط پر) با شدت $\gamma = 10 f.ev.cm^2$ و پراکننده جاذبه (خط چین) با شدت $\gamma = -6 f.ev.cm^2$ بررسی کردیم. همان طور که ملاحظه می‌شود با افزایش انرژی میزان رسانندگی افزایش پیدا می‌کند. در حالت تابش عمودی، کنار نوارهای اپتیکی تاثیر زیادی بر ترابرد و رسانندگی الکترون‌ها ندارد به همین خاطر پله‌های ریزی که در حالت تابش موازی با راستای سیم در شکل (۳-۵) مشاهده می‌شد، وجود ندارد. همچنین رسانندگی در حالت دافعه و جاذبه به خاطر گسیل و جذب فوتون متفاوت می‌باشد. مشابه با قسمت قبل، اثر نقاط عرضی مکان پراکننده تابع دلتا را روی ضریب عبور بررسی کردیم. در این قسمت سعی کردیم تا نشان دهیم که ضریب عبور و رسانندگی به مکانی که در آن پراکننده واقع شده است وابسته می‌باشد. در شکل زیر ما ضریب عبور را به ازای دو مکان مختلف برای پراکننده رسم کرده ایم.



شکل (۱۰-۵): احتمال عبور T_{11} بر حسب تابعی از انرژی فرمی از میان پتانسیل تابع دلتا دافعه با شدت $\gamma = 10 f.ev.cm^2$ در حالت تابش عمودی

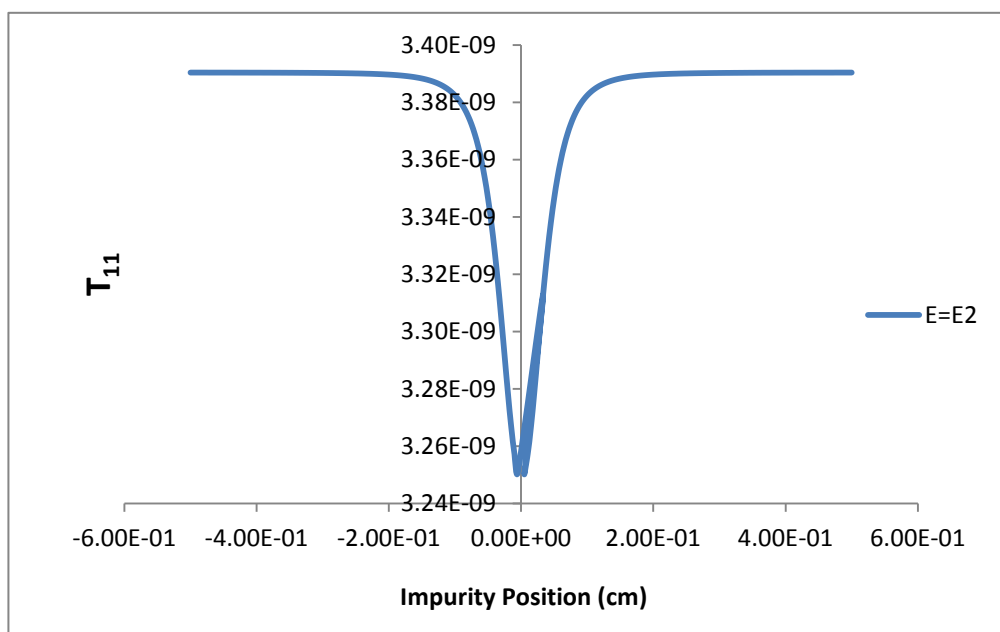
خطوط پر مربوط به مکانی است که پراکننده در فاصله $y_i = -\frac{1}{12}W$ واقع شده است و خط چین ها مربوط به مکانی است که پراکننده در مرکز سیم واقع شده است. زمانی که پراکننده در فاصله $y_i = -\frac{1}{12}W$ واقع شده باشد، نمودار ضریب عبور در هر زیرنوار انرژی یک شیب رو به پایین دارد و بلافاصله شیب افزایشی به خود می‌گیرد. اما زمانی که پراکننده در مرکز سیم واقع شده باشد، در کمینه زیر نوارهای زوج هیچ حرکت رو به پایینی از خود نشان نمی‌دهد. بنابراین زمانی که پراکننده در این مکان واقع شده باشد همه مدهای نرمال زوج ناپدید می‌شوند. بنابراین ثابت های جفت شدگی زوج مربوط به آنها $S_{22} = S_{44} = \dots = 0$ خواهد شد و این بدین معنی است که احتمال اشغال الکترون در هر کدام از مدهای ناپایدار زوج صفر خواهد شد و الکترون ها اطراف پراکننده در این مدها، ظاهر نخواهند شد. با این وجود الکترون ها می‌توانند در مدهای ناپایدار فرد ظاهر شوند. همچنین اگر نمودار فوق را برای پراکننده تابع دلتا جاذبه با همان شرایط فوق رسم کنیم:



شکل (۱۱-۵): احتمال عبور T_{11} بر حسب تابعی از انرژی فرمی از میان پتانسیل تابع دلتا دافعه با شدت $\gamma = -6 f \cdot \text{ev} \cdot \text{cm}^2$ در حالت تابش عمودی

با توجه به نمودار شکل (۱۱-۵) در حالت پراکننده تابع دلتا جاذبه، زمانی که پراکننده در فاصله

$\gamma_i = -\frac{1}{12}W$ واقع شده باشد، در هر کمینه زیرنوار انرژی، افت و خیزهای ناگهانی و یا حالت‌های شبه پیوندی مشاهده می‌شود، اما زمانی که پراکننده در مرکز سیم قرار گرفته باشد $\gamma_i = 0$ ، حالت‌های شبه پیوندی در کمینه زیرنوارهای زوج E_2, E_4, \dots مشاهده نمی‌شوند. این موضوع مربوط می‌شود به ناپدید شدن مدهای ناپایدار زوج، زمانی که پراکننده در این مکان واقع شده باشد. در شکل (۵-۱۲) ما نمودار ضریب عبور را بر حسب تغییرات مکان پراکننده برای یک تراز انرژی مشخص (E_2) رسم کرده ایم.



شکل (۵-۱۲): احتمال عبور T_{11} بر حسب تغییرات نقاط عرضی پراکننده در سیم کوانتومی دو بعدی با پراکننده تابع دلتای دافعه ($\gamma = 10f \cdot ev \cdot cm^2$) در تراز انرژی دوم و در حالت تابش عمودی

نمودار شکل (۵-۱۲)، ضریب عبور را بر حسب تغییرات مکان پراکننده به ازای یک تراز انرژی (E_2) نشان می‌دهد. همان طور که مشاهده می‌شود، در حالت تابش عمودی ضریب عبور T_{11} ، برای نواحی که نزدیک به مرکز سیم می‌باشد، یک شیب ناگهانی از خود نشان می‌دهد. در این مکان تقریباً هیچ عبوری نداریم.

جمع بندی

در این تحقیق توجه ویژه ما به مسئله ترابرد و رسانندگی در یک سیم کوانتومی تحت تابش میدان الکترومغناطیسی، بوده است. نتایج بدست آمده حاکی از آن است که به طور کلی تابش میدان لیزر، چه در امتداد آزاد سیم باشد و چه در راستای محدودیت عرضی سیم، باعث کاهش پدیده ترابرد و در نتیجه رسانندگی در سیم کوانتومی می‌شود. زمانی که امتداد قطبش میدان تابش در راستای محور y باشد مقدار ترابرد برای یک شرایط یکسان نسبت به زمانی که امتداد قطبش میدان تابش در راستای محور آزاد سیم (راستای x) باشد کمتر است، که می‌تواند به خاطر نیروی پاندروموتیو باشد. انرژی که الکترون‌ها از نیروی پاندروموتیو تابش کسب می‌کنند، و گذارهایی که کنار نوارهای نوری در آن مشارکت دارند، اثری جز کاهش نسبی ترابرد الکترون‌ها بر جا نمی‌گذارند. همچنین از بررسی‌های انجام شده در مسئله ترابرد از پراکننده تابع دلتا این طور استنباط می‌شود که نقش پراکنندگی‌های تک فوتونی و دو فوتونی در ترابرد الکترون از نقش پراکنندگی‌های چند فوتونی بیشتر است. در اینجا مکان‌های مختلف برای پراکننده در نظر گرفته شد. نتایج بدست آمده حاکی از آن است که ترابرد الکترون در هر دو وضعیت تابش (در راستای محور x و در راستای محور y) به مکانی که در آن پراکننده واقع شده است، وابسته می‌باشد.

پیشنهادات

این تحقیق با هدف عمده بررسی ترابرد الکترون در سیم های کوانتومی تحت تابش میدان الکترومغناطیسی تراهرتز انجام گردید. به طور کلی تابش میدان لیزر باعث کاهش ترابرد و رسانندگی دستگاه می شود. در این پایان نامه مکان تابش را در ابتدای سیم کوانتومی قرار دادیم و محل پراکننده را در مرکز سیم در نظر گرفتیم. به عنوان گام بعدی می توان ترابرد را زمانی که تابش در محل پراکننده حضور دارد بررسی نمود. در بررسی پراکنندگی، شکل پتانسیل پراکننده یون ناخالصی، به شکل تابع دلتای دیراک فرض شده است. می توان اثر انواع پتانسیل های پراکنندگی مورد توجه دیگر از قبیل پتانسیل گاوسی را نیز مورد مطالعه قرار داد.

مراجع

1. Ihn, T., (2010), "*Semiconductor nanostructures quantum states and electrical Transport*", New York: Oxford University Press, pp.18-67.
2. Ivchenko, I. N., et al, (2007), "*Analytical Methods for problems of Molecular Transport*", Springer Science & Business Media, Vol.83, pp.5.
3. Vettchinkina.V, (2012), "Transport phenomena in quantum wells and wires in Presence of disorder and interaction", *Lund University*.
4. Balaguru, R. J. B., et al, (2006), "Quantum Wells, Quantum Wires, Quantum Dots, Quantum Limit of Conductance, Quantum Capacitance & Quantum HALL Effect", *NPTEL – Electrical & Electronics Engineering – Semiconductor Nanodevices*, pp.3-4.
5. Ferry, D., et al, (2009), "*Transport in nanostructure*", Cambridge University Press, pp.129.
6. Mou, Y., et al, (2008), "Electronic transport for a quantum wire partly irradiated under THZ electromagnetic wave", *Chinese Physics Letters*, Vol.20, No.6, pp.901.
7. Bagwell, P. F. (1990), "Evanescent modes and scattering in quasi-one dimensional wires", *Physical Review B*, Vol.41, No.15, pp.10354.
8. Sonawan, U. S., et al, (2013), "Analysis of electron confinement in GaN/Al_xGa_{1-x}N Quantum wire nanostructure", *Optik-International Journal for Light and Electron Optics*, Vol.124, pp.802-806.
9. Vargiamidis, V., et al, (2003), "Lippmann-schwinger equation approach to scattering in quantum wires", *physica status solidi (b)*, Vol.236, No. 3, pp.597–613.
10. Gudmundsson, V., et al, (2006), "Magnetotransport in a double quantum wire: Modeling using a scattering formalism build on Lippmann-Schwinger equation", *Physical Review B*, Vol.74, pp.125302.

11. Tang, C. S., et al, (1996), "Quantum transport in presence of a finite-range time-modulated potential", *Physical Review B*, Vol.53, pp.4838.
12. Torfason, k., (2009), "Quantum transport in the presence of a local time-periodic potential in a magnetic field ", PhD Thesis, *School of engineering and natural science*.
13. Zhang, C., (2001), "Electronic states and dielectric response of an electron gas under a quantizing magnetic field and an intense laser", *Computer Physics Communications*, Vol.142, pp.374-381.
14. Bardarson, j. H., et al, (2004), "Coherent Electronic Transport in a multimode quantum channel with Gaussian-type scatterers", *Physical Review B*, vol.70, No.24, pp.245308.
15. Cattapan.G, et al, (2002), "Coupled-channel integral equations for quasi-one-dimensional systems", *American Journal of Physics*, vol.71, No.9, pp.903-911
16. Ashcroft, N. W., et al, (1976), "Solid state physics", *Harcourt College*.
17. Hessami, P. S., (2006), "Electronic properties of semiconductor nanostructure under Terahertz Radiation", PhD Thesis, *Phys.Depart. Wollong University*.
18. Harrison, P., (2005), "*Quantum Wells, Wires and Dots theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*", Second Edition, John Wiley & Sons, pp. 263.
19. Kittel, Ch., (1996), "*Intruduction to solid state physics*", Seven Edition, John Wiley & Sons, pp.228.
۲۰. پی پول.چ، جی.اونسزف، (۱۳۹۰)، "مقدمه ای بر نانوفناوری"، تقوی نیا، ن، موسسه انتشارات علمی دانشگاه صنعتی شریف.
21. Sirtori, C., (2002), "Applied physics: Bridge for the terahertz gap", *Nature*, Vol.417, No.6885, pp.132-133.
22. Williams, G. P., (2006), "Filling the THz gap-high power sources and applications", *Repports on Progress in Physics*, Vol.69, No.2, pp.301-326.
23. Neil, R., et al, (2004), "Evollution of the high power thz source program at Jefferson lab", *Infrared physics & technology*, Elsevier, Vol. 45, No.5, pp.389-391.

24. Cardona, M., et al, (2011), "Optical properties of semiconductors", *published by BN, pp.205-301.*

25. Ahmed, S. N., (2007), "*Physics and engineering of radaition detection*", Academic Press Inc. Published by Elsevier.

26. Barbottine, G., et al, (1999), "*Instabilities in silicon devices Silicon Passivation and Related Instabilities*", Elsevier science B.V.

27. Braun, D., et al, (1997), "Level curvatures and conductance: A numerical study of the thouless relation", *Physical Review B, Vol.55, No.12, pp.7557.*

28. Band, Y. B., et al, (2013), "*Quantum mechanics with application to nanotechnology and information science*", Academic Press.

۲۹. ساکورایی.ج، (۱۳۹۰)، "مکانیک کوانتومی مدرن"، علیمحمدی.م، مشفق.ج، انتشارات دانشگاه تهران.

30. Ponderomotive force. (2014, May 5). In *Wikipedia, The Free Encyclopedia*. https://en.wikipedia.org/wiki/Ponderomotive_force

Abstract

Operation of terahertz radiation based on a detailed understanding of how the consequences of their interactions with components and structures at the nanoscale. In this context, one of the concerns, check terahertz radiation electron transport through a quantum wire as one of the components is photodetectors and imaging devices. Therefore, the study of electron transport through quantum wire terahertz radiation will be important. In this study, a two-dimensional quantum wire with limited space under the effect of transverse electromagnetic field has been considered. Lippmann-Schwinger equation used to calculate the electron transport. To calculate the conductivity of the device we also Landavvr relationship. The results showed that the rate of transport of electrons in the presence of radiation is reduced. The results indicate the dominance of single-photon scattering and two-photon scattering of photons on the role of higher rank.

Keywords: Transport of electron, Quantum wire, Nano-structure, Terahertz Radiation, Conductivity, Lippman- Schwinger.



University of Shahrood

Faculty of physics

Master of science Thesis

**Scattering in Quantum Wires under Electromagnetic
Radiation**

Bahareh Asgharpoor

Supervisor(s):

Dr. Saeid Hessmi Pilehrood

Dr. Tayebah Movlarooy

July 2015

