

حاشا  
الرحمن الرحيم





دانشکده فیزیک و مهندسی هسته‌ای

رشته فیزیک، گرایش حالت جامد

پایان نامه کارشناسی ارشد

# ترابرد الکترونی از میان یک نقطه کوانتومی محبوس در یک سیم کوانتومی

نگارنده: زهره سعیدی

استاد راهنما

دکتر سعید حسامی پيله رود

استاد مشاور

دکتر محمدباقر رحمانی

شهریور ۱۳۹۶



شماره:  
تاریخ:

باسم تعالی



مدیریت تحصیلات تکمیلی

فرم شماره (۳) صورتجلسه نهایی دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد

با نام و یاد خداوند متعال، اثریانی جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد خام زهره سعیدی با شماره دانشجویی ۹۳۰۹۲۸۴ رشته فیزیک گرایش حالت جامد تحت عنوان نوآوری الکترونی از میان یک نقطه کوانتومی واقع در یک سیم کوانتومی که در تاریخ ۱۳۹۶/۶/۱۲ با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه سعیدی شاهرود برگزار گردید. به شرح ذیل اعلام می گردد:

قبول (با امتیاز ۱۸/۷ درجه نصاب)  مردود

نوع تحقیق: نظری  عملی

عضو هیأت داوران	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	امضاء
۱- استاد راهنمای اول	دکتر سعید حسامی پیله رود	استادیار	
۲- استاد راهنمای دوم			
۳- استاد مشاور	دکتر محمد باقر رحمانی	استادیار	
۴- نماینده تحصیلات تکمیلی	دکتر ایمان حسینی	استادیار	
۵- استاد عمیق اول	مرتضی ایزدی فرد	دانشیار	
۶- استاد عمیق دوم	دکتر رشید ولی	استادیار	

نام و نام خانوادگی رئیس دانشکده: سعیدی مومنی

تاریخ و امضاء و مهر دانشکده:



توضیح: در صورتی که کسی مردود شود حداکثر یکبار دیگر (در مدت ۴ ماه بعد از مردود شدن) مجدد نباید رود. (از ۴ ماه بعد برگرداند)



تقدیم با بوسه بر دستان پدرم: به او که نمی‌دانم  
از بزرگیش بگویم یا سخاوت، سکوت، مهربانی...  
تقدیم به مادر عزیزتر از جانم: مادرم دریای بی  
کران فداکاری و عشق که وجودم برایش همه رنج  
و وجودش برایم همه مهر.  
تقدیم به همسرم: که سایه مهربانیش سایه سار  
زندگیم می‌باشد، او که اسوه صبر و تحمل بوده و  
مشکلات مسیر را برایم تسهیل نمود.  
تقدیم به خواهرانم: که وجودشان شادی بخش و  
صفایشان مایه آرامش من است.





## سپاس‌گزاری

با تشکر و سپاس بی حد به درگاه باری تعالی که نخستین و بزرگترین یاریگر بندگان در آغاز و پایان هر کاری است. و با تقدیر و تشکر از استاد محترم جناب آقای دکتر حسامی پيله رود که به حق مرا در طول دوره تحصیل در مقطع کارشناسی ارشد و نیز طی مراحل مختلف این تحقیق، صبورانه و مشفقانه راهنمایی کرده و از محضر علمیشان مستفیض گردانیده‌اند. همچنین با تشکر از جناب آقای دکتر رحمانی که با قبول زحمت مشاوره مرا در انجام این کار یاری نمودند.

زهرة سعیدی

شهریور ۱۳۹۶



## تعهد نامه

اینجانب زهره سعیدی دانشجوی کارشناسی ارشد رشته فیزیک فیزیک و مهندسی هسته‌ای دانشگاه شاهرود، نویسنده پایان نامه با عنوان **ترابرد الکترونی از میان یک نقطه کوانتومی محبوس در یک سیم کوانتومی**، تحت راهنمایی سعید حسامی پيله رود متعهد می‌شوم:

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

زهره سعیدی

شهریور ۱۳۹۶

### مالکیت نتایج و حق نشر

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



## چکیده

مطالعه رسانندگی الکتریکی در نانوساختارها یکی از اساسی ترین مسائل در فیزیک نانوساختارها است. در سال های اخیر، علاقه و توجه فیزیکدانان بسیاری به رسانایی در سیم های کوانتومی و نقطه های کوانتومی معطوف شده است. در اکثر موارد برای محاسبه رسانندگی از روش لاندائور – بوتیکر استفاده می شود. این روش بیان می کند که رسانندگی یک سیستم تک کاناله در دمای صفر و بایاس صفر درست  $2e^2/h$  برابر ضریب رسانش است. در این تحقیق اثر یک پتانسیل پراکندگی گوسی شکل ناشی از یک نقطه کوانتومی موجود در دستگاه سیم کوانتومی را بر روی ترابرد الکترونی سیستم مورد بررسی قرار داده ایم. به منظور مطالعه رسانایی چنین دستگاهی ابتدا می بایست به محاسبه ترابرد الکترونی آن در حضور ناخالصی که باعث پراکندگی الکترون ها می شود پرداخت. برای این منظور با استفاده از رهیافتی مبتنی بر روش لیپمن شوینگر به بررسی سیستم پرداخته و تابع موج آن را که در حضور ناخالصی شامل مجموع موج فرودی بعلاوه جمله ای که نشان دهنده پراکندگی است را محاسبه نموده ایم. سپس با استفاده از رابطه لاندائور بوتیکر که ارتباط بین رسانندگی و ضرایب عبور را بیان می کند، رسانندگی دستگاه محاسبه می شود. نهایتاً با کمک محاسبات عددی به بررسی رسانندگی سیستم تحت تاثیر عواملی چون مکان ناخالصی، قدرت پتانسیل پراکندگی و ... پرداخته ایم.

کلمات کلیدی: سیم کوانتومی، رسانندگی، ترابرد الکترونی، پراکندگی، روش لیپمن – شوینگر، لاندائور – بوتیکر



## لیست مقالات مستخرج از پایان نامه

۱. سعیدی ز، حسامی پیله رود س، رحمانی م، "ترابرد الکترونی از میان یک نقطه کوانتومی واقع در یک سیم کوانتومی"، کنفرانس فیزیک ایران، ۶ تا ۹ شهریور ۱۳۹۶، دانشگاه یزد، ایران.





# فهرست مطالب

یظ	فهرست تصاویر
۱	۱ مقدمه و مفاهیم
۱	۱.۱ مقدمه
۳	۲.۱ مروری بر مقالات نوشته شده در زمینه محاسبه ترابرد و رسانندگی
۷	۲ بلورهای نیمرسانا
۷	۱.۲ مقدمه
۷	۲.۲ بلورهای نیمرساناها
۱۰	۳.۲ روش تهیه نانوساختارها
۱۱	۴.۲ اثرات محدودیت کوانتومی در نانوساختارها
۱۲	۵.۲ چاه کوانتومی
۱۳	۱.۵.۲ ابر شبکه
۱۴	۶.۲ سیم کوانتومی
۱۵	۷.۲ نقطه کوانتومی
۱۵	۸.۲ چگالی حالتها در نانوساختارها
۱۶	۱.۸.۲ چگالی حالتها در چاه کوانتومی
۱۷	۲.۸.۲ چگالی حالتها در سیم کوانتومی
۱۸	۳.۸.۲ چگالی حالتها در نقطه کوانتومی
۱۸	۹.۲ جرم موثر
۲۱	۳ ترابرد الکترونی در نانوساختارها
۲۱	۱.۳ مقدمه
۲۱	۲.۳ ترابرد الکترونی
۲۲	۳.۳ معادله ترابرد بولتزمن
۲۴	۴.۳ رهیافت ماتریس چگالی
۲۵	۵.۳ رهیافت کوبو
۲۶	۶.۳ تابع گرین و معادله لیپمن- شوینگر

۳۰	پراکندگی از پتانسیل دلتای دیراک	۷.۳
۳۳	معادله لاندائور بوتیکر	۸.۳
۳۵	<b>۴ ترابرد الکترونی در سیم کوانتومی</b>	
۳۵	مقدمه	۱.۴
۳۵	حالت‌های الکترونی پراکنده شده تحت تاثیر پتانسیل پراکندگی	۲.۴
۳۷	تقریب بورن	۳.۴
۳۷	حالت‌های الکترونی تحت تاثیر پتانسیل نقطه کوانتومی	۴.۴
۴۲	بررسی رسانندگی سیم کوانتومی در حضور پتانسیل پراکندگی گوسی شکل	۵.۴
۴۳	اثر قدرت پتانسیل پراکندگی $V_a$ بر روی رسانندگی	۶.۴
۴۴	اثر پهنای پتانسیل پراکندگی بر روی رسانندگی	۷.۴
۴۶	اثر فرکانس مشخصه پتانسیل محدود کننده سهموی بر روی رسانندگی	۸.۴
۴۷	بررسی ترابرد سیم کوانتومی در یک زیرنوار بر حسب مکان موثر ناخالصی	۹.۴
۴۹	<b>۵ بحث و نتیجه گیری</b>	
۴۹	مقدمه	۱.۵
۴۹	نتایج	۲.۵
۵۰	جمع بندی	۳.۵
۵۰	پیشنهادات	۴.۵
۵۱	<b>مراجع</b>	
۵۵	<b>واژه‌نامه فارسی به انگلیسی</b>	
۵۷	<b>واژه‌نامه انگلیسی به فارسی</b>	

# فهرست تصاویر

۸	۱.۲ ساختار نواری عناصر رسانا، نیمرسانا، نارسانا
	۲.۲ انواع گاف نواری. (الف) گاف نواری مستقیم ( $GaAs$ ) ، (ب) گاف نواری غیر مستقیم
۹	( $Si$ )
	۳.۲ نیمرسانای غیرذاتی . ترازهای پذیرنده به فاصله $E_A$ از لبه نوار ظرفیت و ترازهای
۹	دهنده به فاصله $E_D$ از لبه نوار رسانش
۱۲	۴.۲ چاه کوانتومی منفرد
۱۳	۵.۲ ساختار نواری یک چاه کوانتومی منفرد
۱۴	۶.۲ آرایش اتمها در یک ابرشبکه $(AlAs)_2(GaAs)$ در جهت $(001)$
۱۴	۷.۲ سیم کوانتومی
۱۵	۸.۲ نقطه کوانتومی
	۹.۲ چگالی حالتها در نیمرسانای کپه‌ای. (الف) محاسبه انرژی در فضای $k$ بین سطوح
۱۶	$E$ و $E + dE$ (ب) وابستگی چگالی حالتها به انرژی
	۱۰.۲ چگالی حالتها در چاه کوانتومی. (الف) محاسبه انرژی در فضای $k$ بین سطوح $E$ و
۱۷	$E + dE$ (ب) وابستگی چگالی حالتها به انرژی در چاه کوانتومی
	۱۱.۲ چگالی حالتها در سیم کوانتومی. (الف) محاسبه انرژی در فضای $k$ بین $E$ و $E + dE$
۱۷	(ب) وابستگی چگالی حالتها به انرژی در سیم کوانتومی
۱۸	۱۲.۲ چگالی حالتها در نقطه کوانتومی بر حسب انرژی
۱۹	۱۳.۲ نمایش جرم موثر الکترون در بلور $GaAs$ و جرم الکترون در خلا
	۱.۳ رابطه پراکندگی برای مدهای انتشاری (خط ممتد) و $E > E_n$ برای مدهای ناپایدار
۲۹	(خط چین) $E < E_n$
۲۹	۲.۳ طرحی برای تابع موج خروجی $q = k_{n'} \sqrt{1 - \frac{i\varepsilon}{k_{n'}^2}}$
	۳.۳ الکترون فرودی از سمت چپ توسط ناخالصی موجود در سیم کوانتومی دو بعدی
۳۱	پراکنده می‌شود. طول سیم بسیار بلند و عرض آن $W = 30nm$ می‌باشد.
۳۲	۴.۳ احتمال انتقال $T_{11}$ به عنوان تابعی از انرژی فرمی در بازه انرژی $E_1 - E_2$
	۵.۳ رسانندگی به عنوان تابعی از انرژی فرمی از پتانسیل پراکندگی حاصل از تابع دلتا در
۳۲	دستگاه سیم کوانتومی

۳۳	سیستم دوکاناله	۶.۳
۴۲	۱.۴ رسانندگی به عنوان تابعی از انرژی فرمی از پتانسیل پراکندگی حاصل از نقطه کوانتومی با قدرت پتانسیل دافعه $V_{a_0} = 1.5 meV$ و $\beta = 1.5 \times 10^{12}$ محبوس در دستگاه سیم کوانتومی و با فرکانس پتانسیل محدودکننده سهموی $\omega_0 = 4\pi \times 10^{12}$ رسم شده است.	۴۲
۴۳	۲.۴ اثر قدرت پتانسیل پراکندگی نقطه کوانتومی بر روی رسانندگی دستگاه سیم کوانتومی. منحنی خط - نقطه مربوط به $V_{a_0} = 1.5 meV$ و منحنی خطوط ممتد مربوط به $V_{a_0} = 2.5 meV$ و منحنی نقطه چین مربوط به $V_{a_0} = 4.5 meV$ است.	۴۳
۴۴	۳.۴ اثر موضع پتانسیل نقطه کوانتومی بر روی دامنه عبور دستگاه سیم کوانتومی. منحنی خط - نقطه مربوط به $V_{a_0} = 1.5 meV$ و منحنی خطوط ممتد مربوط به $V_{a_0} = 2.5 meV$ و منحنی نقطه چین مربوط به $V_{a_0} = 4.5 meV$ است.	۴۴
۴۵	۴.۴ اثر پهنای پتانسیل پراکندگی حاصل از نقطه کوانتومی محبوس در دستگاه سیم کوانتومی بر روی رسانندگی دستگاه سیم کوانتومی. منحنی خط چین مربوط به $\beta = 1 \times 10^{12}$ و منحنی خط نقطه مربوط به $\beta = 0.6 \times 10^{12}$ و منحنی خطوط ممتد مربوط به $\beta = 0.5 \times 10^{12}$ است.	۴۵
۴۵	۵.۴ اثر پهنای پتانسیل پراکندگی حاصل از نقطه کوانتومی محبوس در دستگاه سیم کوانتومی بر روی احتمال عبور $T_{11}$ دستگاه سیم کوانتومی. منحنی خط چین مربوط به $\beta = 1.2 \times 10^{12}$ و منحنی خطوط ممتد مربوط به $\beta = 1.1 \times 10^{12}$ و منحنی خط نقطه مربوط به $\beta = 1.0 \times 10^{12}$ است.	۴۵
۴۶	۶.۴ اثر $\omega_0$ بر روی رسانندگی دستگاه سیم کوانتومی. منحنی خط نقطه مربوط به $\omega_0 = 2\pi \times 10^{12}$ و منحنی خطوط ممتد مربوط به $\omega_0 = 8\pi \times 10^{12}$ و منحنی خط چین مربوط به $\omega_0 = 1.0\pi \times 10^{13}$ است.	۴۶
۴۷	۷.۴ اثر $\omega_0$ بر روی احتمال عبور $T_{11}$ دستگاه سیم کوانتومی بر حسب مکان پراکنده. منحنی خط چین مربوط به $\omega_0 = 4\pi \times 10^{12}$ و منحنی خطوط ممتد مربوط به $\omega_0 = 5\pi \times 10^{12}$ و منحنی خط نقطه مربوط به $\omega_0 = 6\pi \times 10^{12}$ است.	۴۷
۴۸	۸.۴ اثر مکان پتانسیل پراکندگی بر روی رسانندگی $T_{11}$ دستگاه سیم کوانتومی بر حسب انرژی فرمی. منحنی خط چین مربوط به $b = 1.0 nm$ و منحنی خطوط ممتد مربوط به $b = 1.5 nm$ و منحنی خط نقطه مربوط به $b = 5.0 nm$ است.	۴۸

# فصل ۱

## مقدمه و مفاهیم

### ۱.۱ مقدمه

امروزه با پیشرفت نانو تکنولوژی و ورود آن به تمام زمینه‌های علمی از جمله زیست شناسی، فیزیک، شیمی، اصول هندسی طراحی و ... باعث اهمیت بیش از پیش نانو ساختارها و طبیعتا ورود گسترده آنها در تمامی زمینه‌های زندگی بشر شده است. همچنین با پیشرفت صنایع و ابزارآلات الکترونیکی و اپتیکی به دنبال پیشرفت فناوری نانو، اهمیت قطعات نیمه رسانا بر کسی پوشیده نیست. کاربردهای فراوان نیمه رساناها در ابزارهای الکترونیکی و اپتوالکترونیکی در دهه‌های اخیر، توجه ویژه‌ای را به سمت این مواد جلب کرده است و باعث بروز تحقیقات تئوری و تجربی زیادی در این زمینه شده است. به طوریکه امروزه اساس اکثر دستگاه‌های الکترونیکی، اپتوالکترونیکی و نیز دستگاه‌های پردازش اطلاعات را نیمه رساناها تشکیل می‌دهند.

فناوری نانو به معنی کاربرد قطعات در ابعاد نانو است. اولین جرقه نانو در سال ۱۹۶۰ توسط ریچارد فاینمن<sup>۱</sup> ملقب به پدر علم نانو طی یک سخنرانی با عنوان فضای زیادی در پایین وجود دارد<sup>۲</sup> زده شد [۱].

با کاهش ابعاد یک بلور کپه‌ای<sup>۳</sup> در ابتدا تغییر خاصی در رفتار آن مشاهده نمی‌شود اما با رسیدن به ابعادی در حد میکرومتری به لایه های نازک و در ابعاد نانو (۱۰۰-۱ نانومتر) به نانو ساختارها دست

---

<sup>۱</sup>Richard Feynman

<sup>۲</sup>There is a plenty of room at the bottom

<sup>۳</sup>bulk

می‌یابیم که دارای خواص فیزیکی و شیمیایی متفاوتی از بلور کپه‌ای می‌باشند. در اینجا ما علاقمند به مطالعه نانوساختارها می‌باشیم که رفتار آنها به دلیل مقید شدن الکترون‌ها در بلور توسط قوانین مکانیک کلاسیک قابل توضیح نیستند. در واقع با کوچک شدن ذرات به اندازه شعاع اکسیتونی<sup>۴</sup> رفتار کوانتومی آنها بهتر آشکار می‌شود و برای بررسی رفتار آنها بایستی از قوانین مکانیک کوانتومی استفاده کرد. چنین ساختارهایی با عنوان نانوساختار معرفی می‌شوند. به طور کلی نانوساختارها با توجه به تعداد ابعاد کاهش یافته به سه دسته چاه کوانتومی، سیم کوانتومی و نقطه کوانتومی تقسیم می‌شوند. از خواص فیزیکی مهم نانوساختارها می‌توان به افزایش نسبت مساحت سطح به حجم آنها اشاره کرد. بنابراین رفتار سطحی بر رفتار حجمی ماده غلبه می‌کند. به عنوان مثال خواص نوری و الکترومغناطیسی ماده که تحت تاثیر اندازه هستند تغییر خواهند کرد [۱].

در میان نانوساختارها، نانوساختارهای نیم‌رسانا نسبت به نانوساختارهای فلزی به دلیل خواص بالقوه‌ای که نیم‌رساناها در زمینه‌های الکتریکی و اپتیکی دارند پیشرفت گسترده‌تری داشته‌اند. به طوری که نانوساختارهای نیم‌رسانا در صنایع الکتریکی و اپتیکی به تولید انبوه رسیدند و بخش عظیمی از مطالعات نظری و پژوهش‌های تجربی را به خود اختصاص می‌دهند. در زمینه‌های تجربی دانشمندان به رشد نانوساختارها، ترکیب آنها با یکدیگر و تولید ساختارهای مرکب از جمله  $GaAs/AlGaAs$  و همچنین تولید ترانزیستورهای کم نوفه با قابلیت تحرک الکترونی بالا، سلولهای خورشیدی چند ساختاری به منظور تامین انرژی، انواع لیزرها، حافظه‌ها، دیودها، آشکارسازها و ... می‌پردازند. ساخت این نانوساختارها بر پایه رشد بلورهای مصنوعی، ابر شبکه‌ها و نیز روش‌های لیتوگرافی است. در زمینه نظری نیز رفتار نانوساختارها در حضور میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی و یا ترکیبی از هر دوی آنها همچنین تاثیر پتانسیل‌های پراکنده و وجود ناخالصی بر روی خواص آنها را مورد مطالعه قرار می‌دهند. از جمله نانوساختارهای نیم‌رسانا که بسیار مورد مطالعه قرار می‌گیرند سیم‌های کوانتومی هستند. در واقع یک سیم کوانتومی نانوساختاری با یک درجه آزادی است که در آن الکترون‌ها فقط در طول سیم آزادانه حرکت می‌کنند و در دو جهت دیگر محدود هستند. ساخت سیم کوانتومی در ابعاد نانومتری هم از جهت تکنولوژی و هم از جهت علمی بسیار مورد علاقه می‌باشد، زیرا در ابعاد نانومتری خواص غیر معمولی از خود بروز می‌دهند و نسبت طول سیم به قطر آن بسیار زیاد می‌باشد. با تکنولوژی امروز اندازه و شکل سیم‌های کوانتومی بسیار دقیق‌تر کنترل می‌شوند. سیم‌های کوانتومی در ابعاد و اشکال مختلفی وجود دارند که از بین آنها می‌توان به سیم‌های کوانتومی با سطح مقاطع دایروی، مستطیلی و مربعی اشاره کرد [۲].

نکته دیگری که در مورد سیم کوانتومی مورد اهمیت است وابستگی رسانندگی به ابعاد آن است. به دلیل وابستگی خواص سیم کوانتومی به شرایط محیطی از قبیل شدت نور، رطوبت، وجود گازها و ... سیم‌های کوانتومی در زمینه‌های حسگری جایگاه ویژه‌ای دارند. همچنین می‌توان از سیم‌های کوانتومی که امروزه در ساخت تراشه‌های رایانه‌ای استفاده می‌شود برای تشخیص سلول‌های بیمار استفاده کرد این نانو سیم‌ها به محض رسیدن به سلول بیمار با توجه به خاصیت نورتابی که از اشعه ماورای بنفش تا نور مرئی دارند چنانچه در مسیر خود به یک عامل بیماری‌زا یا ماده سمی برخورد کنند شروع به تابش

<sup>۴</sup>exciton

کرده و یک سیستم هشدار دهنده سریع را ایجاد می کنند که باعث تشخیص هرچه سریع تر بیماری و درمان آن می شود. بلندی، انعطاف پذیری و استحکام از خصوصیات ویژه سیم های کوانتومی هستند که زمینه های کاربردی زیادی را برای آنها ایجاد می کنند به عنوان مثال با کوچکتر شدن دستگاه های الکترونیکی و اپتیکی در مقیاس نانو استفاده از سیم های کوانتومی نیمرسانا جهت اتصال اجزای این قطعات به یکدیگر یکی دیگر از کاربرهای مهم سیم کوانتومی است. در چند سال اخیر مطالعه رسانش الکتریکی نقطه های کوانتومی و سیم های کوانتومی بخش عمده ای از پژوهش ها در فیزیک مزوسکوپیک را به خود اختصاص داده است. با توجه به اینکه سیم های کوانتومی به عنوان اتصال دهنده ادوات نانو الکترونیکی به یکدیگر هستند دانستن رفتار رسانش آنها در حضور ناخالصی بسیار حائز اهمیت است. برای مطالعه رفتار رسانندگی در نانوساختارها ابتدا بایستی ترابرد الکترونی آنها را بررسی کرد. در بخش زیر نمونه ای از مطالعات صورت گرفته آورده شده است.

## ۲.۱ مروری بر مقالات نوشته شده در زمینه محاسبه ترابرد و رسانندگی

فیلیپ اف بگول<sup>۵</sup> دامنه عبور جریان و رسانندگی الکتریکی را برحسب تابعی از انرژی فرمی برای الکترون های پراکنده شده از یک نقص منفرد در یک سیم کوانتومی شبه یک بعدی مورد مطالعه قرار داد. در یک هندسه محدود، شرایط مرزی پراکندگی مدهای انتشاری در سیم را به مدهای محوشونده جفت می کند. بنابراین جریان پایای بکار برده شده باعث ایجاد مدهای ناپایدار اطراف ناخالصی در سیم کوانتومی می شود. هنگامی که انرژی الکترون با انرژی هر یک از زیرنوارهای شبه یک بعدی جدید و یا حالت شبه مقید دوشکافی برابر شد، الکترون های اضافی ذخیره شده شرایط مرزی را برای مدهای انتشاری به شدت تحت تاثیر قرار می دهند. وی توانست نشان دهد که حضور مدهای ناپایدار حتی در حضور نقص های پراکندگی منجر به اثر شفافیت و یا تیرگی کامل برای مدهای انتشاری می شود [۳].

واسیلیوس<sup>۶</sup> و همکارانش با استفاده از معادله لیپمن - شوینگر دامنه پراکندگی و رسانندگی را بر حسب انرژی فرمی برای الکترون های پراکنده شده از پتانسیل دلتای دیراک دو بعدی در سیم کوانتومی محاسبه کردند. این مساله قبلا با استفاده از روش تطبیق حالت<sup>۷</sup> بررسی شده بود و نتیجه به این شکل بود که ترابرد الکترونی در کف هر زیرنوار مستقل از مکان پراکننده است، در حالیکه این مساله به روش لیپمن شوینگر نشان داد که گذار کامل که به اثر شفافیت معروف است در کمینه هر زیرنوار شدیداً وابسته به مکان پراکننده (مکان نقص) می باشد [۴].

جنز باردارسون<sup>۸</sup> و همکارانش ترابرد همدوس الکترون از میان یک کانال کوانتومی در حضور یک پتانسیل پراکننده را با استفاده از روش لیپمن شوینگر با تقریب ماتریس انتقال بررسی کردند. سیستم مورد بررسی آنها شامل یک سیم کوانتومی تحت تاثیر پتانسیل پراکننده گوسی شکل که می توانست به شکل ناخالصی منفرد، یک نقطه کوانتومی و یا شکلی پیچیده تر در سیم کوانتومی باشد. مشاهدات آنها

<sup>۵</sup>Philip F.Bagwell

<sup>۶</sup>Vassilios Vargiamidis

<sup>۷</sup>matching method

<sup>۸</sup>Jens Hjorleifur Bardarson

شامل فرو رفتگی‌های بسیار عمیق در نمودار رسانندگی بر حسب انرژی فرمی در حضور پتانسیل پراکندگی جاذبه و همچنین وجود ماکزیمم‌هایی در نمودار رسانندگی بود که این ماکزیمم‌های نمودار رسانندگی در اثر یکی شدن انرژی الکترون فرودی با یک تراز انرژی در نقطه کوانتومی بود. همچنین رسانندگی را در حضور یک پتانسیل نامتقارن بررسی کرده و زمانی که پتانسیل موازی با راستای سیم کوانتومی بود، دو دره با شیب تند و عمیق در یک زیر نوار مشاهده کردند که آن را به صورت حالت‌های شبه مقید ناشی از مد ناپایدار توصیف نمودند [۵].

همانطور که اشاره شد از ویژگی‌های مهم نانوساختارها که در خصوصیات آنها بسیار موثر می‌باشد، مساله تراپرد الکترونی است که توجه زیادی به سمت آن معطوف شده‌است. به منظور مطالعه تراپرد الکترونی در نانوساختارها ابتدا باید ساختار نواری انرژی آنها را دانست. ساختار نواری یک بلور از حل معادله شرودینگر مستقل از زمان بدست می‌آید که تعیین کننده نوارهای مجاز انرژی و نهایتاً تعیین کننده حالت‌های مجاز در بلور است. از آنجا که رسانندگی یک بلور به میزان قابل توجهی به تحرک حامل‌ها وابسته است بنابراین تراپرد الکترونی در بسیاری از خواص از جمله رسانندگی الکتریکی که موضوع مورد بررسی در این پایان نامه است، اثر گذار می‌باشد. به همین دلیل به بررسی تراپرد الکترونی در نانوساختارها پرداخته می‌شود.

در بررسی تمام سیستم‌ها به منظور دستیابی به خصوصیات آنها در ابتدا باید تابع موج سیستم را بدست آورد. چون دستیابی به توابع موج بسیاری از سیستم‌ها که در حضور میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی قرار دارند و یا شامل ناخالصی یا نواقص بلوری هستند به راحتی امکانپذیر نیست از مجموعه‌ای از تبدیلات جهت برخی ساده سازی‌ها و یا روش‌های عددی استفاده می‌شود، و با بررسی توابع موج، سایر خصوصیات سیستم از جمله ضرایب عبور و رسانندگی ارزیابی می‌شوند.

در یک سیم کوانتومی ایده‌آل طبق نظریه بلاخ که بیان می‌کند توابع موج الکترونی در یک بلور کامل به هیچ وجه پراکنده نمی‌شوند مگر اینکه بلور دارای نقص و یا ناخالصی باشد تراپرد الکترونی بالستیک خواهد بود، بنابراین پس از دستیابی به تابع موج سیستم و محاسبه ضرایب عبور و با استفاده از نظریه لاندائور بوتیکر<sup>۹</sup> رسانندگی محاسبه می‌شود، همانطور که انتظار می‌رود رسانندگی یک سیم کوانتومی ایده‌آل ضرایب خوش تعریفی از  $G_0 = 2e^2/h$  است.

اما اگر دستگاه مورد بررسی شامل ناخالصی باشد تابع موج کل الکترون در حضور پراکنده شامل دو بخش تابع موج فرودی بعلاوه جمله‌ای که نشاندهندی اثر پراکندگی است، می‌باشد و این امر باعث تغییر تحرک الکترونی و در نتیجه تغییر در کوانتیدگی رسانش الکتریکی در دستگاه کوانتومی مورد بررسی می‌شود. یک مساله مهم چگونگی اثر نقایص در دستگاه سیم کوانتومی بر روی دامنه پراکندگی و رسانش است. مساله پراکندگی توسط توابع پتانسیل پراکندگی به عنوان مثال تابع دلتای دیراک در چندین مقاله به روش‌های مختلف بررسی شده است [۱۲، ۴، ۳]، و از نتایج مهم آن این است که ناخالصی و یا نقص بلوری بر روی رسانندگی اثر مخرب گذاشته و باعث از بین رفتن کوانتیدگی آن می‌شود. مساله تراپرد الکترونی در نانو ساختارها از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است و چون اساساً تراپرد با پراکندگی همراه است در این پایان نامه به معرفی مختصر چند روش برای حل مساله پراکندگی پرداخته می‌شود. در پایان

<sup>۹</sup>landaur bottiker



نامه حاضر، ترتیب نوشتار مطالب به شرح زیر است:

در فصل دوم مفاهیم پایه شامل بلورهای نیمرسانا، نانوساختارها، انواع آن و تاثیر محدودیت کوانتومی بر روی چگالی حامل‌ها در هریک از نانوساختارها ارائه شده است.

فصل سوم مساله ترابرد در نانو ساختارها را بیان کرده و به معرفی مختصری از چند روش متداول از جمله معادله ترابرد بولتزمن، رهیافت تابع گرین، رهیافت ماتریس چگالی و فرمالیزم کوبو می‌پردازد و در پایان فصل روش لاندائور بوتیکر را که برای حل مساله خود انتخاب کرده‌ایم معرفی می‌کند.

در فصل چهارم به مطالعه سیستم مورد نظر که هدف محاسبه ترابرد الکترونی در یک سیم کوانتومی بی نهایت که یک نقطه کوانتومی در آن محبوس می‌باشد و عامل پراکندگی است، را با بدست آوردن تابع موج سیستم به روش لیپمن شوینگر و سپس در فواصل دور از ناحیه پتانسیل پراکندگی و مقایسه تابع موج بدست آمده با تابع موج فرودی ضرایب عبور را بدست آورده و نهایتاً با استفاده از نظریه لاندائور بوتیکر که ارتباط بین ضرایب عبور و رسانندگی را می‌دهد، رسانندگی محاسبه می‌شود.

در فصل پنجم نیز نتایج حاصل از این پایان نامه و پیشنهاداتی برای ادامه‌ی کار بیان شده است. در نهایت فهرست مراجع مورد مطالعه و استفاده شده در این تحقیق آورده شده است.



## فصل ۲

### بلورهای نیمرسانا

#### ۱.۲ مقدمه

در حال حاضر نانوساختارهای نیمرسانا با توجه به قابلیت‌هایی که در هریک از زمینه‌های الکتریکی و اپتیکی دارند بسیار مورد توجه بشر قرار گرفته‌اند. به طوری‌که بخش عظیمی از تحقیقات نظری و تجربی را به خود اختصاص داده‌اند.

در این فصل بلورهای نیمرسانا و هر یک از نانوساختارها و ویژگی آنها معرفی می‌شود.

#### ۲.۲ بلورهای نیمرساناها

هنگامی که یک جامد شکل می‌گیرد بسته به نوارهای انرژی آن که در اثر پهن شدگی ترازهای انرژی تشکیل می‌شوند در حالت کلی از نظر رسانایی به سه دسته: رسانا<sup>۱</sup>، نیمرسانا<sup>۲</sup> و عایق<sup>۳</sup> دسته بندی می‌شوند. نیمرساناها عناصری هستند که عموماً هدایت الکتریکی<sup>۴</sup> آنها بین  $10^{-8} s/m$  تا  $10^3 s/m$  است. این در حالی است که هدایت الکتریکی عایق‌ها کمتر از  $10^{-8} s/m$  و هدایت الکتریکی رساناها بیشتر از  $10^3 s/m$  می‌باشد [۶].

بلورهای نیمرسانا ترکیبات جامدی هستند که در آنها اجزای تشکیل دهنده جامد بلوری؛ اتم‌ها، یون‌ها

---

<sup>۱</sup>conductor

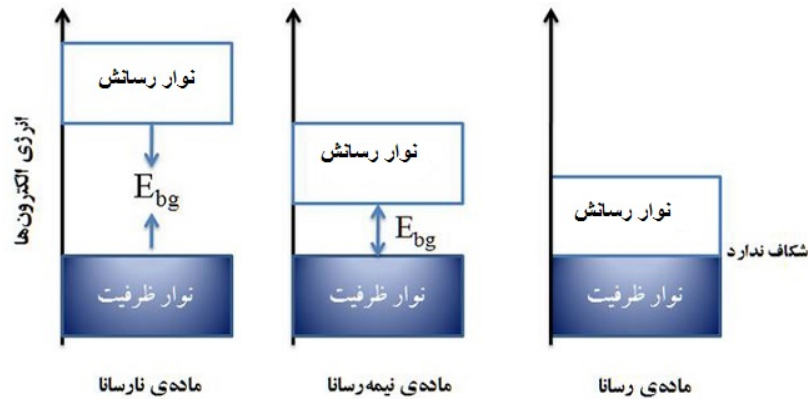
<sup>۲</sup>semiconductor

<sup>۳</sup>insulator

<sup>۴</sup>electrical conductivity

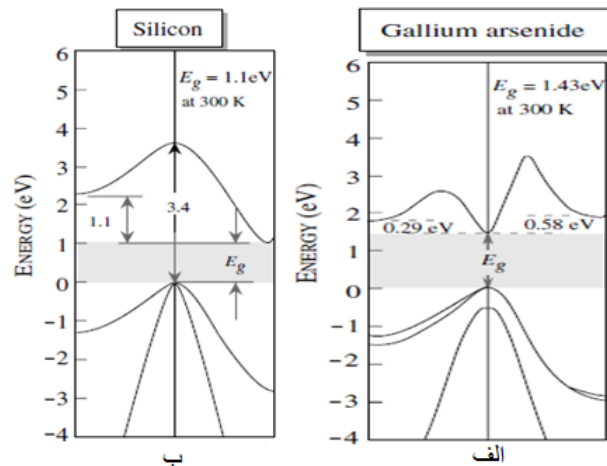
یا مولکول‌ها بصورت منظم در کنار یکدیگر بر روی یک شبکه آرایش یافته‌اند. هر نقطه شبکه شامل گروهی از اتم‌هاست که به این گروه از اتم‌ها پایه گفته میشود و از تکرار تناوبی پایه بلور تشکیل می‌شود. وجود پارامتر تناوب تاثیر قابل توجهی بر روی خواص نیمرسانا می گذارد به همین دلیل در ادامه به بررسی ساختار نواری نیمرسانا می پردازیم [۲، ۷].

همانطور که در شکل (۱.۲) می بینید عناصر نیمرسانا مانند عناصر نارسانا فاقد نواری انرژی بخشی پر هستند. در واقع مواد نیمرسانا که معمولا ساختار بلوری دارند در صفر مطلق نارسانا هستند.



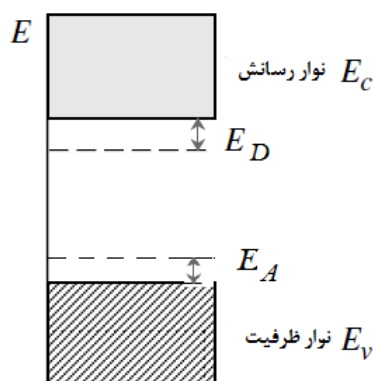
شکل ۱.۲: ساختار نواری عناصر رسانا، نیمرسانا، نارسانا

در بلور نیمرسانا نوارهای پر شده توسط الکترون‌ها را نوار ظرفیت و نوارهای خالی از الکترون را نوار رسانش می‌نامند. فاصله خالی بین نوارهای ظرفیت و رسانش گاف نواری نام دارد به عبارت دقیق‌تر اختلاف انرژی بین بالاترین نقطه نوار ظرفیت (لبه نوار ظرفیت) و پایین‌ترین نقطه نوار رسانش (لبه نوار رسانش) را گاف نواری می‌نامند که تنوع گاف نواری در بلورهای نیمرسانا از  $4eV - 1$  است و با توجه به امتداد لبه‌های نوار ظرفیت و نوار رسانش گاف نواری به دو دسته گاف نواری مستقیم و گاف نواری غیر مستقیم تقسیم بندی می‌شوند بنابراین نیمرساناها نیز به دو دسته نیمرسانا با گاف نواری مستقیم ( $GaAs$ ) و نیمرسانا با گاف نواری غیر مستقیم ( $Si, Ge$ ) دسته بندی می‌شوند.



شکل ۲.۲: انواع گاف نواری. (الف) گاف نواری مستقیم ( $GaAs$ ) ، (ب) گاف نواری غیر مستقیم ( $Si$ )

در نیمرساناها به دلیل کوچک بودن گاف نواری، انرژی گاف نواری به انرژی گرمایی  $k_bT$  نزدیک است و در دمای اتاق گرمای نهان ماده منجر به برانگیختگی الکترون‌های نوار ظرفیت به نوار رسانش شده و جریان تولید می‌شود. چگالی الکترون‌هایی که توسط برانگیختگی گرمایی به نوار رسانش رسیده‌اند، نسبتاً کم بوده اما به هیچ وجه قابل چشم پوشی نیست. چنین موادی را نیمرسانای ذاتی می‌نامند. می‌توان میزان هدایت الکتریکی را با افزودن اتم‌های دهنده به نوار رسانش و همچنین افزودن اتم‌های پذیرنده به نوار ظرفیت افزایش داد چنین نیمرسانایی را نیمرسانای غیر ذاتی می‌نامند (شکل ۳.۲ را ببینید).



شکل ۳.۲: نیمرسانای غیر ذاتی. ترازهای پذیرنده به فاصله  $E_A$  از لبه نوار ظرفیت و ترازهای دهنده به فاصله  $E_D$  از لبه نوار رسانش

در صورتی که به بلور نیمرسانا اتم‌های پذیرنده تزریق شود این اتم‌ها الکترون‌ها را در نوار ظرفیت گرفته و بارهای مثبتی را تحت عنوان حفره برجای می‌گذارند که می‌توانند حامل جریان باشند. این نیمرساناها را نیمرسانای نوع P می‌نامند. با افزودن اتم‌های دهنده به نیمرسانا این اتم‌ها با دادن الکترون به نوار

رسانش باعث تقویت رسانندگی می‌شوند چنین نیمرسانایی را نیمرسانای نوع n می‌نامند. رسانندگی در هر دو نیمرسانای ذاتی و غیر ذاتی وابسته به دما می‌باشد. برخی از بلورهای نیمرسانا از ترکیب عناصر جدول تناوبی با هم به وجود می‌آیند که موسوم به نیمرساناهای ترکیبی هستند به عنوان مثال از ترکیب عناصر سه ظرفیتی گروه III با عناصر پنج ظرفیتی گروه V با یکدیگر، نیمرسانای موسوم به ترکیبات III - V (سه-پنج) مانند گالیوم آرسناید ساخته می‌شوند. از جمله نیمرساناهای ترکیبی دیگر می‌توان به ترکیبات عناصر گروه II با عناصر گروه VI موسوم به ترکیبات II - VI مانند روی سولفید و همچنین ترکیبات گروه‌های IV - VI اشاره کرد. امروزه بیشتر مطالعات انجام شده بر روی نیمرساناها، در باره همین نیمرساناهای ترکیبی به ویژه گروه III - V به منظور تهیه ساختارهای ناهمگون<sup>۵</sup> و تغییر خواص آنها در راستای اهداف صنعتی مورد نیاز بشر است.

## ۳.۲ روش تهیه نانوساختارها

هنگامی که یک یا چند بعد از ابعاد یک نیمرسانای کپه ای که حامل‌ها در آن دارای سه درجه آزادی هستند کاهش یابد در ابتدا تغییرات خاصی در رفتار آنها مشاهده نمی‌شود اما همین که به ابعاد شعاع اکسیتونی<sup>۶</sup> برسد، (رابطه ۱.۲) خواص فیزیکی و شیمیایی مواد تغییرات چشمگیری خواهند داشت به طوریکه برای بررسی آنها می‌بایست از قوانین مکانیک کوانتوم به جای مکانیک کلاسیک استفاده کرد. به چنین ساختاری که اندازه ابعاد آن در یک یا چند بعد تا حد شعاع اکسیتونی کاهش یابد نانوساختار گفته می‌شود. نانوساختارها را بر اساس تعداد درجات آزادی حامل‌ها (تعداد بعد کاهش یافته) به سه دسته تقسیم بندی می‌کنند. اگر یک بعد از ماده حجیم محدود شود با نانوساختار چاه کوانتومی<sup>۷</sup> اگر دو بعد محدود شود به سیم کوانتومی<sup>۸</sup> و اگر هر سه بعد محدود شوند به نانوساختار نقطه کوانتومی<sup>۹</sup> دست می‌یابیم [۱۱، ۱۵].

$$a_x = \frac{\varepsilon \hbar^2}{e^2 m^*} \approx (1 - 100 nm) \quad (1.2)$$

امروزه به دلیل اهمیت نانو ساختارهای نیمرسانا در صنایع روز دنیا از جمله صنعت ابزارآلات الکترونیکی و اپتیکی و همچنین علم پزشکی به بررسی نانوساختارهای نیمرسانا پرداخته می‌شود. نانوساختارهای نیمرسانای رشد داده شده توسط دو دستگاه MBE<sup>۱۰</sup> و MOCVD<sup>۱۱</sup> از دقت بالایی برخوردار هستند. زیرا رشد در این دستگاه‌ها لایه به لایه و با ضخامتی در حدود ۳ آنگستروم انجام می‌شود. اگر لایه نازک بر روی زیر لایه ای با ساختار و ترکیب یکسان رشد داده شود به عنوان مثال یک لایه نازک Si بر روی زیر لایه Si (ویفر سیلیکون) لایه نشانی شود به آن روآراستی همگون می‌گویند. و اگر لایه نازک و زیر لایه ساختاری مشابه اما ترکیب متفاوتی داشته باشند مانند رشد GaAs بر روی

<sup>۵</sup>Heterostructure

<sup>۶</sup>exciton radius

<sup>۷</sup>quantum well

<sup>۸</sup>quantum wire

<sup>۹</sup>quantum dot

<sup>۱۰</sup>molecular beam epitaxy

<sup>۱۱</sup>metal organic chemical vapor deposition

ALAs به آن روآراستی ناهمگون می گویند.

همچنین از روش‌های لیتوگرافی و لایه نشانی شیمیایی از فاز بخار (CVD) لایه نشانی فیزیکی از فاز بخار (PVD) برای تولید نانوساختارها استفاده می‌شود [۷، ۱۳].

روش‌های حالت بخار شامل: رسوب فیزیکی بخار<sup>۱۲</sup>، چگالش گاز خنثی<sup>۱۳</sup>، پاشش حرارتی<sup>۱۴</sup>، ذوب در محیط فوق سرد<sup>۱۵</sup>، رسوب شیمیایی بخار<sup>۱۶</sup> می‌باشد و روش‌های حالت مایع شامل: سل-ژل<sup>۱۷</sup>، فرایندهای شیمیایی مرطوب<sup>۱۸</sup> و روش‌های حالت جامد شامل: آلیاژ سازی مکانیکی، فرایندهای شیمیایی مکانیکی<sup>۱۹</sup> هستند [۱].

## ۴.۲ اثرات محدودیت کوانتومی در نانوساختارها

ابعاد نانوساختارها در یک یا چند راستا در حدود اتم‌های منفرد و مولکول‌هاست، به همین دلیل برای بررسی و توضیح رفتار آنها نمی‌توان از فیزیک کلاسیک بهره گرفت بنابراین وارد محدوده فیزیک کوانتوم می‌شویم. در این بخش به شرح کامل مکانیک کوانتومی پرداخته نمی‌شود بلکه مهم‌ترین اثرات محدودیت کوانتومی بر نانوساختارها بیان می‌شود.

الف) به دلیل کوچک بودن ابعاد نانوساختارها، جرم آنها بسیار کم است در نتیجه از اثر نیروی گرانشی که متناسب با جرم ذره است صرف نظر می‌شود. بنابراین در تعیین رفتار اتم‌ها و مولکول‌ها، نیروهای الکترو مغناطیسی غالب هستند.

ب) یکی از نتایج مکانیک کوانتومی پدیده دوگانگی موج-ذره است. برای اجسامی با جرم کوچک مانند الکترون‌ها رفتار موجی مطرح است و بر اساس معادلاتی نظیر معادله شرودینگر، لیپمن شوینگر و ... برای بررسی موقعیت الکترون‌ها، آنها را همانند بسته‌های موج در نظر گرفته و از تابع توزیع احتمال استفاده می‌شود.

ج) از دیگر نتایج مکانیک کوانتومی پدیده تونل زنی است. در مکانیک کلاسیک یک جسم زمانی می‌تواند از یک سد عبور کند که انرژی بیشتری نسبت به سد دارا باشد، اما در مکانیک کوانتومی احتمال عبور ذره از سد صفر نبوده و شرط لازم برای تونل زنی نزدیک بودن طول موج ذره به ضخامت سد است. بنابراین پدیده تونل زنی تنها در ابعاد نانومتری امکانپذیر است.

د) از دیگر اثرات محدودیت کوانتومی کوانتیده شدن حالت‌های مجاز انرژی است. هنگامی که ابعاد یک ماده حجیم در حد نانو کاهش یابد در واقع تعداد اتم‌های آن کاهش می‌یابد بنابراین همپوشانی بین ترازهای انرژی از بین می‌رود. در نانوساختارها علاوه بر افزایش بسیار زیاد نسبت سطح به حجم نوارهای

<sup>۱۲</sup>Physical Vapor Deposition(PVD)

<sup>۱۳</sup>Inert gas Condensation(IGC)

<sup>۱۴</sup>Combustion Flame Spraying

<sup>۱۵</sup>Cryogenic Melting

<sup>۱۶</sup>Chemical Vapor Deposition(cvd)

<sup>۱۷</sup>Sol-Gel

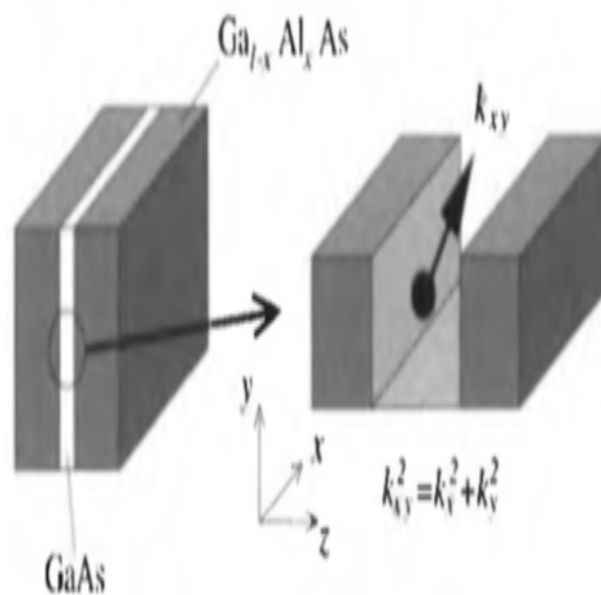
<sup>۱۸</sup>Wet Chemical Synthesis

<sup>۱۹</sup>Mechanochemical Synthesis

انرژی دچار گسستگی شده و به ترازهای انرژی تبدیل می‌شوند. هر چه ابعاد نانوساختارها کوچکتر شود فاصله بین ترازهای انرژی بیشتر شده و گاف نواری بزرگتر می‌شود. (ه) تغییر چگالی حالتها نیز یکی دیگر از اثرات محدودیت کوانتومی است که در ادامه به توضیح آن پرداخته شده است [۸].

## ۵.۲ چاه کوانتومی

به منظور دستیابی به ساختار چاه کوانتومی با استفاده از تکنیک روآراستی نامتجانس<sup>۲۰</sup> یک لایه با گاف نواری کوچکتر (*GaAs*) میان دو لایه از ماده‌ای با گاف نواری بزرگتر (*AlAs*) رشد داده می‌شود. در شکل (۴.۲) (*GaAs*) که دارای گاف نواری کوچکتر است چاه و (*AlAs*) که دارای گاف نواری بزرگتر است به عنوان سد عمل می‌کند. در واقع اصطلاح چاه به منطقه‌ای در نیمرسانا اشاره دارد که حاملها (الکترون و حفره) در آنجا به دلیل پایین بودن سطح انرژی نسبت به اطراف به دام می‌افتند.



شکل ۴.۲: چاه کوانتومی منفرد

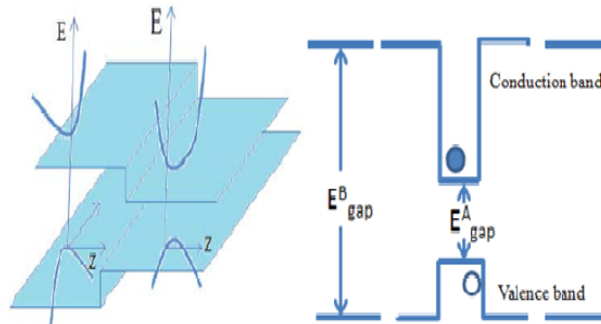
در یک چاه کوانتومی حاملها در صفحه رشد آزادانه حرکت می‌کنند اما در راستای رشد محدود می‌باشند. بنابراین چگالی حاملها در یک چاه کوانتومی با مواد کپه‌ای متفاوت است. برای دستیابی به یک چاه کوانتومی استاندارد می‌توان از روش‌هایی از قبیل فتولیتوگرافی و لیتوگرافی پرتو الکترونی استفاده کرد [۲].

محدودیت یک بعدی حاملها در ساختار چاه کوانتومی باعث جایگزینی تابع موج حاملها و در

<sup>۲۰</sup>Heterostructure



نهایت گسستگی ترازهای انرژی می شود. گسستگی ترازهای انرژی باعث کاربردهای متنوعی از چاه کوانتومی به خصوص در زمینه های الکتریکی و اپتیکی مانند دیودها، ترانزیستورها، دیودهای نور گسیل و به ویژه لیزرها می شود.



شکل ۵.۲: ساختار نواری یک چاه کوانتومی منفرد

## ۱.۵.۲ ابر شبکه

چون ساختار بلوری تعیین کننده خواص الکترونیکی و اپتیکی نیمرسانا است، دانشمندان ساختارهای مصنوعی یا ابر شبکه ها را رشد دادند تا به خواص دلخواه و مورد نیاز در صنعت دست یابند. در ابتدا ایساکی<sup>۲۱</sup> و تسو<sup>۲۲</sup> در دهه ۷۰ ایده ای برای ساخت ابر شبکه ها را پیشنهاد دادند. و به دنبال آن در دهه ۱۹۷۰ در شرکت IBM با استفاده از روش روآراستی نامتجانس<sup>۲۳</sup> دو دستگاه MBE<sup>۲۴</sup> و MOCVD<sup>۲۵</sup> بلورهای مصنوعی با چینش دلخواه ساخته شدند. دستگاه MBE لایه ها را با فاصله حدوداً ۳ آنگستروم یعنی با دقت یک تک لایه کنترل می کند، بنابراین اتم ها به آرامی روی هم چیده می شوند و از دقت بالایی برخوردارند. چون تکنولوژی روآراستی ناهگون رشد ساختارهای نامتجانس را در حد اتم کنترل می کند می تواند تناوب کریستال را در جهت رشد تغییر دهد که منجر به رشد ابر شبکه هایی با دو نیمرسانا یا بیشتر A و B با ضخامت های  $d_A$  و  $d_B$  می شود که تناوب شبکه در جهت رشد  $d_A + d_B$  خواهد بود (تصویر (۶.۲) را ببینید).

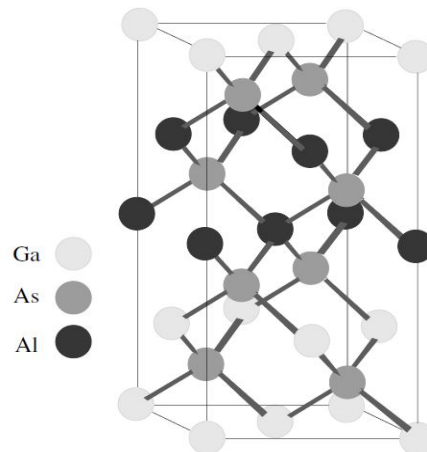
<sup>۲۱</sup> Esaki

<sup>۲۲</sup> Tsu

<sup>۲۳</sup> Heteroepitaxi

<sup>۲۴</sup> Molecular beam epitaxi

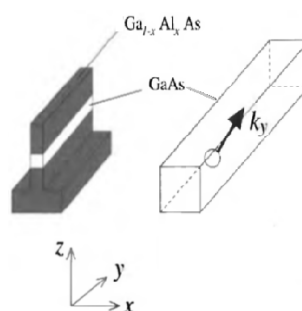
<sup>۲۵</sup> Metal organic chemical vapor deposition



شکل ۶.۲: آرایش اتم‌ها در یک ابرشبکه  $(AlAs)_2(GaAs)_2$  در جهت  $(001)$

## ۶.۲ سیم کوانتومی

در یک سیم کوانتومی ذرات یک درجه آزادی در امتداد طول سیم دارند (در اینجا در جهت  $y$ ). و به دلیل مقید بودن حاملها در صفحه رشد، تابع موج در سراسر سیم گسترده نخواهد بود، در نهایت ترازهای انرژی نیز گسسته هستند و چگالی حاملها تغییر می‌کند. سیم‌های کوانتومی به لحاظ شکل ظاهری انواع مختلفی دارند از جمله آنها می‌توان به سیم‌های کوانتومی با سطوح مقطع مربعی، دایروی و مستطیلی و... اشاره کرد [۱۱، ۱۳].

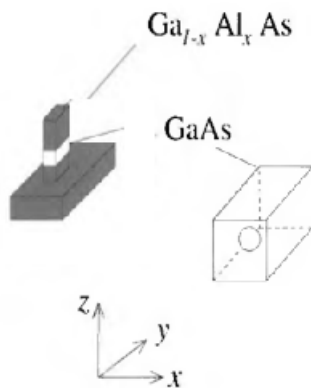


شکل ۷.۲: سیم کوانتومی

رسانایی یک سیم کوانتومی وابسته به ابعاد آن است. به دلیل وابستگی خواص سیم‌های کوانتومی از جمله ترکیبات سیلیکون و گالیوم به محیط از قبیل شدت نور، وجود گازها، رطوبت و... از آنها در زمینه‌های حسگری استفاده می‌کنند.

## ۷.۲ نقطه کوانتومی

هنگامی که هر سه بعد ماده در ابعادی قابل مقایسه با شعاع اکسیتونی کاهش یابد به نقطه کوانتومی دست می‌یابیم، بنابراین در یک نقطه کوانتومی ذرات هیچ درجه آزادی ندارند [۱۴، ۱۵].



شکل ۸.۲: نقطه کوانتومی

ابعاد نقاط کوانتومی در حدود ۲ تا ۱۰ نانومتر می‌باشد که بعد از تحریک شدن توسط نور فرابنفش از خود نور ساطع می‌کنند. خواص الکتریکی و اپتیکی نقاط کوانتومی به شدت به اندازه آنها وابسته است و هر چقدر ابعاد آن کوچکتر شود به دلیل بزرگتر شدن گاف انرژی نقاط کوانتومی در هنگام گسیل انرژی بیشتری را از خود ساطع می‌کنند. صفر بعدی بودن نقطه کوانتومی باعث تغییر چگالی حالتها و گسستگی ترازهای انرژی و همچنین جایگزیدگی آنها در سه راستا می‌شود. بنابراین نقطه کوانتومی را می‌توان اتم انفرادی نامید. از نقاط کوانتومی در پزشکی برای کشف سلول‌های موجودات زنده و تشخیص سلول‌های سرطانی استفاده می‌شود. همچنین در کامپیوترهای کوانتومی، آشکارسازهای مادون قرمز، دیودهای نور گسیل، سلولهای خورشیدی و ... استفاده می‌شود.

## ۸.۲ چگالی حالتها در نانو ساختارها

چگالی حالتها تاثیر زیادی بر روی خواص مواد مانند ضریب جذب، تراپد الکترونی و ... می‌گذارد. در نانو ساختارها همانطور که گفته شد با کاهش تعداد درجات آزادی، چگالی حالتها تغییر می‌کند. برای محاسبه چگالی حالتها در نانو ساختارها ابتدا چگالی حاملها در یک نیم رسانای کپه‌ای را بدست می‌آوریم. چگالی حالتها در واقع تعداد حالت‌های انرژی موجود در واحد حجم فضای حقیقی در واحد انرژی، حول انرژی  $E$  را بیان می‌کند. بنابراین کمیت  $N(E)dE$  تعداد حالت‌های مجاز در واحد حجم در بازه انرژی بین  $(E, E + dE)$  است. برای بدست آوردن چگالی حالات باید ابعاد سیستم و ارتباط بین تکانه ذرات و انرژی را بدانیم که ما در اینجا چگالی حالت را برای الکترون‌ها محاسبه می‌کنیم. برای الکترون آزاد رابطه سهمی زیر را داریم:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + V_0 \quad (2.2)$$

تعداد حالت‌های بین سطوح انرژی  $E$  و  $E + dE$  متناظر با حجم بین کره‌هایی با شعاع  $k$  و  $k + dk$  در فضای  $k$  است. همچنین حجم یک حالت الکترونی در فضای  $k$  در سه بعد برابر است با  $(\frac{\sqrt{\pi}}{L})^3$  در نتیجه تعداد حالت‌های الکترونی موجود در بین سطوح  $E$  و  $E + dE$  برابر است با

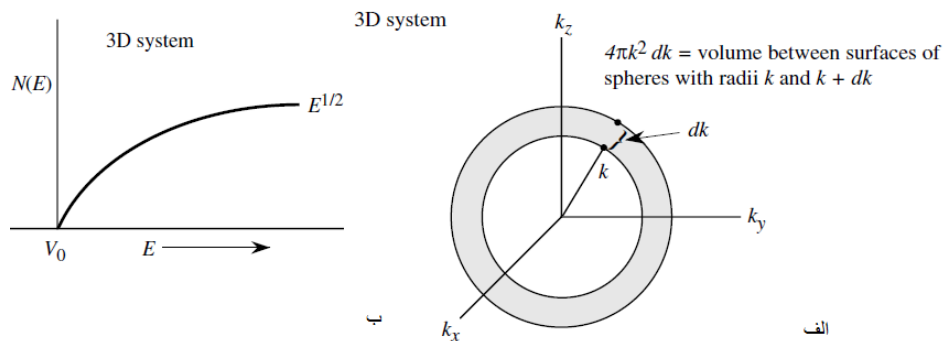
$$\frac{4\pi k^2 dk}{8\pi^3} V = \frac{k^2 dk}{2\pi^2} V \quad (3.2)$$

در فضای  $k$  می‌باشد. از طرفی با توجه به رابطه ۲.۲ و با توجه به اصل طرد پائولی برای چگالی حالت‌ها خواهیم داشت:

$$N(E)dE = \frac{k^2 dk}{2\pi^2} \quad (4.2)$$

$$N(E)dE = \frac{k^2 dk}{2\pi^2} = \frac{m^{*3/2} (E - V_0)^{1/2} dE}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \quad (5.2)$$

همانطور که در رابطه (۵.۲) می‌بینید برای یک جسم کپه‌ای چگالی حالت‌ها متناسب با ریشه دوم انرژی است [۲، ۱۳].



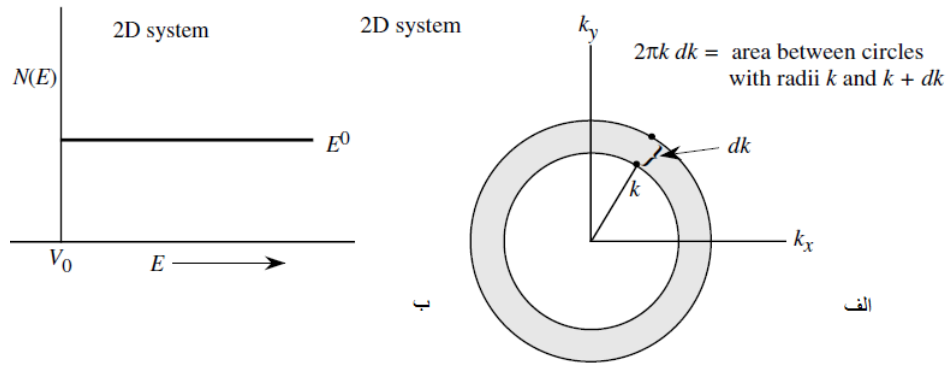
شکل ۹.۲: چگالی حالت‌ها در نیمرسانای کپه‌ای. (الف) محاسبه انرژی در فضای  $k$  بین سطوح  $E$  و  $E + dE$  وابستگی چگالی حالت‌ها به انرژی

## ۱.۸.۲ چگالی حالت‌ها در چاه کوانتومی

اکنون مساله را برای یک چاه کوانتومی حل می‌کنیم. همانطور که قبلاً نیز گفته شد حامل‌ها در یک چاه کوانتومی دارای دو درجه آزادی هستند بنابراین چگالی حالت‌ها عبارت است از تعداد حالت‌های مجاز انرژی در واحد سطح حقیقی در واحد انرژی، حول انرژی  $E$ ، از طرفی انرژی بین سطوح دایروی با شعاع  $k$  و  $k + dk$  برابر است با  $2\pi k dk$  همچنین مساحت یک تک الکترون در فضای  $k$  برابر است با  $(\frac{\sqrt{\pi}}{L})^2$  بنابراین چگالی حالت‌ها در یک سیستم دو بعدی (چاه کوانتومی) برابر است با:

$$N(E)dE = \frac{2m^*}{\hbar^2} \frac{1}{2\pi} \quad (6.2)$$

همانطور که در رابطه (۶.۲) می‌بینید در چاه کوانتومی چگالی حالت‌ها به انرژی وابسته نیست [۲، ۱۳].



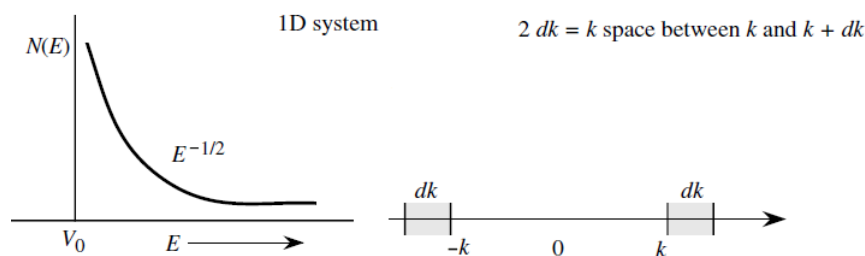
شکل ۱۰.۲: چگالی حالت‌ها در چاه کوانتومی. (الف) محاسبه انرژی در فضای  $k$  بین سطوح  $E$  و  $E + dE$  (ب) وابستگی چگالی حالت‌ها به انرژی در چاه کوانتومی

### ۲.۸.۲ چگالی حالت‌ها در سیم کوانتومی

به همین ترتیب برای سیم کوانتومی که در آن حامل‌ها دارای یک درجه آزادی هستند چگالی انرژی عبارت است از تعداد حالت‌های مجاز انرژی در واحد طول در واحد انرژی حول انرژی  $E$ . طولی که یک الکترون در فضای  $k$  اشغال می‌کند برابر  $2\pi k$  می‌باشد در نتیجه تعداد حالت‌های مجاز در طول  $2dk$  برابر خواهد شد با:

$$N(E)dE = \frac{\sqrt{2}m^*(E - V_0)^{-1/2}}{\pi\hbar} \quad (7.2)$$

همانطور که در رابطه (۷.۲) مشاهده می‌کنید در یک سیم کوانتومی چگالی حالت‌ها متناسب با عکس ریشه دوم انرژی است [۲، ۱۳].



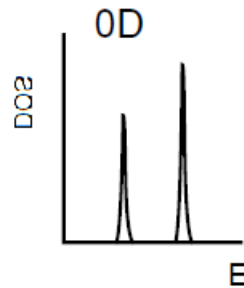
شکل ۱۱.۲: چگالی حالت‌ها در سیم کوانتومی. (الف) محاسبه انرژی در فضای  $k$  بین  $E$  و  $E + dE$  (ب) وابستگی چگالی حالت‌ها به انرژی در سیم کوانتومی

### ۳.۸.۲ چگالی حالت‌ها در نقطه کوانتومی

اما چگالی حالت‌ها در یک نقطه کوانتومی مانند یک تابع دلتای دیراک رفتار می‌کند [۲، ۱۳].

$$N(E)dE = 2\delta(E - V_0) \quad (۸.۲)$$

در رابطه بالا ضریب ۲ به دلیل واگنی اسپینی است.



شکل ۱۲.۲: چگالی حالت‌ها در نقطه کوانتومی بر حسب انرژی

### ۹.۲ جرم موثر

هنگامی که یک الکترون در بلور حرکت می‌کند به دلیل وجود یون‌های موجود در شبکه بلوری، و نیروی وارده شده از طرف آنها به الکترون جرم الکترون در حال حرکت در بلور متفاوت از جرم الکترون آزاد  $m_0$  خواهد بود. به طور کلی جرم موثر یک ذره در واقع پاسخ آن ذره به نیروهای وارده بر آن است که این نیرو ممکن است از طریق ذرات غیر همنام باشد و یا از طریق ذرات همنامی که با یکدیگر در یک توزیع گرمایی قرار دارند. از معادله شرودینگر مستقل از زمان داریم:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \psi = E\psi \quad (۹.۲)$$

از حل آن خواهیم داشت:

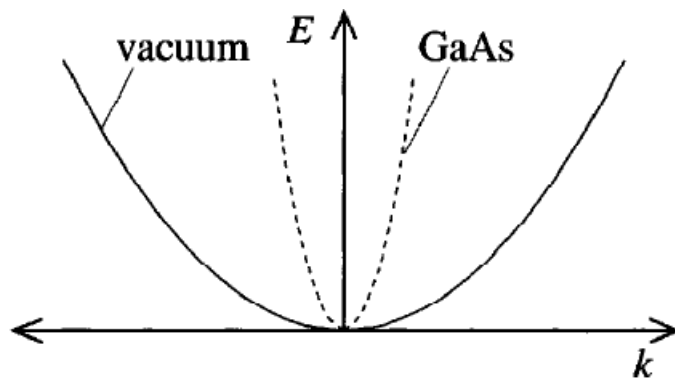
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{P^2}{2m^*} \quad (۱۰.۲)$$

$$V_g = \frac{dE}{dp} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad (۱۱.۲)$$

در این صورت جرم موثر با قیاس معادله نیوتون می‌شود:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \quad (۱۲.۲)$$

همانطور که در رابطه اخیر می‌بیند جرم موثر با مشتق دوم انرژی نسبت به  $k$  رابطه عکس دارد و ارتباط آنها به شکل رابطه سهمی گون است. هرچه سهمی بزرگتر باشد یعنی تغییرات انرژی بر حسب  $K$  زیاد باشد جرم موثر کوچکتر می‌شود همانطور که در شکل زیر می‌بینید جرم موثر  $GaAs$  کمتر از جرم سکون الکترون در خلا ( $m^* = 0.067m_0$ ) است [۲].



شکل ۱۳.۲: نمایش جرم موثر الکترون در بلور  $GaAs$  و جرم الکترون در خلا





## فصل ۳

# ترابرد الکترونی در نانوساختارها

### ۱.۳ مقدمه

یکی از مهمترین مسائل مورد بررسی نانوساختارها مساله ترابرد الکترونی در آنهاست. زیرا ترابرد الکترونی به شدت وابسته به ابعاد سیستم می باشد. از سال های ۱۹۵۰ تا کنون مطالعات زیادی بر روی نظریه های ترابرد بر پایه کوانتوم و مکانیک آماری انجام شده است و روش هایی مانند انتگرال مسیر، توابع گرین، ماتریس چگالی، فرمالیزم کوبو و لاندائور بوتیکر و ... برای حل مساله ترابرد و پراکندگی ارائه شده است. این فصل ابتدا به توضیح مختصری درباره مساله ترابرد در نیمرسانا پرداخته و در ادامه معادله ترابرد بولتزمن، ماتریس چگالی، توابع گرین و روش کوبو را معرفی می کند، سپس فرمالیزم لاندائور بوتیکر را که روش اصلی حل مساله در این پایان نامه است بررسی می کند.

### ۲.۳ ترابرد الکترونی

هدف اصلی در نظریه ترابرد نیمرسانا محاسبه پاسخ توزیع الکترون ها در داخل دستگاه یا نمونه رسانای حجیم در حضور اختلال اعمال شده است. این اختلال می تواند میدان الکتریکی، مغناطیسی، گرادیان دما، گرادیان چگالی، فشار یا ترکیبی از هریک از اینها باشد. در نانوساختارها با کوچک شدن ابعاد مواد در حد شعاع اکسیتونی ذرات رفتار کنترل نشده و غیر قابل پیش بینی از خود بروز می دهند که در چهارچوب قوانین فیزیک کلاسیک نمی گنجد و برای بررسی آنها از قوانین فیزیک کوانتوم استفاده می شود. در واقع نانوساختارها پل ارتباطی بین مکانیک کلاسیک و مکانیک کوانتومی هستند [۱۶]. برای

بررسی مساله ترابرد کوانتومی بهتر است که در برخی فرضیات اساسی ترابرد الکترون‌ها در نیمرساناها بر اساس مدل شبه کلاسیکی تجدید نظر شود.

الف) جدا از مساله پراکندگی، در فیزیک کلاسیک الکترون‌ها همانند ذرات منفرد توصیف می‌شوند. اگر  $\tau$  زمان بین دو برخورد باشد طبق اصل عدم قطعیت انرژی در مکانیک کوانتوم  $\Delta\varepsilon = \hbar/\tau$  می‌بایست  $10^{-14} s \gg \tau$  باشد.

ب) در طول دو برخورد متوالی، مکان و تکانه الکترون مانند یک ذره کلاسیکی توسط مکان و تکانه به خوبی تعریف شده است. اما در این تقریب باید قادر به تصور بسته‌های موج با عدم قطعیت  $\Delta p$  بسیار کمتر از میانگین  $p$  و یک عدم قطعیت در  $\Delta x$  بسیار کمتر از میانگین طول آزاد  $l$  در همان زمان به صورت زیر بود:

$$\Delta p \ll p, \Delta x \ll l \quad (1.3)$$

با استفاده از روابط عدم قطعیت

$$\hbar \sim \Delta x \Delta p \ll pl \sim \frac{p^2}{m} \tau \sim KT \tau \quad (2.3)$$

یا

$$\tau \gg \hbar/KT \sim 10^{-13} \sim 10^{-14} S \quad (3.3)$$

$K$  ثابت بولتزمن و  $T$  دما می‌باشد.

ج) طبق رابطه کلاسیکی بولتزمن برای ترابرد الکترون‌ها در نیمرسانا، برخوردها به طور کلی در فضا و زمان آنی فرض می‌شدند. از آنجایی که برهم کنش بین ذرات با عوامل پراکندگی مدتی طول می‌کشد این فرضیه به طور کلی حتی در نظریه کلاسیکی نیز صحیح نیست. در مورد جفت شدگی ضعیف که پراکندگی به ندرت رخ می‌دهد ممکن است این فرض با توجه به زمان پویش آزاد بین برخوردهای متوالی قابل چشم پوشی باشد. برای حل این شرایط یک مدت زمان برای برخورد تخمین زده شده است که این تخمین به شرایط و مکانیزم برخورد بستگی دارد [۱۸].

به هر حال با استفاده از نظریه‌های مختلف در مکانیک کوانتوم حل مساله ترابرد امکانپذیر است که در ادامه به معرفی چند روش می‌پردازیم.

### ۳.۳ معادله ترابرد بولتزمن

ترابرد حامل‌ها در بلور کپه‌ای از یک تابع توزیع احتمال  $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$  بدست می‌آید، تابع  $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$  طوری تعریف می‌شود که  $f(\vec{r}, \vec{p}, t) dr$  احتمال پیدا کردن الکترون با تکانه  $\vec{P} = \hbar \vec{k}$  در المان حجم  $dr$  به مرکزیت  $\vec{r}$  در زمان  $t$  را می‌دهد. برای سیستمی که در تعادل گرمایی است، همان  $f_0(\varepsilon(\vec{p}))$  است، که در آن  $f_0$  تابع توزیع فرمی دیراک در دمای  $T$  است. آهنگ تغییرات زمانی تابع توزیع احتمال از معادله ترابرد بولتزمن بدست می‌آید.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f + \vec{F} \cdot \vec{\nabla}_p f = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (4.3)$$

که در آن

$$\vec{v} = \nabla_p \in (\vec{p}) \quad (۵.۳)$$

سرعت الکترون (حفره) و  $\vec{F}$  نیروی وارد بر الکترون (حفره) است. هنگامی که میدان الکتریکی حاضر باشد، نیروی  $\vec{F} = q\vec{E}$  بر ذره وارد می‌شود ( $q$  بار ذره و  $\vec{E}$  میدان در مکان  $\vec{r}$  و زمان  $t$ ).

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \sum_p f(\vec{r}, \vec{p}, t)[1 - f(\vec{r}, \vec{p}, t)]W(\vec{p}', p) - f(\vec{r}, \vec{p}, t)[1 - f(\vec{r}, \vec{p}, t)]W(\vec{p}, \vec{p}') \quad (۶.۳)$$

که در آن  $W(\vec{p}, \vec{p}')$  آهنگ گذار از حالت  $\vec{p}$  به حالت  $\vec{p}'$  است و به جزئیات پراکندگی بستگی دارد به عنوان مثال پراکندگی الکترون - فونون، الکترون - ناخالصی و غیره.

در معرفی ابتدایی تابع بولتزمان برای گروهی از الکترون‌ها، آنها در المان حجم  $d\vec{r}d\vec{p}$  در فضای فاز در نظر گرفته شدند. اگر الکترون‌ها به موقعیت  $\vec{r} + \delta\vec{r}$  و  $\vec{p} + \delta\vec{p}$  در حجم  $d\vec{r}d\vec{p}$  حرکت کنند. برای یک زمان به اندازه کافی کوتاه عنصر حجمی در فضای فاز تغییر نخواهد کرد ( $d\vec{r}d\vec{p} = d\vec{r}d\vec{p}'$ ). پس همه الکترون‌ها در عنصر حجمی موقعیت مکانی و تکانه یکسانی دارند. با این حال اگر برخورد در آهنگ  $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$  مجاز باشد، تابع توزیع همانند شکل زیر بیان می‌شود:

$$f(\vec{r} + \delta\vec{r}, \vec{p} + \delta\vec{p}, t + \delta t) = f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \delta t \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} \quad (۷.۳)$$

با بسط سمت چپ رابطه

(۷.۳) و تقسیم بر  $\delta t$  و با استفاده از  $\partial\vec{r}/\partial t = \vec{v}$  خواهیم داشت:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_r f + \vec{p} \cdot \nabla_p f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} \quad (۸.۳)$$

که اگر سرعت گروه الکترون‌ها، با انرژی  $\varepsilon = \varepsilon(\vec{p})$  و رابطه  $\vec{v} = \nabla_p \in (\vec{p})$  بیان شود و با توجه به تئوری شبه کلاسیکی بسته موج الکترون در میدان خارجی

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} = \vec{F}(\vec{r}, \vec{p}, t) \quad (۹.۳)$$

که در اینجا  $\vec{F}$  نیروی خارجی وارد بر الکترون است، بنابراین سمت چپ رابطه (۸.۳) همان رابطه ترابرد بولتزمان است.

سمت راست روابط (۴.۳) و (۵.۳) به راحتی با توجه به این نکته که  $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$  آهنگ پراکنده شدن تمام الکترون‌ها از حالات  $(\vec{p}')$  به حالت  $(\vec{p})$  منهای آهنگ پراکنده شدن الکترون‌ها از حالت  $(\vec{p})$  به حالات  $(\vec{p}')$  در همه مکان‌ها و زمان‌هاست. اگر  $W(\vec{p}, \vec{p}')$  آهنگ گذار از حالت  $p$  به حالت خالی  $p'$  باشد انتظار داریم آهنگ گذار از حالتی با کسر اشغال  $f(\vec{r}, \vec{p}', t)$  به حالتی با کسر اشغال  $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$  توسط جمله نخست رابطه (۶.۳) داده شود و عامل  $1 - f(\vec{r}, \vec{p}, t)$  کسری از حالت‌های خالی را نشان می‌دهد [۱۸]. اما چون حل دقیق معادله بولتزمان بسیار سخت است از معادلات ترازمندی انرژی و تکانه برای حل آن استفاده می‌شود [۱۶].

### ۴.۳ رهیافت ماتریس چگالی

رهیافت ماتریس چگالی یکی از روش‌های بسیار سودمند در مسائل مکانیک آماری است. اگر در زمان  $t$  حالت فیزیکی سیستم‌های متفاوت در آنسامبل مورد بررسی توسط توابع موج  $\Psi = (r_i, t)$  مشخص شود. در صورتی که تابع موج بهنجار باشد تغییر تابع موج  $k$  امین سیستم با زمان توسط معادله شرودینگر محاسبه می‌شود.

$$H\Psi^k(r_i, t) = i\hbar\dot{\Psi}^k(r_i, t) \quad (10.3)$$

می‌توان با تعریف توابع متعامد  $\phi_n$  توابع موج  $\Psi^k(r_i, t)$  را به صورت زیر بیان کرد.

$$\Psi^k(r_i, t) = \sum_n a_n^k \phi_n \quad (11.3)$$

که در آن

$$a_n^k(t) = \int \phi_n^* \Psi^k(t) d\tau \quad (12.3)$$

ضرایب  $a_n^k(t)$  بسیار مهم هستند زیرا عدد  $|a_n^k(t)|$  در یک اندازه‌گیری در زمان  $t$  نشان دهنده احتمال حضور  $k$  امین سیستم آنسامبل در حالت  $\phi_n$  را می‌دهد.

حال به تعریف عملگر چگالی  $\hat{\rho}(t)$  که توسط عناصر ماتریس زیر تعیین می‌شود می‌پردازیم:

$$\rho_{mn}(t) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N a_m^k(t) a_n^{k*}(t) \quad (13.3)$$

که مولفه ماتریسی  $\rho_{mn}(t)$  میانگین کمیت  $a_m^k(t) a_n^{k*}(t)$  است. همچنین مولفه قطری  $\rho_{nn}(t)$  نشان دهنده احتمال این است که سیستمی که به طور تصادفی انتخاب می‌شود در زمان  $t$  در حالت  $\phi_n$  باشد. به طور کلی برای بدست آوردن مقدار چشمداشتی یک کمیت فیزیکی مانند  $G$  به صورت زیر عمل می‌کنیم.

$$\langle G \rangle = \frac{1}{N} \sum \int \Psi^{*k} \hat{G} \Psi^k d\tau \quad (14.3)$$

که بر حسب ضرایب  $a_n^k$  برابر است با:

$$\langle G \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \sum_{m,n} a_n^{*k} a_m^k G_{nm} \quad (15.3)$$

که در آن

$$G_{nm} = \int \phi_n^* \hat{G} \phi_m d\tau \quad (16.3)$$

با معرفی ماتریس چگالی  $\rho$ ، معادله (۱۴.۳) به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\langle G \rangle = \sum_{m,n} \rho_{mn} G_{nm} = \sum_m (\hat{\rho} \hat{G})_{mm} = Tr(\hat{\rho} \hat{G}). \quad (17.3)$$

اما اگر توابع موج اصلی  $\Psi^k$  نباشد، مقدار مورد انتظار کمیت خواسته شده برابر خواهد شد:

$$\langle G \rangle = Tr(\hat{\rho} \hat{G}) \quad (18.3)$$

نکته قابل توجه این است که مقدار مورد انتظار هر کمیت فیزیکی مستقل از انتخاب  $\phi_n$  می‌باشد [۹].

### ۵.۳ رھیافت کوبو

برای دستیابی به فرمول کوبو پاسخ خطی سیستم نسبت به اختلال وابسته به زمان تا مرتبه اول اختلال بررسی می‌شود. یک سیستم کوانتومی که طبق هامیلتونی مستقل از زمان  $H_0$  تعیین می‌شود در نظر گرفته شده است، حال فرض کنید که در زمان  $t = t_0$  سیستم تحت یک اختلال خارجی کوچک وابسته به زمان  $H'(t)$  قرار گیرد. آنگاه سیستم از حالت تعادل خارج می‌شود و هامیلتونی کل سیستم به شکل زیر نوشته می‌شود.

$$H_{total}(t) = H_0 + H'(t) \quad (۱۹.۳)$$

اکنون مقدار چشمداشتی کمیتی مانند  $A$  در زمان‌های  $t > t_0$  یعنی در حضور اختلال از رابطه زیر قابل محاسبه است.

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z_0} \sum_n \langle n(t) | e^{-\beta H} A | n(t) \rangle = \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n(t) | A | n(t) \rangle \quad (۲۰.۳)$$

$Z = Tr(\rho_0)$  تابع پارش سیستم است و اندیس صفر به محاسبه بر اساس حالت پایه هامیلتونی  $H_0$  اشاره دارد. چون اختلال  $H_1$  را کوچک فرض کرده‌ایم از تصویر برهم کنش برای تحول زمانی ویژه حالت هامیلتونی استفاده می‌کنیم.

$$\begin{aligned} |n(t)\rangle &= e^{-iH_0 t} |\hat{n}(t)\rangle = e^{-iH_0 t} \hat{U}(t, t_0) |\hat{n}(t_0)\rangle \\ &= e^{-iH_0 t} \left( 1 - i \int_{t_0}^t dt' \hat{H}'(t') \right) |\hat{n}(t_0)\rangle \end{aligned} \quad (۲۱.۳)$$

در اینجا  $\hbar = 1$  فرض شده است. بنابراین

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \left( 1 + i \int_{t_0}^t dt' \hat{H}'(t') \right) e^{iH_0 t} A e^{-iH_0 t} \\ &\quad \times \left( 1 - i \int_{t_0}^t dt' \hat{H}'(t') \right) | n \rangle \end{aligned} \quad (۲۲.۳)$$

چون تحول زمانی عملگر  $A$  در تصویر برهم کنش به صورت

$$\hat{A} = e^{iH_0 t} A e^{-iH_0 t}$$

است مقدار چشمداشتی برابر است با:

$$\langle A \rangle = \langle A \rangle_0 - i \int_{t_0}^t dt' \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \hat{A}(t), \hat{H}'(t) | n \rangle \quad (۲۳.۳)$$

$$= \langle A \rangle_0 - i \int_{t_0}^t dt' \langle [\hat{A}(t), \hat{H}'(t)] \rangle_0 \quad (۲۴.۳)$$

که میانگین گیری نسبت به هامیلتونی غیر اختلالی است. حال تابع همبستگی تاخیری را مطابق رابطه زیر تعریف می‌کنیم.

$$C_{AH'}^A(t, t') = -i\theta(t - t') \langle [\hat{A}(t), \hat{H}'(t')] \rangle_0 \quad (۲۵.۳)$$

در نهایت رابطه زیر فرمول کوبو را که پاسخ خطی سیستم به یک پتانسیل خارجی است نشان می‌دهد

$$\langle \delta A \rangle = \langle A \rangle - \langle A \rangle_0 = \int dt C_{AH}^R e^{-\eta(t-t')} \quad (26.3)$$

$e^{-\eta(t-t')}$  با پارامتر بی‌نهایت کوچک و مثبت  $-\eta$  به افت پاسخ در زمان  $t$  ناشی از اختلال در زمان  $t'$  هنگامی که  $t' \gg t$  است، اشاره دارد.

### ۶.۳ تابع گرین و معادله لیپمن - شوینگر

معادله لیپمن - شوینگر<sup>۱</sup> برای بدست آوردن دامنه پراکندگی و همچنین رسانندگی به عنوان تابعی از انرژی فرمی الکترون‌های پراکنده شده از ناخالصی به کار برده می‌شود [۴]. همچنین با استفاده از معادله لیپمن شوینگر می‌توان رسانندگی مغناطیسی و تحول زمانی بسته موج الکترونی را محاسبه کرد [۱۹]. از مزایای این روش تکرار حل معادله انتگرالی تابع موج، و رسیدن به سری بورن است که یک تقریب مناسب برای حل مسایل پراکندگی پیچیده است. استفاده از معادله لیپمن - شوینگر در حل مسائل پراکندگی مبتنی بر استفاده از تابع گرین است. فرض کنید هامیلتونی سیستم با اختلال مستقل از زمان  $V$  به شکل زیر داده شود.

$$H = H_0 + V \quad (27.3)$$

که در آن  $H_0$  عملگر انرژی جنبشی و به شکل

$$H_0 = \frac{p^2}{2m}$$

است. در غیاب پراکننده  $V = 0$  ویژه حالات و ویژه مقادیر انرژی طبق روابط (۲۸.۳) و (۲۹.۳) داده می‌شوند.

$$\langle \mathbf{x} | \psi_{\mathbf{p},n}^0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ik_n x} \phi_n(y) \quad (28.3)$$

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + E_n \quad (29.3)$$

. در رابطه فوق  $E_n$  ها معرف ویژه مقادیر انرژی متناظر با پتانسیل محدود کننده عرضی می‌باشند. اما در حضور پراکننده معادله شرودینگر به شکل زیر نوشته می‌شود.

$$(H_0 + V) | \Psi \rangle = E | \Psi \rangle \quad (30.3)$$

<sup>۱</sup>Lippmann-Schwinger

هم  $H_0$  و هم  $H_0 + V$  طیف انرژی پیوسته‌ای را ایجاد می‌کنند. ما به حلی از رابطه (۳۰.۳) نیاز داریم که وقتی  $V \rightarrow 0$  برود، به حل معادله شرودینگر ذره آزاد و ویژه مقدار انرژی مشابه آن برسد. راه حل ارائه شده از رابطه زیر بدست می‌آید.

$$|\Psi_p^{(+)}\rangle = |\Psi_p^{(0)}\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} V |\Psi_p^{(+)}\rangle \quad (31.3)$$

رابطه (۳۱.۳) به معادله لیپمن - شوینگر معروف است، که یک معادله کت مستقل از نمایش خاصی است.

وجود  $|\Psi_p^{(0)}\rangle$  قابل انتظار است زیرا در غیاب پراکننده  $V = 0$ ،  $|\Psi_p^{(+)}\rangle$  باید به  $|\Psi_p^{(0)}\rangle$  که تابع موج ذره آزاد است برسد [۴، ۱۰].

اکنون با ضرب  $\langle x |$  از سمت چپ، تابع موج در پایه مکان محاسبه می‌شود.

$$\langle \mathbf{x} | \psi_{\mathbf{p},n}^{(\pm)} \rangle = \langle \mathbf{x} | \psi^{(0)} \rangle + \int d^3x' \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle \langle \mathbf{x}' | V | \psi_{\mathbf{p},n}^{(\pm)} \rangle \quad (32.3)$$

رابطه (۳۲.۳) یک معادله انتگرالی برای مساله پراکنندگی است که  $|\psi_{\mathbf{p},n}^{(\pm)}\rangle$  در انتگرال ظاهر می‌شود و در آن از رابطه کاملیت زیر استفاده شده است.

$$\int dx |x\rangle \langle x| = 1$$

اگر  $|\psi_{\mathbf{p},n}^{(0)}\rangle$  مولفه موج تخت حالت الکترونی با تکانه  $\mathbf{p}$  باشد، می‌توان نوشت:

$$\langle \mathbf{x} | \psi_{\mathbf{p},n}^{(0)} \rangle = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \phi_n(y) \quad (33.3)$$

بر خلاف حالت‌های مقید، حالت موج تخت (۳۳.۳) بهنجارش پذیر به واحد نبوده و در واقع یک بردار در فضای هیلبرت نیست. و بهنجارش آن به صورت زیر است:

$$\int dx \langle \mathbf{p}'_x | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}_x \rangle = \delta(\mathbf{p}_x - \mathbf{p}'_x)$$

اکنون با در نظر گرفتن تابع موج در فضای مکان ابتدا قسمت انتگرالی رابطه (۳۳.۳) را به عنوان یک تابع گرین محاسبه می‌کنیم.

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{\hbar^3}{\sqrt{m}} \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle \quad (34.3)$$

که در آن  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  است.

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^3}{\sqrt{m}} \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle &= \frac{\hbar^3}{\sqrt{m}} \sum_{n'} \int d^3p'_x \sum_{n''} \int d^3p''_x \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}'_{x,n'} \rangle \\ &\times \left\langle \mathbf{p}' \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \mathbf{p}'' \right\rangle \langle \mathbf{p}''_{x,n''} | \mathbf{x}' \rangle \end{aligned} \quad (35.3)$$

با محاسبه  $\langle \mathbf{p}'_{x,n'} | \mathbf{p}''_{x,n''} \rangle$  به صورت زیر

$$\langle \mathbf{p}' | \mathbf{p}'' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{\frac{i(p''_x - p'_x)x}{\hbar}} \int dy \phi_{n'}(y) \phi_{n''}^*(y) = \delta(\mathbf{p}'_x - \mathbf{p}''_x) \delta_{n'n''} \quad (۳۶.۳)$$

انتگرال روی  $y$  براحتی قابل حل و برابر دلتای دیراک است زیرا در راستای  $y$  حاملها توسط پتانسیل محدود کننده عرضی  $V_c$  محدود شده اند. اما انتگرال روی  $x$  براحتی قابل حل نمی باشد و الکترون ها در راستای  $x$  آزادانه حرکت می کنند. بنابراین انتگرال بر روی  $\mathbf{p}$  طبق رابطه زیر بدست می آید.

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

با قراردادن معادله بالا در رابطه (۳۵.۳) معادله انتگرالی زیر برای تابع گرین حاصل می شود.

$$G_+(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{\hbar^3}{\sqrt{m}} \sum_{n'} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp'_x}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{\frac{ip'_x(x-x')}{\hbar}}}{E - (p'^2/\sqrt{m}) + i\varepsilon} \quad (۳۷.۳)$$

اکنون با جایگذاری  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{\sqrt{m}}$  و  $p'_x = \hbar q$

$$\langle x | p'_x \rangle = \frac{e^{-ip'_x x/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

$$\langle p''_x | x \rangle = \frac{e^{-ip''_x x/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

در انتگرال رابطه (۳۷.۳) می توان آن را به شکل زیر نوشت.

$$G_+(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sum_{n'} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \left( \frac{-1}{\sqrt{2\pi}} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{e^{iq(x-x')}}{q^2 - k_{n'}^2 - i\varepsilon} \quad (۳۸.۳)$$

که در آن  $k_{n'} = \sqrt{\frac{\sqrt{m}}{\hbar^2} (E - E_{n'})}$  است. چنانچه مقدار انرژی فرمی  $E_F$  بیشتر از انرژی کف هر زیر نوار  $E_{n'}$  باشد  $n'$  مد انتشاری<sup>۲</sup> است که در اثر پتانسیل پراکنندگی از مد سمت چپ  $n$  به مد سمت راست  $n'$  منتشر شده است. اما اگر انرژی فرمی  $E_F$  کمتر از انرژی کف هر زیر نوار یعنی  $E_{n'}$  باشد  $n'$  مد محوشونده<sup>۳</sup> است. مقدار  $k_{n'}$  برای مدهای محوشونده (ناپایدار) از رابطه

$$k_{n'} = \sqrt{(\sqrt{m}/\hbar^2)(E_{n'} - E)}$$

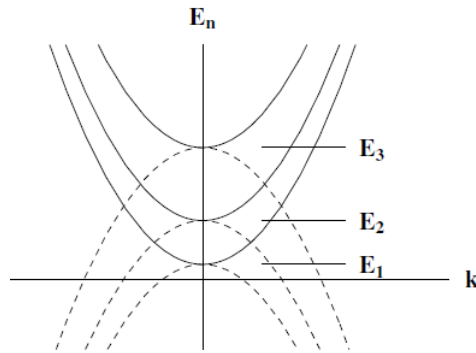
بدست می آید. و  $k_n = ik_n$  می باشد.

قسمت انتگرالی در رابطه (۳۸.۳) تابع گرین با استفاده از روش حساب مانده ها به شکل زیر حل می شود. ابتدا ریشه های مخرج را می یابیم.

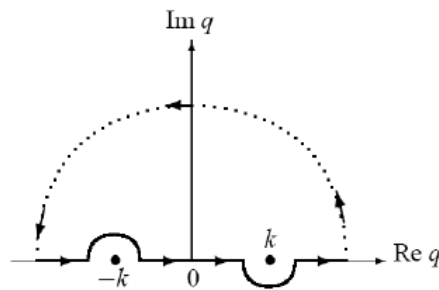
$$q^2 - k_{n'}^2 + i\varepsilon = 0$$

$$q = \pm k_{n'} \sqrt{1 \pm \frac{i\varepsilon}{k^2}} = \pm k \pm i\varepsilon$$





شکل ۱.۳: رابطه پراکندگی برای مدهای انتشاری (خط ممتد) و برای مدهای ناپایدار (خط چین)  $E < E_n$



شکل ۲.۳: طرحی برای تابع موج خروجی  $q = k_{n'} \sqrt{1 - \frac{i\varepsilon}{k_{n'}^2}}$

با توجه به شکل ۲.۳ برای بدست آوردن  $G_+$  به صورت زیر عمل می‌کنیم.

$$\begin{aligned} \frac{-1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{iq|x-x'|}}{k_{n'}^2 - q^2 \pm i\varepsilon} &= \frac{-1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\circ} \frac{e^{-iq|x-x'|}}{q + k_{n'} \sqrt{1 - \frac{i\varepsilon}{k_{n'}^2}} (q - k_{n'} \sqrt{1 - \frac{i\varepsilon}{k_{n'}^2})} \\ &- \frac{-1}{2\pi} \int_{\circ}^{\infty} \frac{e^{iq|x-x'|}}{q + k_{n'} \sqrt{1 - \frac{i\varepsilon}{k_{n'}^2}} (q - k_{n'} \sqrt{1 - \frac{i\varepsilon}{k_{n'}^2})} \\ &= \frac{-1}{2\pi} (2\pi i) \frac{e^{-ik_{n'}|x-x'|}}{2k_{n'}} - \frac{-1}{2\pi} (-2\pi i) \frac{e^{ik_{n'}|x-x'|}}{2k_{n'}} \end{aligned} \quad (39.3)$$

با کمی ساده سازی و فرض  $ik_{n'} = \kappa$  در جمع اول که بر روی مدهای ناپایدار است، نهایتاً تابع گرین برای مدهای انتشاری و مدهای ناپایدار طبق رابطه زیر داده می‌شود.

$$G_+(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sum_{n'=1}^{n_f^{max}} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \frac{e^{ik_{n'}|x-x'|}}{2ik_{n'}} - \sum_{n'=n_f^{max}+1}^{\infty} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \frac{e^{-\kappa_{n'}|x-x'|}}{2\kappa_{n'} \pm i\varepsilon} \quad (40.3)$$

در جمع اول بیشینه مدهای انتشاری در انرژی فرمی  $E$  است. و جمع دوم جمع بر روی مدهای ناپایدار است. با جایگذاری تابع گرین در رابطه (۳۲.۳) یک معادله انتگرالی برای توصیف پراکندگی

<sup>۲</sup> propagating  
<sup>۳</sup> evanescent

الکترون‌های موجود در زیرنوار  $n$  دستگاہ به سایر زیر نوارها طبق رابطه زیر به دست می‌آید.

$$\psi_{\mathbf{p},n}^{(+)}(x, y) = \psi_{\mathbf{p},n}^{(\circ)}(x, y) + \frac{\Upsilon m}{\hbar^2} \int dx' \int dy' G_+(x, y; x', y') V(x', y') \psi_{\mathbf{p},n}^{(+)}(x', y') \quad (41.3)$$

### ۷.۳ پراکندگی از پتانسیل دلتای دیراک

به عنوانی مثالی از کاربرد معادله لیمن شوینگر در ابتدا به بررسی مساله پراکندگی الکترون از یک پتانسیل دلتای دیراک (نقص بلوری) پرداخته می‌شود. سیستم مورد بررسی شامل یک سیم کوانتومی بسیار بلند است که در آن الکترون‌ها در امتداد عرضی  $y$  تحت پتانسیل محدود کننده  $V_c$  محبوس می‌باشند. و در راستای  $x$  آزاد هستند (شکل ۳.۳ را ببینید). ویژه مقادیر انرژی طبق روابط زیر تعریف می‌شوند.

$$E_n = (n + \frac{1}{4}) \hbar \omega_c$$

با تعریف پتانسیل دلتای دیراک به صورت زیر

$$V(x, y) = \gamma \delta(x) \delta(y - y_i) \quad (42.3)$$

تابع موج پراکندگی برابر خواهد شد با:

$$\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}(x, y) = \psi_{\mathbf{p},n}^{(\circ)}(x, y) + \frac{1}{D} \frac{\Upsilon m}{\hbar^2} G_+(x, y; \circ, y_i) \psi_{\mathbf{p}}^{(\circ)}(\circ, y_i) \quad (43.3)$$

که در آن

$$D = 1 - \sum_{n'=1}^{n_F^{max}} \frac{s_{nn'}}{\Upsilon k_n} + \sum_{n_F^{max}+1}^{n_c} \frac{s_{nn'}}{\Upsilon k_n} \quad (44.3)$$

و

$$s_{nn'} = \frac{\Upsilon m}{\hbar^2} \phi_{n'}(y) \phi_n'(y') \quad (45.3)$$

در آخر با جایگذاری تابع گرین، تابع موج کل حاصل از پتانسیل پراکندگی دلتا که شامل مجموع موج فرودی بعلاوه جمله ناشی از پراکننده می‌باشد به شکل زیر بدست می‌آید.

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{p}}^{(+)}(x, y) &= \frac{1}{\sqrt{\Upsilon \pi}} e^{ik_n x} \phi_n(y) + \sum_{n'=1}^{n_F^{max}} \frac{1}{\sqrt{\Upsilon \pi}} e^{ik_{n'} |x|} \phi_{n'}(y) \frac{-i}{\Upsilon k_{n'} D} s_{nn'} \\ &+ \sum_{n_F^{max}+1}^{n_c} \frac{1}{\sqrt{\Upsilon \pi}} e^{-k_{n'} |x|} \phi_{n'}(y) \frac{-1}{\Upsilon k_{n'} D} s_{nn'} \end{aligned} \quad (46.3)$$

دامنه گذار الکترون‌ها از زیرنوار  $n$  به زیرنوار  $n'$  که تحت پتانسیل پراکندگی دلتا واقع شده‌اند طبق رابطه زیر بیان می‌شود.

$$t_{nn'}(E) = \delta_{nn'} - \frac{i}{\Upsilon k_{n'} D} s_{nn'} \quad (47.3)$$

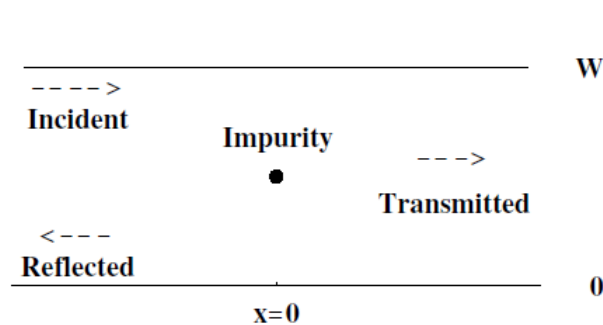
ضرایب انتقال جریان نیز با کمک  $t_{nn'}(E)$  بدست می‌آیند.

$$T_{nn'} = \frac{k_{n'}}{k_n} t_{nn'} t_{nn'}^* \quad (48.3)$$

رسانندگی چنین سیستمی برابر است با:

$$G = \frac{e^2}{\hbar\pi} T_{nn'} \quad (49.3)$$

اکنون با استفاده از روابط بدست آمده برای ضرایب عبور و رسانندگی و با کمک برنامه نویسی فرترن به بررسی سیستم مورد نظر می‌پردازیم.



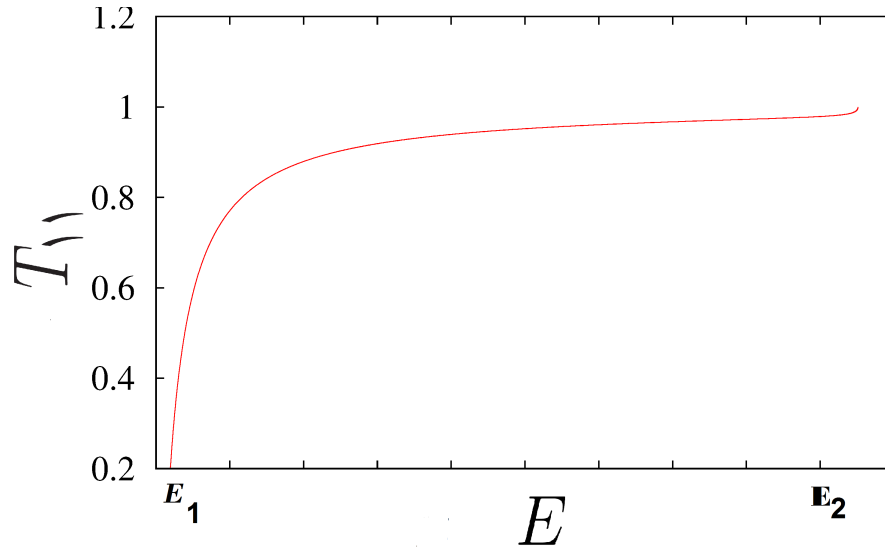
شکل ۳.۳: الکترون فرودی از سمت چپ توسط ناخالصی موجود در سیم کوانتومی دو بعدی پراکنده می‌شود. طول سیم بسیار بلند و عرض آن  $W = 30nm$  می‌باشد.

همانطور که در بالا اشاره شد دستگاه مورد بررسی یک سیم کوانتومی بلند است که در امتداد  $y$  عرض آن  $W = 30nm$  و جرم موثر الکترون  $0.067$  جرم الکترون آزاد ( $GaAs$ )  $m^* = 0.067m_0$  است. برای بررسی ابتدا دو مد شامل یک مد انتشاری ( $n = 1$ ) و یک مد ناپایدار ( $n = 2$ ) را در نظر گرفته و نمودار احتمال عبور را بر حسب انرژی فرمی رسم خواهیم کرد. الکترون‌ها تحت تاثیر پتانسیل پراکندگی حاصل از تابع دلتا از حالت اولیه،  $n = 1$  پراکنده شده و در حالت ناپایدار  $n = 2$  تجمع می‌کنند زمانی که انرژی فرمی برابر انرژی کف زیرنوار دوم باشد ( $E = E_2$ ) در رابطه (۵۰.۳) انتقال کامل خواهد بود ( $T_{11} = 1$ ).

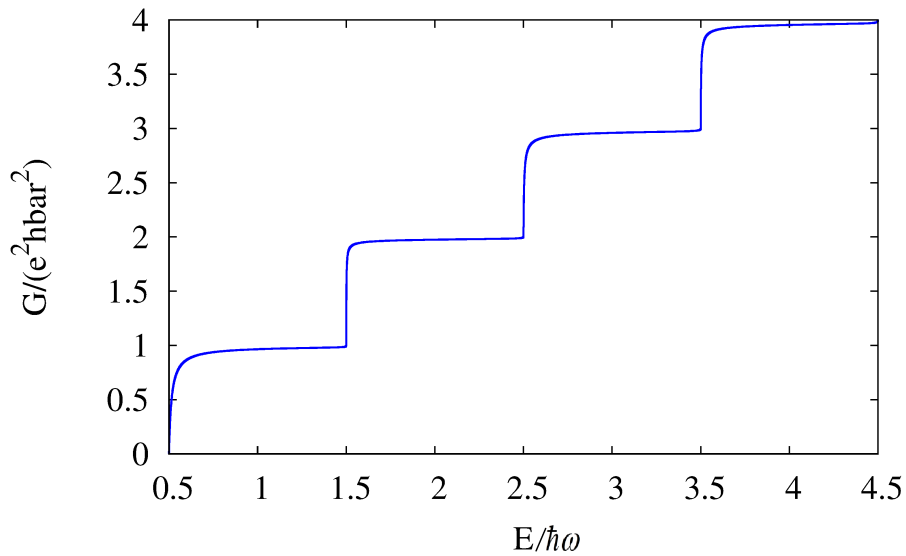
$$t_{11}(E) = 1 - \frac{i}{2k_1 + i s_{11} + k_1/\kappa_2 s_{22}} s_{11} \quad (50.3)$$

شکل (۴.۳) احتمال انتقال را بر حسب انرژی فرمی نشان می‌دهد. در حضور پتانسیل پراکننده دافعه،  $V_a$  نمودار  $T_{11}$  با افزایش انرژی به طور پیوسته افزایش می‌یابد. به محض رسیدن انرژی فرمی به مینیمم انرژی زیرنوار دوم، الکترون‌ها از مد  $n = 1$  پراکنده شده و در مد ناپایدار  $n = 2$  ظاهر می‌شوند. در این صورت احتمال انتقال ماکزیمم و برابر  $T_{11} = 1$  خواهد شد و تراپرد تقریباً بالستیک است. قله به وجود آمده مربوط به حالت تشدید انرژی الکترون و تراز انرژی فرمی می‌باشد.

شکل (۵.۳) نمودار رسانندگی بر حسب انرژی فرمی را که در آن ناخالصی در مکان  $y_i = -1/12W$



شکل ۴.۳: احتمال انتقال  $T_{11}$  به عنوان تابعی از انرژی فرمی در بازه انرژی  $E_1 - E_2$

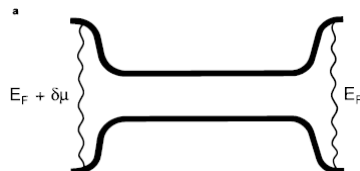


شکل ۵.۳: رسانندگی به عنوان تابعی از انرژی فرمی از پتانسیل پراکندگی حاصل از تابع دلتا در دستگاه سیم کوانتومی

قرار داشته و شدت قدرت پراکندگی  $\gamma = 12 \text{ feV}$  می باشد را نشان می دهد. انحناى ابتدای نمودار رسانندگی در مینیمم هر زیرنوار مربوط به افزایش ضریب بازتاب بلافاصله بالای هر زیرنوار می باشد. هنگامی که انرژی فرمی به مینیمم انرژی هر زیرنوار می رسد، رسانندگی بالستیک خواهد بود به عبارتی اثر شفافیت کامل رخ می دهد.

### ۸.۳ معادله لاندائور بوتیکر

یکی از روش‌های محاسبه رسانندگی توسط لاندائور<sup>۴</sup> معرفی شده است. دو منبع گسترده گاز الکترونی را که یک اختلاف جزئی  $\delta n$  در چگالی الکترون باهم دارند تصور کنید. این اختلاف باعث شارش جریان  $J$  توسط الکترون‌ها با انرژی بین انرژی‌های  $E_F$  و  $E_F + \delta\mu$  در محدوده‌های بالا و پایین چگالی از طریق یک کانال باریک بین این دو منبع می‌شود (شکل ۶.۳).



شکل ۶.۳: سیستم دوکاناله

برای یک  $\delta n$  کوچک برحسب اختلاف انرژی فرمی (یا اختلاف انرژی شیمیایی) می‌توان نوشت:

$$\delta\mu = \delta n / \rho(E_F),$$

که  $\rho(E_F)$  چگالی حالت‌ها در انرژی  $E_F$  در منبع است. ثابت پخش  $D$  توسط رابطه  $J = D\delta n$  تعریف می‌شود و با رسانندگی طبق رابطه زیر ارتباط دارد.

$$G = e^2 \rho(E_F) D \quad (۵۱.۳)$$

رابطه اخیر تعمیم رابطه انیشتن است. چون در حال حاضر جریان پخش توسط الکترون‌ها در محدوده باریک  $\delta\mu$  بالای  $E_F$  ایجاد شده است (در دمای پایین)، ثابت پخش را می‌توان از خواص سطح فرمی کانال بدست آورد.

برای محاسبه ثابت پخش، ابتدا یک سیم الکترونی ایده آل را بین دو منبع در نظر بگیرید. یعنی الکترونی که در نزدیکی سطح فرمی در منبع  $E_F + \delta\mu$  به موجبر تزریق شده است به منبع دیگری انتشار یابد بدون اینکه منعکس شود.

$$J_n = \int_{E_F}^{E_F + \delta\mu} g_s g_v \left( 2\pi \frac{dE_n(k)}{dk} \right)^{-1} \frac{dE_n(k)}{\hbar dk} = \frac{g_s g_v}{h} \delta\mu \quad (۵۲.۳)$$

که مستقل از شاخص مد و انرژی فرمی است. جریان در کانال به طور مساوی بین  $N$  مد در انرژی فرمی به اشتراک گذاشته شده، چون سرعت گروه و چگالی حالت‌ها از بین رفته است.

پراکندگی درون یک کانال باریک بخشی از جریان تزریقی را به منبع اولیه منعکس می‌کند. اگر  $T_n$  کسری از جریان انتقالی باشد، آنگاه جریان پخش کل در کانال از رابطه  $T = \frac{2}{h} \delta\mu \sum_{n=1}^N T_n$  بدست می‌آید. با استفاده از روابط  $J = D\delta n$  و  $\delta\mu = \frac{\delta n}{\rho(E_F)}$  برای رسانندگی بدست می‌آوریم:

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{n=1}^N T_n \quad (۵۳.۳)$$

<sup>۴</sup>landauer

همچنین

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{n,m=1}^N |t_{mn}^2| = \frac{2e^2}{h} \text{Tr} \mathbf{t} \mathbf{t}^\dagger \quad (54.3)$$

در اینجا  $|t_{mn}^2| = \sum_{m=1}^N T_n$  ماتریس  $t$  دامنه احتمال انتقال از حالت  $n$  به  $m$  است. این رابطه که ارتباط بین رسانندگی و ضرایب انتقال را می‌دهد به روش لاندائور معروف است. مشتقات معادله (53.3) بر اساس فرمول کوبو از نظریه پاسخ خطی توسط نویسندگان مختلف داده شده است. در یک بعد این روابط به رابطه (55.3) که معادله اصلی لاندائور است کاهش می‌یابند. ضریب  $e^2/h$  کوانتوم رسانندگی است.

$$G = \frac{e^2}{h} T(1 - T)^{-1} \quad (55.3)$$

با تعمیم رابطه لاندائور – بوتیکر می‌توان آن را برای بدست آوردن رسانندگی سیستم‌های چند ترمیناله نیز استفاده کرد [20، 21].

# فصل ۴

## ترابرد الکترونی در سیم کوانتومی

### ۱.۴ مقدمه

در این فصل به حل مساله پراکندگی الکترون در یک سیم کوانتومی دوبعدی<sup>۱</sup> (منظور یک سیم کوانتومی است که درون یک چاه کوانتومی قرار گرفته است) بسیار بلند تحت تاثیر پتانسیل پراکندگی ناشی از حضور یک نقطه کوانتومی در دستگاه سیم کوانتومی پرداخته می شود. رهیافت مورد استفاده برای محاسبه تابع موج دستگاه معادله لیپمن شوینگر و برای محاسبه رسانندگی معادله لاندائور بوتیکر می باشند.

### ۲.۴ حالت های الکترونی پراکنده شده تحت تاثیر پتانسیل پراکندگی

یک دستگاه شامل یک سیم کوانتومی دو بعدی بسیار بلند در صفحه  $(x, y)$  که در آن ترابرد الکترون ها در راستای عرضی  $y$  تحت اثر پتانسیل محدود کننده سهمی گون،

$$V_c = \frac{1}{2} m \omega_c^2 y^2$$

بوده و در راستای  $x$  آزادانه حرکت می کنند را در نظر بگیرید. هامیلتونی دستگاه در حضور پتانسیل پراکندگی  $V(x, y)$  عبارت است از:

$$H = H_0 + V(x, y) \quad (1.4)$$

<sup>۱</sup>quantum well-wire

که در آن  $H_0$  هامیلتونی دستگاه با پتانسیل محدودیت کوانتومی  $V_c$  است. ویژه مقادیر و ویژه حالات چنین سیستمی که پتانسیل محدود کننده عرضی آن به شکل نوسانگر هماهنگ ساده یک بعدی در نظر گرفته شده است، طبق روابط زیر داده می شود.

$\phi_n(y)$  ها ویژه حالات نوسانگر هماهنگ ساده یک بعدی بوده و طبق رابطه زیر تعریف می شوند.

$$\phi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2}^n n! y_0 \sqrt{\pi}}} H_n(y) \quad (2.4)$$

$E_n$  ها نیز مقادیر مجاز انرژی در کف زیرنوارهای دستگاه الکترونی مورد مطالعه را بدست می دهند و برابر

$$E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega.$$

می باشد.  $H_n(y)$  توابع هرمیت هستند و طبق رابطه بازگشتی زیر بدست می آیند.

$$H_0(y) = 1$$

$$H_1(y) = 2y$$

$$H_{n+1}(y) = 2yH_n(y) - 2nH_{n-1}(y)$$

در اینجا  $V(x, y)$  پتانسیل پراکندگی ناشی از یک نقطه کوانتومی در مسیر ترابرد الکترونی است. در فصل قبل اشاره شد که با حل معادله شرودینگر در حضور پراکننده رابطه لیپمن - شوینگر که یک معادله کت مستقل از نمایش بوده و به رابطه زیر منجر می شود.

$$\psi_{\mathbf{p},n}^{(+)}(x, y) = \psi_{\mathbf{p},n}^{(0)}(x, y) + \frac{\sqrt{m}}{\hbar^2} \int dx' \int dy' G_+(x, y; x' y') V(x', y') \psi_{\mathbf{p},n}^{(+)}(x', y') \quad (3.4)$$

حال با در نظر گرفتن پتانسیل پراکندگی

$$V(x', y') = V_a e^{-\beta(x'^2 - (y'-b)^2)} \quad (4.4)$$

که در آن  $V_a$  معیاری از قدرت پتانسیل پراکننده می باشد، و جایگذاری تابع گرین رابطه (۳.۴) برای تابع موج  $\psi_{\mathbf{p},n}^{(+)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  برابر می شود با:

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{p},n}^{(+)}(x, y) &= \psi_{\mathbf{p},n}^{(0)}(x, y) + \frac{\sqrt{m}}{\hbar^2} \int dx' \int dy' V_a e^{-\beta(x'^2 - (y'-b)^2)} \psi_{\mathbf{p},n}^{(+)}(x', y') \\ &\times \left\{ \sum_{n'=1}^{n_f^{max}} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \frac{ik_{n'} |x-x'|}{\sqrt{ik_{n'}}} - \sum_{n'=n_f^{max}+1}^{\infty} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \frac{-\kappa_{n'} |x-x'|}{\sqrt{\kappa_{n'} \pm i\varepsilon}} \right\} \end{aligned} \quad (5.4)$$

معادله (۵.۴) به دلیل حضور تابع موج نامعلوم  $\psi_{\mathbf{p},n}^{(+)}(x', y')$  در قسمت انتگرالی هنوز مستقیماً برای محاسبه تابع موج پراکندگی مناسب نیست. بنابراین با استفاده از تقریب بورن به حل آن می پردازیم.



### ۳.۴ تقریب بورن

چنانچه اثر پراکننده خیلی قوی نباشد، به نظر می‌رسد جایگزینی  $\psi_{\mathbf{p},n}^{(+)}(x', y')$  با تابع موج فرودی  $\psi_{\mathbf{p},n}^{(\circ)}(x', y')$  تقریب خوبی باشد. بنابراین

$$\psi_{\mathbf{p},n}^{(+)}(x, y) = \psi_{\mathbf{p},n}^{(\circ)}(x, y) + \frac{\Upsilon m}{\hbar^2} \int dx' \int dy' G_+(x, y; x' y') V(x', y') \psi_{\mathbf{p},n}^{(\circ)}(x', y') \quad (۶.۴)$$

اگر  $\langle \mathbf{x} | \psi_{\mathbf{p},n}^{(+)} \rangle$  در داخل محدوده پتانسیل پراکننده (یعنی ناحیه‌ای که  $V(x, y)$  محسوس است) با  $\psi_{\mathbf{p},n}^{(\circ)}(x, y)$  خیلی متفاوت نباشد می‌توان از چنین تقریبی که به تقریب مرتبه اول بورن معروف است استفاده کرد. اینک مراتب بالاتر تقریب بورن طبق رابطه زیر داده می‌شوند.

$$\psi_{\mathbf{p},n}^{(+)} = \psi_{\mathbf{p},n}^{(\circ)}(x, y) + \psi_{\mathbf{p},n}^{(\prime)}(x, y) + \psi_{\mathbf{p},n}^{(\prime\prime)}(x, y) + \dots$$

که در آن  $\psi_{\mathbf{p},n}^{(\circ)}(x, y)$  موج فرودی است و

$$\psi_{\mathbf{p},n}^{(\prime)}(\mathbf{x}) = \frac{\Upsilon m}{\hbar^2} \int d^{\prime}x \int d^{\prime}y G_+(\mathbf{x}, \mathbf{x}') V(\mathbf{x}') \psi^{(\circ)}(\mathbf{x}')$$

$$\psi_{\mathbf{p},n}^{(\prime\prime)}(\mathbf{x}) = \left(\frac{\Upsilon m}{\hbar^2}\right)^2 \int d^{\prime}x' \int d^{\prime\prime}x'' G_+(\mathbf{x}, \mathbf{x}') V(\mathbf{x}') G_+(\mathbf{x}', \mathbf{x}'') V(\mathbf{x}'') \psi^{(\circ)}(\mathbf{x}'')$$

...

### ۴.۴ حالت‌های الکترونی تحت تاثیر پتانسیل نقطه کوانتومی

حال با جایگذاری روابط (۴.۴) و (۴.۳) و تقریب مرتبه اول سری بورن رابطه (۵.۴) به شکل زیر در خواهد آمد.

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{p},n}^{(+)}(x, y) = & \psi_{\mathbf{p},n}^{(\circ)}(x, y) + \frac{\Upsilon m V_{a_0}}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_{-\infty}^{\infty} dy' \left\{ \sum_{n'=1}^{n_f^{max}} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \frac{e^{ik_{n'}|x-x'|}}{\Upsilon ik_{n'}} \right. \\ & \left. - \sum_{n'=n_f^{max}+1}^{\infty} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \frac{e^{-\kappa_{n'}|x-x'|}}{\Upsilon \kappa_{n'}} \right\} e^{-\beta(x'^2 - (y'-b)^2)} \psi_{\mathbf{p},n}^{(\circ)}(x', y') \quad (۷.۴) \end{aligned}$$

برای حل انتگرال بالا ابتدا قسمت مدهای انتشاری را در نظر گرفته و سپس حل مدهای ناپایدار به روشی مشابه صورت می‌گیرد.

برای اینکار بازه انتگرال گیری روی  $x'$  را به دلیل وجود عبارت قدر مطلق  $e^{ik_{n'}|x-x'|}$  به صورت زیر به دو بخش تقسیم خواهیم کرد. در ادامه با جایگذاری روابط (۲.۴) و (۳.۳) رابطه زیر برای انتگرال مدهای

انتشاری بدست خواهد آمد.

$$\begin{aligned}
 A_{n,n'}(x', y') &= \frac{\sqrt{m}V_a}{y_0 \sqrt{\pi \hbar^2}} \sum_{n'=1}^{n_f^{max}} \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2n} \sqrt{2n'} n! n'!}} \frac{\phi_{n'}(y)}{\sqrt{\sqrt{2} \pi \sqrt{ik_{n'}}}} \int_{-\infty}^{\infty} dy' \exp(-\beta(y' - b)^2) - y'^2/y_0^2 \\
 &\times H_n(y'/y_0) H_{n'}(y'/y_0) \left\{ \int_{-\infty}^x dx' \exp(ik_{n'}(x - x') - \beta(x'^2) + ik_n x') \right. \\
 &\left. + \int_x^{\infty} dx' \exp(-ik_{n'}(x - x') - \beta(x'^2) + ik_n x') \right\} \quad (۸.۴)
 \end{aligned}$$

برای حل انتگرال روی  $y'$  با مربع کردن تابع نمایی به صورت زیر عمل می‌کنیم [۲۲].

$$\begin{aligned}
 B_{nn'}(y') &= \int_{-\infty}^{\infty} dy' \exp(-\beta(y' - b)^2) - y'^2/y_0^2 H_n(y'/y_0) H_{n'}(y'/y_0) \\
 &= e^{-\left(\frac{\beta y_0 + 1}{y_0^2}\right)} \int_{-\infty}^{\infty} dy' \exp\left(y' - \left(\frac{\beta y_0^2}{1 + \beta y_0}\right)\right)^2 H_n(y'/y_0) H_{n'}(y'/y_0) \quad (۹.۴)
 \end{aligned}$$

با تغییر متغیرهای زیر

$$\exp\left\{-\left(\frac{\beta y_0 + 1}{y_0^2}\right) \left(y' - \left(\frac{\beta y_0^2}{1 + \beta y_0}\right)\right)^2\right\} = \exp\left(\frac{y' \sqrt{\beta y_0^2 + 1}}{y_0} - \frac{\beta y_0^2}{\sqrt{\beta y_0^2 + 1}}\right)^2$$

$$\frac{y'}{y_0} \sqrt{\beta y_0^2 + 1} = z$$

$$H_n(y'/y_0) = H_n\left(\frac{z}{\sqrt{1 + \beta y_0^2}}\right)$$

$$dy' = \frac{y_0}{\sqrt{1 + \beta y_0^2}} dz$$

بالاخره رابطه (۹.۴) برابر می‌شود با:

$$\begin{aligned}
 B_{nn'}(y') &= \frac{y_0}{\sqrt{1 + \beta y_0^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dz \exp\left(\frac{y' \sqrt{\beta y_0^2 + 1}}{y_0} - \frac{\beta y_0^2}{\sqrt{\beta y_0^2 + 1}}\right)^2 \\
 &\times H_n\left(\frac{z}{\sqrt{1 + \beta y_0^2}}\right) H_{n'}\left(\frac{z}{\sqrt{1 + \beta y_0^2}}\right) \quad (۱۰.۴)
 \end{aligned}$$

نهایتاً انتگرال روی  $y'$  با استفاده از رابطه

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-r)^2} H_m(\alpha x) H_n(\alpha x) dx = \pi^{1/2} \sum_{k=0}^{\min(m,n)} \sqrt{k!} \binom{m}{k} \binom{n}{k} (1 - \alpha^2)^{\frac{m+n}{2} - k} H_{m+n-2k}\left(\frac{\alpha r}{(1 - \alpha^2)^{1/2}}\right)$$

و انجام برخی ساده سازی‌ها طبق رابطه زیر بدست می‌آید.

$$II_{nn'}(y') = \frac{y_0}{\sqrt{1 + \beta y_0^2}} \sqrt{\pi} \sum_{s=0}^{\min(n,n')} \sqrt{s!} \binom{n}{s} \binom{n'}{s} \left(\frac{\beta y_0^2}{1 + \beta y_0^2}\right)^{\frac{n+n'}{2} - s} H_{n+n'-2s}\left(b \frac{\sqrt{\beta}}{\sqrt{1 + \beta y_0^2}}\right) \quad (۱۱.۴)$$

برای محاسبه انتگرال روی  $x'$  خواهیم داشت:

$$C_{nn'}(x') = \left\{ \int_{-\infty}^x dx' \exp(ik_{n'}(x-x') - \beta(x')^2) + ik_n x' \right. \\ \left. + \int_x^{\infty} dx' \exp(-ik_{n'}(x-x') - \beta(x')^2) + ik_n x' \right\} \quad (12.4)$$

با مربع کردن توان تابع نمایی و تغییر متغیرهای زیر

$$(x' - \frac{i}{\beta}(k_n - k_{n'})) = q$$

$$(x' - \frac{i}{\beta}(k_n + k_{n'})) = q'$$

و همچنین تغییر کران انتگرال رابطه (12.4) به شکل زیر در می‌آید.

$$C_{nn'}(x') = \exp \left\{ ik_{n'} x - \frac{(k_n - k_{n'})^2}{4\beta} \right\} \left\{ \int_{-\infty}^{\circ} dq e^{-\beta q} + \int_{\circ}^{x - \frac{i}{\sqrt{\beta}}(k_n - k_{n'})} dq e^{-\beta q} \right\} \\ + \exp \left\{ -ik_{n'} x - \frac{(k_n + k_{n'})^2}{4\beta} \right\} \left\{ \int_{\circ}^{\infty} dq' e^{-\beta q'} - \int_{\circ}^{x - \frac{i}{\sqrt{\beta}}(k_n + k_{n'})} dq' e^{-\beta q'} \right\} \quad (13.4)$$

در روابط فوق انتگرال‌های مشابه انتگرال با کران مزدوج به راحتی قابل حل نبوده و به عنوان توابع  $erf$  شناخته می‌شوند برای چنین انتگرالی از روابط زیر استفاده می‌شود. با توجه به روابط زیر

$$z = x + iy \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt = erf z \\ \int_0^{\infty} dx e^{-\beta x^2} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}$$

نهایتاً برای انتگرال  $x'$  بدست می‌آید [22، 23].

$$C_{nn'}(x') = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \left\{ \exp \left\{ ik_{n'} x - \frac{(k_n - k_{n'})^2}{4\beta} \right\} \left\{ 1 + erf \sqrt{\beta} \left( x - \frac{i}{\sqrt{\beta}}(k_n - k_{n'}) \right) \right\} \right. \\ \left. + \exp \left\{ -ik_{n'} x - \frac{(k_n + k_{n'})^2}{4\beta} \right\} \left\{ 1 - erf \sqrt{\beta} \left( x - \frac{i}{\sqrt{\beta}}(k_n + k_{n'}) \right) \right\} \right\} \quad (14.4)$$

سرانجام انتگرال روی مدهای انتشاری به شکل زیر بدست می‌آید.

$$A_{nn'}(x, y) = \frac{mV_{a_s}}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \sum_{n'=1}^{n_f^{max}} \sqrt{\frac{n!n'}{2^n 2^{n'}}} \frac{\phi_{n'}(y)}{\sqrt{2\pi} 2^{ik_{n'}}} \frac{1}{\sqrt{1 + \beta y_s^2}} \sum_{s=0}^{\min(n,m)} \frac{2^s}{s!(n-s)!(n'-s)!} \\ \times \left( \frac{\beta y_s^2}{1 + \beta y_s^2} \right)^{\frac{n+m}{2} - s} H_{n+m-2s} \left( b \frac{\sqrt{\beta}}{\sqrt{1 + \beta y_s^2}} \right) \left\{ \exp \left\{ \pm ik_{n'} x - \frac{(k_n \mp k_{n'})^2}{4\beta} \right\} \right. \\ \left. \times \left\{ 1 \pm erf \sqrt{\beta} \left( x - \frac{i}{\sqrt{\beta}}(k_n \mp k_{n'}) \right) \right\} \right\} \quad (15.4)$$

با انجام محاسباتی مانند آنچه تا کنون صورت گرفته است انتگرال مدهای ناپایدار نیز به شکل زیر حاصل می‌شود.

$$\begin{aligned}
 A'_{nn'}(x', y') &= \frac{-mV_{a_0}}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \sum_{n=n_f^{max}+1}^{n_c} \sqrt{\frac{n!n'}{2^n 2^{n'}}} \frac{\phi_{n'}(y)}{\sqrt{2\pi} 2^{\kappa_{n'}}} \frac{1}{\sqrt{1+\beta y_0^2}} \\
 &\times \sum_{s=0}^{min=n, n'} \frac{2^s}{s!(n-s)!(n'-s)!} \left(\frac{\beta y_0^2}{1+\beta y_0^2}\right)^{\frac{n+n'}{2}-s} H_{n+n'-2s} \left(b \frac{\sqrt{\beta}}{\sqrt{1+\beta y_0^2}}\right) \\
 &\times \exp \left\{ \mp \kappa_{n'} x + \frac{(ik_n \pm \kappa_{n'})^2}{4\beta} \right\} \left\{ 1 \pm erf \sqrt{\beta} \left(x - \frac{1}{\sqrt{\beta}} (ik_n \mp \kappa_{n'})\right) \right\}
 \end{aligned} \tag{۱۶.۴}$$

با توجه به روابط (۱۵.۴) و (۱۶.۴) و جایگذاری آنها در رابطه (۷.۴) تابع موج حاصل از پتانسیل پراکندگی یک نقطه کوانتومی که در مسیر ترابرد الکترون‌ها در دستگاه سیم کوانتومی حضور دارد به صورت مجموع یک موج فرودی بعلاوه جمله‌ای که ناشی از برهمکنش الکترون‌ها با پتانسیل پراکندگی نقطه کوانتومی است، می‌باشد.

$$\begin{aligned}
 Q_s &= \sum_{s=0}^{max(n, n')} \frac{2^s}{s!(n-s)!(n'-s)!} \left(\frac{\beta y_0^2}{1+\beta y_0^2}\right)^{\frac{n+m}{2}-s} H_{n+m-2s} \left(b \frac{\sqrt{\beta}}{\sqrt{1+\beta y_0^2}}\right) \\
 M_k^{(\pm)} &= \exp \left\{ -(k_n \mp k_{n'})^2 / 4\beta \right\} \left\{ 1 \pm erf \sqrt{\beta} \left(x - (k_n \mp k_{n'}) / \sqrt{4\beta}\right) \right\} \\
 M_\kappa^{(\mp)} &= \exp \left\{ (ik_n \pm \kappa_{n'})^2 / 4\beta \right\} \left\{ 1 \pm erf \sqrt{\beta} \left(x - (ik_n \pm \kappa_{n'}) / \sqrt{4\beta}\right) \right\}
 \end{aligned}$$

سرانجام با توجه به روابط فوق تابع موج ناشی از پتانسیل پراکندگی برابر است با:

$$\begin{aligned}
 \psi^{(+)}(x, y) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_n x} \phi_n(y) + \frac{2mV_{a_0}}{\hbar^2} \exp \left\{ -\beta b^2 + \left(\frac{\beta b y_0}{1+\beta y_0^2}\right)^2 \right\} \\
 &\times \sqrt{\frac{n!}{2^n}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \left[ \sum_{n'=1}^{n_f^{max}} \sqrt{\frac{n!}{2^{n'}}} \frac{1}{2ik_{n'}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm ik_{n'} x} \phi_{n'}(y) Q_s M_k^{(\pm)} \right. \\
 &\left. - \sum_{n'=n_f^{max}+1}^{n_c} \sqrt{\frac{n!}{2^{n'}}} \frac{1}{2\kappa_{n'}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\mp \kappa_{n'} x} \phi_{n'}(y) Q_s M_\kappa^{(\mp)} \right]
 \end{aligned} \tag{۱۷.۴}$$

با فرض دامنه گذار بین زیر نواری تابع موج الکترون‌های پراکنده شده به شکل

$$\psi_{n'}^{(+)}(x, y) = t_{nn'} \psi_n^{(+)}$$

و نهایتاً با استفاده از رابطه (۱۷.۴) دامنه گذار تابع موج از زیر نواری  $n$  به زیر نواری  $n'$  برابر خواهد بود با:

$$\begin{aligned}
 t_{nn'} &= \delta_{nn'} + \frac{2mV_{a_0}}{\hbar^2} \exp \left\{ -\beta b^2 + \left(\frac{\beta b y_0}{1+\beta y_0^2}\right)^2 \right\} \sqrt{\frac{n!}{2^n}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \\
 &\times \left[ \sum_{n'=1}^{n_f^{max}} \sqrt{\frac{n!}{2^{n'}}} \frac{1}{2ik_{n'}} Q_s M_k^{(+)} - \sum_{n'=n_f^{max}+1}^{n_c} \sqrt{\frac{n!}{2^{n'}}} \frac{1}{2\kappa_{n'}} Q_s M_\kappa^{(-)} \right]
 \end{aligned}$$

با انجام برخی ساده سازی‌ها و استفاده از روابط زیر و در فواصل دور از پتانسیل پراکندگی

$$erfz = erf(x + iy) = erf x + \frac{i}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} \int_0^y dt e^{t^2} \cos 2xt + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^y dt e^{t^2} \sin 2xt$$

$$erf(\infty) = 1$$

دامنه گذار به رابطه زیر کاهش می‌یابد.

$$t_{nn'} = \delta_{nn'} + \frac{2mV_{a_0}}{\hbar^2} \exp\{-\beta b^2 + (\frac{\beta b y_0}{1 + \beta y_0^2})^2\} \sqrt{\frac{n!}{2^n}} \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}$$

$$\times \left[ \sum_{n'=\backslash}^{n_f^{max}} \sqrt{\frac{n!}{2^{n'}}} \frac{1}{\sqrt{ik_{n'}}} Q_s e^{-(k_n - k_{n'})^2 / 4\beta} - \sum_{n'=n_f^{max}+1}^{n_c} \sqrt{\frac{n!}{2^{n'}}} \frac{1}{\sqrt{\kappa_{n'}}} Q_s e^{i(k_n + \kappa_{n'})^2 / 4\beta} \right]$$

(۱۸.۴)

همچنین دامنه بازتابی تابع موج از رابطه زیر تعیین می‌شود.

$$r_{nn'} = \frac{2mV_{a_0}}{\hbar^2} \exp\{-\beta b^2 + (\frac{\beta b y_0}{1 + \beta y_0^2})^2\} \sqrt{\frac{n!}{2^n}} \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}$$

$$\times \left[ \sum_{n'=\backslash}^{n_f^{max}} \sqrt{\frac{n!}{2^{n'}}} \frac{1}{\sqrt{ik_{n'}}} Q_s M_k^{(-)} - \sum_{n'=n_f^{max}+1}^{n_c} \sqrt{\frac{n!}{2^{n'}}} \frac{1}{\sqrt{\kappa_{n'}}} Q_s M_{\kappa}^{(+)} \right]$$

(۱۹.۴)

دامنه گذار نواری  $t_{nn'}$  نشاندهنده ذراتی است که در اثر پتانسیل پراکندگی حاصل از نقطه کوانتومی از مد  $n$  به مد  $n'$  انتقال یافته‌اند را نشان می‌دهد. اکنون احتمال عبور الکترون‌هایی که در زیر نوار  $n$  تحت تاثیر پتانسیل پراکندگی قرار می‌گیرند و در زیر نوار  $n'$  ظاهر می‌شوند برابر است با:

$$\tilde{t}_{nn'} = \sqrt{\frac{k_{n'}}{k_n}} t_{nn'} \tag{۲۰.۴}$$

نهایتاً ضرایب انتقال جریان  $T_{nn'}$  در اثر پتانسیل پراکندگی به صورت زیر داده می‌شود.

$$T_{nn'} = \frac{k_{n'}}{k_n} t_{nn'} t_{nn'}^* \tag{۲۱.۴}$$

رابطه اخیر احتمال پیدا شدن یک الکترون در حال انتشار در مد  $n$  (سمت چپ) را در مد  $n'$  (سمت راست) می‌دهد.

نهایتاً با استفاده از رابطه لاندائور بوتیکر که ارتباط بین رسانندگی و ضرایب عبور را می‌دهد [۲۴، ۲۵، ۵]. رسانایی دستگاه سیم کوانتومی طبق رابطه لاندائور بوتیکر به صورت رابطه زیر تعریف می‌شود [۴].

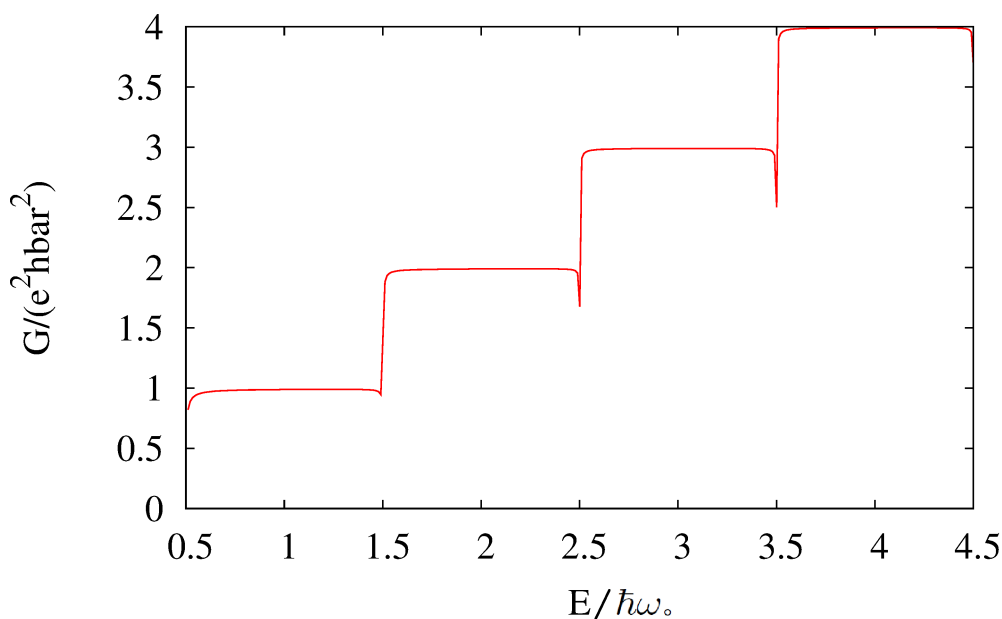
$$G = \frac{e^2}{\pi \hbar} \sum_{nn'} T_{nn'} = \frac{e^2}{\pi \hbar} \sum_{nn'} \frac{k_{n'}}{k_n} t_{nn'} t_{nn'}^* \tag{۲۲.۴}$$

برای بررسی نتایج حاصل از محاسبات صورت گرفته دستگاه سیم کوانتومی را از جنس  $GaAs/AlGaAs$

با جرم موثر  $m^* = 0.67m_0$  و با در نظر گرفتن ناخالصی در مکان  $b = 20\text{nm}$  مورد مطالعه قرار داده و در باره نتایج حاصل بحث خواهیم کرد. محاسبات صورت گرفته در این بخش و همچنین نمودارهای رسم شده همگی با در نظر گرفتن  $20$  مد بدست آمده‌اند. در نظر گرفتن تعداد حالت‌های بیشتر نیز با اختلاف کوچک قابل چشم پوشی همین نتایج را خواهند داد.

## ۵.۴ بررسی رسانندگی سیم کوانتومی در حضور پتانسیل پراکندگی گوسی شکل

در اولین گام نمودار رسانندگی بر حسب انرژی فرمی برای پنج زیرنوار ابتدایی با کمک محاسبات عددی رسم می‌شود. رسانندگی دستگاه سیم کوانتومی در حضور پتانسیل پراکندگی نقطه کوانتومی را بررسی خواهیم نمود.



شکل ۱.۴: رسانندگی به عنوان تابعی از انرژی فرمی از پتانسیل پراکندگی حاصل از نقطه کوانتومی با قدرت پتانسیل دافعه  $V_{a_0} = 1.5\text{meV}$  و  $\beta = 1.5 \times 10^{12}$  محبوس در دستگاه سیم کوانتومی و با فرکانس پتانسیل محدودکننده سهموی  $\omega_0 = 4\pi \times 10^{12}$  رسم شده‌است.

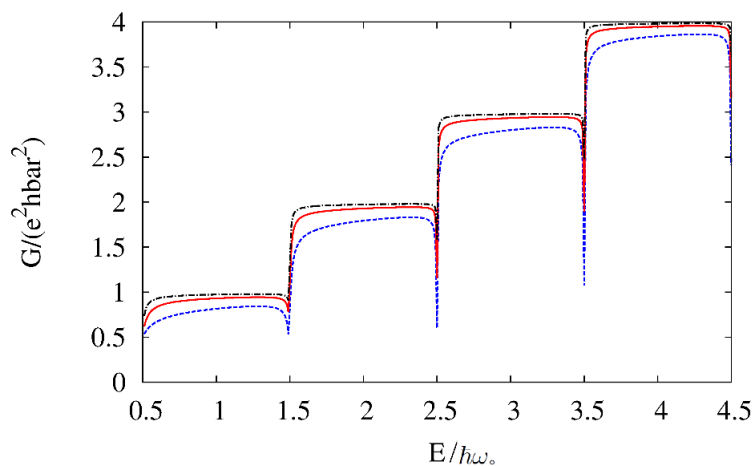
شکل (۱.۴) نمودار رسانندگی دستگاه سیم کوانتومی بر حسب انرژی فرمی و در حضور پتانسیل پراکندگی نقطه کوانتومی با قدرت پتانسیل دافعه  $V_{a_0} = 1.5\text{meV}$  و  $\beta = 1.5 \times 10^{12}$  و فرکانس مشخصه پتانسیل محدود کننده سهموی  $\omega_0 = 4\pi \times 10^{12}$  را نشان می‌دهد. انحنای لبه‌های نمودار رسانندگی در آستانه هر زیر نوار انرژی ناشی از افزایش قابل ملاحظه در جزء انعکاسی تابع موج بالای آستانه هر زیر نوار انرژی

است. هنگامی که انرژی فرمی با انرژی کف هر زیرنوار یکی می‌شود رسانندگی دقیقاً برابر با رسانندگی بالستیک خواهد بود [۴، ۱۸].

برای بررسی اثر هر یک از کمیت‌های  $V_a, \beta, \omega$  بر روی ضرایب عبور و در نتیجه بر روی رسانندگی، نمودار رسانندگی بر حسب انرژی فرمی را برای مقادیر متفاوتی از این کمیت‌ها ترسیم کرده و به توضیح آن خواهیم پرداخت.

## ۶.۴ اثر قدرت پتانسیل پراکندگی $V_a$ بر روی رسانندگی

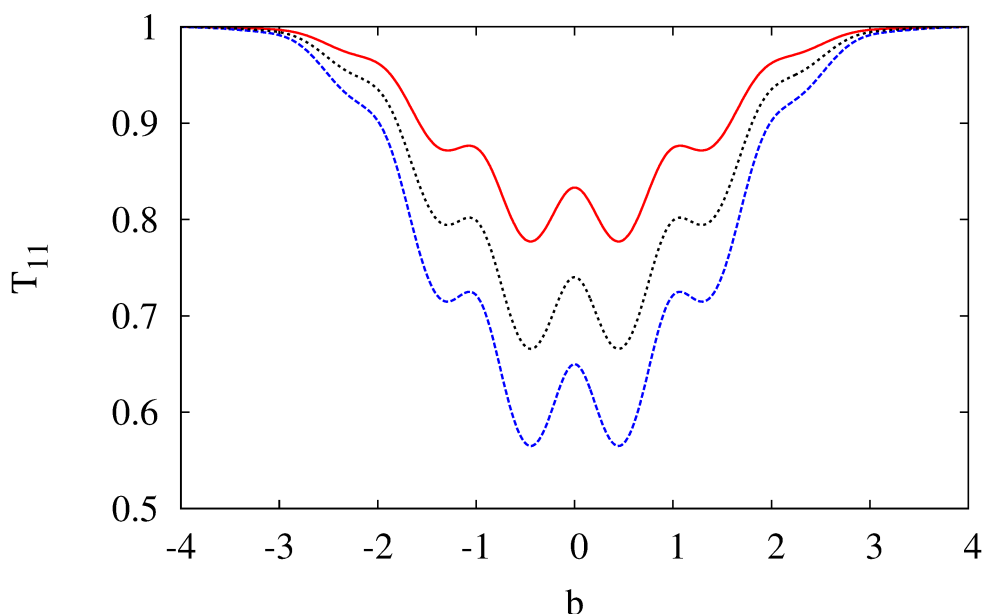
در این محاسبات مکان پتانسیل پراکندگی نقطه کوانتومی در دستگاه سیم کوانتومی در  $b = 10\text{nm}$  و پهنای پتانسیل پراکندگی  $\beta = 10^{12} \times 10^{\text{Å}}$  و فرکانس مشخصه پتانسیل محدود کننده سهموی  $\omega = 4\pi \times 10^{12}$  اختیار شده‌اند.



شکل ۲.۴: اثر قدرت پتانسیل پراکندگی نقطه کوانتومی بر روی رسانندگی دستگاه سیم کوانتومی. منحنی خط - نقطه مربوط به  $V_a = 1.5\text{meV}$  و منحنی خطوط ممتد مربوط به  $V_a = 2.5\text{meV}$  و منحنی نقطه چین مربوط به  $V_a = 4.5\text{meV}$  است.

شکل (۲.۴) اثر قدرت پتانسیل پراکندگی نقطه کوانتومی را بر روی رسانندگی سیم کوانتومی بر حسب انرژی فرمی نشان می‌دهد. با افزایش قدرت پتانسیل پراکندگی، رسانندگی دستگاه سیم کوانتومی برای تمام زیرنوارهای انرژی کاهش می‌یابد که این امر ناشی از کاهش احتمال عبور به ازای افزایش  $V_a$  است.

شکل (۳.۴) احتمال عبور  $T_{11}$  به ازای انرژی یک زیرنوار بر حسب تغییرات مکان ناخالصی برای مقادیر متفاوت  $V_a$  را نشان می‌دهد. در نظر گرفتن احتمال عبور برای یک زیرنوار بر حسب تغییرات مکان ناخالصی به ازای  $V_a$  های متفاوت نشان می‌دهد با بزرگ شدن ( $V_a$ ) که افزایش ارتفاع تابع پتانسیل گوسی شکل را بدنبال دارد، منجر به کاهش دامنه عبور در مکان  $\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\beta}}$  که پهنای موثر پراکننده است یعنی جایی که تابع گوسی شکل حاصل از پراکننده به  $\frac{1}{e}$  ماکزیمم مقدار خود می‌رسد، می‌شود [۳].



شکل ۳.۴: اثر موضع پتانسیل نقطه کوانتومی بر روی دامنه عبور دستگاه سیم کوانتومی. منحنی خط- نقطه مربوط به  $V_{a_0} = 1/5 meV$  و منحنی خطوط ممتد مربوط به  $V_{a_0} = 2/5 meV$  و منحنی نقطه چین مربوط به  $V_{a_0} = 4/5 meV$  است.

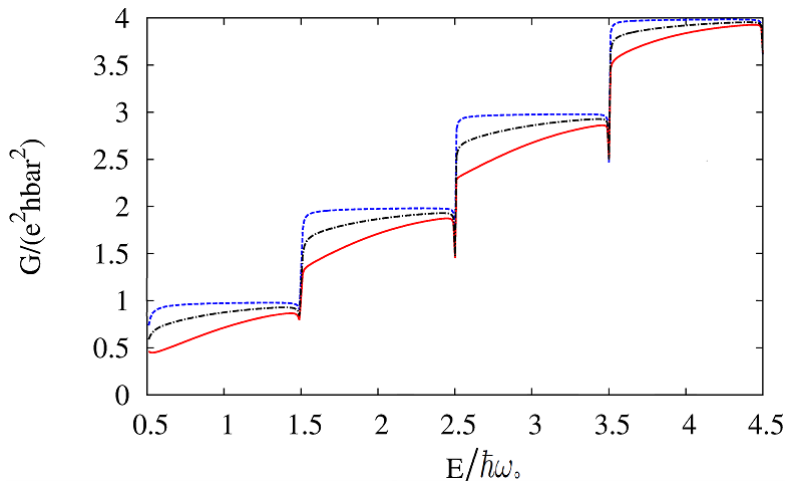
## ۷.۴ اثر پهنای پتانسیل پراکندگی بر روی رسانندگی

اثر پهنای پتانسیل پراکندگی نقطه کوانتومی ( $\beta$ ) محبوس در دستگاه سیم کوانتومی بر روی رسانندگی دستگاه سیم کوانتومی در شکل (۴.۴) رسم شده است. در این محاسبات مکان پتانسیل پراکندگی نقطه کوانتومی در دستگاه سیم کوانتومی در  $b = 10 nm$  و پهنای پتانسیل پراکندگی  $V_{a_0} = 1/5 meV$  و فرکانس مشخصه پتانسیل محدود کننده سهموی  $\omega_0 = 4\pi \times 10^{12}$  اختیار شده‌اند.

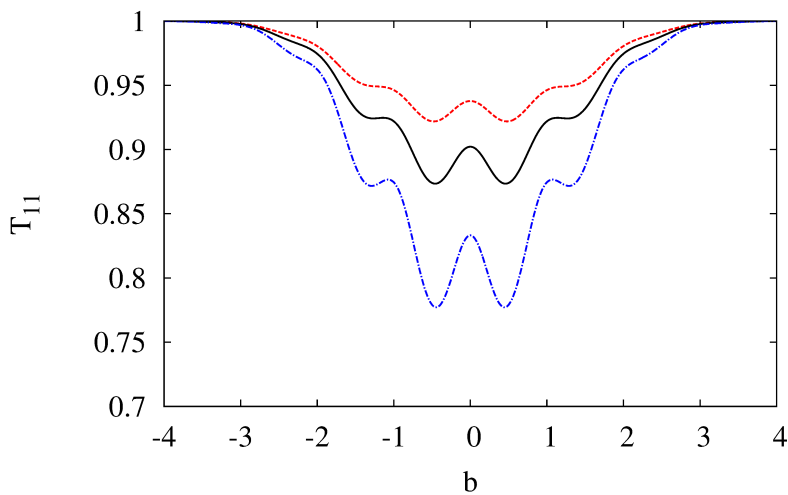
شکل (۴.۴) اثر پهنای پتانسیل پراکندگی گوسی حاصل از نقطه کوانتومی محبوس در دستگاه سیم کوانتومی بر روی رسانندگی سیم کوانتومی را نشان می‌دهد.

همانطور که در شکل نشان داده شده است کاهش  $\beta$  که منجر به کاهش پهنای موثر پتانسیل پراکندگی می‌شود، پتانسیل پراکندگی فضای کمتری را در ناحیه موثر تابع موج یعنی محدوده  $2/\sqrt{\beta}$  در بر می‌گیرد و نهایتاً الکترون‌های بیشتری بدون برخورد با پتانسیل پراکندگی عبور خواهند کرد در نتیجه دامنه عبور و بدنبال آن رسانندگی دستگاه سیم کوانتومی افزایش می‌یابد.





شکل ۴.۴: اثر پهنای پتانسیل پراکنده حاصل از نقطه کوانتومی محبوس در دستگاه سیم کوانتومی بر روی رسانندگی دستگاه سیم کوانتومی. منحنی خط چین مربوط به  $\beta = 1 \times 10^{12}$  و منحنی خط نقطه مربوط به  $\beta = 0.6 \times 10^{12}$  و منحنی خطوط ممتد مربوط به  $\beta = 0.5 \times 10^{12}$  است.



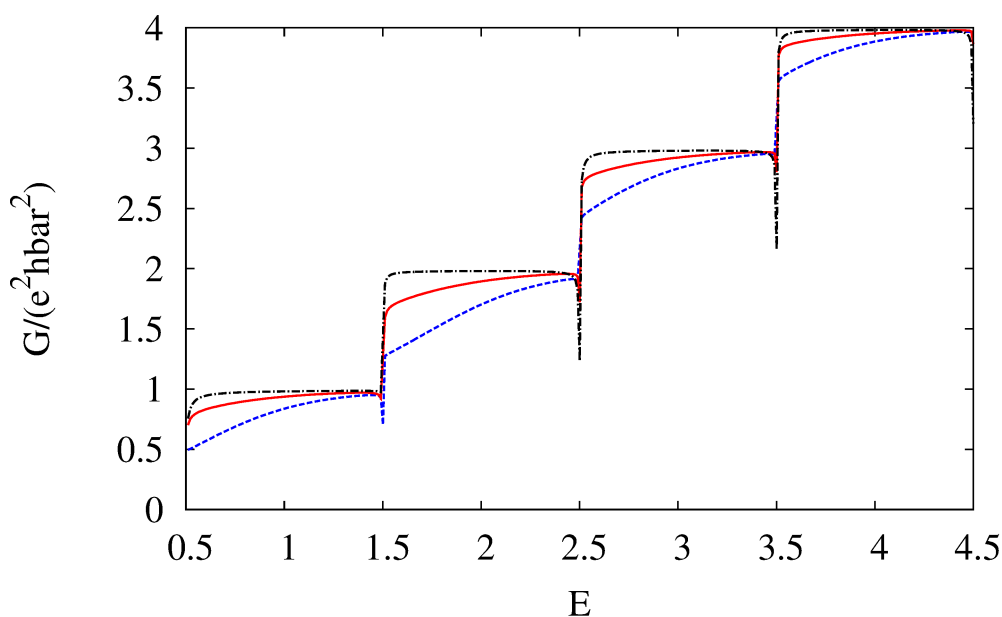
شکل ۵.۴: اثر پهنای پتانسیل پراکنده حاصل از نقطه کوانتومی محبوس در دستگاه سیم کوانتومی بر روی احتمال عبور  $T_{11}$  دستگاه سیم کوانتومی. منحنی خط چین مربوط به  $\beta = 1/2 \times 10^{12}$  و منحنی خطوط ممتد مربوط به  $\beta = 1/1 \times 10^{12}$  و منحنی خط نقطه مربوط به  $\beta = 1/0 \times 10^{12}$  است.

شکل (۵.۴) نمودار احتمال عبور  $T_{11}$  بر حسب تغییرات مکان ناخالصی را برای یک زیرنوار انرژی به ازای مقادیر مختلف  $\beta$  نشان می‌دهد. با افزایش  $\beta$  در واقع ناحیه موثر پراکنده کاهش می‌یابد در نتیجه ضرایب عبور زیاد می‌شوند، هرچه از مکان پتانسیل پراکنده دورتر شویم اثر پتانسیل پراکنده کمتر شده بنابراین الکترون‌های بیشتری بدون برخورد عبور کرده و احتمال عبور افزایش می‌یابد.

## ۸.۴ اثر فرکانس مشخصه پتانسیل محدود کننده سهموی بر روی رسانندگی

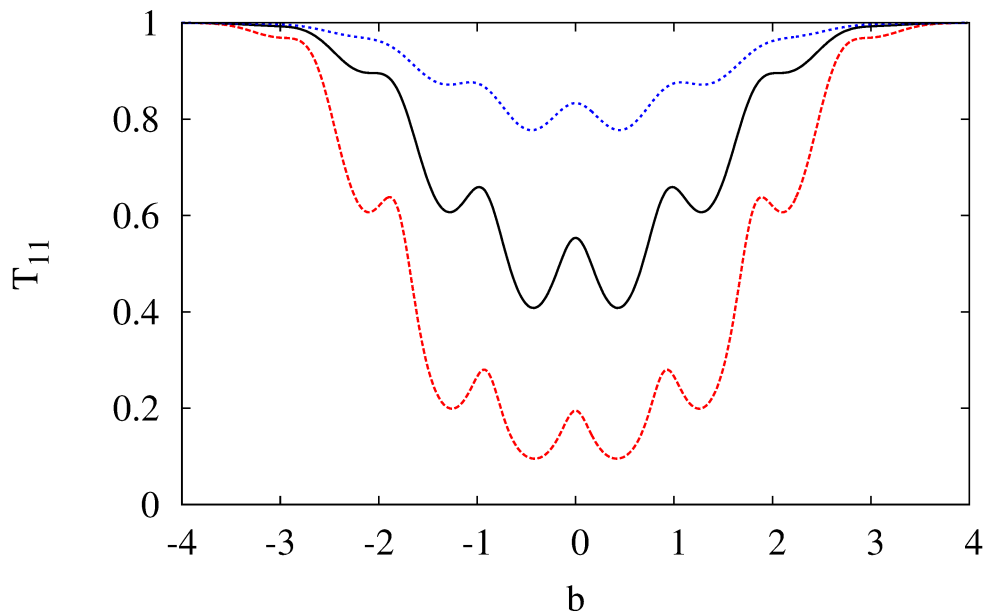
در این قسمت اثر  $\omega_0$  که بر روی مقدار انرژی هر زیرنوار و همچنین پتانسیل محدود کننده کوانتومی موثر است را بر روی رسانندگی دستگاه سیم کوانتومی در حضور پتانسیل نقطه کوانتومی محبوس در سیم کوانتومی بررسی می‌نماییم. در این محاسبات مکان پتانسیل پراکندگی نقطه کوانتومی در دستگاه سیم کوانتومی در  $b = 10 \text{ nm}$  و پهنای پتانسیل پراکندگی  $\beta = 10^{12} \times 10^{\circ}$  و قدرت پتانسیل پراکندگی  $V_{a_0} = 15 \text{ meV}$  اختیار شده‌اند.

شکل (۶.۴) اثر فرکانس مشخصه پتانسیل محدود کننده سهموی بر روی رسانندگی دستگاه سیم کوانتومی را نشان می‌دهد.



شکل ۶.۴: اثر  $\omega_0$  بر روی رسانندگی دستگاه سیم کوانتومی. منحنی خط نقطه مربوط به  $\omega_0 = 2\pi \times 10^{12}$  و منحنی خطوط ممتد مربوط به  $\omega_0 = 8\pi \times 10^{12}$  و منحنی خط چین مربوط به  $\omega_0 = 10^3 \pi \times 10^{13}$  است.

در شکل (۶.۴) با افزایش  $\omega_0$  رسانندگی کاهش یافته است زیرا افزایش  $\omega_0$  منجر به گسترده شدن بیشتر تابع موج در فضا می‌شود و از طرفی با توجه به رابطه  $y_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$ ، فضای موثر احتمال حضور الکترون یعنی  $\psi\psi^*$  را کاهش می‌دهد در نتیجه الکترون‌های بیشتری به هنگام گذار با پراکننده برخورد می‌کنند و این امر باعث کاهش احتمال عبور و در نتیجه کاهش رسانندگی می‌شود.



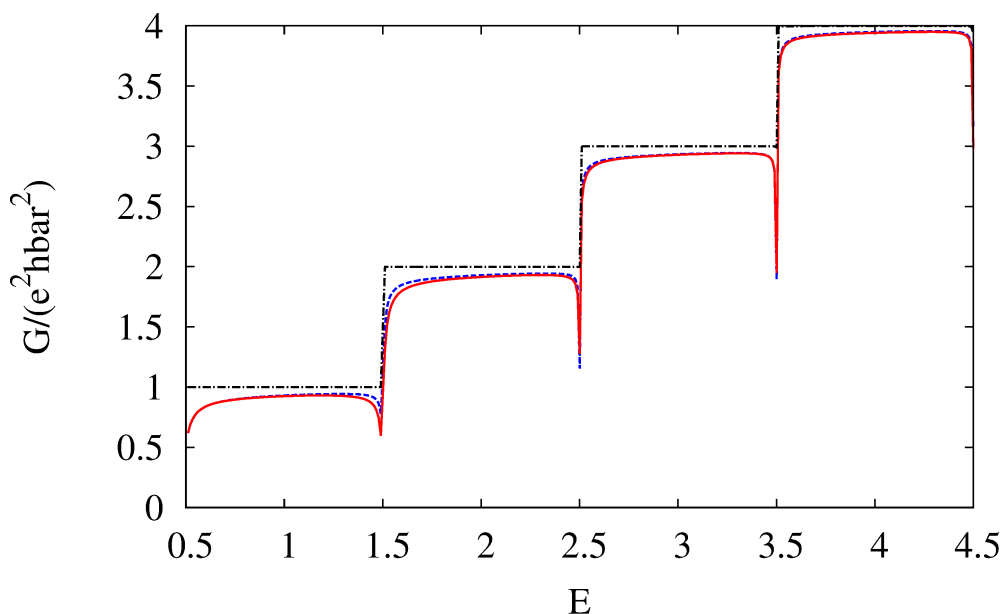
شکل ۷.۴: اثر  $\omega$  بر روی احتمال عبور  $T_{11}$  دستگاه سیم کوانتومی بر حسب مکان پراکننده. منحنی خط چین مربوط به  $\omega = 4\pi \times 10^{12}$  و منحنی خطوط ممتد مربوط به  $\omega = 5\pi \times 10^{12}$  و منحنی خط نقطه مربوط به  $\omega = 6\pi \times 10^{12}$  است.

شکل (۷.۴) اثر فرکانس مشخصه پتانسیل محدود کننده سهموی را بر روی احتمال عبور برای یک زیرنوار انرژی به ازای مقادیر مختلف  $\omega$  نشان می‌دهد. با کاهش  $\omega$  اصطلاحاً شعاع نوسان الکترون‌ها ( $y_0$ ) افزایش می‌یابد یعنی کانال عبور الکترون بزرگ شده، در نتیجه احتمال برخورد با پراکننده کاهش می‌یابد در نتیجه احتمال عبور زیاد می‌شود.

## ۹.۴ بررسی ترابرد سیم کوانتومی در یک زیرنوار بر حسب مکان موثر ناخالصی

هنگامی که نقطه کوانتومی محبوس در دستگاه سیم کوانتومی در ناحیه موثر تابع موج یعنی جایی که  $|\psi|^2$  قابل ملاحظه است قرار گیرد، الکترون‌های زیادی با پتانسیل پراکننده برخورد خواهند کرد و در حالت ناپایدار ظاهر می‌شوند. در چنین حالتی هر چه پهنا و قدرت پتانسیل پراکنندگی کمتر باشد به مراتب احتمال عبور بزرگ است و با دور شدن از محدوده پراکنندگی احتمال عبور بیشتر می‌شود. همچنین هر چقدر شعاع نوسان یعنی  $y_0$  بزرگتر باشد، احتمال عبور افزایش می‌یابد. اما در صورتی که این شعاع در اثر افزایش فرکانس مشخصه پتانسیل محدود کننده کوانتومی کاهش یابد به طوری که در حدود پهنای پتانسیل پراکنندگی شود احتمال عبور و بدنبال آن رسانندگی کاهش می‌یابد چون بیشتر

الکترون‌ها به هنگام گذار با پتانسیل پراکندگی برخورد کرده و پراکنده می‌شوند. شکل (۸.۴) احتمال عبور را بر حسب مکان‌های مختلف پراکنده ( $b$ ) برای شعاع نوسانی  $y_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$  نشان می‌دهد.



شکل ۸.۴: اثر مکان پتانسیل پراکندگی بر روی رسانندگی  $T_{11}$  دستگاه سیم کوانتومی بر حسب انرژی فرمی. منحنی خط چین مربوط به  $b = 10\text{nm}$  و منحنی خطوط ممتد مربوط به  $b = 15\text{nm}$  و منحنی خط نقطه مربوط به  $b = 50\text{nm}$  است.

در شکل (۸.۴) منحنی‌های خط چین و ممتد به ازای مقادیری از مکان پراکنده رسم شده‌اند که در ناحیه موثر حضور تابع موج قرار دارند. و منحنی خط نقطه به ازای  $b = 50\text{nm}$  از ناحیه موثر تابع موج یعنی شعاع نوسانی خارج شده است، به عبارتی  $b > 2y_0$  است. بنابراین رسانندگی این منحنی بیشتر از بقیه و ماکزیمم است.

# فصل ۵

## بحث و نتیجه گیری

### ۱.۵ مقدمه

در فصول قبل به بررسی نظریه پراکندگی و روش‌های محاسبه ترابرد الکترونی و نیز رسانندگی پرداخته شد. در فصل چهار نیز با استفاده از معادله لیپمن - شوینگر محاسبات نظری برای یافتن ترابرد الکترونی از میان یک دستگاه سیم کوانتومی که یک نقطه کوانتومی در آن محبوس بود را بدست آوردیم سپس با استفاده از معادله لاندائور بوتیکر که ارتباط بین ضرایب عبور و رسانندگی را می‌دهد، رسانندگی سیستم را محاسبه نمودیم. نهایتاً با استفاده از زبان برنامه نویسی فرترن نمودارهای رسانندگی و احتمال عبور را بر حسب هریک از پارامترهای مهم و تاثیر گذار  $V_{a_0}, \beta, \omega$  رسم کرده و به بررسی آنها پرداختیم. اکنون در این فصل نتایج بدست آمده را ارائه خواهیم داد.

### ۲.۵ نتایج

۱. ترابرد الکترونی در دستگاه سیم کوانتومی شامل نقطه کوانتومی بالستیک نبوده و ضرایب خوش تعریفی از مقدار پایه  $\frac{e^2}{h}$  است.
۲. با افزایش قدرت پتانسیل پراکندگی  $V_{a_0}$  که منجر به افزایش ارتفاع تابع پتانسیل گوسی شکل می‌شود، احتمال عبور و رسانندگی دستگاه سیم کوانتومی کاهش می‌یابد.
۳. با افزایش  $\beta$  پهنای پراکندگی تابع پتانسیل پراکندگی گوسی شکل کاهش می‌یابد و الکترون‌های کمتری با پتانسیل پراکندگی برخورد می‌کنند بنابراین احتمال عبور و رسانندگی افزایش می‌یابند.

۴. فرکانس مشخصه پتانسیل پراکندگی بر روی شعاع نوسانی  $y$  طبق  $y_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$  اثر می‌گذارد. بنابراین با افزایش  $\omega_0$ ، شعاع نوسانی کاهش یافته و ناحیه موثر حضور الکترون کاهش می‌یابد و به اصطلاح کانال عبوری کوچک می‌شود و با حضور ناخالصی در این ناحیه الکترون‌های بیشتری با پتانسیل پراکندگی برخورد کرده و احتمال عبور و رسانندگی کاهش می‌یابند.

### ۳.۵ جمع بندی

در این تحقیق توجه ویژه ما به مساله ترابرد الکترونی و رسانندگی در یک سیم کوانتومی در حضور یک نقطه کوانتومی بوده است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که در حضور هر گونه ناخالصی از جمله پتانسیل پراکندگی نقطه کوانتومی که در این پایان نامه مورد بررسی قرار گرفته است، ترابرد الکترونی کاهش می‌یابد و این امر منجر به کاهش رسانندگی در سیستم مورد بررسی می‌شود. مطالعات انجام شده نشان می‌دهد که موقعیت پراکننده بر روی رسانندگی تاثیر گذار بوده و هنگامی که پراکننده در منطقه موثر حضور تابع موج قرار گرفته باشد به طور قابل ملاحظه‌ای رسانندگی کاهش می‌یابد. همچنین بزرگی قدرت پراکننده و پهنای آن به شدت بر روی رسانندگی اثر گذار می‌باشند به طوری که افزایش آنها باعث کاهش رسانندگی می‌شود.

### ۴.۵ پیشنهادات

محوریت اصلی این تحقیق بررسی مساله ترابرد الکترون در سیم کوانتومی در حضور پتانسیل نقطه کوانتومی می‌باشد. به طور کلی وجود ناخالصی در سیم کوانتومی باعث کاهش ترابرد و رسانندگی می‌شود. در این پایان نامه پتانسیل پراکندگی گوسی شکل حاصل از یک نقطه کوانتومی مورد مطالعه قرار گرفت به عنوان یک پیشنهاد برای مطالعات بعدی می‌توان پراکندگی را در حضور انواع پتانسیل‌های پراکندگی دیگر مانند پتانسیل پراکندگی حاصل از پاد نقطه کوانتومی و یا در حضور دو نقطه کوانتومی مورد مطالعه قرار داد. همچنین می‌توان همین مساله را در حضور میدان‌های الکترومغناطیسی نیز مورد مطالعه قرار داد.

## مراجع

- [۱] کریم زاده، ف. قاسمعلی، الف. سالمی زاده، س. ” نانو مواد خواص، تولید و کاربرد ”، جهاد دانشگاهی چاپ سوم
- [۲] Harrison, Paul. Alex. Valavanis. ” **Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures** ” . John Wiley . Sons, .۲۰۱۶
- [۳] Bagwell, Philip F. ” **Evanescent modes and scattering in quasi-one-dimensional wires** .” Physical Review B ۴۱.۱۵ : (۱۹۹۰) . ۱۰۳۵۴
- [۴] Vargiamidis, V, et al, (۲۰۱۳), ” **Lippmann-Schwinger equation approach to scattering in quantum wires**, ” physica status solidi, Vol. ۲۳۶, No. ۳, pp. ۵۹۷-۶۱۳.
- [۵] Bardarson, Jens Hjorleifur, et al. ” **Coherent electronic transport in a multimode quantum channel with Gaussian-type scatterers**. ” Physical Review B ۷۰.۲۴ : (۲۰۰۴) . ۲۴۵۳۰۸
- [۶] Enderlein, Rolf, and Norman JM Horing. ” **Fundamentals of semiconductor physics and devices** .” World Scientific, .۱۹۹۷
- [۷] Peter, Y. U., and Manuel Cardona. ” **Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties**. ” Springer Science and Business Media, .۲۰۱۰
- [۸] حسینی نسب، ف. افسری ولایتی، م. قاسمی نژاد، م. ” **مباحث عمومی، علوم و فناوری نانو** ” جلد اول، چاپ اول، انتشارات کوچک آموز
- [۹] پتربا، ر. ک. ” **مکانیک آماری** ” ترجمه زمردیان، م. انتشارات واژگان خرد چاپ دوم
- [۱۰] ساکورایی، جی، جی. ” **مکانیک کوانتومی مدرن ساکورایی** ” ترجمه علیمحمدی، م. مشفق، ح. ر. انتشارات دانشگاه تهران چاپ هشتم

- [١١] Balaguru, R. John Bosco, and B. G. Jeyaprakash. "Quantum Wells, Quantum Wires, Quantum Dots, Quantum Limit of Conductance, Quantum Capacitance and Quantum HALL Effect."
- [١٢] Chu, C. S., and R. S. Sorbello. "Effect of impurities on the quantized conductance of narrow channels." Physical Review B ٤٠.٩ : (١٩٨٩) .٥٩٤١
- [١٣] Singh, Jasprit. "Electronic and optoelectronic properties of semiconductor structures." Cambridge University Press, .٢٠٠٧
- [١٤] Koole, Rolf, et al. "Size effects on semiconductor nanoparticles." Springer Berlin Heidelberg, .٢٠١٤ .١٣-٥١
- [١٥] L.V. Keldysh. "Excitons in Semiconductor-Dielectric Nanostructures. ١٩٩٧."
- [١٦] Ferry, David, and Carlo Jacoboni, eds. "Quantum transport in semiconductors." Springer Science & Business Media, .٢٠١٣
- [١٧] Nguyen, Cam. "Analysis methods for RF, microwave, and millimeter-wave planar transmission line structures." Vol. .١٦٠ John Wiley & Sons, .٢٠٠٣
- [١٨] ferry, David. "transport in nanostructur". Second edition
- [١٩] Thorgilsson, Gunnar, Chi-Shung Tang, and Vidar Gudmundsson. "Time-dependent magnetotransport of a wave packet in a quantum wire with embedded quantum dots." Physical Review B ٧٤.١٩ : (٢٠٠٧) .١٩٥٣١٤
- [٢٠] Beenakker, C. W. J., and Henk van Houten. "Quantum transport in semiconductor nanostructures." Solid state physics ٤٤ : (١٩٩١) .١-٢٢٨
- [٢١] Ferry, David, and Stephen Marshall Goodnick. "Transport in nanostructures." No. .٩ Cambridge university press, .١٩٩٧
- [٢٢] Gradshteyn, Izrail Solomonovich, and Iosif Moiseevich Ryzhik. "Table of integrals, series, and products." Academic press, .٢٠١٤
- [٢٣] Abramowitz, Milton, and Irene A. Stegun. "Handbook of mathematical functions." Applied mathematics series ٥٥.٦٢ : (١٩٦٦) .٣٩



- [٢٤] Kamenev, Alex, and Walter Kohn. "Landauer conductance without two chemical potentials." *Physical Review B* ٦٣.١٥ : (٢٠٠١) .١٥٥٣٠٤
- [٢٥] Beenakker, C. W. J., and Henk van Houten. "Quantum transport in semiconductor nanostructures." *Solid state physics* ٤٤ : (١٩٩١) .١-٢٢٨
- [٢٦] Chu, C. S., and R. S. Sorbello. "Effect of impurities on the quantized conductance of narrow channels." *Physical Review B* ٤٠.٩ : (١٩٨٩) .٥٩٤١
- [٢٧] Chu, C. S., and R. S. Sorbello. "Scanning tunneling microscope as a probe of the local transport field in mesoscopic systems ." *Physical Review B* ٤٠.٩ : (١٩٨٩) .٥٩٥٠
- [٢٨] Wang, Jian, Yong Jiang Wang, and Hong Guo. "Ballistic-electron transport through a coupled-quantum-wire system." *Physical Review B* ٤٤.٤ : (١٩٩٢) .٢٤٢٠
- [٢٩] Nonoyama, Shinji, Yukari Honma, and Atsunobu Nakamura. "Ballistic transport in nanowire through junctions of narrow-wide-narrow geometry." *Physics Letters A* ٣٧٩.١٢ : (٢٠١٥) .٩٧٩-٩٨٢



# واژه‌نامه فارسی به انگلیسی

bulk.....	کپه‌ای
exciton .....	اکسیتون
matching method .....	روش تطبیق حالت
conductor .....	رسانا
semiconductor .....	نیمرسانا
insulator .....	نارسانا
electrical conductivity .....	هدایت الکتریکی
quantum well .....	چاه کوانتومی
quantum wire .....	سیم کوانتومی
quantum dot .....	نقطه کوانتومی
nanostructure.....	نانوساختار



# واژه‌نامه انگلیسی به فارسی

bulk	کپه‌ای
exciton	اکسیتون
matching method	روش تطبیق حالت
conductor	رسانا
semiconductor	نیمرسانا
insulator	نارسانا
electrical conductivity	هدایت الکتریکی
quantum well	چاه کوانتومی
quantum wire	سیم کوانتومی
quantum dot	سیم کوانتومی
nanostructure	نانوساختار

## **Abstract**

The study of electrical conductivity in nanostructures is one of the most fundamental issues in the physics of nanostructures. In recent years, the interest of many physicists has been focused on the study of the electronic conductivity in quantum wires and quantum dots. In most cases, the Landauer Buttiker formalism, which relates the electronic conductivity of a single-channel system to the electronic transmission coefficients, is used to calculate the conductance of the system. Here, the electron transport through a quantum dot, embedded in a quantum well wire is investigated via representing the quantum dot by a Gaussian-type scattering potential. First, through the Lippmann-Schwinger approach, the transmission amplitudes of the scattered electrons is determined. Then, the conductance of the system is obtained using the Landauer Buttiker formalism. Finally, by numerical calculations, the dependence of the conductance to the transversal position and some specifics of the scattering potential of the embedded dot is examined.

Keywords: Quantum wire, conductance, electron transport, Lippmann-Schwinger, Landauer Buttiker.



**Shahrood University of Technology**

**Faculty Of Physics and Nuclear Engineering**

**MSc Thesis in: Solid State Physics**

**Electronic transport through a quantum dot  
embedded in a quantum wire**

**By: Zohre Saeidi**

**Supervisor**

**Saeid Hessami Pilehrood**

**Advisor**

**Mohammad Bagher Rahmani**

**September 2017**