

بسم الله الرحمن الرحيم



دانشکده فیزیک و مهندسی هسته ای

پایان نامه کارشناسی ارشد نانو فیزیک

مطالعه خواص ترموالکتریک یک سیم چاه کوانتومی

نگارنده: حسین تجن جاری

استاد راهنما

دکتر سعید حسامی پيله رود

مهر ۱۴۰۰

تقدیم بہ پدر و مادر عزیزم و ہمہ عزیزانی کہ در این مسیر پرفراز و نشیب چراغ راہ
بودند و از ہیچ کلمی مضائقہ نکردند...

هر چند بندگی فقط شایسته ذات حضرت حق می باشد ولیکن به مصداق حدیث
شریفه (هر کس حرفی به من بیاموزد مرا بنده خود کرده است) معلم، چنان شایسته و
مقام والایی دارد که مولای مستقیان که دریای علم و معرفت و پرچم دار توحید است
خود را بنده کسی می داند که حتی یک حرف به او بیاموزد، لذا بر خود لازم می دانم تا
از زحمات استاد فرزانه و کراتقدر جناب آقای دکتر حسامی کمال تشکر را داشته باشم
که دلسوزانه و مشفقانه در این مدت راهنما و معلم بنده بودند. همچنین از دوست و برادر
کراتقدر جناب مهندس محمد تحقیقی علیای بابت تمام زحماتی که در این مدت متحمل
شدند کمال تشکر را دارم.

حسین تجن جاری
مهر ۱۴۰۰

تعهد نامه

اینجانب حسین تجن جاری دانشجوی کارشناسی ارشد رشته نانوفیزیک فیزیک و مهندسی هسته ای دانشگاه شاهرود، نویسنده پایان نامه با عنوان مطالعه خواص ترموالکتریک یک سیم چاه کوانتومی، تحت راهنمایی سعید حسامی پيله رود متعهد می شوم:

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهش های دیگر پژوهش گران، 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 بوده اند، در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می گردد.
- در تمام مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که از موجود زنده (یا بافت های 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.

حسین تجن جاری

مهر ۱۴۰۰

مالکیت نتایج و حق نشر

- تمام حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزارها و تجهیزات ساخته شده) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد. 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 نمی باشد.

چکیده

در سالهای اخیر توجه به پدیده ترموالکتریک بخاطر جذابیت هایی که دارد افزایش قابل ملاحظه ای داشته است. در واقع از اوایل دهه ۹۰ میلادی بررسی این پدیده در ابعاد نانو و بهره بردن از نانو ساختارها نشان داد که هر چه به سمت ساختار هایی با ابعاد کم تر پیش برویم شاهد افزایش چشمگیر معیار شایستگی ترموالکتریکی خواهیم بود. مرور مطالعات پیشین نشان می دهد که طی سالهای اخیر تحقیقات در این زمینه به نتایج امیدبخشی منجر شده است. در تحقیق پیش رو خواص ترموالکتریکی یک سیم چاه کوانتومی مطالعه شده است. برای محاسبه ضرایب عبور الکترونی دستگاه از معادله ی لیپمن - شوینگر و برای تعیین ضرایب ترموالکتریک از رهیافت لاندائور استفاده شده است. نتایج حاصل از محاسبات در دستگاه سیم چاه کوانتومی GaAs نشان دهنده نقش کاهش ابعاد در افزایش معیار شایستگی است. بعلاوه نحوه تغییر در معیار شایستگی دستگاه با تغییر در دما، انرژی فرمی و عرض سیم چاه کوانتومی بررسی شده است.

کلمات کلیدی: ترموالکتریک، معیار شایستگی، سیم-چاه کوانتومی، مسافت آزاد میانگین، معادله لیپمن - شوینگر، رهیافت لاندائور

فهرست مطالب

س	فهرست تصاویر
ق	پیشگفتار
۱	۱ مبانی فیزیکی و تعاریف اولیه
۱	۱.۱ نانو ساختار ها
۶	۲.۱ پدیده ترمو الکتریک
۱۲	۳.۱ مفاهیم کاربردی
۱۴	۴.۱ رهیافت لاندائور
۱۹	۲ نمونه هایی از کارهای انجام شده گذشته در این زمینه
۲۰	۱.۲ خواص ترموالکتریک نانوسیم های ابر شبکه
۲۱	۲.۲ خواص ترمو الکتریک سیستم های چاه کوانتومی
۲۳	۳.۲ خواص ترمو الکتریک نقاط کوانتومی گرافن شش ضلعی
۲۵	۴.۲ بررسی نظری معیار شایستگی ترموالکتریک در ساختارهای با ابعاد کم
۲۶	۵.۲ تأثیر اندازه در مواد ترموالکتریک
	۶.۲ خواص ترموالکتریک چاه های کوانتومی متشکل از عایق توپولوژیک و لایه های نازک
۲۷	۷.۲ افزایش معیار شایستگی ترموالکتریک در نانو سیم های GaAs
۲۸	۸.۲ خواص ترموالکتریک ابر شبکه های Ge/SiGe
۲۹	۳ ابزارهای محاسباتی و رهیافت
۳۱	۱.۳ معادله لیپمن- شوینگر در یک سیم کوانتومی
۳۲	۱.۱.۳ پتانسیل پراکندگی تابع دلتای دیراک
۳۶	۴ اثر ترموالکتریک در یک سیم چاه کوانتومی
۴۱	۱.۴ تعریف مسئله

۴۲	حل معادله شرودینگر برای سیم چاه کوانتومی	۲.۴
۴۴	معادله لیپمن شوینگر برای یک سیم چاه کوانتومی	۱.۲.۴
۴۵	اعمال پتانسیل پراکندگی تابع دلتای دیراک به سیم چاه کوانتومی	۲.۲.۴
۴۸	تحلیل و بررسی نتایج و نمودارها	۳.۴
۴۸	بررسی تغییرات رسانایی الکتریکی	۱.۳.۴
۵۰	بررسی تغییرات رسانایی گرمایی	۲.۳.۴
۵۴	بررسی تغییرات ضریب سبک	۳.۳.۴
۵۶	بررسی تغییرات معیار شایستگی	۴.۳.۴
۵۸	مروری بر نتایج	۴.۴
۵۹	پیشنهادهات	۵.۴
۶۱	مراجع	

فهرست تصاویر

۳	۱.۱ طرح واره ساختارهای نانو[۴]
۳	۲.۱ تصاویر میکروسکوپی ساختارهای نانو[۵]
۴	۳.۱ نمای طرح واره فضای k
	۴.۱ چگالی حالتها متفاوت در نیمرساناها، نقاط کوانتومی برای صفر بعد، سیم کوانتومی برای یک بعد، چاه کوانتومی برای دو بعد و ساختار کپه ای برای سه بعد
۶	۵.۱ تصویر آزمایش سبیک
۷	۶.۱ طرح کلی اثر سبیک برای نیمرسانای نوع n و نوع p و جهت میدان در آنها
	۷.۱ طرح واره آزمایش پلتیر براس سیستمی متشکل از بیسموت و مس. هنگامی که جریان از مدار عبور می کند گرما در اتصال اول ایجاد می شود و در اتصال دوم جذب می شود که باعث اختلاف دمایی بین دو اتصال می شود.
۸	۸.۱ طرح کلی سه اثر ترمو الکتریک یعنی، سبیک، پلتیر، و تامسون[۸]
۹	۹.۱ مسافت آزاد میانگین فونونی به تفکیک رژیم های ترابردی متفاوت[۱۲]
۱۳	۱۰.۱ طرحی از سیستم فرضی رهیافت لاندائور[۱۷]
۱۵	۱.۲ مقدار معیار شایستگی برای دو نمونه از یک نانو سیم ابر شبکه با قطر های ۵ و ۱۰ نانو متر بر حسب طول نمونه های مختلف[۱۹]
۲۰	۲.۲ در این نمودار مقدار معیار شایستگی برای نمونه های متفاوت در دمای ۷۷ کلوین و با قطر برابر ۱۰ نانو متر بر حسب انرژی فرمی نشان داده شده است.[۱۹]
۲۱	۳.۲ تغییرات معیار شایستگی بر حسب عرض چاه در دماهای مختلف برای نمونه نوع n [۲۰]
۲۲	۴.۲ تغییرات معیار شایستگی بر حسب عرض چاه در دماهای مختلف برای نمونه نوع p [۲۰]
۲۲	۵.۲ طرحی از گرافن با اعمال دو محدودیت در دو طرف ساختار با عرض های متفاوت. [۲۱]
۲۳	

۶.۲	نحوه تغییرات رسانندگی گرمایی فونونی نانوروبان با دما. [۲۱]	۲۴
۷.۲	ویژگی های ترموالکتریکی نانوروبان گرافن در دمای ۳۰۰ کلوین. (a)، (b)	
	(c) و (d) به ترتیب رفتار معیار شایستگی ترموالکتریک، توان حرارتی،	
۲۴	ضریب انتقال الکترون و رسانندگی گرمایی الکترونی را نشان می دهند. [۲۱]	
۸.۲	محاسبه کمیت بدون بُعد معیار شایستگی برای سه ماده مختلف بصورت	
۲۵	نانو سیم و نانو چاه. [۲۲]	
۹.۲	معیار شایستگی بر حسب طول چاه [۱۳]	۲۶
۱۰.۲	معیار شایستگی بر حسب ضخامت لایه [۱۳]	۲۶
۱۱.۲	معیار شایستگی برای نمونه های مختلف بر حسب انرژی در ساختارهای	
۲۷	متفاوت [۲۳]	
۱۲.۲	معیار شایستگی بر حسب ضخامت لایه [۲۳]	۲۸
۱۳.۲	حداکثر معیار شایستگی و پارامتر قدرت بر حسب قطر سیم در دمای اتاق [۲۴]	۲۹
۱۴.۲	حداکثر معیار شایستگی بر حسب دما [۲۴]	۲۹
۱۵.۲	ضریب سبیک بر حسب چاه کوانتومی و جدول مقایسه ای رسانندگی گرمایی	
	و رسانندگی الکتریکی برای طرح شماره ۱ با رنگ آبی و طرح شماره دو با	
۳۰	رنگ قرمز [۲۵]	
۱۶.۲	معیار شایستگی بر حسب طول چاه کوانتومی برای طرح شماره ۱ به رنگ	
۳۰	آبی و طرح شماره ۲ به رنگ قرمز [۲۵]	
۱.۳	طرحی از ترابرد یک موج الکترونی که به علت وجود ناخالصی در یک سیم	
	کوانتومی ۲ بُعدی با طول بی نهایت و با عرض محدود پراکنده می شود.	
۳۲	[۲۶]	
۲.۳	رابطه پراکندگی مدهای انتشاری و محوشونده در یک سیم شبه یک بعدی.	
	برای مدهای انتشاری توسط منحنی های پررنگ نشان داده شده ($E > E_n$)	
	و برای مدهای محوشونده ($k_n = i\kappa_n$) بصورت منحنی های خط چین نشان	
۳۵	داده شده است ($E < E_n$). [۲۶]	
۱.۴	تغییرات رسانایی الکتریکی بر حسب انرژی فرمی با احتساب دمای (۳۰۰K)	
۴۸	و عرض چاه های مختلف	
۲.۴	تغییرات رسانایی الکتریکی بر حسب دما با احتساب انرژی فرمی ($E_f = E'_f$)	
	و در عرض چاه های مختلف $W=3\text{nm}$ ، $W=4\text{nm}$ ، $W=5\text{nm}$ ، $W=6\text{nm}$	
۴۹		
۳.۴	تغییرات رسانایی الکتریکی بر حسب عرض چاه با احتساب انرژی فرمی ($E_f =$	
۴۹	E'_f) در دماهای متفاوت $T=100\text{K}$ ، $T=200\text{K}$ ، $T=300\text{K}$ ، $T=400\text{K}$	

- ۴.۴ تغییرات رسانایی گرمایی برحسب انرژی فرمی با احتساب مسافت آزاد میانگین فونونی ($\lambda = 100\text{nm}$) و عرض چاه های متفاوت ۵۰
- ۵.۴ تغییرات رسانایی گرمایی برحسب انرژی فرمی در مسافت آزاد میانگین ($\lambda = 100\text{nm}$) و دمای ($T=300\text{K}$) به تفکیک رسانایی الکترونی (k_e) و رسانایی شبکه ای (k_l) ۵۰
- ۶.۴ تغییرات رسانایی گرمایی برحسب مسافت آزاد میانگین فونونی در دمای ($T=300\text{K}$) و انرژی فرمی ($E_f = E'_f$) با عرض چاه های متفاوت ۵۱
- ۷.۴ تغییرات رسانایی گرمایی برحسب مسافت آزاد میانگین فونونی در دمای و ($T=300\text{K}$) انرژی فرمی ($E_f = E'_f$) به تفکیک رسانایی الکترونی (k_e) و رسانایی شبکه ای (k_l) ۵۱
- ۸.۴ تغییرات رسانایی گرمایی بر حسب دما با احتساب انرژی فرمی ($E_f = E'_f$) و مسافت آزاد میانگین فونونی ($\lambda = 100\text{nm}$) در عرض چاه های ۵۲
- ۹.۴ تغییرات رسانایی گرمایی برحسب دما با احتساب انرژی فرمی ($E_f = E'_f$) و مسافت آزاد میانگین فونونی برابر ($\lambda = 100\text{nm}$) به تفکیک رسانایی الکترونی (k_e) و رسانایی شبکه ای (k_l) ۵۲
- ۱۰.۴ تغییرات رسانایی گرمایی برحسب عرض چاه با احتساب انرژی فرمی ($E_f = E'_f$) و مسافت آزاد میانگین فونونی ($\lambda = 100\text{nm}$) و دمای ($T=300\text{K}$) به تفکیک رسانایی الکترونی (k_e) و رسانایی شبکه ای (k_l) ۵۳
- ۱۱.۴ تغییرات ضریب سبیک بر حسب انرژی فرمی با احتساب عرض چاه های مختلف ۵۴
- ۱۲.۴ تغییرات ضریب سبیک بر حسب دما با احتساب انرژی فرمی ($E_f = E'_f$) در عرض چاه های مختلف ۵۴
- ۱۳.۴ تغییرات ضریب سبیک بر حسب عرض چاه با احتساب انرژی فرمی ($E_f = E'_f$) و دماهای مختلف ۵۵
- ۱۴.۴ نمودار تغییرات معیار شایستگی بر حسب انرژی فرمی با احتساب عرض چاه ($W=30\text{nm}$) و مسافت آزاد میانگین فونونی ($\lambda = 100\text{nm}$) در دماهای مختلف ۵۶
- ۱۵.۴ نمودار تغییرات معیار شایستگی بر حسب مسافت آزاد میانگین فونونی ($\lambda = 100\text{nm}$) با احتساب دمای و ($T=300\text{K}$) انرژی فرمی ($E_f = E'_f$) در عرض چاه های مختلف ۵۶
- ۱۶.۴ نمودار تغییرات معیار شایستگی بر حسب دما با احتساب انرژی فرمی ($E_f = E'_f$) و مسافت آزاد میانگین فونونی ($\lambda = 100\text{nm}$) در عرض چاه های مختلف ۵۷

۱۷.۴	نمودار تغییرات معیار شایستگی بر حسب عرض چاه باحساب انرژی فرمی ($E_f = E'_f$) و مسافت آزاد میانگین فونونی ($\lambda = 100nm$) در دماهای مختلف $T=100K, T=200K, T=300K, T=400K$	۵۷
------	---	----

پیشگفتار

موضوع انرژی و تامین آن همیشه بعنوان یک معضل اساسی در جهان مطرح بوده و همگی به دنبال یافتن راهی برای فائق آمدن بر آن می باشند، به ویژه که در سالهای اخیر بحث کاهش یا اتمام سوختهای فسیلی که تا امروز بعنوان پر کاربردترین و اصلی ترین منبع تامین انرژی مطرح شده، پرداختن به منابع دیگر تامین کننده انرژی مانند انرژی هسته ای، انرژی خورشیدی، نیروگاههای بادی، انرژی زمین گرمایی و... از اصلی ترین دغدغه های محققان و دانشمندان و حتی مدیران سیاسی حکومتها و جوامع مختلف گردیده است. نکته مهم در اینجا اما ائتلاف گرمایی نزدیک به ۷۰ درصدی انرژی در حوزه هایی که نام برده ایم می باشد که عملاً به پاشنه آشیل این صنعت مهم و تاثیر گذار در جهان تبدیل شده است حال دانستن این امر مهم که ابزارهای ترموالکتریک میتوانند گرما را بصورت مستقیم به برق تبدیل کنند میتواند گویای اهمیت پرداختن به حوزه ترموالکتریک باشد. در اوایل دهه ۹۰ میلادی هیگس^۱ و درسل هاوس^۲ پیشنهاد کردند که مواد با ابعاد کم برای استفاده از خواص ترموالکتریکی مناسب تر هستند بعد از این پیشنهاد تا به امروز تمرکز محققان و دانشمندان روی نانو ساختارها با ابعاد کم برای دست یابی به پیشرفتهایی در حوزه ترموالکتریک بوده است و نتایج حاصل شده گویای این واقعیت است که با ورود به حوزه نانو ساختارها شاهد افزایش قابل توجهی در «معیار شایستگی» عناصر کاربردی در صنعت ترموالکتریک هستیم. تلاش دانشمندان و محققان همواره برای توسعه قطعات و دستگاههای الکترونیکی کوچک تر، سریع تر، ارزان تر با عملکرد و بهره وری بالاتر در حیطه ی مربوط به ترموالکتریک بوده است. پر واضح است که دستیابی به یک نتیجه ایده آل و مطلوب می تواند انقلابی در عرصه انرژی و تکنولوژی های مرتبط با حوزه ترموالکتریک ایجاد کند، هرچند تا به امروز تلاشهای زیادی در این زمینه صورت گرفته است و حتی ابزارهای کاربردی و صنعتی بر مبنای این یافته ها تولید، ساخته و بکارگیری شده است اما هنوز به نتایج مطلوب و ایده آلی که آغازگر عصر نوینی در علم ترموالکتریک باشد دست نیافته ایم. [۱، ۲]

¹L.D Hicks

²M.S Dresselhaus

فصل ۱

مبانی فیزیکی و تعاریف اولیه

۱.۱ نانو ساختارها

قبل از هر چیز ابتدا به مفهوم نانو می پردازیم، تولد علم نانو را می توان به اواسط دهه شصت میلادی و تلاش های تحسین بر انگیز فاینمن^۱ ربط داد. در واقع این فاینمن بود که دریچه علم نانو را بروی دنیا گشود و توجه دانشمندان را به گستردگی و وسعت حوزه نانو معطوف نمود. در سالهای پس از آن رفته رفته علم نانو به یکی از حوزه های مهم تحقیقاتی دانشمندان و محققان سرار دنیا بدل شد و امروز شاهد دستاوردهای بزرگی در این حوزه هستیم هرچند راه زیادی در پیش داریم و هنوز کارهای زیادی برای انجام دادن وجود دارد. بطور عام و معمول به بررسی و تحقیق بر روی دستگاه هایی با لااقل در یک بعد کوچکتر از صد نانومتر (100 nm)، علم نانو می گویند هر چند این تعریف دقیقی نیست ولی در حال حاضر یکی از معروفترین تعاریف علم نانو می باشد. در تعاریف ابتدائی ساختارهایی از عناصر یا مواد که حداقل در یک بعد مقیاس ۱ تا ۱۰۰ نانومتر داشته باشند را نانو ساختار^۲ می نامند اما در تعریف جدید ساختاری که حداقل در یک بعد دارای خواص کوانتومی باشد را نانو ساختار گویند.

^۱ Richard Philips Feynman

^۲Nanostructure

انواع نانو ساختار

در ابتدا باید به این موضوع اشاره کرد طبق تعریف سازمان جهانی استاندارد در واقع مواد نانو به دو گروه کلی نانوساختار^۱ و نانو اشیاء^۲ تقسیم می شوند که در واقع برای نظم دادن به دنیای گسترده نانو و افزایش دامنه شمول مواد نانو این دسته بندی جدید اعمال شد که در ادامه به معرفی تعدادی از ساختارهای نانو می پردازیم.

۱. ساختارهای صفر بُعدی^۳:

در تعریف ساختارهای صفر بُعدی می توان گفت ساختارهایی هستند که از تمام جهات سه بُعد دارای محدودیت کوانتومی هستند. نانوذرات می توانند بسته به کاربردها در اشکال مختلف مانند کروی، بیضوی، مکعبی، و ... ساخته شوند. بسته به این که از یک جزء تشکیل شده باشند آنها را نقاط کوانتومی^۴ یا اینکه ترکیبی از چند جزء باشند که ذرات کوانتومی^۵ نامیده می شوند. [۳]

۲. ساختارهای یک بُعدی^۶:

به ساختارهایی که در دو بُعد دارای خواص کوانتومی و ابعاد نانو می باشند و از یک بُعد دارای آزادی می باشند که برای مثال می توان از نانوسیمها، نانومیلها، نانولولهها و ... نام برد. مهم ترین ویژگی نانوساختارهای یک بُعدی فلزی هدایت الکتریکی آنها در راستای محور سیم می باشد که بر حسب روش ساخت می تواند بلوری و یا بی شکل باشند.

۳. ساختارهای دو بُعدی^۷:

ساختارهایی که در یک بُعد دارای خواص کوانتومی و ابعاد نانو می باشند و از دو بُعد دارای آزادی می باشند ساختارهای دو بُعدی گویند که بطور عمده شامل لایه های نازک^۸ یا پوشش های سطحی می باشند که به روش های مختلفی بر روی سطوح قرار می گیرند و می توان ضخامت و خواص آنها را کنترل کرد. همچنین لایه های نازک نیز می توانند به صورت خالص و یا ترکیبی از چند ماده مختلف باشند.

¹Nanostructure

²Nano-object

³Zero-dimensional nanostructures

⁴Quantum-dot

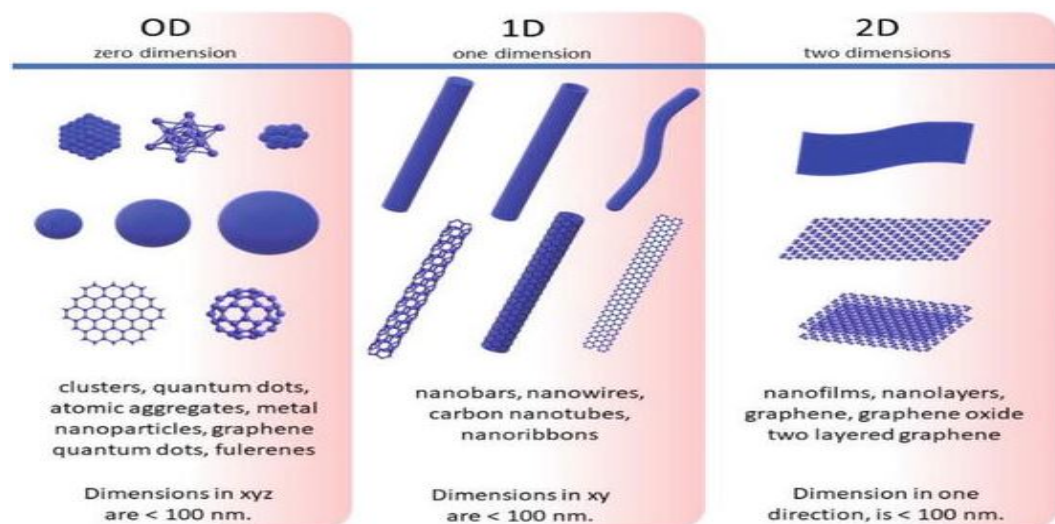
⁵Quantum particles

⁶One-dimensional nanostructures

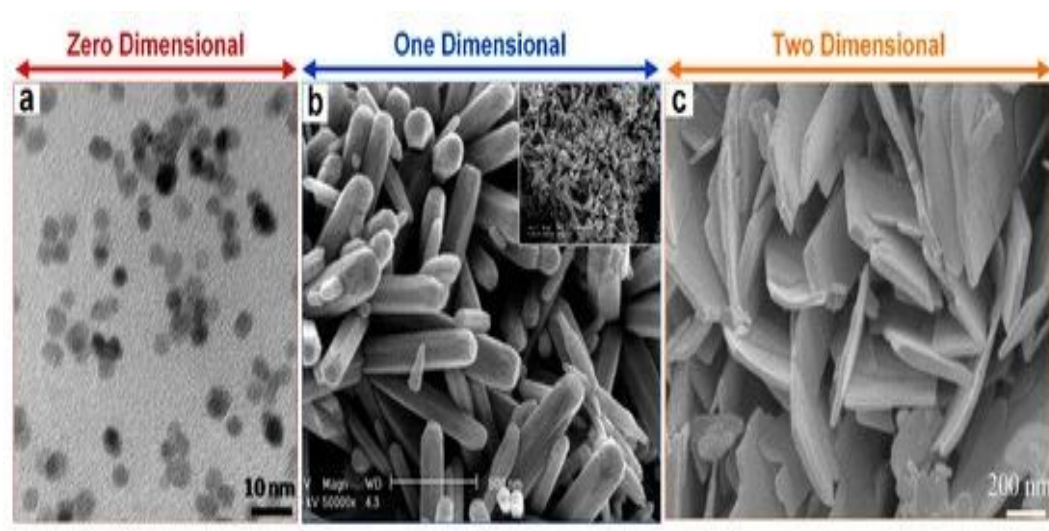
⁷Two-dimensional nanostructures

⁸Thin films

حال تصاویر طرح واره و همچنین تصاویر بدست آمده از میکروسکوپیهای SEM و TEM را برای ساختارهای نانو مشاهده می کنیم:



شکل ۱.۱: طرح واره ساختارهای نانو [۴]



شکل ۲.۱: تصاویر میکروسکوپی ساختارهای نانو [۵]

۴. چگالی حالت ها^۱

برای بررسی دقیق رفتار یک سیستم کوانتومی در ابتدا نیاز به درک صحیح رفتار حاملها در آن سیستم داریم به همین منظور در وهله ی اول می بایست چگالی حالتها را برای سیستم مورد نظر محاسبه کنیم. چگالی حالتها در واقع به تعداد حالات انرژی در واحد حجم در یک فضای حقیقی گفته می شود. که در ادامه به تعریف دقیق آن می پردازیم :

¹Density OF states

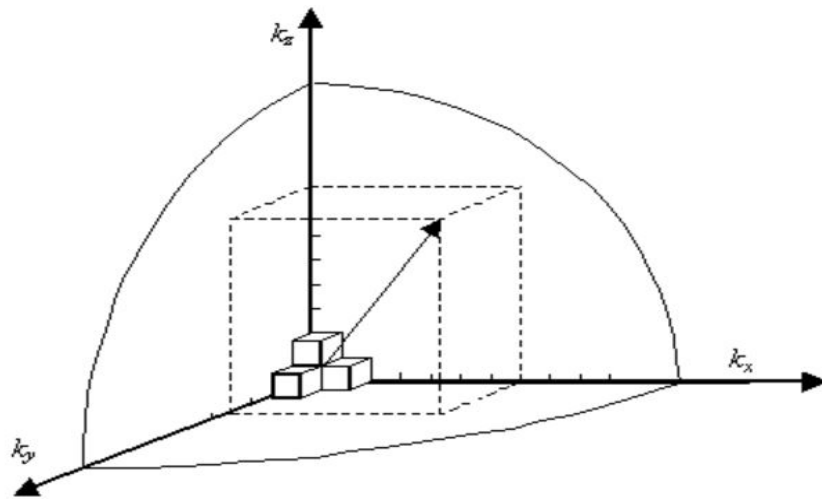
برای شروع یک نیمرسانا مکعبی به طول L را در نظر می گیریم که تابع موج آن با توجه به معادله شرودینگر بصورت زیر مفروض می باشد

$$\psi = A \sin(K_x X) + B \cos(K_x X) \quad (1.1)$$

با اعمال شرایط مرزی در $X=0$ و $X=L$ تابع موج بخاطر پتانسیل بی نهایت برابر صفر می شود. سپس عدد موج در راستاهای مختلف X, Y و Z بدست می آید

$$K_x = \frac{n\pi}{L} \quad ; \quad K_y = \frac{n\pi}{L} \quad ; \quad K_z = \frac{n\pi}{L} \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.1)$$

در شکل زیر فضای K نشان داده شده است



..

شکل ۳.۱: نمای طرح واره فضای k

حال طبق شکل فوق با محاسبه یک هشتم حجم کره با شعاع k در حجم مکعب به ضلع $(\frac{\pi}{L})$ را محاسبه میکنیم:

$$N = 2 \times \frac{1}{8} \times \frac{L^3}{\pi} \times \frac{4}{3} \pi k^3 \quad (3.1)$$

سپس چگالی حالت بصورت زیر بدست می آید

$$\frac{dN}{dE} = \frac{dN}{dk} \frac{dk}{dE} = \frac{L^3}{\pi} \pi k^2 \frac{dk}{dE} \quad (4.1)$$

در اینجا انرژی جنبشی (E) با عدد موج (K) رابطه دارد که

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad \frac{dk}{dE} = \frac{m^*}{\hbar^2 k}, \quad k = \frac{\sqrt{2m^*E}}{\hbar} \quad (5.1)$$

در نهایت چگالی حالت ها بصورت زیر بدست می آید

$$g(E) = \frac{1}{L} \frac{dN}{dE} = \frac{\sqrt{2} \pi \sqrt{m^*}}{\hbar^2} \sqrt{E} \quad ; E \geq 0 \quad (6.1)$$

رابطه فوق برای نیمرساناها در پایین ترین حالت نوار رسانش بصورت زیر تغییر می کند:

$$g_c(E) = \frac{\sqrt{2} \pi \sqrt{m^*}}{\hbar^2} \sqrt{E - E_c} \quad ; E \geq E_c \quad (7.1)$$

$$g_c(E) = 0 \quad ; E < E_c$$

به همین ترتیب چگالی حالت ها برای نیمرساناهای یک بُعدی و دو بُعدی و سه بُعدی بین k و $k+dk$ بصورت زیر بدست می آید: [۶، ۷]

$$\frac{dN_{3D}}{dk} = 2 \left(\frac{L}{\pi} \right)^3 4\pi k^2, \quad \frac{dN_{2D}}{dk} = 2 \left(\frac{L}{\pi} \right)^2 2\pi k, \quad \frac{dN_{1D}}{dk} = 2 \left(\frac{L}{\pi} \right) \quad (8.1)$$

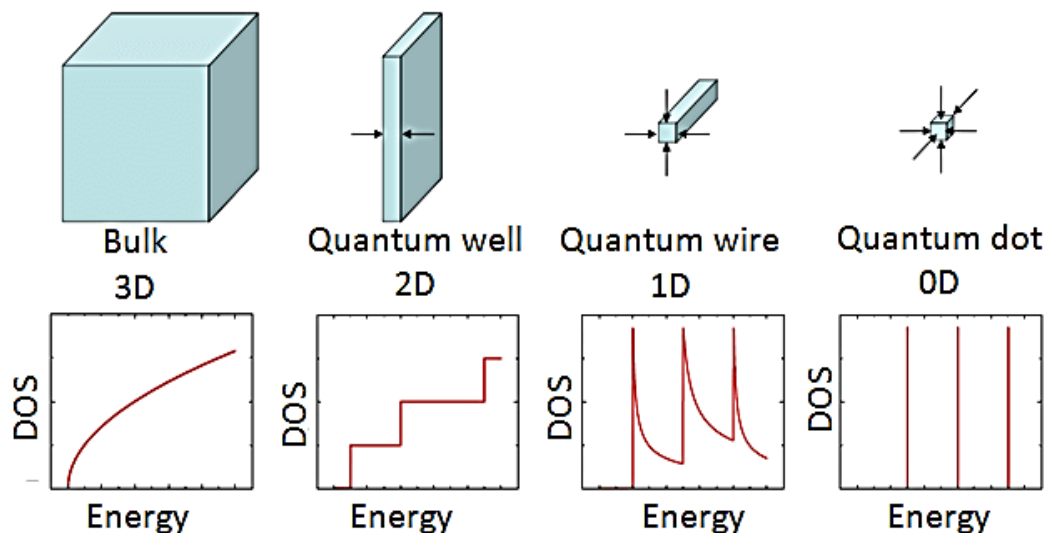
$$E(k) = E_{min} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (9.1)$$

$$g_{c,1D} = \frac{dN_{1D}}{dE} = \sqrt{\frac{2\pi m^*}{\hbar^2}} \frac{1}{\sqrt{E - E_{min}}} \quad , E \geq E_{min} \quad (10.1)$$

$$g_{c,2D} = \frac{dN_{2D}}{dE} = \frac{\sqrt{2\pi m^*}}{\hbar^2} \quad , E \geq E_{min} \quad (11.1)$$

$$g_{c,3D} = \frac{dN_{3D}}{dE} = \frac{\sqrt{2} \pi \sqrt{m^*}}{\hbar^2} \sqrt{E - E_{min}} \quad , E \geq E_{min} \quad (12.1)$$

در پایان می توان طرحی از چگالی حالت ها برای ابعاد مختلف و نمودار های متناظر با انرژی هر بُعد را بشکل زیر نشان داد.



شکل ۴.۱: چگالی حالتها متفاوت در نیمرساناها، نقاط کوانتومی برای صفر بُعد، سیم کوانتومی برای یک بُعد، چاه کوانتومی برای دو بُعد و ساختار کپه ای برای سه بُعد

۲.۱ پدیده ترموالکتریک

پدیده ترموالکتریک یکی از مهمترین و جذاب ترین پدیده های یافت شده در حوزه ی فیزیک می باشد که بطور کلی و در معنای عام به ظهور جریان الکتریکی میان دو نقطه بعد از ایجاد اختلاف دما بین آن ها و یا بالعکس آن یعنی رسیدن به اختلاف دمایی با ایجاد ولتاژ الکتریکی در دو نقطه می باشد. با توسعه روز افزون فناوری نانو ، حوزه ترموالکتریک نگاههای بسیاری از محققان و دانشمندان را به خود جلب کرد برای مثال تمرکز بودجه های کلان اختصاص یافته برای کارهای تحقیقاتی در این حوزه طی دو دهه اخیر روی صنعت خودرو سازی ، سنسور های مختلف و کاربردهای نظامی این اثر بوده است. تاریخچه معرفی این پدیده به اوایل قرن ۱۹ میلادی و تلاش های سیبک^۱ و پلتیر^۲ باز میگردد . پس از دستاوردهای سیبک و پلتیر اینبار تامسون با بررسی دقیق این پدیده و انجام آزمایش هایی ، به رابطه میان اثر سیبک و پلتیر دست یافت . در ادامه به بررسی این آثار می پردازیم.

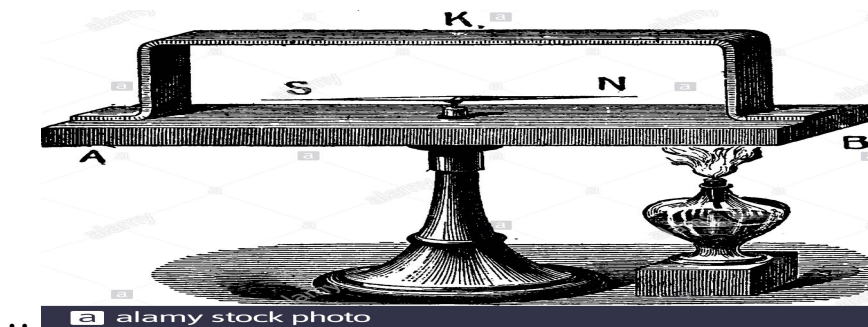
^۱Seebeck

^۲Peltier

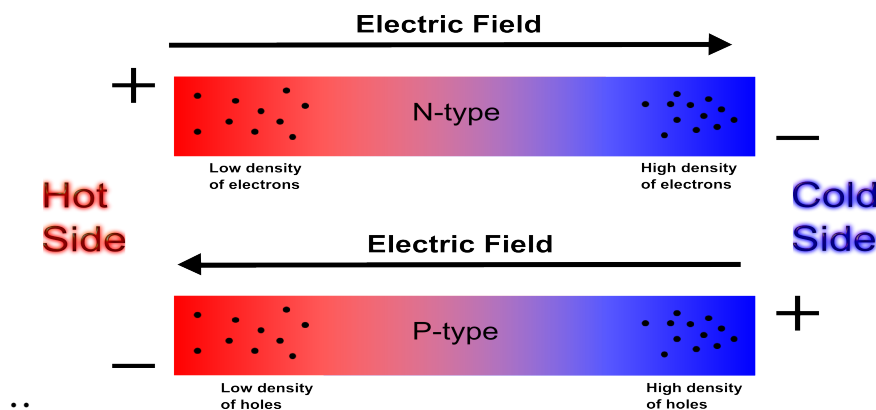
۱. اثر سبیک^۱

در سال ۱۸۲۱ توماس سبیک^۲ مشاهده کرد پس ایجاد اختلاف دما در میان دو سر یک قطعه فلزی یک جریان در میان آنها ایجاد میشود او با انحراف در عقربه قطب نما که در مسیر این قطعه قرار داشت به این مهم پی برد . برای درک بهتر این اثر یک میله رسانای محدود را در نظر بگیرید که به رسانای دیگری متصل است سپس یک طرف اتصال آنرا گرم می کنیم آنگاه این گرادیان دمایی در سرار میله باعث میشود که حامل های بار از سمت گرم به سمت خنک تر حرکت کنند و اینکار موجب ایجاد یک میدان می شود که این میدان عامل بوجود آمدن جریان در مدار می شود و این حرکت تا زمانی که سیستم ما به تعادل برسد ادامه خواهد داشت. اثر سبیک برگشت پذیر است یعنی اگر اتصالات سرد و گرم جابجا شوند جهت میدان و جریان نیز تغییر میکند. در تصاویر زیر طرحی کلی از آزمایش سبیک را مشاهده می کنیم. برای این اثر رابطه ای بدست می آید که معرف ضریب سبیک می باشد:

$$S = \frac{V}{\Delta T} \quad (1.1)$$



شکل ۵.۱: تصویر آزمایش سبیک



شکل ۶.۱: طرح کلی اثر سبیک برای نیمرسانای نوع n و نوع p و جهت میدان در آنها

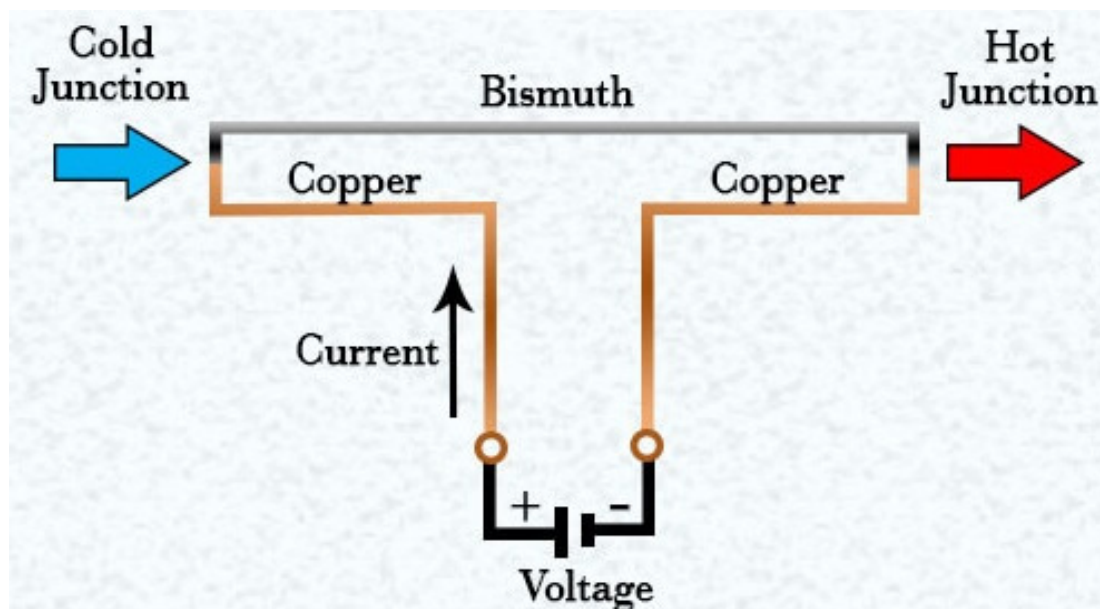
¹Seebeck effect

²Thomas Johan Seebeck

۲. اثر پلتیر^۱

ژان شارل پلتیر^۲ در سال ۱۸۳۴ اثر حرارتی جریان الکتریکی در محل اتصال میان دو فلز را کشف کرد. می توان گفت اثر پلتیر در واقع همان اثر سیبک می باشد منتها در جهت عکس آن قرار دارد یعنی اگر همان سیستم در اثر سیبک را در نظر بگیریم، پلتیر با بهره گیری از جریان الکتریکی موجب ایجاد حرارت یا بعبارتی اختلاف دما در دو طرف قطعه می شود. با توجه به این اثر ضریب پلتیر^۳ متناسب است با نسبت Q (نرخ گرمایش یا سرمایش منتقل شده) به I (جریان) که بصورت زیر تعریف می شود.

$$\Pi_{ab} = \frac{Q}{I} \quad (2.1)$$



شکل ۷.۱: طرح واره آزمایش پلتیر براس سیستمی متشکل از بیسموت و مس. هنگامی که جریان از مدار عبور می کند گرما در اتصال اول ایجاد می شود و در اتصال دوم جذب می شود که باعث اختلاف دمایی بین دو اتصال می شود.

۳. اثر تامسون^۴

ویلیام تامسون پس از بررسی و تحلیل دو اثر سیبک و پلتیر موفق به برقراری ارتباط و ایجاد اتصال بین این دو اثر شد و سومین اثر ترموالکتریک را معرفی نمود. اثر تامسون در واقع یک جریان الکتریکی حاصله از یک گرادیان دمایی کوچک اعمال شده بر رسانای منفرد را توصیف می کند. این اثر عبارت است از جذب یا انتشار گرما در امتداد یک رسانا زمانی که جریان از آن عبور می کند و زمانی که یک انتهای رسانا گرم و دیگری سرد

¹ Peltier effect

² Jean-Charles Peltier

³ Peltier coefficient

⁴ Thomson effect

است. در ادامه رابطه مربوط به این اثر را مشاهده می کنیم که در آن Q میزان گرمایش یا سرمایش منتقل شده، I جریان الکتریکی، β ضریب تامسون و ΔT تغییرات دما می باشد:

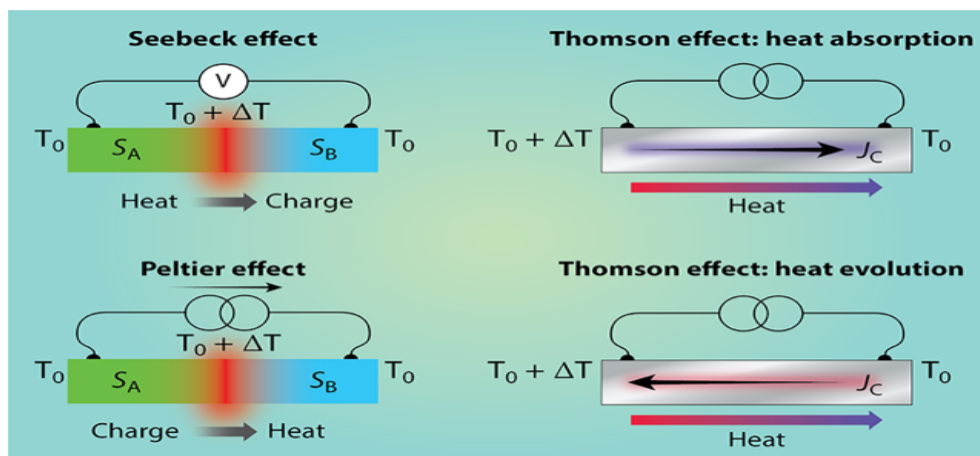
$$Q = \beta I \Delta T \quad (3.1)$$

تامسون که بعدها به لرد کلون مشهور شد هر سه ضریب حرارتی را با هم در رابطه ی کلون مرتبط کرد و به نوعی با هم گره زد. در واقع معادلات کلون ضرایب سبک، پلتیر و تامسون را بخوبی توصیف میکند و نشان می دهد که به هم وابسته اند. روابط زیر:

$$S_{ab} = \frac{\Pi_{ab}}{T} \quad (4.1)$$

$$\frac{dS_{ab}}{dT} = \frac{\beta_a - \beta_b}{T} \quad (5.1)$$

همانطور که مشاهده می کنید در رابطه اول بین ضریب سبک و ضریب پلتیر ارتباط وجود دارد و در رابطه دوم ارتباط میان ضریب سبک و ضریب تامسون مشهود است در واقع روابط کلون، کامل کننده نظریه پدیده ترموالکتریک می باشد. در شکل زیر به صورت طرح وار شاهد تفاوت و تمایز سه اثر ترموالکتریک هستیم. در این شکل جهت جریان و شارش گرما در هر سه اثر قابل مشاهده می باشد.



شکل ۸.۱: طرح کلی سه اثر ترمو الکتریک یعنی، سبک، پلتیر، و تامسون [۸]

۴. معیار شایستگی ترموالکتریک^۱

هرچند ضرایب سه گانه ای که تا اینجا با آنها آشنا شدیم می توانند خواص ترموالکتریکی یک ماده را توصیف کنند اما باید خاطر نشان کرد که برای مقایسه دو ماده اطلاعاتی در اختیار ما قرار نمی دهند چون ضرایب ترموالکتریک دو پارامتر مهم یعنی رسانایی گرمایی و رسانایی الکتریکی که خصوصیات ذاتی هر ماده می باشد را در خود ندارند. برای مقایسه مواد از لحاظ ترموالکتریکی از کمیت بدون بُعد بنام معیار شایستگی ترموالکتریک (ZT) می کنیم:

$$ZT = \left(\frac{S^2 G}{K} \right) T \quad (6.1)$$

البته برای دقت بیشتر می توان رابطه (۶.۱) بصورت زیر بازنویسی کرد:

$$ZT = \left(\frac{S^2 G}{k_e + k_l} \right) T \quad (7.1)$$

که در آن بجای (k) که رسانایی گرمایی ($n.W/K$) می باشد (κ_e) و (κ_l) را که به ترتیب رسانایی گرمایی الکترونی^۲ و رسانایی گرمایی شبکه^۳ هستند جایگذاری کردیم، همچنین (G) در اینجا معرف رسانایی الکتریکی ($1/\Omega$)، T در اینجا معرف دما (K) و S معرف ضریب سبیک می باشد (V/K) می باشد. [۹]

۵. رسانندگی گرمایی

بطور کل به توانایی انتقال گرما توسط یک ماده که مجموعی از رفتار حاملهای بار و فونون های انتشاری می باشد، رسانندگی گرمایی^۴ ($W/m.K$) می گویند که بصورت زیر تعریف شد.

$$K = - \frac{q}{\Delta T}$$

که ΔT معرف اختلاف دما و q معرف نرخ جریان گرما می باشد و K طبق رابطه زیر از دو بخش شبکه ای و الکترونی تشکیل می شود.

$$K = k_e + k_l$$

توجه به این نکته ضروری است که رسانندگی گرمایی با اعمال ابعاد نمونه به رسانایی گرمایی مرتبط می شود که این رابطه بصورت زیر می باشد

$$\kappa = \frac{A}{d} K$$

¹Thermoelectric figure-of-merit

²Electronic thermal-conductance

³Lattice thermal-conductance

⁴ Thermal-conductivity

A نشان دهنده مساحت سطح مقطع عمود بر جریان نمونه و d معرف طول نمونه می باشد $(n.W/K)$.

رسانندگی گرمایی شبکه ای

رسانندگی گرمایی شبکه ای عمدتاً بدلیل انتشار فونون های آکوستیک در جامدات ایجاد می شود که با استفاده از تئوری کلاسیک در مورد انتقال رژیم های پخشی قابل تعریف است

$$K_L = C_v V_s L_\phi \quad (8.1)$$

در اینجا (C_v) حرارت ویژه بر واحد جامدات، (V_s) سرعت صوت و (L_ϕ) طول پوشش آزاد میانگین فونون می باشد.

رسانندگی گرمایی الکترونی

رسانندگی گرمایی الکتریکی با رسانایی الکتریکی (σ) ارتباط دارد و بطور کل بوسیله قانون ویدمان-فرانتس^۱ بیان می شود.

$$K_e = L\sigma T \quad (9.1)$$

در اینجا (T) و (σ) به ترتیب معرف دما و رسانایی الکتریکی و (L) عدد لورنز یا همان پارامتر انتقال مختلط می باشد. عدد لورنز^۲ را می توان با استفاده از مقدار الکترون آزاد در زمانی که حامل های بار تنها برخورد الاستیک انجام می دهند تخمین زد:

$$L = \left(\frac{\pi^2}{3}\right) \left(\frac{K_B}{e}\right)^2 \quad (10.1)$$

در اینجا K_B ثابت بولتزمن و e معرف بار الکترون می باشد.

۶. رسانندگی الکتریکی

رسانندگی الکتریکی به حرکت حامل های بار در اثر اعمال یک میدان الکتریکی در نمونه مورد نظر اشاره دارد.

رسانایی الکتریکی (σ) یک نیمرسانای هم ارز بوسیله ی فرمول زیر محاسبه می شود:

$$\sigma = n_e \mu \quad (11.1)$$

¹Wiedmann-Franz law

²Lorenz number

که در آن n_e دانسیته ی حاملهای بار که بار هرکدام برابر e است و μ اینجا موبیلیتی یا همان تحرک می باشد و به سرعت رانش حامل های بار بر واحد میدان الکتریکی مربوط می شود که در نهایت به طول پویش آزاد میانگین الکترونها (l_e) وابسته است.

رسانایی الکتریکی نیز با رسانندگی الکتریکی طبق رابطه زیر مرتبط است :

$$G = \frac{A}{d} \sigma \quad (12.1)$$

A نشان دهنده مساحت سطح مقطع عمود بر جریان نمونه و d معرف طول نمونه می باشد (S/m).

۳.۱ مفاهیم کاربردی

در ادامه به معرفی و تعریف برخی مفاهیم کاربردی که آشنایی با آنها ضروری به نظر می رسد می پردازیم .

۱. فونون

بطور کلی فونون ها را شبه ذراتی می نامند که وقتی ارتعاشات و حرکات یک شبکه را کوانتیزه می کنیم پدیدار می شوند ، به عبارتی آنها هیچ مکانی در فضا ندارند ، آنها فقط کوانتوم انرژی حالت های ارتعاشی خاص هستند . با وجود اینکه در فضا هیچ مکانی ندارند ولی به علت قابل مشاهده بودن ارتعاشات و ترابرد حاصل از فونون برای آنها مسافت آزاد میانگین هم قائل می شوند . در مجموع می توان فونون ها را ”شبه ذرات بوزونی” توصیف کرد که در بررسی پراکندگی حامل ها اهمیت دارند .

۲. پراکندگی فونون

فونون ها می توانند از طریق مکانیسم های متفاوتی هنگام عبور از یک سیستم پراکنده شوند . برخی از این مکانیسم های پراکندگی عبارتند از: پراکندگی فونون فونون ، پراکندگی فونون ناشی از ناخالصی ، پراکندگی فونون الکترون . رابطه متناظر با پراکندگی را بصورت معکوس زمان واهلش تعریف میکنند برای کدام از انواع پراکندگی که نام بردیم روابط و فرمولهای متفاوتی بکار می رود که بسته به ضرورت مقتضی از آن استفاده می شود . [۱۰، ۱۱]

۳. مسافت آزاد میانگین^۱

مسافت آزاد میانگین ، فاصله متوسطی است که یک ذره متحرک جهت حرکت یا انرژی خود را به طور عمده در نتیجه یک یا چند برخورد پی در پی با ذرات دیگر از دست می

¹mean free path

دهد. این ذرات متحرک می تواند هر ذره ای از قبیل یک اتم ، یک مولکول و یا یک فونون باشد.

مسافت آزاد میانگین فونونی بسته به شرایط مسئله با روش های متفاوتی بدست می آید:

relevant length scales	transport regime	models	relevant formulae
$\lambda_{dom}(T) < \Lambda_{ph}(T) < L$	Diffusive regime (incoherent)	Kinetic model	$K = \frac{1}{3} C v_s \Lambda_{ph}$
$\lambda_{dom}(T) < L \sim \Lambda_{ph} < \Lambda_{ph-bulk}$	Casimir regime (incoherent)	Casimir model	$K_{Cas} = \beta \Lambda_{Cas} T^3$
$\lambda_{dom}(T) \sim L < \Lambda_{ph}$	Ziman regime (partly coherent)	Ziman model	$\Lambda_{ph} = \frac{1+p}{1-p} \Lambda_{Cas}$
$L < \lambda_{dom}(T) < \Lambda_{ph}$	Ballistic regime (coherent)	Landauer model	$T = \frac{1}{1 + 3L / 4\Lambda_{eff}}$

شکل ۹.۱: مسافت آزاد میانگین فونونی به تفکیک رژیم های ترابردی متفاوت [۱۲]

در این تصویر سعی شده بصورت کلی با بیان روش های مختلف انتقال فونون در سیستم هایی با مقیاس نانو که با احتساب دماهای پایین ، معمولاً زیر ۳۰۰ کلوین برای عنصر سیلیکون بدست می آید ، تفاوت های بدست آوردن مسافت آزاد میانگین را نشان دهد. L طول نمونه است ، عبارت است از مسافت آزاد میانگین فونون غیر ارتجاعی و λ_{dom} طول موج فونون غالب است. در مورد مدل لاندائور، پارامتر T درواقع ضریب ترابرد ^۱ بین یک نانوسیم و مخزن حرارتی آن را نشان می دهد. علت استفاده از رژیم های متفاوت برای بدست آوردن مسافت آزاد میانگین ، دست یابی به بهترین جواب برای شرایط متفاوت هر ساختار است برای مثال در رژیم کاسیمیر ^۲ مسافت آزاد میانگین توسط سطح مقطع سیم یعنی با پراکندگی مرزی محدود می شود. در این رژیم فرض می شود که هر فونونی که به سطح ناهموار برخورد می کند، به دنبال قانون تابش جسم سیاه، مجدداً در همه جهت و انرژی جذب می شود. درواقع طول موج فونون هر مقدار که باشد سطح بی نهایت ناهموار در نظر گرفته می شود. اما وقتی دما بشدت کاهش پیدا کند طول موج روند افزایشی خواهد داشت و در نهایت بزرگتر از دامنه زبری و همواری سطح خواهد بود پس در این مواقع مدل زیمان ^۳ جایگزین روش کاسیمیر خواهد شد.

^۱Transmission coefficient

^۲Casimir

^۳Ziman

۴. محدودیت کوانتومی^۱

در مواد با ابعاد کم، مشخصه طول مواد در یک جهت خاص با طول موج موثر دوبروی حامل ها قابل مقایسه است. بنابراین، حرکت حامل ها در جهات خاصی محدود می شود، به این معنی که حامل ها در چاه های پتانسیل با دیوارهای بی نهایت بلند قرار می گیرند. این اثر که باعث ایجاد محدودیت می شود را محدودیت کوانتومی می گویند. [۱۳]

۴.۱ رهیافت لاندائور

لاندائور در ۱۹۵۷ این ایده را مطرح کرد که پراکننده ها می توانند بطور مستقل میدان های موضعی را القا کنند که بر میگردد به دینامیک حامل ها و این ایده کمک شایانی به درک ما از انتقال الکترون در سیستم های مزوسکوپی و نانوسکوپی کرده است. از دیگر نتایج مهم رهیافت لاندائور این است که شاهد پدیدار شدن یک مقاومت محدود خواهیم بود حتی اگر احتمال ترابرد نمونه مورد نظر واحد باشد. [۱۴]

توجه به این نکته ضروری است که رهیافت فوق شامل یک سری مفروضات فیزیکی و شرایط خاص می باشد که ممکن است نتایج آن در مقایسه با نتایج تحقیقات تجربی در موضوع ترابرد در مقیاس نانو رضایت بخش باشد و یا ناراضی کننده باشد. در ادامه بطور اختصار به برخی از این روابط که بر اساس نظریه پراکندگی و استدلال های فیزیکی استخراج شده است اشاره می کنیم. [۱۵، ۱۶، ۱۷]

۱. فرمول بندی مسئله

همانطور که گفته شد رهیافت لاندائور یک فرمول است که مقاومت الکتریکی در یک ساختار کوانتومی را به خواص پراکندگی ارتباط می دهد. در ساده ترین حالت که ماتریس پراکندگی مستقل از انرژی است داریم:

$$G(\mu) = G_0 \sum_n T_n(\mu)$$

که در آن G رسانایی الکتریکی^۲ و $\omega^{-1} \approx 7/75 * 10^{-5}$ و $G_0 = \frac{e^2}{\pi h}$ و همچنین T_n در رابطه فوق ضریب ترابرد^۳ می باشد. [۱۸]

همچنین چگالی جریان در امتداد محور x و در حالت عبوری r برابر می شود با:

$$j(k) = \langle \psi_{ik}^+ | j(k) | \psi_{ik}^+ \rangle$$

¹Quantum confinement

²Electrical conductance

³Transmission coefficient

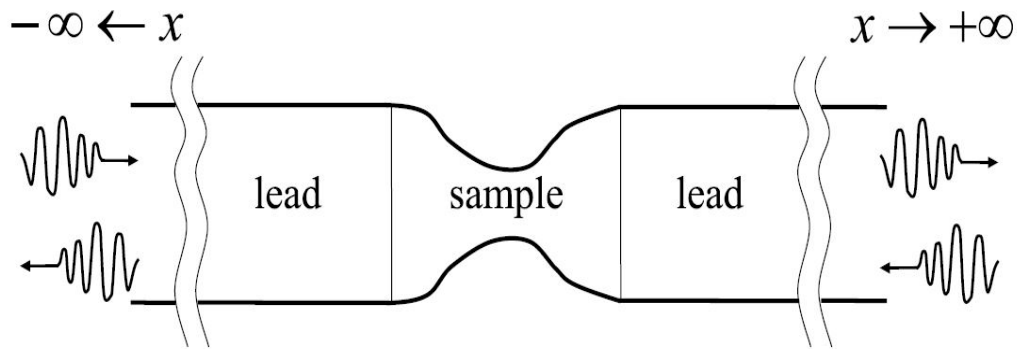
$$j(r) = \frac{\hbar}{im} \left[[\psi_{ik_i}^+]^*(r) \frac{\partial \psi_{ik_i}^+(r)}{\partial x} - \psi_{ik_i}^+ \frac{\partial [\psi_{ik_i}^+]^*(r)}{\partial x} \right] \quad (۱.۱)$$

حال می توان جریان کل را محاسبه نمود

$$I = e \sum_r j(r) \quad (۲.۱)$$

حال یک سیستم کوانتومی بسته اما نامتناهی را در نظر می گیریم نمونه ما بین دو منبع ماکروسکوپی قرار گرفته است.

Landauer approach



شکل ۱۰.۱: طرحی از سیستم فرضی رهیافت لاندائور [۱۷]

برای چنین سیستمی تابع توزیع الکترون برای منبع های چپ و راست بصورت زیر تعریف می شود:

$$f_L(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu_L/k_B T)} + 1} \quad ; \quad f_R(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu_R/k_B T)} + 1} \quad (۳.۱)$$

که μ_L و μ_R پتانسیل شیمیایی منبع راست و چپ می باشند. جریان کل بار بین دو منبع با فرض عبور از سمت چپ به راست بصورت زیر بدست می آید:

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE T(E) [f_L(E) - f_R(E)] \quad (۴.۱)$$

حال برای توابع توزیع با حد بایاس صفر یعنی $(\mu_R - \mu_L \rightarrow 0)$ تابع توزیع تعادلی سمت چپ با استفاده از بسط تیلور بصورت زیر محاسبه می شود:

$$f_L(E) = f_R(E) - \frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \Big|_{\mu_R} (\mu_L - \mu_R) + \mathcal{O}[(\mu_L - \mu_R)^2] \quad (۵.۱)$$

حال با جاگذاری عبارت فوق تا مرتبه اول در رابطه (۴.۱) داریم:

$$I_{\Delta\mu} = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \bar{T}(E) \left[-\frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \right]_{\mu_R} (\mu_L - \mu_R) \quad (۶.۱)$$

عبارت فوق را با در نظر گرفتن اختلاف پتانسیل بصورت زیر بازنویسی میکنیم:

$$V = \frac{(\mu_L - \mu_R)}{e} \quad (۷.۱)$$

$$I_{\Delta\mu} = \frac{2e^2}{h} V \int dE \left(-\frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \right) \bar{T}(E) \quad (۸.۱)$$

رسانایی الکتریکی از رابطه زیر بدست می آید:

$$G = \frac{I_{\Delta\mu}}{V} \quad (۹.۱)$$

در نهایت با استفاده از رابطه (۷.۱) داریم:

$$G = \frac{2e^2}{h} \int dE \left(-\frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \right) \bar{T}(E) \quad (۱۰.۱)$$

با استفاده از روشی مشابه و با بهره گیری از رابطه (۴.۱) جریان الکتریکی ناشی از اختلاف دمایی کوچک بین دو منبع را می توان محاسبه نمود. با فرض آنکه دمای دو منبع چپ و راست به ترتیب T_R و T_L و پتانسیل شیمیایی هم μ باشند

$$f_L(E) = \frac{1}{e^{\beta_L(E-\mu)} + 1} \quad ; \quad f_R(E) = \frac{1}{e^{\beta_R(E-\mu)} + 1} \quad (۱۱.۱)$$

که β را بصورت تعریف کردیم

$$\beta_L = k_B T_L \quad ; \quad \beta_R = k_B T_R$$

دوباره با استفاده از بسط تیلور

$$f_L(E) = f_R(E) - \frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \Big|_{T_R} (T_L - T_R) + \mathcal{O}[(T_L - T_R)^2] \quad (۱۲.۱)$$

با استفاده از عملیات جبری

$$f_L(E) - f_R(E) \approx \frac{1}{k_B T_R^2} \frac{\partial f_R(E)}{\partial \beta_R} \Delta T = \frac{1}{T_R} (E - \mu) \frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \Delta T \quad (۱۳.۱)$$

با جاگذاری در (۴.۱)

$$I_{\Delta T} = \frac{\gamma e}{h T_R} (T_L - T_R) \int_{-\infty}^{+\infty} dE \bar{T}(E) \left[-\frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \Big|_{T_R} \right] (E - \mu) \quad (۱۴.۱)$$

$$\frac{I_{\Delta T}}{\Delta T} = \frac{\gamma e}{h T_R} \int dE (E - \mu) \left(-\frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \right) \bar{T}(E) \quad (۱۵.۱)$$

اکنون با داشتن رسانایی الکتریکی و جریان حاصل از اختلاف دمای میان دو منبع می توان ضریب سبک را محاسبه کرد

$$S = \frac{I_{\Delta T} / \Delta T}{G} = \frac{k_B}{e} \frac{\int dE \left(\frac{E - \mu}{k_B T} \right) \bar{T}(E) \left(-\frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \right)}{\int dE \left(-\frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \right) \bar{T}(E)} \quad (۱۶.۱)$$

حال جریان الکتریکی کل به شکل زیر بازنویسی می شود:

$$I = \frac{I_{\Delta \mu}}{\Delta \mu / e} (\Delta \mu / e) + \frac{I_{\Delta T}}{\Delta T} (\Delta T) = GV + \frac{I_{\Delta T}}{\Delta T} (\Delta T) = G(V + S \Delta T) \quad (۱۷.۱)$$

با استفاده از شار چگالی احتمال، جریان انرژی کل را در دستگاه با پتانسیل شیمیایی μ محاسبه می شود:

$$I_E = \sum_k j_k (E_k - \mu) \quad (۱۸.۱)$$

طبق رهیافت لاندائور جریان انرژی بین دو منبع بدین صورت محاسبه می گردد

$$I_E = \frac{\gamma}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE (E - \mu) \bar{T}(E) [f_L(E) - f_R(E)] \quad (۱۹.۱)$$

در حد بایاس بسیار کوچک یعنی $(\mu_R - \mu_L \rightarrow 0)$ ، جریان انرژی در واحد بایاس می شود:

$$A = \frac{I_{E, \Delta \mu}}{V} = \frac{\gamma e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE (E - \mu) \left[-\frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \Big|_{\mu_R} \right] \bar{T}(E) \quad (۲۰.۱)$$

سپس جریان انرژی در واحد اختلاف دمای بین دو منبع نیز بصورت زیر خواهد بود

$$B = \frac{I_{E, \Delta T}}{\Delta T} = \frac{\gamma e}{h T_R} \int_{-\infty}^{+\infty} dE (E - \mu)^2 \left[-\frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \right] \bar{T}(E) \quad (۲۱.۱)$$

اکنون جریان انرژی کل عبارت خواهد بود از

$$I_E = \frac{I_{E, \Delta \mu}}{\Delta \mu / e} (\Delta \mu / e) + \frac{I_{E, \Delta T}}{\Delta T} (\Delta T) = AV + B \Delta T \quad (۲۲.۱)$$

اکنون با در نظر گرفتن یک حالت خاص که جریان برابر صفر باشد، $I=0$ ، رابطه بایاس و اختلاف دما بصورت $V = -S \Delta T$ در می آید و همچنین در این حالت جریان انرژی (شار گرما)

بصورت $I_E = (B - AS)\Delta T$ اکنون رسانایی گرمایی الکترونی برای جریان الکتریکی صفر از روابط زیر بدست می آید:

$$I_E = k_e \Delta T \quad ; \quad k_e = B - AS \quad (23.1)$$

$$k_e = \left(\frac{I_{E,\Delta T}}{\Delta T} \right) - \left(\frac{I_{E,\Delta \mu}}{V} \right) \frac{(I_{\Delta T}/\Delta T)}{(I_{\Delta \mu}/V)} \quad (24.1)$$

$$k_e = \frac{\Upsilon T k_B}{h} \left\{ \int \left(\frac{E - \mu}{k_B T} \right) \Upsilon \bar{T}(E) \left(-\frac{\partial f_E}{\partial E} \right) dE - \frac{\left[\int \left(\frac{E - \mu}{k_B T} \right) \bar{T}(E) \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) dE \right]^{\Upsilon}}{\int \bar{T}(E) \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) dE} \right\} \quad (25.1)$$

فصل ۲

نمونه هایی از کارهای انجام شده گذشته در این زمینه

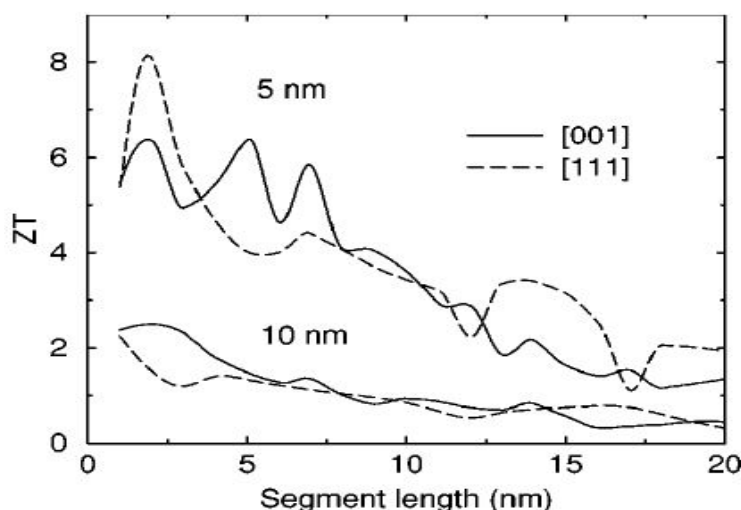
در این فصل تعدادی از مقالات منتشر شده در سالهای اخیر که به حوزه ترموالکتریک در ابعاد نانو می پردازد را باهم مرور می کنیم. بررسی اجمالی و توجه به دستاوردها و نتایج تحقیقاتی مقالات مذکور و همچنین مشاهده مقالات عدیده مرتبط، گویای اهمیت و جایگاه در حال رشد مقالات این حوزه در مجامع علمی و دانشگاهی می باشد. یادآوری این نکته ضروری است که در انتخاب این مقالات سعی شده تا به جوانب مختلف این امر توجه شود نکاتی از جمله سال انتشار، همخوانی با کار پیش رو، دغدغه های علمی محققان و نتایج حاصل از تحقیق که منتشر شده است.

۱.۲ خواص ترموالکتریکی نانوسیم های ابر شبکه

لین^۱ و درسل هاوس در مقاله ای به همین نام در سال ۲۰۰۳ به بررسی مدل نظری برای ساختارهای الکترونی و ویژگی های ترابرد در نانوسیم های ابر شبکه پرداختند.

آنها با بررسی معیار شایستگی (ZT) برا ساس پتانسیل کرونیگ - پنی^۲ و استفاده از تابع ترابرد بولتزمن^۳ یک بعدی بصورت تئوری دریافتند که نانو سیمهای ابر شبکه ساختارهای امیدوار کننده تری برای کاربردهای ترموالکتریکی هستند. آنها دریافتند کاهش قطر سیم سبب افزایش محدودیت کوانتومی می شود و معیار شایستگی به عواملی چون طول قطعه ، قطر سیم ، جهت کریستال ، انتخاب اجزای مواد وانرژی فرمی بستگی دارد. یکی از موارد مهم مورد اشاره در این مقاله این می باشد که برای یک معیار شایستگی بهتر باید طول نمونه از قطر نانو سیم کمتر باشد.

در این مقاله آنها مقدار ZT را برای نانو سیم ابر شبکه فوق نازک PbSe/PbS با قطر ۵ نانومتر، بسیار بالاتر از مقدار آلیاژی $PbS_{(0.5)}Se_{(0.5)}$ محاسبه کردند. وابستگی معیار شایستگی در مطالعه مذکور به ترتیب به طول نمونه مطابق شکل (۲.۱) و به انرژی فرمی مطابق شکل (۲.۲) می باشد. [۱۹]

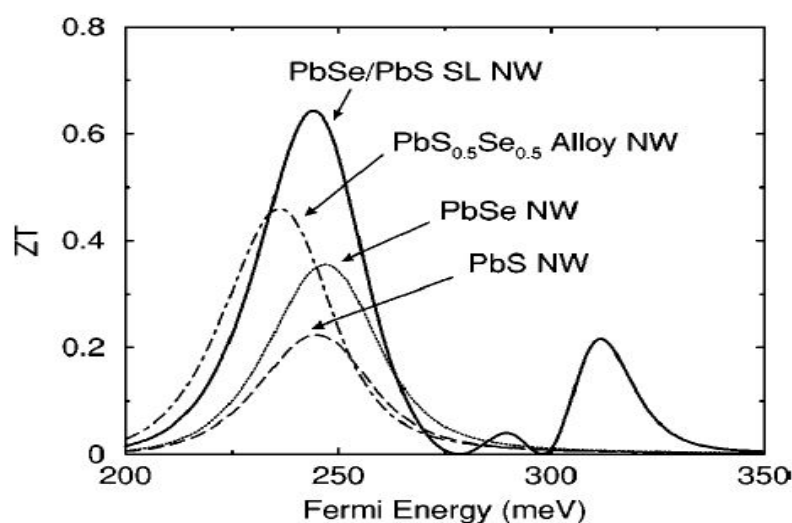


شکل ۱.۲: مقدار معیار شایستگی برای دو نمونه از یک نانو سیم ابر شبکه با قطر های ۵ و ۱۰ نانومتر بر حسب طول نمونه های مختلف [۱۹]

¹Y.m Lin

²Kronig-Penney

³Boltzmann



شکل ۲.۲: در این نمودار مقدار معیار شایستگی برای نمونه های متفاوت در دمای ۷۷ کلوین و با قطر برابر ۱۰ نانومتر بر حسب انرژی فرمی نشان داده شده است. [۱۹]

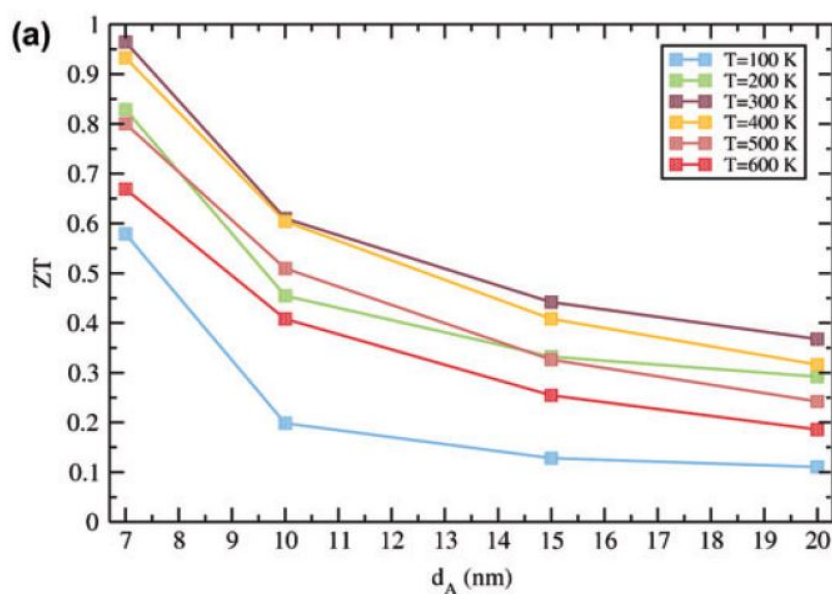
۲.۲ خواص ترموالکتریک سیستم های چاه کوانتومی

یلگل^۱ و سریواستاوا^۲ در سال ۲۰۱۴ طی مقاله ای به بررسی اثر ترموالکتریک در ساختار چاه کوانتومی نیم رسانای ۲ بعدی پرداختند. آنها با بهره گیری از راهبرد نیمه کلاسیک بولتزمن نمونه نوع n ساختار $(Bi_2Se_3/Bi_2Te_3/Bi_2Se_3)$ و نمونه نوع p ساختار $(Sb_2Te_3/Bi_2Te_3/Sb_2Te_3)$ را در محدوده دمایی ۵۰ تا ۶۰۰ کلوین را مورد مطالعه قرار دادند. که برای نمونه نوع n با عرض چاه ۷ نانومتر و در دمای ۳۵۰ کلوین ماکزیمم ZT را برابر (۰.۹۷) و برای نمونه نوع p با احتساب عرض چاه ۱۰ نانومتر و در دمای ۴۴۰ کلوین ماکزیمم ZT را برابر (۱.۹۴۵) بدست آوردند. [۲۰]

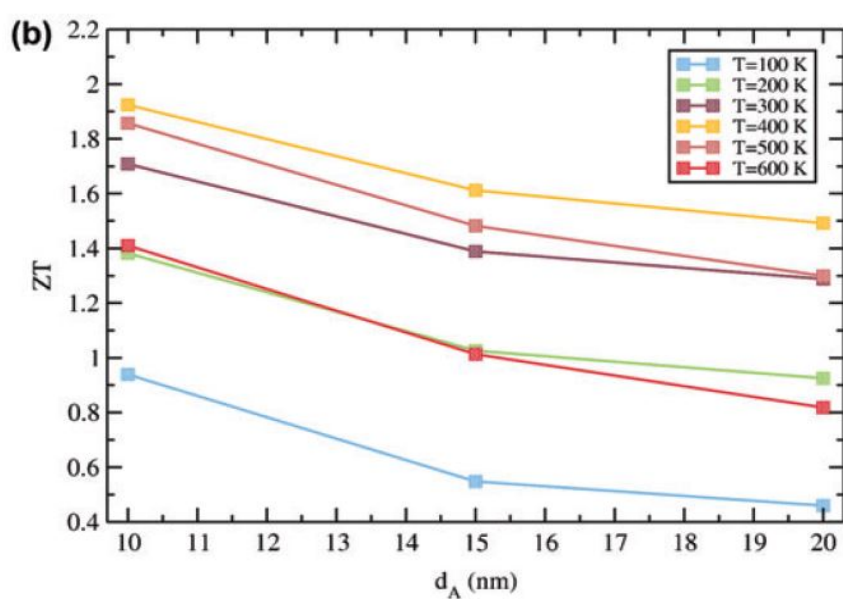
آنها در یافتند که دو نمونه نوع n و نوع p نشان دهنده رفتار تراز فرمی در محدوده های دمایی بوده. و رسانندگی گرمایی حامل ها در هر دو نوع n و p با افزایش دما و عرض چاه، کاهش می یابد. در اینجا دو نمودار از نتایج حاصل از مقاله فوق را مشاهده می کنیم که به تغییرات معیار شایستگی و بر حسب عرض چاه اشاره دارد. [۲۰]

¹ Ö.C Yelgel

²G.P. Srivastava



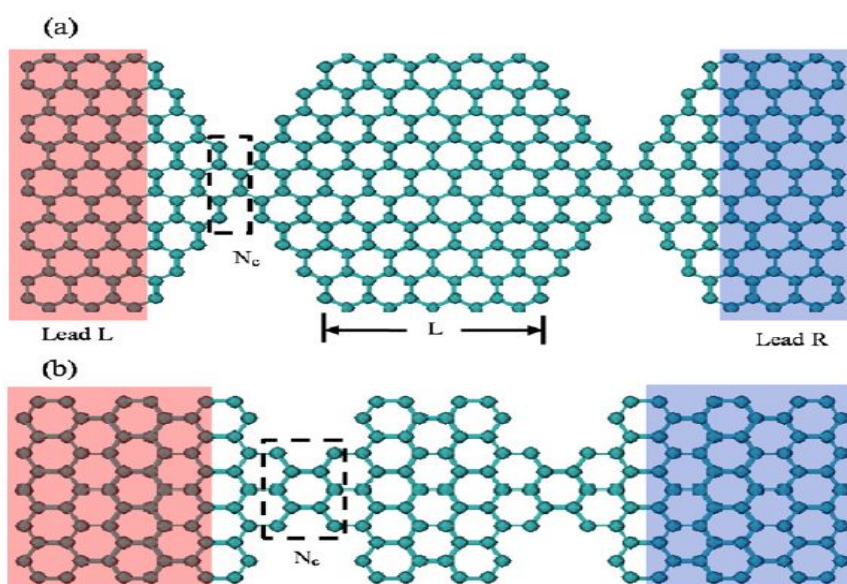
شکل ۳.۲: تغییرات معیار شایستگی برحسب عرض چاه در دماهای مختلف برای نمونه نوع n [۲۰]



شکل ۴.۲: تغییرات معیار شایستگی برحسب عرض چاه در دماهای مختلف برای نمونه نوع p [۲۰]

۳.۲ خواص ترمو الکتریک نقاط کوانتومی گرافن شش ضلعی

در سال ۲۰۱۲ آقای یان^۱ و همکارانش به بررسی خواص ترموالکتریکی نانوروبان های گرافن و یا نقاط کوانتومی گرافن شش ضلعی با بهره گیری از تابع غیرتعادلی گرین با اعمال محدودیت پرداختند. آنها در یافتند که با کاهش عرض در محدودیت ها می توان شاهد کاهش رسانندگی گرمایی بود در صورتی که مقدار عبارت $S^2 G_e$ ^۲ در مقایسه با نتایج مربوط به نانو روبان ها همچنان بالاست، بنابر این می توان معیار شایستگی را تا حد زیادی افزایش داد. [۲۱]

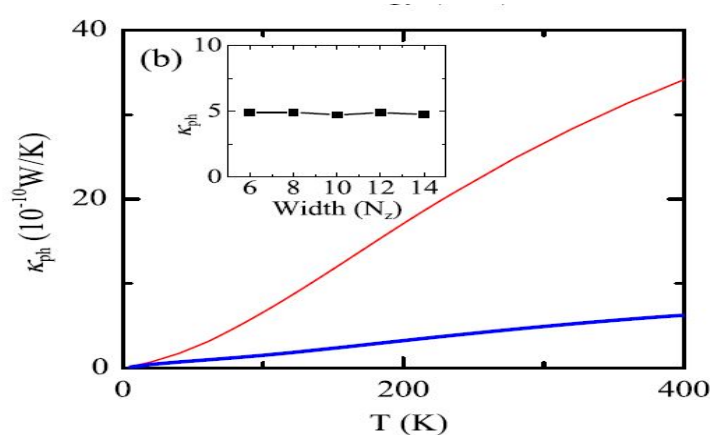


شکل ۵.۲: طرحی از گرافن با اعمال دو محدودیت در دو طرف ساختار با عرض های متفاوت. [۲۱]

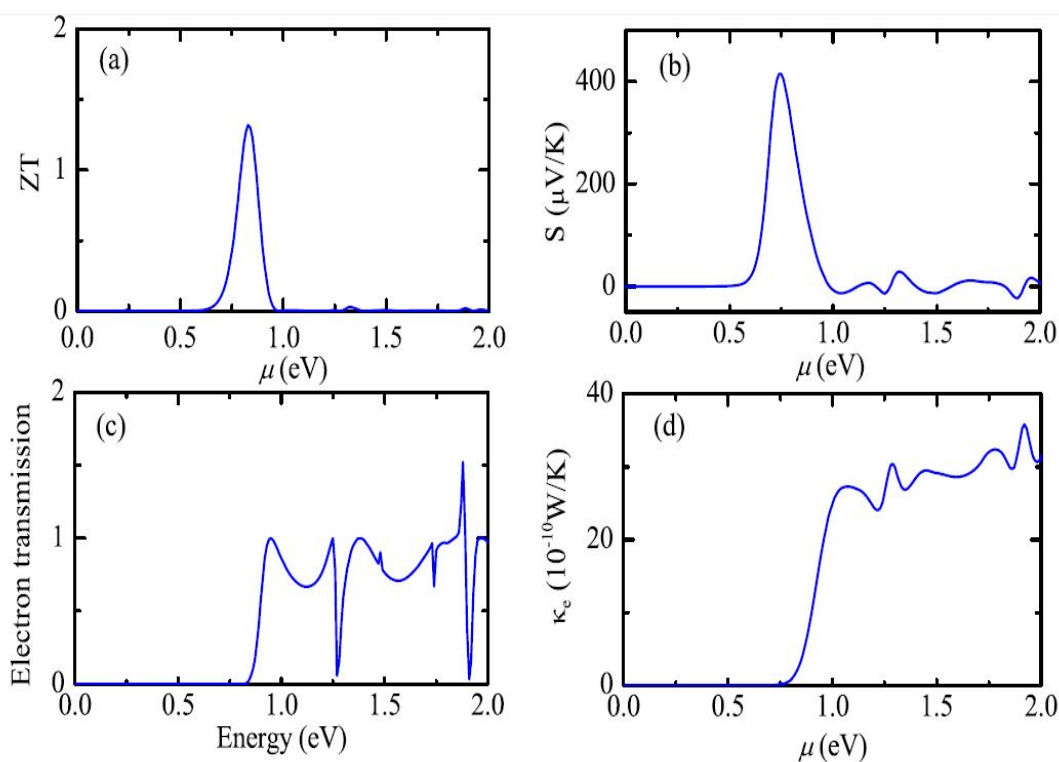
در پژوهش فوق آنها در یافتند که در صورت وجود محدودیتها ، انتقال فونونها در بیشتر انرژیهای فونونی به جز انرژیهای بسیار کم متوقف می شود ، زیرا فونونهای کم انرژی دارای طول موج طولانی هستند و بنابراین به سختی می توان آنها را با محدودیتها پراکنده کرد.

^۱Y. Yan

^۲ در این عبارت S معرف ضریب سیبک و G_e معرف رسانندگی الکتریکی می باشد.



شکل ۶.۲: نحوه تغییرات رسانندگی گرمایی فونونی نانوروبان با دما. [۲۱]



شکل ۷.۲: ویژگی های ترموالکتریکی نانوروبان گرافن در دمای ۳۰۰ کلوین. (a)، (b)، (c) و (d) به ترتیب رفتار معیار شایستگی ترموالکتریک، توان حرارتی، ضریب انتقال الکترون و رسانندگی گرمایی الکترونی را نشان می دهند. [۲۱]

۴.۲ بررسی نظری معیار شایستگی ترموالکتریکی در ساختارهای با ابعاد کم

سلمان^۱ و جبیر^۲ در سال ۲۰۱۸ به بررسی نظری معیار شایستگی ترموالکتریک در ساختارهای با ابعاد کم از جمله تلوراید بیسموت (Bi_2Te_3) و تلوراید سرب ($PbTe$) و گالیم آرسناید ($GaAs$) در دمای اتاق پرداختند. طبق نتایج عددی آنها افزایش قابل توجهی در معیار شایستگی ترموالکتریک در سیم های کوانتومی با قطر $W = 20 \text{ \AA}$ پیش بینی می شود و این افزایش در سیم های کوانتومی بیشتر از چاه کوانتومی با همین ابعاد مفروض است. همچنین در این مطالعه خاطر نشان شده است که علت افزایش معیار شایستگی به خاطر محدودیت کوانتومی حامل ها در ساختارهای دو بُعدی و یک بُعدی بکار گرفته شده است. [۲۲]

مطالعه فوق برای محاسبه ضرایب و متغیرهای ترموالکتریک از جمله ضریب سبیک، رسانندگی گرمایی و رسانندگی الکتریکی و... از مدل معادله ترابرد بولترمن استفاده شده است. برای مثال از روابط زیر را برای ساختار دو بُعدی و با در نظر گرفتن محدودیت کوانتومی کامل استفاده شده:

$$\sigma_{2D} = \frac{\langle \tau \rangle e^2}{2\pi W} \left(\frac{2K_B T}{\hbar^2} \right) (m_y/m_x)^{(1/2)} F_0$$

$$S_{2D} = -\frac{K_B}{e} (2F_1/F_0 - \xi_{2D}^*)$$

$$K_e^{2D} = \frac{\langle \tau \rangle K_B \hbar^2}{4\pi W} \left(\frac{2K_B T}{\hbar^2} \right)^2 (m_y/m_x)^{(1/2)} (3F_2 - 4F_1^2/F_0)$$

که در آن W بعنوان طول چاه کوانتومی، K_B همان ثابت بولترمن و ξ^* پتانسیل شیمیایی کاهش یافته نسبت به لبه نوار رسانش می باشد. همچنین F بعنوان انتگرال فرمی-دیراک تعریف شده است.

در نهایت نتایج حاصل از مطالعه فوق در جدول ذیل درج شده است.

Material	$Z_{2D}T$	$Z_{1D}T$
Bi_2Te_3	1.1654	3.3833
$PbTe$	0.2022	1.0425
$GaAs$	0.0448	0.2397

شکل ۸.۲: محاسبه کمیت بدون بُعد معیار شایستگی برای سه ماده مختلف بصورت نانو سیم و نانو چاه. [۲۲]

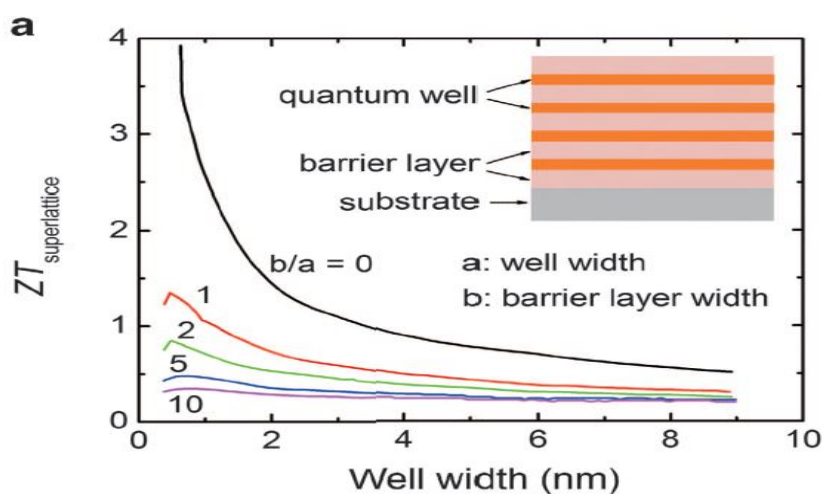
¹E. M Salman

²R. M Jubayr

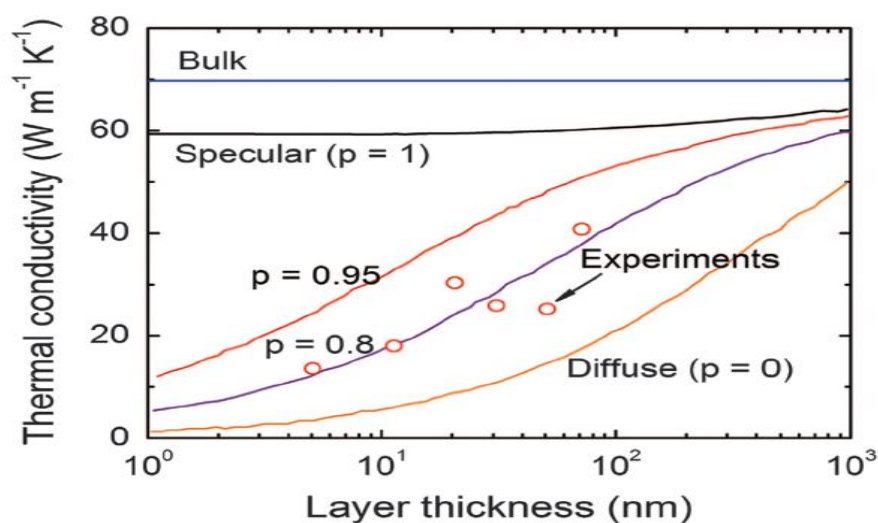
۵.۲ تأثیر اندازه در مواد ترموالکتریک

آقای مائو^۱ و همکاران در سال ۲۰۱۶ طی مقاله ای به بررسی تأثیر اندازه و ابعاد در مواد ترموالکتریک پرداختند. آنها با بهره گیری از معادله بولتزمن در ۲ بُعد و ۱ بُعد، در مورد تأثیرات محدودیت کوانتومی بر حامل ها، از جمله افزایش چگالی حالتها، اثر پراکندگی بر رسانندگی گرمایی شبکه ای و ... به تحقیق پرداختند.

آنها در یافتند با کاهش ابعاد سیستم ضریب افزایش می یابد و اثر محدودیت کوانتومی فونونی و پراکندگی باعث کاهش رسانندگی گرمایی می شود. [۱۳]



شکل ۹.۲: معیار شایستگی بر حسب طول چاه [۱۳]

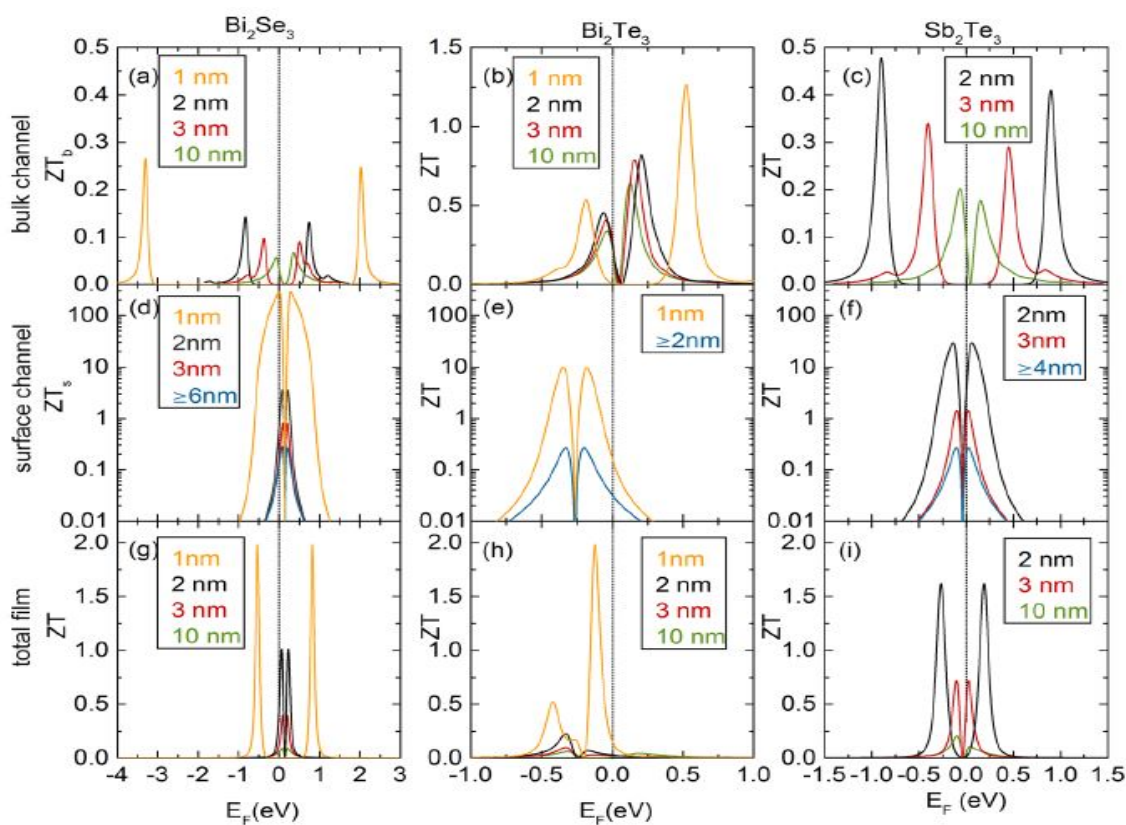


شکل ۱۰.۲: معیار شایستگی بر حسب ضخامت لایه [۱۳]

۶.۲ خواص ترموالکتریک چاه های کوانتومی متشکل از عایق توپولوژیک و لایه های نازک

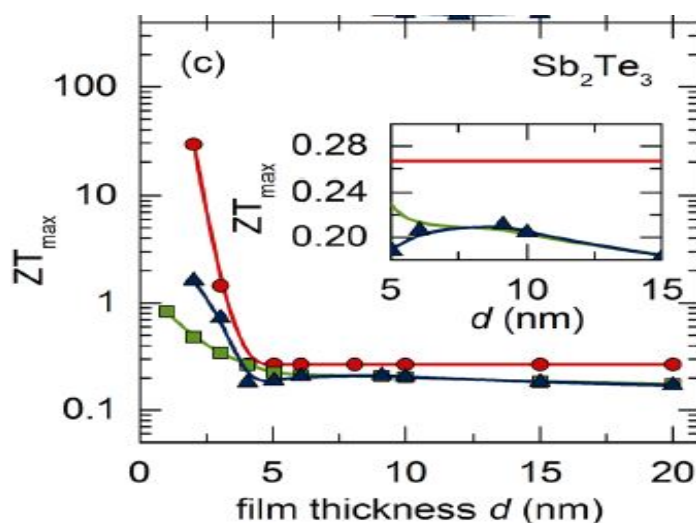
آسترهاگ^۱ و همکاران از دانشگاه هامبورگ در سال ۲۰۱۴ به بررسی خواص ترموالکتریک عایق های لایه نازک ترکیباتی از جمله Bi_2Se_3 ، Sb_2Te_3 ، Bi_2Te_3 پرداختند.

آنها از مدل کانالهای چندگانه و معادلات نیمه کلاسیک بولتزمن برای محاسبه خواص ترموالکتریکی برای چاه های کوانتومی لایه نازک با ضخامت بین ۱ تا ۱۰ نانومتر استفاده کردند که در آن اثر محدودیت کوانتومی نقش مهمی ایفا می کند. [۲۳]



شکل ۱۱.۲: معیار شایستگی برای نمونه های مختلف بر حسب انرژی در ساختارهای متفاوت [۲۳]

¹H. Osterhage



شکل ۱۲.۲: معیار شایستگی بر حسب ضخامت لایه [۲۳]

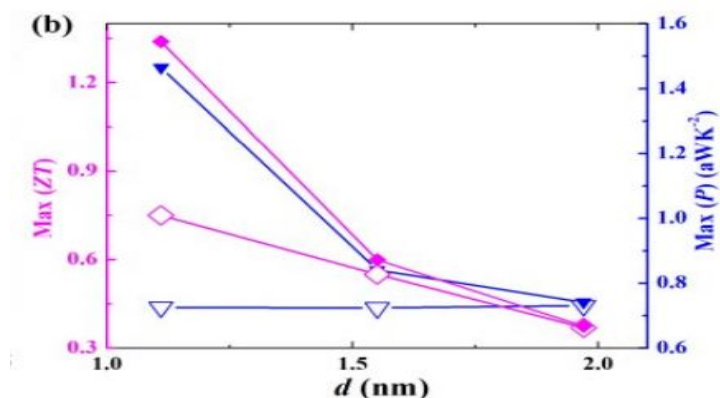
۷.۲ افزایش معیار شایستگی ترموالکتریکی در نانو سیم های GaAs

در سال ۲۰۱۵ ژو^۱ و همکاران طی مقاله مذکور به بررسی راه افزایش معیار شایستگی در نانو سیم های GaAs پرداختند. آنها از ترکیب نظریه توابع چگالی و رهیافت تابع گرین غیر تعادلی برای مقصود خود بهره بردند. در ابتدا به دنبال پایدار ترین ساختار برای GaAs بودند مثل ساختار زینک بلند^۲ و ورتسایت^۳ سپس به تجزیه و تحلیل سیستماتیک این ساختارها بر اساس وابستگی به نوع ساختار، اندازه نانوسیم ها و دما پرداختند. آنها برای یک نانو سیم بسیار نازک گالیم آرسناید در ابعاد چند نانو متر در دمای اتاق، معیار شایستگی را برابر (۱/۳۴) بدست آوردند که طبق داده های قبلی حدود صد برابر معیار شایستگی گالیم آرسناید در حالت کپه ای می باشد. آنها در این تحقیق خاطر نشان کردند که با مهندسی سطح مثلاً زبری سطح و رشد ابر شبکه ها و کنترل نوع انباشت می توان این مقدار را افزایش داد. [۲۴]

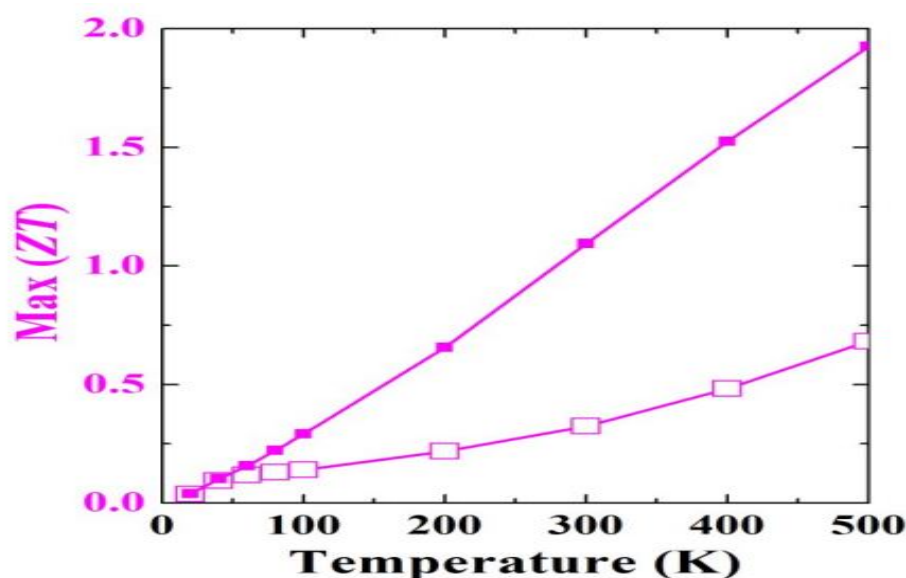
^۱X. Zou

^۲ Blende Zinc

^۳wurtzite



شکل ۱۳.۲: حداکثر معیار شایستگی و پارامتر قدرت برحسب قطر سیم در دمای اتاق [۲۴]

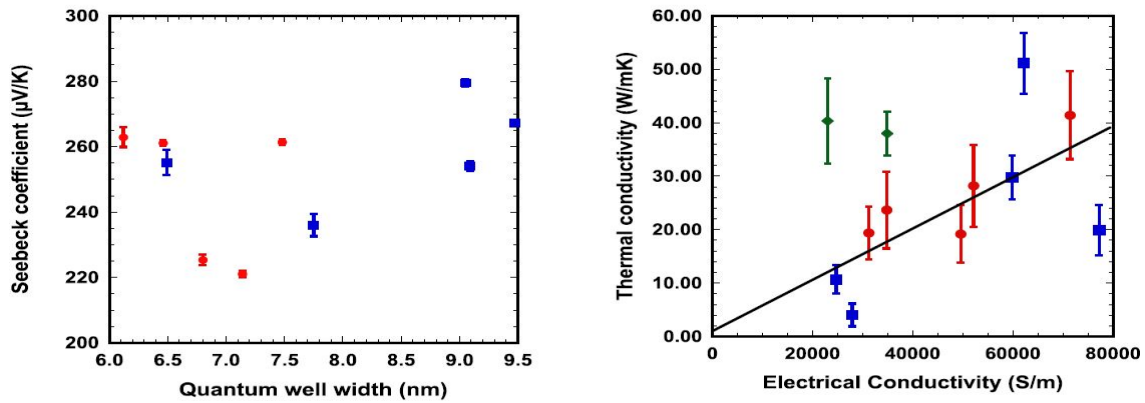


شکل ۱۴.۲: حداکثر معیار شایستگی بر حسب دما [۲۴]

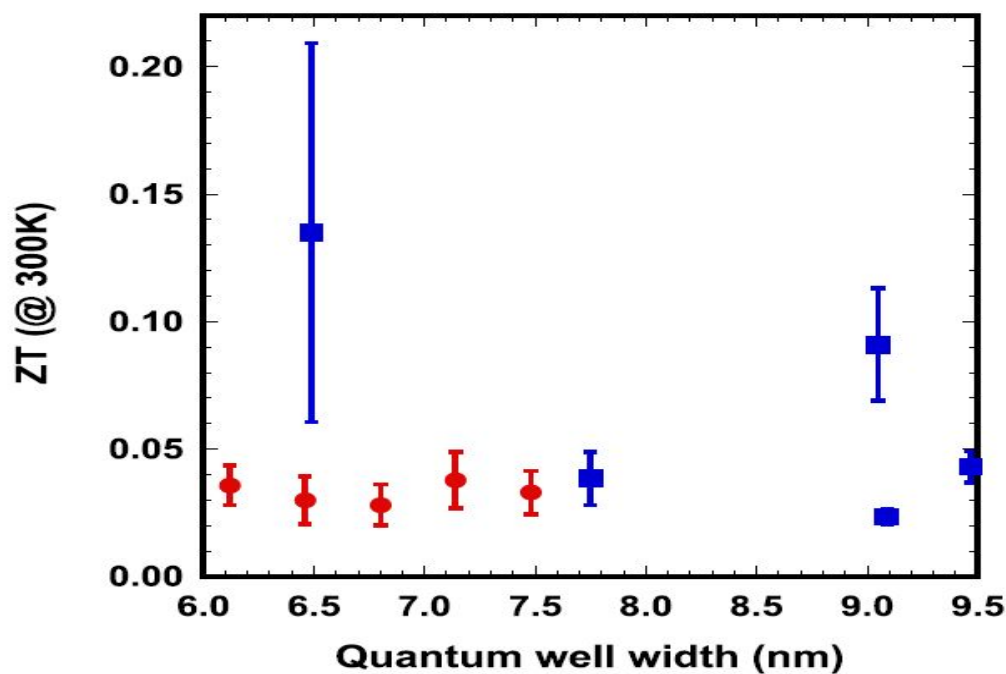
۸.۲ خواص ترموالکتریک ابر شبکه های Ge/SiGe

در سال ۲۰۱۳ سامارلی و همکاران^۱ به بررسی خواص ترموالکتریکی ابر شبکه ی Ge/SiGe پرداختند. در این مقاله آنها با مقایسه نتایج خود با مدل سازی بهره گرفته شده از معادلات ترابرد بولتزمن و همچنین تکنیک مونت کارلو نشان دادند که تراکم در رفتگی ها در ساختار رشد داده شده باعث ایجاد محدودیت هایی در بهبود عملکرد دستگاه می شود. آنها لایه های SiGe با روش رسوب بخار شیمیایی با انرژی کم با افزایش پلازما با دو طرح متفاوت رشد دادند که اولی بصورت $Si_{0.8}Ge_{0.2}$ در (6 nms^{-1}) دومی هم بصورت $Si_{0.6}Ge_{0.4}$ در (2 nms^{-1}) و در نهایت نتایج بدست آمده را بصورت نمودارهای زیر نشان دادند. [۲۵]

¹ A. Samarelli



شکل ۱۵.۲: ضریب سیبک بر حسب چاه کوانتومی و جدول مقایسه ای رسانندگی گرمایی و رسانندگی الکتریکی برای طرح شماره ۱ با رنگ آبی و طرح شماره دو با رنگ قرمز [۲۵]



شکل ۱۶.۲: معیار شایستگی بر حسب طول چاه کوانتومی برای طرح شماره ۱ به رنگ آبی و طرح شماره ۲ به رنگ قرمز [۲۵]

فصل ۳

ابزارهای محاسباتی و رهیافت

اکنون با مرور دو فصل قبل می‌دانیم اختلاف دما در یک سیستم باعث ایجاد یک جریان الکترونی در آن می‌شود. در اینجا به علت وجود ناخالصی‌ها و نقص‌های موجود در سیستم، حرکت الکترون‌ها با پراکندگی همراه است و این پراکندگی در واقع یکی از مهمترین عوامل مورد بررسی پدیده ترموالکتریک می‌باشد. برای تحلیل دقیق این پدیده در یک سیستم، آن را با روش‌ها و رهیافت‌های متفاوت مورد مطالعه و ارزیابی قرار می‌دهند که از پرکاربردترین رهیافت‌های مورد استفاده در مقالات این حوزه می‌توان به انتگرال مسیر^۱، توابع گرین^۲، ماتریس چگالی^۳، رهیافت کوبو^۴ و لاندائور بوتیکر^۵ اشاره کرد. در همین راستا یکی از روش‌های قابل استفاده در بررسی جزئیات پراکندگی‌های الکترونی موثر در پدیده ترموالکتریک معادله لیپمن-شوینگر^۶ می‌باشد. [؟]

¹Path integral

² Green's function

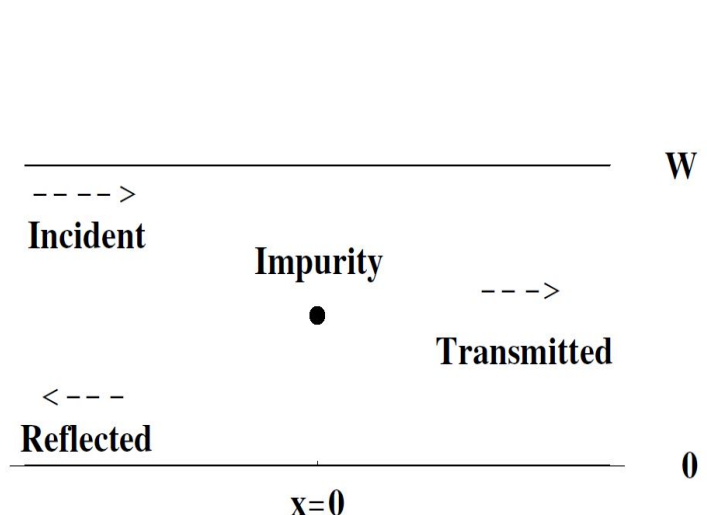
³ Density matrix

⁴Kubo formalism

⁵Landauer-Buttiker

⁶Lippmann-Schwinger equation

در ادامه یک سیم کوانتومی بی نهایت را مشاهده می کنیم که در آن حرکت الکترون ها در راستای عرضی محدود و در راستای طولی آزاد در نظر گرفته شده است.



برای چنین سیستمی هامیلتونی را بصورت زیر تعریف می کنند:

$$H = H_{\circ} + V \quad (1.3)$$

که در آن H_0 از مجموع انرژی جنبشی و یک پتانسیل محدود (V_c) در جهت عرضی (y) است که می‌توان آن را به صورت زیر معرفی نمود:

$$H_{\circ} = \frac{P^{\mathfrak{r}}}{\mathfrak{r}m} + V_c(y) \quad , \quad V_c(y) = \frac{1}{\mathfrak{r}} m \omega_{\circ}^{\mathfrak{r}} y^{\mathfrak{r}} \quad (2.3)$$

همچنین در رابطه (۱.۳) $V = V(x, y)$ پتانسیل پراکنده ای می باشد که از حضور نقص ها و ناخالصی ها پدید می آید. در غیاب پراکنده، حالت های الکترونی دستگاه ویژه حالت های

¹Electron mobility

ذره آزاد محدود به حرکت در سیم کوانتومی خواهند بود. معادله ی ویژه مقداری بیانگر حالت های مجاز دستگاه بصورت $E|p\rangle = H_0|p\rangle$ می باشد.

در ادامه از نماد $|\psi_p^{(0)}\rangle$ برای توصیف حالت ذره آزاد استفاده می شود. در اینجا ویژه حالت های ذره آزاد در سیم کوانتومی توصیف شده با معادله (۲.۳)، بصورت زیر بدست می آید:

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

که $\phi_n(y)$ ویژه حالات نوسانگر هماهنگ ساده یک بُعدی بوده و طبق رابطه زیر تعریف می شود:

$$\phi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! y_0 \sqrt{\pi}}} H_n(y) \quad (4.3)$$

$H_n(y)$ ها توابع هرمیت هستند که با استفاده از روابط زیر بدست می آیند:

$$H_0(y) = 1$$

$$H_1(y) = 2y$$

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

و ویژه مقادیر انرژی برای H_0 برابر است یا:

$$E = \frac{P_x^2}{2m} + E_n \quad (5.3)$$

که در آن تغییرات $P_x = \hbar K_x$ پیوسته بوده و n بعنوان شاخص زیرنوار^۱ و E_n بعنوان انرژی کف زیرنوار در نظر گرفته شده اند.

در حضور پراکننده، معادله شرودینگر که باید حل شود بصورت زیر خواهد بود:

$$(H_0 + V)|\psi^{(+)}\rangle = E|\psi^{(+)}\rangle \quad (6.3)$$

که حل آن برای یافتن حالت های ذرات پراکنده شده برابر خواهد بود با:

$$|\psi_p^{(+)}\rangle = |\psi_p^{(0)}\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V |\psi^{(+)}\rangle \quad (7.3)$$

در نهایت رابطه بدست آمده همان معادله لیپمن-شوینگر در نظریه پراکندگی است که توصیف کننده یک موج فرودی به علاوه یک موج خروجی می باشد. [۲۷]

با ضرب عبارت $\langle x|$ از سمت چپ در معادله (۷.۳) و همچنین استفاده از اتحاد زیر در فضای مکان:

¹Subband

$$\int d^3x' |x'\rangle \langle x'| = 1 \quad (۸.۳)$$

رابطه ی (۷.۳) را تبدیل به معادل انتگرالی برای پراکندگی می شود.

$$\langle x | \psi_p^{(+)} \rangle = \langle \psi_p^{(0)} \rangle + \int d^3x' \left\langle x \left| \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} \right| x' \right\rangle \langle x' | V | \psi_p^{(+)} \rangle \quad (۹.۳)$$

با توجه به معادله (۹.۳) می بینیم که باید بخش مرکزی انتگرال را حل کنیم در ادامه با توجه به کامل بودن مجموعه ویژه حالت های هامیلتونی H_0 می توان رابطه زیر را استفاده نمود :

$$\int d^3p' |p'\rangle \langle p'| = 1 \quad (۱۰.۳)$$

در نهایت با اعمال رابطه (۱۰.۳) بخش مرکزی انتگرال بصورت زیر باز نویسی می شود:

$$G_+(x, x') = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3p' \int d^3p'' \langle x | p' \rangle \left\langle p' \left| \frac{1}{E - \frac{p'^2}{2m} + i\epsilon} \right| p'' \right\rangle \langle p'' | x' \rangle. \quad (۱۱.۳)$$

در عبارت بدست آمده حال باید جمله $\langle p' | p'' \rangle$ محاسبه شود به همین منظور دوباره از رابطه ی (۸.۳) استفاده می شود:

$$\langle p' | p'' \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp \frac{i(p''_x - p'_x)x}{\hbar} \int_0^W dy \phi_{n'}(y) \phi_{n''}(y) = \delta(p'_x - p''_x) \delta_{n'n''} \quad (۱۲.۳)$$

با وارد کردن نتیجه حاصل در عبارت (۱۱.۳) و نیز ایجاد یک تغییر بصورت زیر

$$\int d^3p' \int d^3p'' \longrightarrow \sum_{n', n''} \int_{-\infty}^{+\infty} dp'_x \int_{-\infty}^{+\infty} dp''_x \quad (۱۳.۳)$$

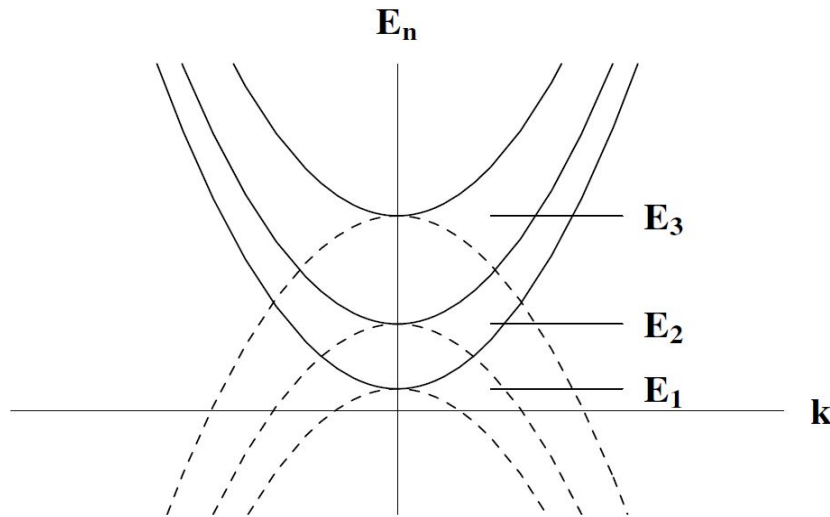
در نهایت به عبارت زیر می رسیم

$$G_+(x, x') = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{n'} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp'_x}{2\pi\hbar} \cdot \frac{e^{\frac{ip'_x(x-x')}{\hbar}}}{E - \frac{p'^2_x}{2m} + i\epsilon} \quad (۱۴.۳)$$

برای رسیدن به یک ساختار ساده تر ، عبارت معادل برای E طبق رابطه (۵.۳) در فرمول بالا قرار می گیرد سپس با جایگذاری $p'_x = \hbar q$ و در نهایت با تغییر متغیر و بازآرایی مجدد روابط بالا و همچنین با جایگذاری عبارت $k_{n'}^2 = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)(E - E_{n'})$ نتیجه زیر حاصل می شود:

$$G_+(x, x') = \sum_{n'} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \left(\frac{-1}{2\pi} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{e^{iq(x-x')}}{q^2 - k_{n'}^2 + i\epsilon} \quad (۱۵.۳)$$

نکته ای که اینجا وجود دارد این است که اگر $E_{n'}$ که انرژی کف زیر نوار است کمتر از انرژی فرمی E_f باشد، n' یک مُد انتشاری^۱ می باشد که در اثر پتانسیل پراکندگی از مد سمت چپ n به مد سمت راست n' منتشر شده است. اما اگر انرژی کف هر زیر نوار $E_{n'}$ بیشتر از انرژی فرمی E_f باشد آنگاه n' معرف یک مُد محو شونده^۲ خواهد بود، در ادامه مشاهده می شود برای حالت های محو شونده $k_{n'} = (\frac{\gamma_m}{\hbar})(E_{n'} - E)$ می شود.



شکل ۲.۳: رابطه پراکندگی مُدهای انتشاری و محو شونده در یک سیم شبه یک بعدی. برای مُد های انتشاری توسط منحنی های پررنگ نشان داده شده ($E > E_n$) و برای مُدهای محو شونده ($k_n = i\kappa_n$) بصورت منحنی های خط چین نشان داده شده است ($E < E_n$). [۲۶]

در انتگرال مذکور سهم دو مورد متفاوتی که ذکر شد بصورت جداگانه محاسبه می شود. اگر n' مُدانتشاری باشد آنگاه انتگرال با $I_{n'}(x, x') = (\frac{-i}{\sqrt{k_{n'}}})e^{ik_{n'}|x-x'|}$ داده می شود و اگر n' یک مُد محو شونده باشد آنگاه انتگرال با $I_{n'}(x, x') = (\frac{-1}{\sqrt{k_{n'}}})e^{-k_{n'}|x-x'|}$ داده می شود. در نهایت با توجه به آنچه گذشت و با اعمال روابط مذکور تابع گرین بصورت زیر بازنویسی می شود:

$$G_+(x, x') = \sum_{n'=1}^{n_f^{(max)}} \phi_{n'}(y)\phi_{n'}(y') \frac{e^{ik_{n'}|x-x'|}}{\sqrt{k_{n'}}} - \sum_{n'=n_f^{(max)}+1}^{\infty} \phi_{n'}(y)\phi_{n'}(y') \frac{e^{-k_{n'}|x-x'|}}{\sqrt{k_{n'}}} \quad (۱۶.۳)$$

که در جمله اول $n_f^{(max)}$ معرف بالاترین مد انتشاری در انرژی فرمی E می باشد، و همچنین n' در جمع جمله ی دوم بر روی مُدهای محو شونده ی می باشد. همچنین در اینجا از یک پتانسیل موضعی به شکل $\langle x'|V(x)|x'' \rangle = V(x)\delta^{(2)}(x', x'')$ بهره می گیریم. در اینجا فرض شده پتانسیل، یک پتانسیل با برد محدود است نه بینهایت که بدین ترتیب محدوده ای که در پراکندگی سهیم می باشد در یک فضای محدود قرار خواهد گرفت. حال با در نظر گرفتن

¹Propagating

²Evanescent

• $V(x') \neq 0$ فقط در بازه های $0 < x' < L$ ، $0 < y' < W$ معادله انتگرالی (۹.۳) به معادله ای برای توصیف پراکندگی ذرات از یک پتانسیل محدود موضعی یا محلی تبدیل می شود.

(۱۷.۳)

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

با دقت در معادله فوق متوجه می شویم که تابع موج کل $(\psi_p^{(+)}(x, y))$ در حضور پراکننده به صورت جمع تابع موج ذره فرودی $(\psi_p^{(0)}(x, y))$ به علاوه عبارتی که نشان دهنده اثر پراکننده است نوشته می شود. معادله فوق در کل طول سیم معتبر خواهد بود. توجه به تعبیر فیزیکی معادله انتگرالی فوق بسیار جالب خواهد بود. تابع موج $\psi_p^{(+)}(x)$ دامنه احتمال یافتن ذره در x را می دهد. اگر ذره در x' برهمکنش داشته باشد آنگاه دامنه احتمال یافتن آن در x برابر است با دامنه ی احتمال حضور ذره در x' ضرب در دامنه ی احتمال انتشار آن از x' به x . دامنه احتمال کل حضور ذره در x از جمع مقادیر مذکور برای تمامی x' های ممکن محاسبه می شود. تا به اینجا ی بحث تنها حالت کلی پتانسیل پراکندگی موضعی با برد محدود را شامل شده است. در بخش بعدی بررسی پراکندگی الکترون از پتانسیل تابع دلتا در یک سیم دو بُعدی را مشاهده خواهیم کرد. [۲۶]

۱.۱.۳ پتانسیل پراکندگی تابع دلتای دیراک

در این بخش بررسی پراکندگی الکترون از پتانسیل تابع دلتا را مشاهده خواهیم کرد که برای بررسی اثرات پراکندگی در دستگاه الکترونی مورد نظر مناسب است. در ابتدا پتانسیل تابع دلتا بصورت زیر در نظر گرفته شده است:

$$V(x, y) = \gamma \delta(x) \delta(y - y_i) \quad (۱۸.۳)$$

که در آن γ می تواند بسته به شرایط مثبت یا منفی باشد. حال معادله (۱۷.۳) برای تابع موج $\psi_p^{(+)}(x, y)$ برابر خواهد شد با:

$$\psi_p^{(+)}(x, y) = \psi_p^{(0)}(x, y) + \frac{2m\gamma}{\hbar^2} G_+(x, y; 0, y_i) \psi_p^{(+)}(0, y_i) \quad (۱۹.۳)$$

با قرار دادن $x = 0$ و $y = y_i$ در آخرین عبارت رابطه فوق عبارت $\psi_p^{(+)}(0, y_i)$ را بدست می آید سپس با بهره گیری از نکته فوق تابع موج بصورت زیر نوشته می شود:

$$\psi_p^{(+)}(x, y) = \psi_p^{(0)}(x, y) + \frac{1}{D} \frac{2m\gamma}{\hbar^2} G_+(x, y; 0, y_i) \psi_p^{(0)}(0, y_i) \quad (۲۰.۳)$$

که در آن به جهت سهولت در نوشتار D به شکل زیر تعریف شده است.

$$D = 1 - \sum_{n'=1}^{n_f^{(max)}} \left(\frac{S_{n'n'}}{2iK_{n'}} \right) + \sum_{n'=n_f^{(max)}+1}^{n_c} \left(\frac{S_{n'n'}}{2K_{n'}} \right) \quad (21.3)$$

n_c در واقع ماکزیمم مد محو شونده ای است که در محاسبات منظور می شود. برای اطمینان از همگرایی در محاسبه دامنه پراکندگی باید محاسبات انجام شده مدهای محو شونده بسیاری را شامل شود به گونه ای که افزایش تعداد مدهای محو شونده به حساب آمده اختلاف ناچیزی در نتایج محاسبات ایجاد کند.

در عبارت بالا همچنین از معرفی کمیت زیر استفاده شده است:

$$S_{n'n'} = \frac{2m\gamma}{\hbar^2} \phi_n(y_i) \phi_{n'}(y_i) \quad (22.3)$$

در واقع معادله (۲۰.۳) تابع موج ذرات پراکنده شده توسط پتانسیل تابع دلتا دیراک در یک سیم دو بُعدی را نشان می دهد. همانطور که دیده شد تابع موج از مجموع موج فرودی به علاوه ی جمله ای که حاصل از تأثیر پراکننده می باشد، تشکیل می شود. این معادله گویای این می باشد دامنه احتمال یافتن ذره در بازه (x, y) برابر است با دامنه احتمال آن که ذره در موقعیت ناخالصی باشد ضرب در دامنه احتمال انتشار ذره تحت اثر ناخالصی تا نقطه (x, y) که دور از موضع ناخالصی است. در نهایت با جایگذاری تابع گرین در معادله (۲۰.۳) می توان تابع موج کل را بصورتی نوشت که برای هر دو مد انتشاری و مد محو شونده به نتیجه و جواب رسید:

$$\begin{aligned} \psi_p^{(+)}(x, y) = & \frac{1}{\sqrt{2}\pi} e^{ik_n x} \phi(y) + \sum_{n'=1}^{n_f^{(max)}} \frac{1}{\sqrt{2}\pi} e^{ik_{n'} |x|} \phi_{n'}(y) \left(\frac{-i}{2k_{n'} D} \right) S_{nn'} \\ & + \sum_{n'=n_f^{(max)}+1}^{n_c} \frac{1}{\sqrt{2}\pi} e^{-\kappa_{n'} |x|} \phi_{n'}(y) \left(\frac{-1}{2k_{n'} D} \right) S_{nn'}. \end{aligned} \quad (23.3)$$

در این معادله جمع اول بر روی مدهای انتشاری و جمع دوم بر روی مدهای محوشونده می باشد، n مدفرودی و n' مد پراکنده است. دامنه ترابرد تابع موج از معادله اخیر بدست می آید

$$t_{nn'}(E) = \delta_{nn'} + \left(\frac{-i}{2k_{n'} D} \right) S_{nn'} \quad (24.3)$$

$$r_{nn'}(E) = - \left(\frac{-i}{2k_{n'} D} \right) S_{nn'} \quad (25.3)$$

در صورتی که n' مد محوشونده باشد باید در معادلات فوق $k'_n = i\kappa_{n'}$ را جایگذاری کنیم.

دامنه انتقال جریان که نشان دهنده دامنه احتمال آن می باشد که الکترونی از یک سو در مد n فرود آمده در سمت دیگر به مد n' منتقل شود برابر است با $\tilde{t}_{nn'} = \sqrt{k_{n'}/k_n} t_{nn'}$. با این حساب ضرایب ترابرد جریان $T_{nn'} E$ خواهد بود.

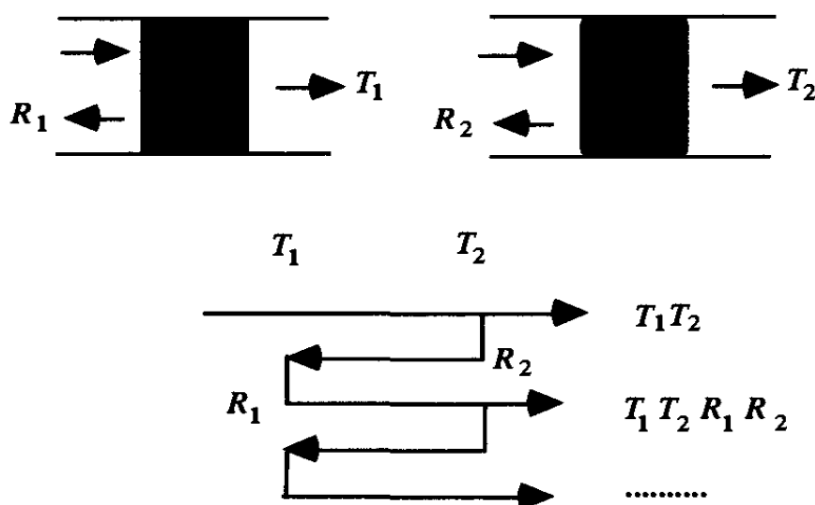
$$T_{nn'} = \frac{k_{n'}}{k_n} t_{nn'} t_{nn'}^* \quad (26.3)$$

عبارت فوق در واقع احتمال مشاهده الکترونی در مد n' را پس از پراکندگی در مد n می دهد. رسانایی و ضریب انتقال کل چنین دستگاهی به ترتیب برابر است با:

$$G = \frac{e^2}{\hbar\pi} \sum_{n,n'} T_{nn'} \quad (27.3)$$

$$\bar{T}(E) = \sum_{n,n'} \frac{k_{n'}}{k_n} t_{nn'} t_{nn'}^* \quad (28.3)$$

با در نظر گرفتن دو پراکننده متوالی، احتمال عبور کل را می توان با حساب آوردن سهم صحیح تمامی مراتب بازتاب بین دو پراکننده محاسبه نمود



$$T_{(1+2)} = T_1 T_2 + T_1 T_2 R_1 R_2 + T_1 T_2 R_1^2 R_2^2 + \dots = \frac{T_1 T_2}{1 - R_1 R_2} \quad (29.3)$$

با توجه به این نکته که $R_1 = 1 - T_1$ و $R_2 = 1 - T_2$ آنگاه می توان داشت :

$$\frac{1 - T_{(1+2)}}{T_{(1+2)}} = \frac{1 - T_1}{T_1} + \frac{1 - T_2}{T_2} \quad (30.3)$$

با تعمیم عبارت فوق به دستگاهی شامل N پراکننده متوالی ، احتمال عبور را بصورت زیر می توان نوشت:

$$\frac{1 - T_{(N)}}{T_{(N)}} = \sum_{i=1}^N \frac{1 - T_i}{T_i} \Rightarrow T_{(N)} = \left(1 + \sum_{i=1}^N \frac{1 - T_i}{T_i} \right)^{-1} \quad (31.3)$$

با توجه به رهیافت لاندائور که در فصل اول به آن اشاره شد و با توجه به جریان به دست آمده در رابطه های (۱.۱) (۲.۱) در رژیم پاسخ خطی، رسانایی الکتریکی (G)، ضریب سبیک (S) و رسانایی گرمایی الکترونی (k_e) برای جریان الکتریکی صفر به شکل زیر به دست می آیند:

[۲۸، ۲۹، ۱۵]

$$G = \frac{2e^2}{h} \int \bar{T}(E) \left(\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE \quad (32.3)$$

$$S = \frac{k_B}{e} \frac{\int \left(\frac{E-E_F}{k_B T_L} \right) \bar{T}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE}{\int \bar{T}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE} \quad (33.3)$$

$$k_e = \frac{2T_L k_B}{h} \left\{ \int \left(\frac{E-E_F}{k_B T_L} \right)^2 \bar{T}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE - \frac{\left[\int \left(\frac{E-E_F}{k_B T_L} \right) \bar{T}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE \right]^2}{\int \bar{T}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE} \right\} \quad (34.3)$$

رسانایی گرمایی شبکه ای (k_l) را نیز می توان به روشی مشابه به دست آورد :

$$k_l = \frac{T_L k_B}{h} \int T_{ph}(\hbar\omega') M_{ph}(\hbar\omega') \left[\left(\frac{\hbar\omega'}{k_B T_L} \right)^2 \left(-\frac{\partial n_0}{\partial(\hbar\omega')} \right) \right] d(\hbar\omega') \quad (35.3)$$

که در آن

$$n_0(\hbar\omega') = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega'}{k_B T_L}} - 1} \quad (36.3)$$

معرف تابع توزیع تعادلی بوز-اینشتین می باشد. همچنین $T_{ph}(\hbar\omega')$ ضریب گذار فونونی است که به صورت زیر تعریف می شود:

$$T_{ph}(\hbar\omega') = \frac{\lambda(\hbar\omega')}{l + \lambda(\hbar\omega')}$$

$\lambda(\hbar\omega')$ مسافت آزاد میانگین فونونی و $M_{ph}(\hbar\omega')$ تعداد مدهای فونونی می باشد.

$$\frac{\partial n_0}{\partial(\hbar\omega')} = \left(-\frac{1}{k_B T_L} \right) \frac{e^{\frac{\hbar\omega'}{k_B T_L}}}{(e^{\frac{\hbar\omega'}{k_B T_L}} - 1)^2} \quad (37.3)$$

$$\lambda(\hbar\omega') = \lambda_0 \left(\frac{\hbar\omega'}{k_B T_L} \right)^r, \quad (r = 0 \text{ for acoustic phonon scattering}) \quad (38.3)$$

$$\lambda_0 \sim 10^{-2} \text{ nm}$$

$$M_{ph}(\hbar\omega') = \frac{\mathfrak{z}(\hbar\omega')^2}{\mathfrak{f}\pi(\hbar c_s)^2} \quad (39.3)$$

که (c_s) در اینجا سرعت موج صوتی می باشد.
برای رسانایی فونونی بالستیک ضریب گذار فونونی برابر ۱ $T_{ph}(\hbar\omega')$ می باشد. با بهره گیری از معادلات (36.3) و (37.3) و (39.3) و استفاده از تغییر متغیر $x = \hbar\omega'/k_B T_L$ و اعمال آنها در معادله (35.3) عبارت زیر حاصل می شود:

$$(K_l)_{ballistic} = \frac{\mathfrak{z}k_B^{\mathfrak{f}}T_L^{\mathfrak{z}}}{\lambda\pi^2\hbar^{\mathfrak{z}}C_s^{\mathfrak{z}}} \int_0^{+\infty} dx \frac{x^{\mathfrak{f}}e^x}{(e^x - 1)^2} = \frac{\pi^2 k_B^{\mathfrak{f}}T_L^{\mathfrak{z}}}{\mathfrak{f}\pi\hbar^{\mathfrak{z}}C_s^{\mathfrak{z}}} \quad (40.3)$$

در ادامه برای رسانایی فونونی پخشی داریم:

$$(K_l)_{diffusive} = \frac{\lambda_0}{L} (k_l)_{ballistic} \quad (41.3)$$

برای ترابردهای بالستیک و پخشی فونون، رسانایی گرمایی مورد انتظار برای (M_{ph}) فونون به ترتیب برابر خواهد بود با:

$$(k_l)_{ballistic} = \frac{\pi^{\mathfrak{z}}k_B^{\mathfrak{f}}T}{\mathfrak{z}\hbar}(M_{ph}) \quad (42.3)$$

$$(k_l)_{diffusive} = \frac{\lambda_0}{L} \frac{\pi^{\mathfrak{z}}k_B^{\mathfrak{f}}T}{\mathfrak{z}\hbar}(M_{ph}) \quad (43.3)$$

از رابطه فوق که مربوط رسانایی گرمایی است میتوان بیشینه مقدار ممکن ترابرد انرژی گرمایی هر مد فونون را یافت که بصورت زیر می باشد:

$$g_0 = \frac{\pi^{\mathfrak{z}}k_B^{\mathfrak{f}}T}{\mathfrak{z}\hbar} \quad (44.3)$$

در نهایت با قرار دادن و بکارگیری روابط بدست آمده فوق از قبیل روابط (32.3) (33.3) (34.3) (43.3) در رابطه (7.1) گفته شده در فصل اول می توان معیار شایستگی ترموالکتریکی را بدست آورد.

فصل ۴

اثر ترموالکتریک در یک سیم چاه کوانتومی

پس از تعریف مفاهیم اولیه و کلیدی مربوط به موضوع در دست بررسی و با مرور برخی کارهای پژوهشگران این حوزه و نگاه دقیق تر به رهیافت و راهبرد حل مسئله، اکنون باید به بررسی و تأمل در دستگاه مورد توجه خود پردازیم. در فصل پیش رو ابتدا مسئله مورد نظر را تعریف کرده سپس با بهره گیری از روابط و روش های معرفی شده به مطالعه نظری دقیق مسئله پیش رو می پردازیم. در انتها با تحلیل نتایج به دنبال دریافت ویژگی های ترموالکتریک دستگاه معرفی شده در شرایط مختلف هستیم.

۱.۴ تعریف مسئله

در این بخش به تعریف مسئله می پردازیم. دستگاه مورد نظر شامل الکترون های آزاد دو بعدی در یک چاه کوانتومی گالیم از جنس آرسناید می باشد. طول فضای در دسترس الکترون های دستگاه در یک بُعد بسیار محدود (کمتر از ۱۰۰ نانومتر) و در بُعد دیگر چندین برابر بزرگتر است. به عبارتی تراورد الکترونها عملاً در یک نوار باریک با محدودیت کوانتومی عرضی اتفاق

می افتد یعنی ساختاری که می توان آنرا شبه یک بُعدی نامید. در اینجا پتانسیل دیوار سخت نماینده محدودیت عرضی دستگاه خواهد بود. در اولین گام با استفاده از معادله شرودینگر حالت های در دسترس الکترون های دستگاه مشخص می شوند. سپس نحوه ترابرد این الکترونها بررسی می شوند.

۲.۴ حل معادله شرودینگر برای سیم چاه کوانتومی

می توان هامیلتونی حاکم بر تحول زمانی دستگاه مورد نظر را به شکل زیر بیان نمود

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + V_c(y) \quad (1.4)$$

فرض بر آن است که در راستای عرضی سیم پتانسیل محدودیت کوانتومی از نوع پتانسیل دیوار سخت به شکل زیر می باشد

$$V_c(y) = \begin{cases} 0, & 0 < V_c(y) < W \\ \infty, & elsewhere \end{cases}$$

بردار تکانه الکترون ها شامل دو مولفه خواهد بود:

$$p = (p_x, p_y) \quad (2.4)$$

با استفاده از معادله شرودینگر حالت های الکترونی در دسترس الکترون های دستگاه معرفی شده را به دست می آوریم.

$$H\Psi(x, y) = E\Psi(x, y) \quad (3.4)$$

$$\frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{p_y^2}{2m^*}\Psi(x, y) = E\Psi(x, y) \quad (4.4)$$

چون در راستای x حامل ها بصورت ازادانه حرکت میکنند و در راستای y دارای محدودیت هستند با فرض اینکه طول آزاد سیم L است، می توان حالت های الکترونی دستگاه را به شکل زیر نوشت.

$$\Psi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \Phi_n(y) \quad (5.4)$$

با جایگذاری عبارت بالا در معادله شرودینگر، در گام بعدی ویژه حالت های عرضی به دست می آیند

$$\frac{p_y^2}{2m} \Phi(y) = E_n \Phi(y) \quad (6.4)$$

$$\frac{d^2}{dy^2} \Phi(y) + K^2 \Phi(y) = 0 \quad (7.4)$$

که در آن $K^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2}$ ، حال جواب معادله (۷.۴) را بصورت زیر بدست می آید

$$\Phi(y) = A \sin Ky + B \cos Ky \quad (8.4)$$

با اعمال شرایط مرزی ($\Phi(W) = \Phi(0) = 0$) شروع به حل معادله ی (۷.۴) می کنیم

$$\Phi(0) \rightarrow A \sin(0) + B \cos(0) = 0 \rightarrow B = 0 \quad (9.4)$$

$$\Phi(W) = A \sin KW + B \cos KW \rightarrow (B = 0) \rightarrow A \sin KW = 0$$

$$\rightarrow \sin KW = 0 \rightarrow KW = n\pi \rightarrow K = \frac{n\pi}{W}$$

در نهایت با در نظر گرفتن نتیجه بالا و قرار دادن آن در معادله (۸.۴) داریم

$$\Phi(y) = A \sin \frac{n\pi}{W} y \quad (10.4)$$

برای بدست آوردن A در معادله فوق از شرط بهنجارش استفاده می کنیم

$$\int \Phi^* \Phi = 1 \rightarrow \int A^2 \sin^2 \frac{n\pi}{W} y = 1 \rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{W}} \quad (11.4)$$

با جایگذاری ضریب بدست آمده خواهیم داشت

$$\Phi(y) = \sqrt{\frac{2}{W}} \sin\left(\frac{n\pi y}{W}\right) \quad (12.4)$$

اکنون ویژه مقادیر انرژی رابطه ی فوق بصورت زیر خواهد بود

$$E_n = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mW^2} \quad (13.4)$$

با استفاده از ویژه مقادیر بدست آمده جواب معادله (۵.۴) بصورت زیر خواهد بود:

$$\Psi(x, y) = \sqrt{\frac{2}{W}} \sin\left(\frac{n\pi y}{W}\right) \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \quad (14.4)$$

که در آن L و W به ترتیب ابعاد نمونه در راستای x و y می باشند. حال با توجه به نتایج حاصل شده ویژه مقادیر انرژی کل دستگاه به صورت زیر خواهد بود:

$$E_{nk} = E_n + \frac{\hbar^2 K^2}{2m^*} \rightarrow E_{nk} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m^* W^2} + \frac{\hbar^2 K^2}{2m^*}, n = 1, 2, 3, \dots \quad (15.4)$$

۱.۲.۴ معادله لیپمن شوینگر برای یک سیم چاه کوانتومی

همانطور که در فصل ۳ هم اشاره شد برای مطالعه و بررسی پراکندگی حامل های بار در یک سیستم از راهبرد لیپمن شوینگر بهره می گیریم حال باید راهبرد فوق را برای یک سیم چاه کوانتومی بررسی کنیم. در ابتدای امر هامیلتونی برای یک سیستم در حضور پتانسیل پراکندگی طبق رابطه (۱.۳) بصورت زیر تعریف میشود:

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + V_c(y) \quad (۱۶.۴)$$

با بهره گیری از روابط اثبات شده در فصل ۳ و استفاده از رابطه ی (۱۱.۳) تابع گرین برای سیستم ما بصورت زیر تعریف می شود:

$$G_+(x, x') = \frac{\hbar^2}{2m} \int dy' p' \int dy'' p'' \langle x|p' \rangle \left\langle p' \left| \frac{1}{E - \frac{p'^2}{2m} + i\epsilon} \right| p'' \right\rangle \langle p''|x' \rangle. \quad (۱۷.۴)$$

حال رابطه بالا را بصورت زیر بازنویسی میکنیم:

$$G_+(x, x') = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{n', n''} \int dp' \int dp'' \langle x|p'_x, n' \rangle \left\langle p'_x, n' \left| \frac{1}{E - \left[E_{n'} + \frac{\hbar^2 K^2}{2m^*} \right] + i\epsilon} \right| p''_x, n'' \right\rangle \langle p''_x, n''|x' \rangle. \quad (۱۸.۴)$$

برای حل تابع گرین فوق از روابط زیر استفاده می کنیم:

$$\langle x|p'_x, n' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ikx} \Phi_n(y)$$

$$\begin{aligned} \langle p'_x, n'|p''_x, n'' \rangle &= \int dx \langle p'_x, n'|x \rangle \langle x|p''_x, n'' \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{\frac{i(p'_x - p''_x)x}{\hbar}} \int dy \Phi_{n'}^*(y) \Phi_{n''}(y) \\ &= \delta(p'_x - p''_x) \delta_{n'n''} \end{aligned}$$

در ادامه تابع گرین بصورت زیر خواهد شد

$$G_+(x, x') = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{n'} \Phi_{n'}(y) \Phi_{n'}(y') \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp'_x}{2\pi\hbar} \frac{e^{\frac{ip'_x(x-x')}{\hbar}}}{E - \left[E_{n'} + \frac{\hbar^2 K^2}{2m^*} \right] + i\epsilon} \quad (۱۹.۴)$$

برای رسیدن به یک ساختار ساده تر ، عبارت معادل برای مخرج را در فرمول بالا قراردادیم سپس $p'_x = \hbar q$ قرار می گیرد و در نهایت با تغییر متغیر و بازآرایی مجدد روابط بالا و همچنین با جایگذاری عبارت $k_{n'}^2 = \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) (E - E_{n'})$ نتیجه زیر حاصل می شود:

$$G_+(x, x') = \sum_{n'} \Phi_{n'}(y) \Phi_{n'}(y') \left(\frac{-1}{2\pi} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{e^{iq(x-x')}}{q^2 - k_{n'}^2 + i\epsilon} \quad (20.4)$$

برای به دست آوردن عبارت انتگرالی در معادله تابع گرین فوق می توانیم از روش حساب مانده ها گفته شده فصل ۳ استفاده کنیم

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

$$q = \pm k_{n'} \sqrt{1 + \frac{i\epsilon}{k_{n'}^2}} = \pm (k_{n'} + i\epsilon)$$

سپس داریم :

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{iq(x-x')}}{q^2 - k_{n'}^2 - i\epsilon} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{iq(x-x')}}{(q + k_{n'} + i\epsilon)(q - k_{n'} - i\epsilon)}$$

$$= \frac{1}{2\pi} (2\pi i) \frac{e^{ik_{n'}(x-x')}}{2k_{n'}} + \frac{1}{2\pi} (-2\pi i) \frac{e^{ik_{n'}(x-x')}}{2k_{n'}}$$

با بهره گرفتن از این روش و اعمال جوابهای آن در معادله (20.4) به رابطه زیر می رسیم

$$G_+(x, x') = \sum_{n'=1}^{n_F^{max}} \Phi_{n'}(y) \Phi_{n'}(y') \frac{e^{ik_{n'}|x-x'|}}{2ik_{n'}} - \sum_{n'=n_F^{max}+1}^{\infty} \Phi_{n'}(y) \Phi_{n'}(y') \frac{e^{\kappa_{n'}|x-x'|}}{2\kappa_{n'}} \quad (21.4)$$

در نهایت این رابطه نشان دهنده ی مدهای مختلف می باشد که جمله ی اول نمایانگر مدهای انتشاری و جمله ی دوم نمایانگر مدهای محو شونده یا میرا می باشند.

۲.۲.۴ اعمال پتانسیل پراکندگی تابع دلتای دیراک به سیم چاه کوانتومی

در این بخش برای درک و تحلیل پراکندگی باید با وارد کردن یک پراکننده به سیستم به بررسی آن بپردازیم. حال به همین منظور از پتانسیل پراکندگی دلتای دیراک که در فصل ۳ به آن اشاره شد بهره میگیریم. در ادامه ی محاسبات مربوط به این مبحث در فصل ۳ به رابطه زیر رسیدیم که اکنون آن را برای سیستم خود ادامه می دهیم:

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

در رابطه ی بالا برای بدست آوردن D از رابطه ی (۲۱.۴) استفاده کرده و بصورت زیر محاسبه می کنیم:

$$D = 1 - \frac{\Upsilon m \gamma}{\hbar \Upsilon} G_+(\circ, y_i; \circ, y_i) \\ = 1 - \frac{\Upsilon m \gamma}{\hbar \Upsilon} \sum_{n'=1}^{n_F^{max}} \Phi_{n'}(y_i) \Phi_{n'}(y_i) \frac{1}{\Upsilon i k_{n'}} - \sum_{n'=n_F^{max}+1}^{\infty} \Phi_{n'}(y_i) \Phi_{n'}(y_i) \frac{1}{\Upsilon \kappa_{n'}}$$

حال برای D به عبارت زیر می رسم

$$D = 1 - \sum_{n'=1}^{n_f^{(max)}} \left(\frac{S_{n'n'}}{\Upsilon i K_{n'}} \right) + \sum_{n'=n_f^{(max)}+1}^{n_c} \left(\frac{S_{n'n'}}{\Upsilon K_{n'}} \right) \quad (22.4)$$

در این رابطه $S_{nn'}$ بصورت زیر تعریف می کنیم:

$$S_{nn'} = \frac{\Upsilon m \gamma}{\hbar \Upsilon} \Phi_n(y_i) \Phi_{n'}(y_i) \quad (23.4)$$

سپس برای بدست آوردن تابع موج کل سیستم از روابط (۲۱.۴) و (۱۴.۴) استفاده کرده و آنها را در رابطه ی (۲۰.۳) جایگذاری می کنیم.

$$\Psi_p^{(+)}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{\Upsilon \pi}} e^{ik_n x} \Phi_n(y) \\ + \left\{ \frac{\Upsilon m \gamma}{\hbar \Upsilon D} \sum_{n'=1}^{n_F^{max}} \Phi_{n'}(y) \Phi_{n'}(y_i) \frac{e^{ik_{n'} x}}{\Upsilon i k_{n'}} \right. \\ \left. - \sum_{n'=n_F^{max}+1}^{\infty} \Phi_{n'}(y) \Phi_{n'}(y_i) \frac{e^{-\kappa_{n'} x}}{\Upsilon \kappa_{n'}} \right\} \times \left\{ \frac{1}{\sqrt{\Upsilon \pi}} \Phi_n(y) \right\}$$

در نهایت تابع موج کل می شود :

$$\Psi_p^{(+)}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{\Upsilon \pi}} e^{ik_n x} \Phi_n(y) + \sum_{n'=1}^{n_F^{max}} e^{ik_{n'} |x|} \Phi_{n'}(y) \frac{-i}{\Upsilon k_{n'} D} S_{nn'} \\ + \sum_{n'=n_F^{max}+1}^{n_c} e^{-\kappa_{n'} |x|} \Phi_{n'}(y) \frac{-1}{\Upsilon \kappa_{n'} D} S_{nn'} \quad (24.4)$$

در این معادله جمع اول مربوط به مُد انتشار و جمع دومی مرتبط با مد محوشونده می باشد، n مُد فرودی و n' مد پراکنده است و دامنه ترابرد تابع موج از معادله اخیر بدست می آید.

$$t_{nn'}(E) = \delta_{nn'} + \left(\frac{-i}{2k_{n'}D} \right) S_{nn'} \quad (25.4)$$

$$r_{nn'}(E) = - \left(\frac{-i}{2k_{n'}D} \right) S_{nn'} \quad (26.4)$$

حال اگر n' مد محو شونده باشد می توان بجای $k_{n'}$ عبارت $ik_{n'}$ را جایگذاری کرد. بدین ترتیب ضرایب انتقال جریان برابر می شود با:

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

همانطور که در فصل ۳ اشاره شد با داشتن ضرایب انتقال جریان می توان به ضرایب انتقال متوسط و در نهایت به رسانایی سیستم دست یافت :

$$\bar{T}(E) = \sum_{n,n'} \frac{k_{n'}}{k_n} t_{nn'} t_{nn'}^*$$

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

در نهایت با داشتن $\bar{T}(E)$ و G و با بهره گیری از روابط ارائه شده در بخش پایانی فصل ۳، می توان به ضرایب ترموالکتریک یعنی ضریب سبیک، رسانایی الکتریکی و رسانایی گرمایی دست یافت.

$$G = \frac{2e^2}{h} \int \bar{T}(E) \left(\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE$$

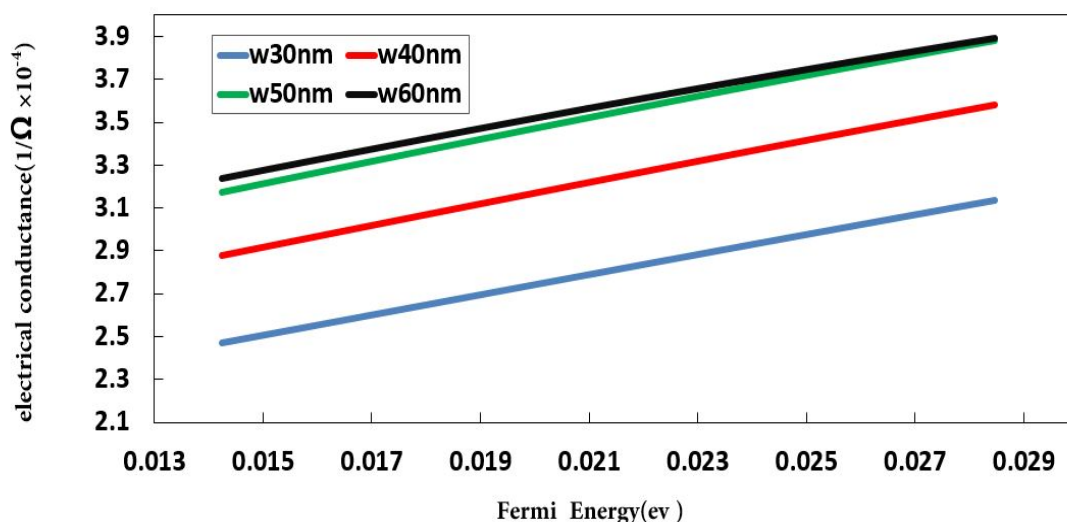
$$S = \frac{k_B}{e} \frac{\int \left(\frac{E-E_F}{k_B T_L} \right) \bar{T}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE}{\int \bar{T}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE}$$

$$k_e = \frac{2T_L k_B}{h} \left\{ \int \left(\frac{E-E_F}{k_B T_L} \right) \bar{T}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE - \frac{\left[\int \left(\frac{E-E_F}{k_B T_L} \right) \bar{T}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE \right]^2}{\int \bar{T}(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE} \right\}$$

۳.۴ تحلیل و بررسی نتایج و نمودارها

با توجه به آنکه حل تحلیلی تمامی معادلات امکان پذیر نمی باشد، می بایست در ادامه برای بدست آوردن ویژگی های ترموالکتریکی دستگاه از محاسبات عددی استفاده نماییم. تلاش می شود تا رفتار ترموالکتریکی دستگاه در قالب نمودارهایی که نمایانگر نحوه تغییرات کمیت های مربوطه می باشند، معرفی شود.

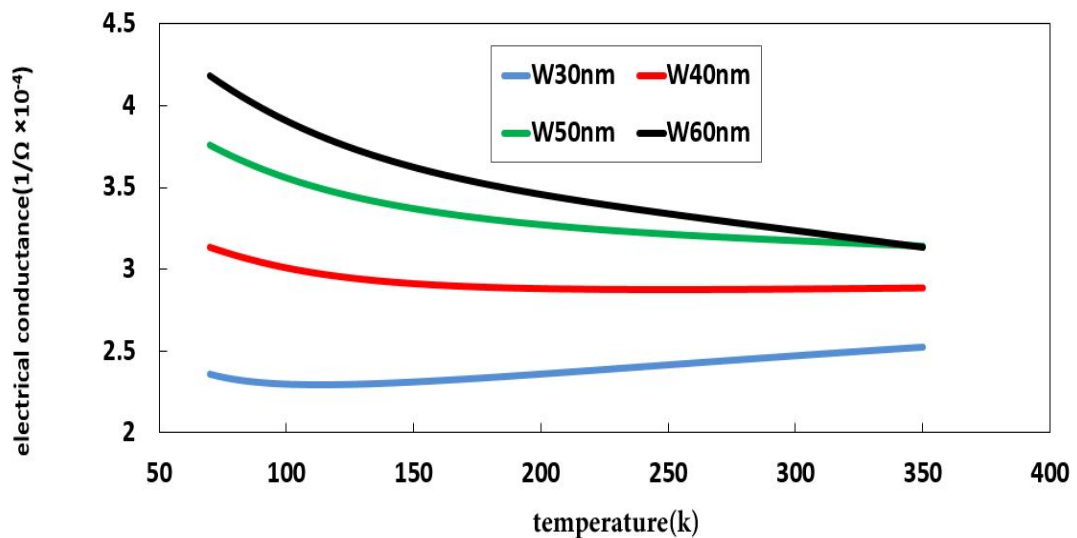
۱.۳.۴ بررسی تغییرات رسانایی الکتریکی



شکل ۱.۴: تغییرات رسانایی الکتریکی بر حسب انرژی فرمی با احتساب دمای (۳۰۰K) و عرض چاه های مختلف

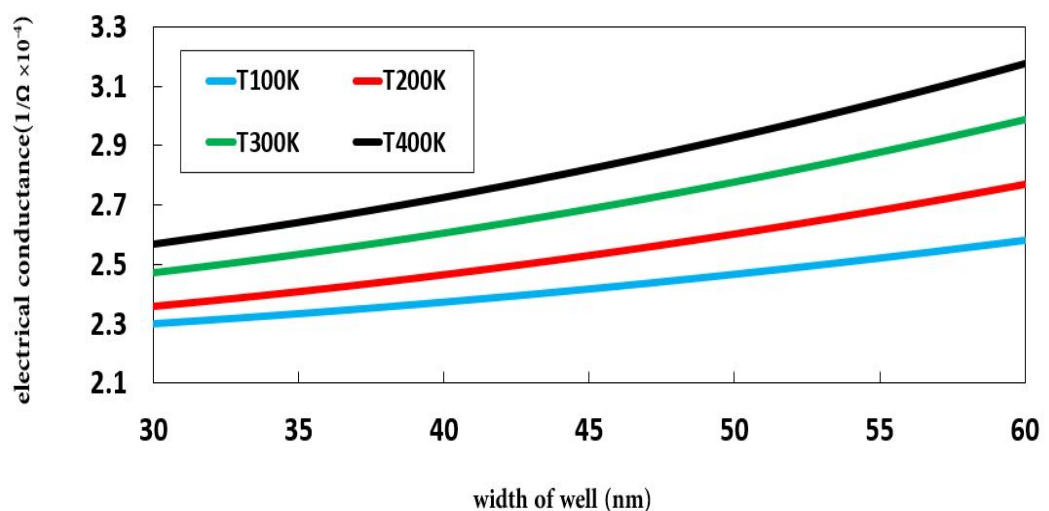
در شکل (۱.۴) شاهد تغییرات رسانایی الکتریکی (σ) بر حسب انرژی فرمی در دماهای متفاوت و عرض چاه مفروض هستیم. برای تحلیل چگونگی رفتار رسانایی الکتریکی بر حسب انرژی فرمی، به بررسی دقیق فرمول (۲۱.۴) می پردازیم. می دانیم با افزایش (n_f^{max}) مدهای انتشاری افزایش و مدهای محوشونده کاهش می یابند که مدهای انتشاری نقش اصلی در ترابرد حاملهای بار را دارند بنابراین با افزایش انرژی فرمی شاهد افزایش نسبی مدهای انتشاری و در نتیجه افزایش ترابرد حاملهای بار هستیم، در نهایت افزایش ترابرد حاملهای بار باعث افزایش رسانایی الکتریکی می شود.

در شکل (۲.۴) تغییرات رسانایی الکتریکی (σ) بر حسب دما و برای مقایسه بهتر، در عرض چاه های متفاوت رسم شده است. برای تحلیل چرایی رفتار رسانایی الکتریکی بر حسب دما باید به این نکته توجه کرد که هر چه دما افزایش پیدا کند الکترونهای پراثری بیشتری داریم و این منتج به افزایش ترابرد می شود در نتیجه باید رسانایی الکتریکی افزایش یابد که این حالت برای عرض چاه های ۳۰ نانومتر صادق است اما برای عرض چاه های بیشتر شاهد روند متفاوتی



شکل ۲.۴: تغییرات رسانایی الکتریکی برحسب دما با احتساب انرژی فرمی ($E_f = E'_f$) و در عرض چاههای مختلف $W=30\text{nm}$ ، $W=40\text{nm}$ ، $W=50\text{nm}$ ، $W=60\text{nm}$

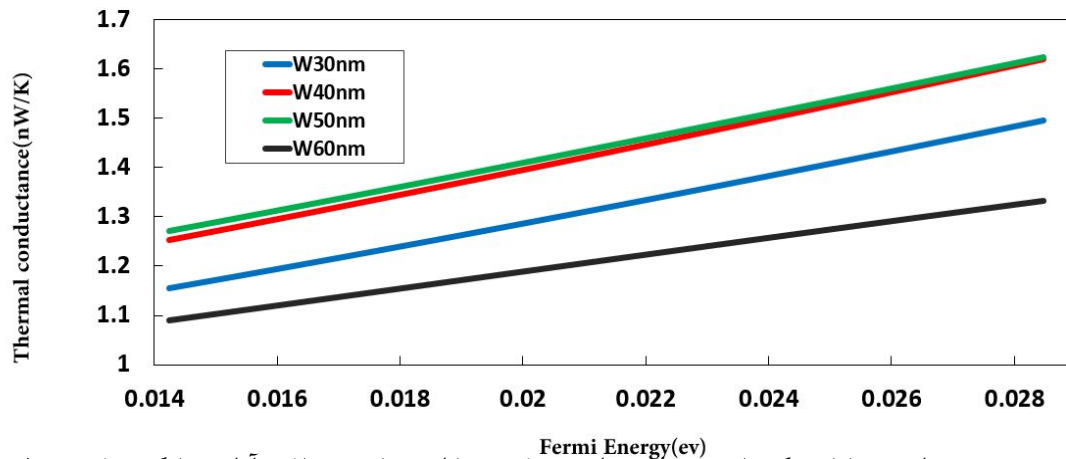
هستیم. دلیل این رفتار متفاوت می تواند کاهش نسبی انرژی فرمی مفروض با افزایش پهنای چاه و بنابراین کاهش نسبی سهم مدهای انتشاری در اثر افزایش دما و در نهایت رسانایی الکتریکی باشد.



شکل ۳.۴: تغییرات رسانایی الکتریکی برحسب عرض چاه با احتساب انرژی فرمی ($E_f = E'_f$) در دماهای متفاوت $T=100\text{K}$ ، $T=200\text{K}$ ، $T=300\text{K}$ ، $T=400\text{K}$

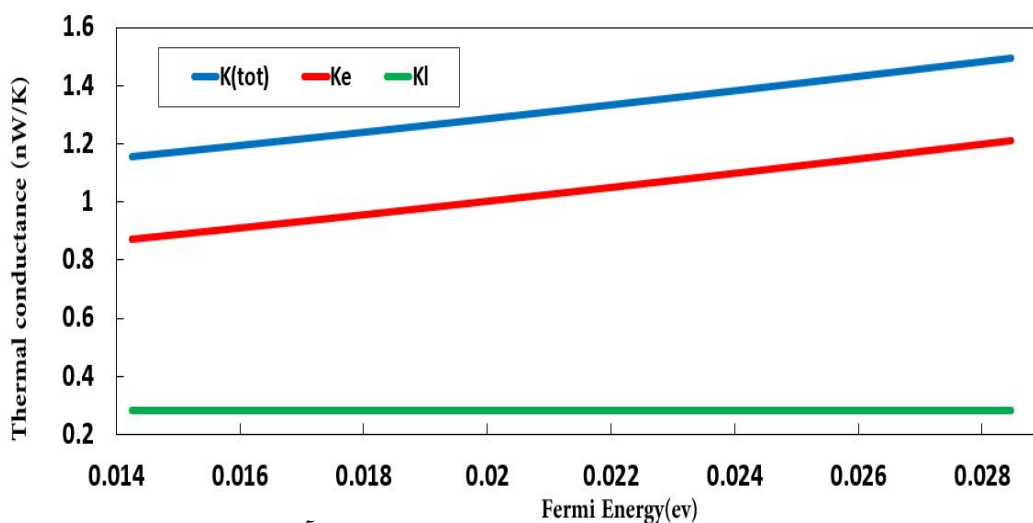
در شکل (۳.۴) تغییرات رسانایی الکتریکی (σ) بر حسب عرض چاه در دماهای متفاوت را مشاهده می کنیم برای تحلیل رفتار رسانایی الکتریکی بر حسب عرض چاه باید به این نکته توجه کرد که در هر دمای مفروض هر چه عرض چاه افزایش پیدا کند تعداد مدهای انتشاری افزایش می یابد در نتیجه حامل های بار بیشتری داریم و این منتج به افزایش ترابرد می شود در نتیجه رسانایی الکتریکی افزایش می یابد.

۲.۳.۴ بررسی تغییرات رسانایی گرمایی



شکل ۴.۴: تغییرات رسانایی گرمایی بر حسب انرژی فرمی با احتساب مسافت آزاد میانگین فونونی ($\lambda = 100\text{nm}$) و عرض چاه های متفاوت

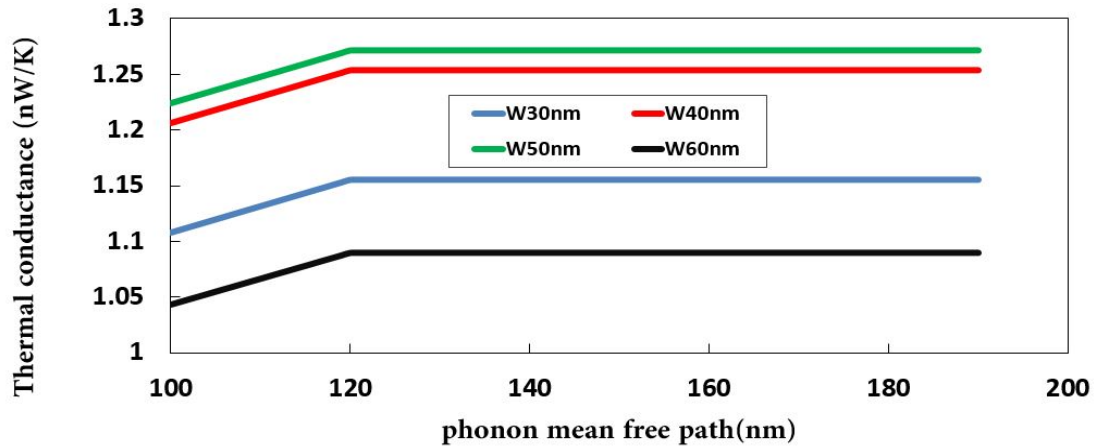
در شکل (۴.۴) شاهد تغییرات رسانایی گرمایی بر حسب انرژی فرمی در دماهای متفاوت و عرض چاه مفروض هستیم. برای تحلیل چگونگی رفتار رسانایی گرمایی بر حسب انرژی فرمی، به بررسی رابطه ی رسانایی الکتریکی می پردازیم همانطور که قبل تر نیز اشاره شد در اینجا نیز با افزایش (n_f^{max}) مدهای انتشاری افزایش و مدهای محوشونده کاهش می یابند که مدهای انتشاری نقش اصلی در ترابرد حاملهای بار را دارند بنابراین با افزایش انرژی فرمی شاهد افزایش مدهای انتشاری و در نتیجه افزایش ترابرد حاملهای بار هستیم، در نهایت افزایش ترابرد حاملهای بار باعث افزایش رسانای گرمایی می شود.



شکل ۵.۴: تغییرات رسانایی گرمایی بر حسب انرژی فرمی در مسافت آزاد میانگین ($\lambda = 100\text{nm}$) و دمای ($T=300\text{K}$) به تفکیک رسانایی الکترونی (k_e) و رسانایی شبکه ای (k_l)

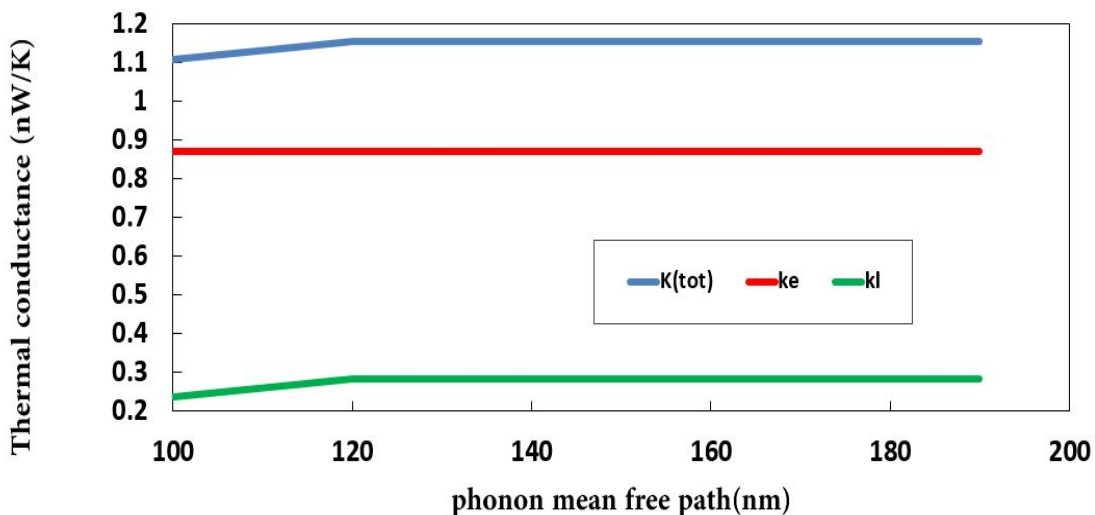
با نگاه به (۵.۴) نمودار حاصل از روابط مربوط به رسانایی گرمایی میتوان به وضوح مشاهده کرد که عامل اصلی و تأثیر گذار روی رسانایی گرمایی در واقع پارامتر رسانایی الکترونی که

وابسته به ترابرد الکترونها می باشد و رسانایی شبکه ای ثابت می باشد و هیچگونه تأثیری روی رسانایی گرمایی ندارد.



شکل ۶.۴: تغییرات رسانایی گرمایی بر حسب مسافت آزاد میانگین فونونی در دمای $(T=300K)$ و انرژی فرمی $(E_f = E'_f)$ با عرض چاههای متفاوت

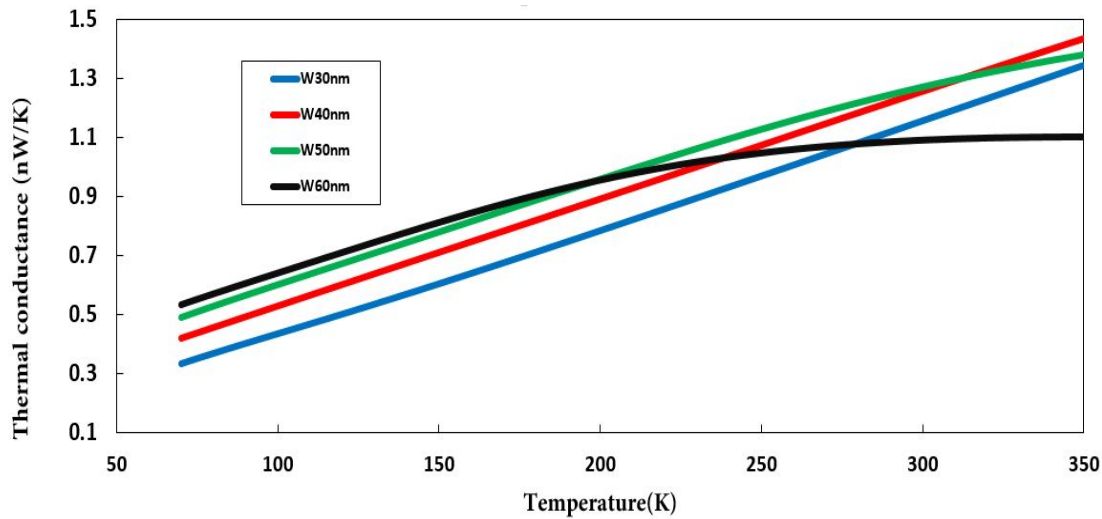
در شکل (۶.۴) شاهد تغییرات رسانایی گرمایی بر حسب مسافت آزاد میانگین فونونی در عرض چاه متفاوت و دما و انرژی فرمی $(E_f = E'_f)$ هستیم. برای تحلیل نتایج این نمودار میتوان به فرمول (۴۳.۳) مراجعه کرد که نشان می دهد رسانایی گرمایی فونونی یا شبکه ای (k_L) یک رابطه ی خطی با مسافت آزاد میانگین دارد. همانطور که در نمودار مشخص است افزایش مسافت آزاد میانگین فونونی، افزایش رسانایی گرمایی شبکه ای را به دنبال داشته و در نتیجه شاهد افزایش رسانایی گرمایی کل خواهیم بود.



شکل ۷.۴: تغییرات رسانایی گرمایی بر حسب مسافت آزاد میانگین فونونی در دمای $(T=300K)$ و انرژی فرمی $(E_f = E'_f)$ به تفکیک رسانایی الکترونی (k_e) و رسانایی شبکه ای (k_L)

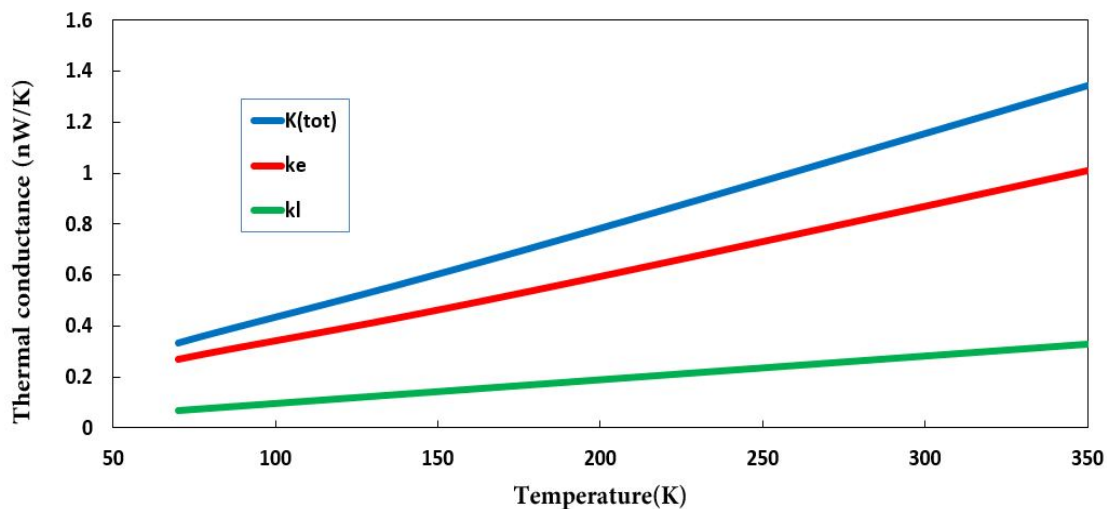
همانطور که انتظار می رفت در نمودار (۷.۴) هنگامی که به بررسی رسانایی گرمایی بر حسب مسافت آزاد میانگین فونونی می پردازیم عامل اصلی مؤثر بر رسانایی گرمایی کل در

اینجا رسانایی شبکه ای یا فونونی می باشد و رسانایی الکترونی مقدار ثابت می باشد.



شکل ۸.۴: تغییرات رسانایی گرمایی بر حسب دما با احتساب انرژی فرمی ($E_f = E'_f$) و مسافت آزاد میانگین فونونی ($\lambda = 100\text{nm}$) در عرض چاه های $W=30\text{nm}$ ، $W=40\text{nm}$ ، $W=50\text{nm}$ ، $W=60\text{nm}$

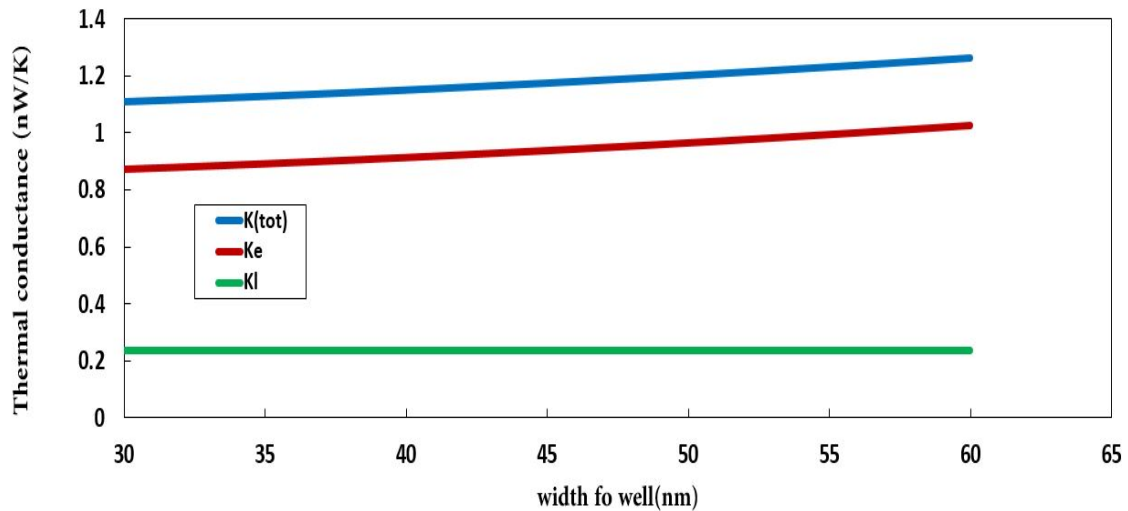
در شکل (۸.۴) شاهد تغییرات رسانایی گرمایی بر حسب دما (T) در عرض چاه متفاوت و با انرژی فرمی ($E_f = E'_f$) هستیم. برای تحلیل نتایج این نمودار میتوان به فرمول (۴۳.۳) و (۴۲.۳) مراجعه کرد که نشان می دهد رسانایی گرمایی فونونی یا شبکه ای (k_L) یک رابطه ی خطی و مستقیم با دما دارد. همانطور که در نمودار مشخص است افزایش دما باعث افزایش رسانایی گرمایی شبکه ای و در نتیجه شاهد افزایش رسانایی گرمایی کل خواهیم بود.



شکل ۹.۴: تغییرات رسانایی گرمایی بر حسب دما با احتساب انرژی فرمی ($E_f = E'_f$) و مسافت آزاد میانگین فونونی برابر ($\lambda = 100\text{nm}$) به تفکیک رسانایی الکترونی (k_e) و رسانایی شبکه ای (k_l)

همانطور که انتظار می رفت در نمودار (۹.۴) هنگامی که به بررسی رسانایی گرمایی بر حسب دما می پردازیم طبق رابطه های مربوط به دو کمیت رسانایی شبکه ای یا فونونی و رسانایی

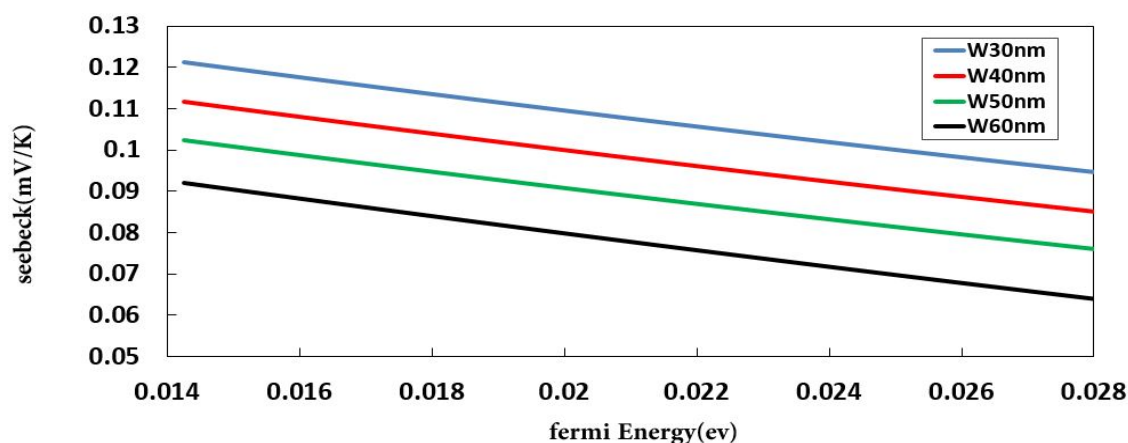
الکترونی شاهد ارتباط هردو با دما هستیم و با توجه به همین فرمول ها بستگی رسانایی الکترونی به دما بیشتر است چون الکترونها عامل اصلی ترابرد هستند بالطبع با افزایش دما ترابرد افزایش می یابد و به همین علت شاهد تغییرات با شیب بیشتر در این پارامتر می باشیم



شکل ۱۰.۴: تغییرات رسانایی گرمایی بر حسب عرض چاه با احتساب انرژی فرمی ($E_f = E'_f$) و مسافت آزاد میانگین فونونی ($\lambda = 100nm$) و دمای ($T=300K$) به تفکیک رسانایی الکترونی (k_e) و رسانایی شبکه ای (k_l)

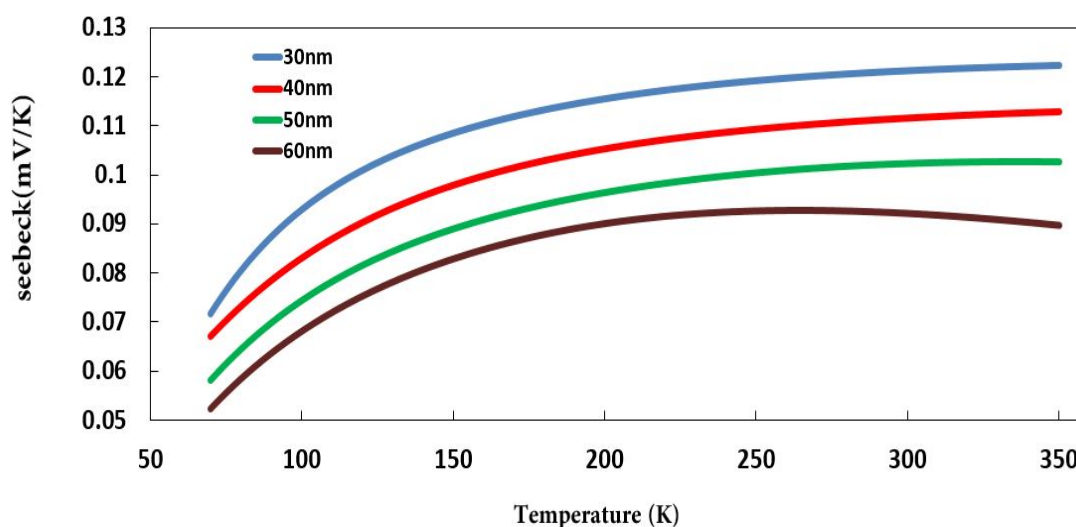
در شکل (۱۰.۴) تغییرات رسانایی گرمایی بر حسب عرض چاه با احتساب مسافت آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100nm$ و به تفکیک رسانایی شبکه ای (k_l) و رسانایی الکترونی (k_e) را نشان دادیم. طبق انتظار رسانایی گرمایی شبکه ای ثابت و تنها رسانایی الکترونی وابسته به تغییرات عرض چاه می باشد و در تغییرات رسانایی گرمایی کل نقش اصلی را ایفا میکند.

۳.۳.۴ بررسی تغییرات ضریب سبیک



شکل ۱۱.۴: تغییرات ضریب سبیک بر حسب انرژی فرمی با احتساب عرض چاه های مختلف $W=30\text{nm}$, $W=40\text{nm}$, $W=50\text{nm}$, $W=60\text{nm}$

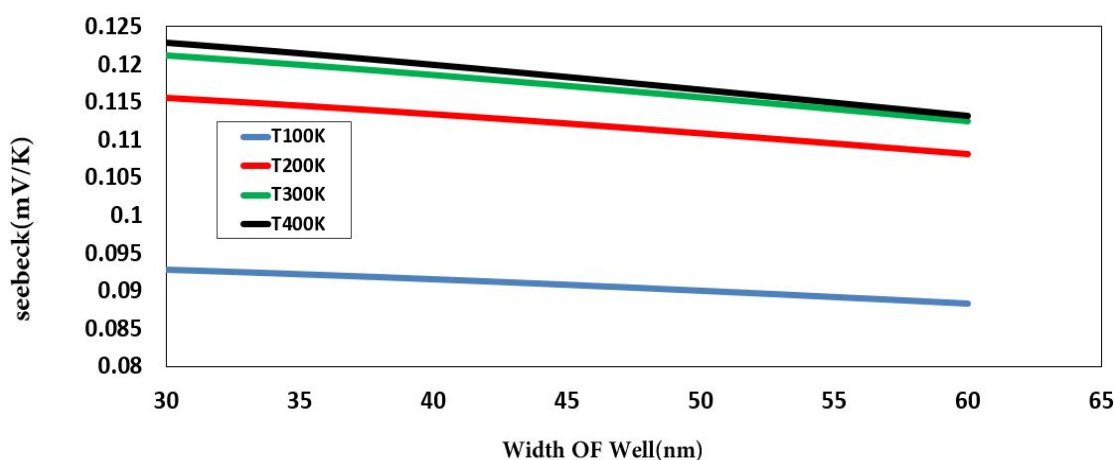
در نمودار (۱۱.۴) که متناظر با تغییرات ضریب سبیک بر حسب انرژی فرمی در دماهای متفاوت ترسیم شده است. برای تحلیل این نمودار می توان با نگاهی به نمودارهای اخیر و با بررسی دوباره رابطه ی (۲۱.۴) یادآور این نکته شد که با افزایش انرژی فرمی مدهای انتشاری افزایش می یابد که نشان دهنده افزایش حامل های بار و در نتیجه منجر به افزایش رسانایی الکتریکی می شود، حال باید خاطر نشان کرد که ضریب سبیک طبق رابطه (۱۱.۱) و (۱۶.۱) آورده شده در فصل ۱ رابطه ی معکوس با غلظت حامل ها دارد و با نگاه به روابط (۳۳.۳) (۳۲.۳) با افزایش رسانایی الکتریکی ضریب سبیک کاهش می یابد.



شکل ۱۲.۴: تغییرات ضریب سبیک بر حسب دما با احتساب انرژی فرمی $(E_f = E'_f)$ در عرض چاههای مختلف $W=30\text{nm}$, $W=40\text{nm}$, $W=50\text{nm}$, $W=60\text{nm}$

در نمودار (۱۲.۴) که متناظر با تغییرات ضریب سیبک بر حسب دما با احتساب عرض چاه های متفاوت ترسیم شده است. مشاهده می شود که ضریب سیبک تا محدوده دمایی $T=25^{\circ}\text{K}$ تا $T=300^{\circ}\text{K}$ افزایشی دارد و بعد از آن محدوده دمایی و نزدیک به دمای اتاق، نمودار ضریب سیبک بر حسب دما با شیب ملایم رو به کاهش می رود.

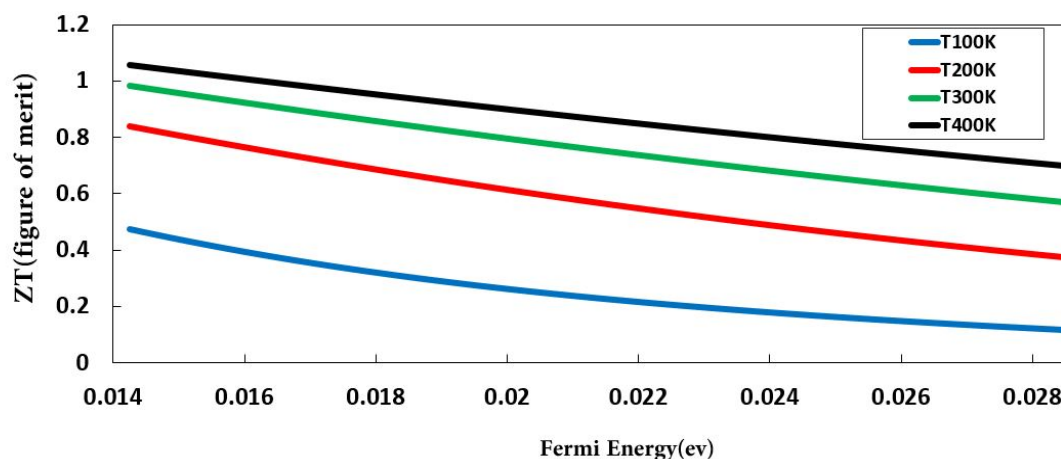
برای تحلیل این نمودار می توان با نگاهی به رابطه (۳۳.۳) می توان اینگونه بیان کرد که تا محدوده دمایی اتاق، نقش صورت رابطه (جریان الکتریکی برآمده از شیب دمایی) پررنگ تر است و سبب افزایش ضریب سیبک می شود ولی با افزایش دما این مخرج رابطه (رسانایی الکتریکی) می باشد که مؤثر تر ظاهر می شود و باعث کاهش ضریب سیبک می شود.



شکل ۱۳.۴: تغییرات ضریب سیبک بر حسب عرض چاه با احتساب انرژی فرمی ($E_f = E'_f$) و دماهای مختلف $T=100^{\circ}\text{K}$ ، $T=200^{\circ}\text{K}$ ، $T=300^{\circ}\text{K}$ ، $T=400^{\circ}\text{K}$

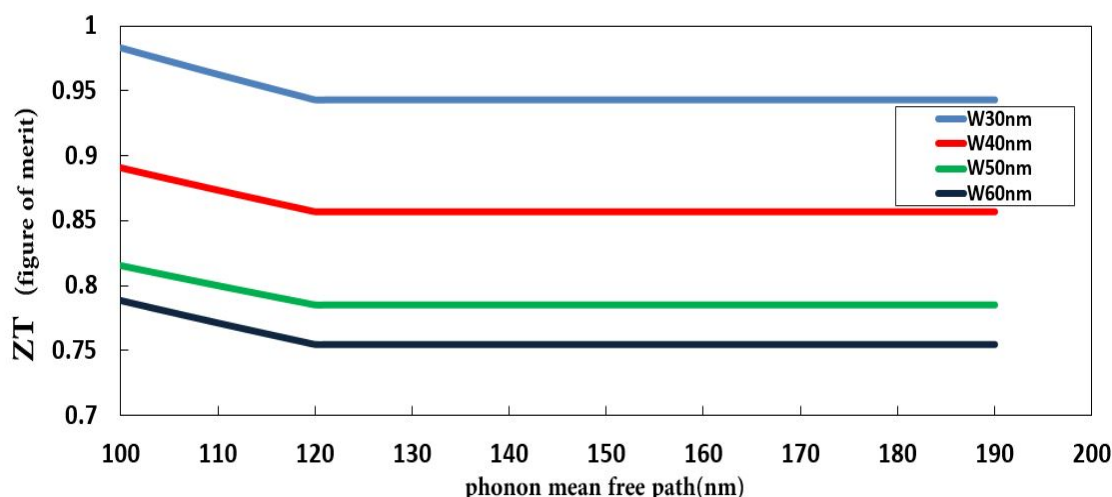
در نمودار (۱۳.۴) تغییرات ضریب سیبک بر حسب عرض چاه و با احتساب دماهای متفاوت ترسیم شده است همانطور که می دانیم با افزایش عرض چاه شاهد افزایش مدهای انتشاری هستیم که نشان دهنده افزایش حامل های بار و در نتیجه منجر به افزایش رسانایی الکتریکی می شود، حال باید خاطر نشان کرد که ضریب سیبک طبق رابطه (۱۱.۱) و (۱۶.۱) آورده شده در فصل ۱ رابطه ی معکوس با غلظت حامل ها دارد و با نگاه به این روابط با افزایش عرض چاه ضریب سیبک کاهش می یابد .

۴.۳.۴ بررسی تغییرات معیار شایستگی



شکل ۱۴.۴: نمودار تغییرات معیار شایستگی بر حسب انرژی فرمی با احتساب عرض چاه $(W=30\text{nm})$ و مسافت آزاد میانگین فونونی $(\lambda = 100\text{nm})$ در دماهای مختلف $T=100\text{K}$ ، $T=200\text{K}$ ، $T=300\text{K}$ ، $T=400\text{K}$

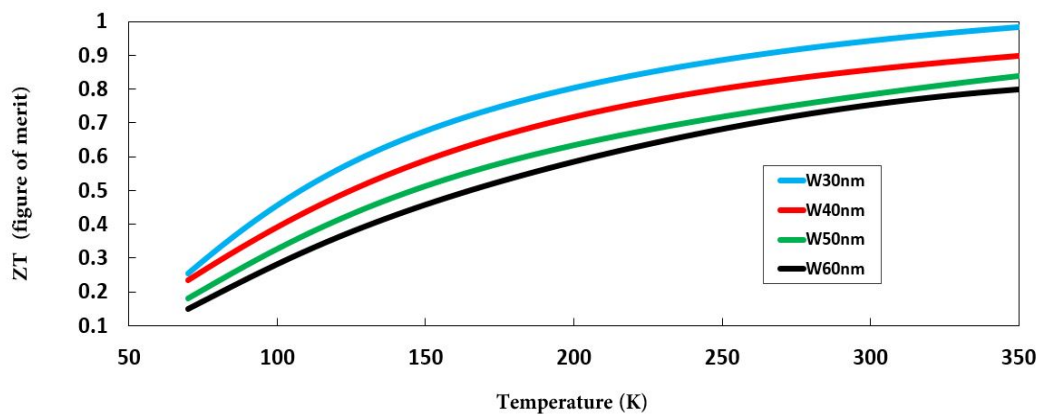
برای تحلیل نمودار (۱۴.۴) که بررسی تغییرات (ZT) یا همان معیار شایستگی در ترموالکتریک بر حسب انرژی فرمی می باشد باید به برآیند نمودار هایی که تا اینجا مرور کرده ایم توجه کنیم چرا که طبق روابط (۷.۱)، (۶.۱) تغییرات معیار شایستگی رابطه مستقیم با ضریب سبک و دما و رسانایی الکتریکی و همچنین رابطه عکس با رسانایی گرمایی دارد با کنار هم گذاشتن نمودار های (۱.۴) (۴.۴) (۱۱.۴) حال میتوان نتیجه گرفت (ZT) کاهش می یابد.



شکل ۱۵.۴: نمودار تغییرات معیار شایستگی بر حسب مسافت آزاد میانگین فونونی $(\lambda = 100\text{nm})$ با احتساب دمای و $(T=300\text{K})$ انرژی فرمی $(E_f = E'_f)$ در عرض چاه های مختلف $W=30\text{nm}$ ، $W=40\text{nm}$ ، $W=50\text{nm}$ ، $W=60\text{nm}$

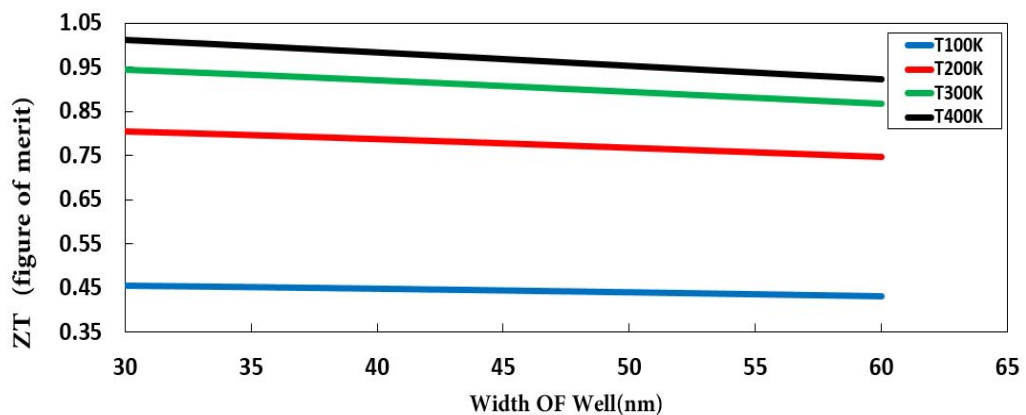
برای تحلیل نمودار (۱۵.۴) که بررسی تغییرات معیار شایستگی در ترموالکتریک بر حسب

مسافت آزاد میانگین فونونی می باشد باید به برآیند نمودار هایی که تا اینجا مرور کرده ایم توجه کنیم چرا که طبق روابط (۷.۱)، (۶.۱) تغییرات معیار شایستگی رابطه معکوس با رسانایی گرمایی دارد با نگاه به نمودار (۶.۴) حال میتوان نتیجه گرفت (ZT) به همان نسبت با تغییرات مسافت آزاد میانگین کاهش می یابد. در توضیح شکل نمودار پس از عدد ۱۲۰ در مسافت آزاد میانگین، که بصورت یک خط صاف مشاهده می شود به علت در نظر گرفتن طول نمونه برابر (L=۱۲۰nm) می باشد.



شکل ۱۶.۴: نمودار تغییرات معیار شایستگی بر حسب دما با احتساب انرژی فرمی ($E_f = E'_f$) و مسافت آزاد میانگین فونونی ($\lambda = 100nm$) در عرض چاههای مختلف $W=30nm, W=40nm, W=50nm, W=60nm$

برای تحلیل نمودار (۱۶.۴) بیانگر تغییرات معیار شایستگی در ترموالکتریک بر حسب دما می باشد، بادر نظر گرفتن نتایج حاصله از نمودار هایی که تا اینجا مرور کرده ایم و طبق روابط (۷.۱)، (۶.۱) تغییرات معیار شایستگی رابطه مستقیم با دما دارد با کنار هم گذاشتن نمودار های (۲.۴) (۸.۴) (۱۲.۴) نتیجه می گیریم (ZT) همواره با افزایش دما افزایشی خواهد بود.



شکل ۱۷.۴: نمودار تغییرات معیار شایستگی بر حسب عرض چاه با احتساب انرژی فرمی ($E_f = E'_f$) و مسافت آزاد میانگین فونونی ($\lambda = 100nm$) در دماهای مختلف $T=100K, T=200K, T=300K, T=400K$

نمودار (۱۷.۴) بیان گر تغییرات معیار شایستگی در ترموالکتریک بر حسب عرض چاه می باشد با در نظر گرفتن نتایج حاصل شده از نمودار هایی که تا اینجا مرور کرده ایم با کنار هم گذاشتن آنها یعنی نمودار های (۳.۴) (۱۰.۴) (۱۳.۴) نتیجه می گیریم (ZT) همواره با افزایش عرض چاه با شیب ملایم کاهشی خواهد بود .

۴.۴ مروری بر نتایج

پس از مرور و بررسی نمودارها و خروجی داده ها به نتایجی دست یافتیم که بصورت اختصار به بیان تأثیرات دما، انرژی فرمی و عرض چاه بر ضرایب و متغیر های ترموالکتریک می پردازیم.

الف:

رسانایی الکتریکی و رسانایی گرمایی کل با افزایش انرژی فرمی روند افزایشی دارند . در بررسی دقیق رسانایی گرمایی متوجه می شویم که افزایش انرژی فرمی باعث افزایش رسانایی گرمایی الکترونی می شود و روی بخش رسانایی گرمایی شبکه ای تأثیری مشاهده نمی شود. همچنین مشاهده شد ضریب سبیک با افزایش انرژی فرمی بصورت محسوسی کاهش یافت .

ب:

با افزایش عرض چاه ، رسانایی الکتریکی و رسانایی گرمایی کل افزایش می یابد همچنین با بررسی دقیق تر در رسانایی گرمایی کل تأثیر افزایش عرض چاه روی بخش الکترونی اعمال می شود و بخش شبکه ای رسانایی گرمایی عملاً ثابت می ماند. در مورد ضریب سبیک ، با افزایش عرض چاه شاهد کاهش این ضریب ترموالکتریکی هستیم.

ج:

در نهایت در بررسی تأثیر افزایش دما شاهد افزایش رسانایی گرمایی کل هستیم که این روند در بخش الکترونی آن بیشتر به چشم می آید و در بخش شبکه ای روند تغییرات بصورت بسیار کمی و با شیب ملایم افزایشی می باشد. رسانایی الکتریکی برای عرض های کوچک روند افزایشی دارد اما با افزایش عرض چاه، افزایش دما باعث کاهش رسانایی الکتریکی می شود. همچنین برای ضریب سبیک، با افزایش دما شاهد روند افزایشی در نمودار هستیم اما در محدوده ی دمایی بالای ۲۵۰ تا ۳۰۰ کلوین مشاهده می شود که این روند با شیب ملایم کاهشی می شود.

د: در پایان با بررسی مسافت آزاد میانگین فونونی متوجه می شویم که افزایش در مسافت آزاد میانگین فونونی باعث افزایش رسانای گرمایی کل خواهد شد که تأثیر این افزایش روی بخش شبکه ای رسانایی گرمایی می باشد و عملاً رسانایی گرمایی الکترونی ثابت می ماند.

۵.۴ پیشنهادات

این تحقیق با هدف بررسی خواص ترمو الکتریکی برای یک ساختار کوانتومی شبه یک بعدی با استفاده از رهیافت لاندائور انجام گرفت و شاهد تأثیرات محدودیت کوانتومی برای نمونه گالیم آرسناید بصورت نظری بودیم. پیشنهاداتی که می توان برای کارهای آتی ارائه داد عبارتند از:

۱. بهره گیری از رهیافت تابع گرین غیر تعادلی و یا رهیافت های متناظر .
۲. بررسی ساختارهای با محدودیت کوانتومی دیگر نظیر چاه های کوانتومی چندگانه و ابرشبکه ها .

مراجع

- [1] L. D. Hicks and M. S. Dresselhaus, **(1993)**. "Effect of quantum-well structures on the thermoelectric figure of merit". Physical Review B 47, 12727–12731 .
- [2] N.Tuan Hung ,**(2016)**, master thesis , "Thermoelectric properties of low-dimensional semiconductors",Department of Physics Graduate School of Science Tohoku University.
- [3] N. Nakpathomkun, PhD thesis,**(2010)**. "Thermoelectric properties of quantum dots and other low-dimensional systems",Department of Physics of the University of Oregon
- [4] M. L. García-Betancourt,S. I. R. Jiménez, Z. E. N. Salazar **(2020)**. "Low Dimensional Nanostructures: Measurement and Remediation Technologies Applied to Trace Heavy Metals in Water".
- [5] N. Nasiri, C. Clarke **(2019)**. "Nanostructured gas sensors for medical and health applications: low to high dimensional materials". Biosensors, 9(1), 43.
- [6] P. Harrison, **(2005)**, " Quantum Wells, Wires and Dots theoritical and computational physics of semiconductor nanostructures", Second Edition,Vol. 1,The University of Leeds, UK, pp. 23.
- [7] B. Van Zeghbroeck , **(2011)**," Principles of Semiconductor Devices",the university of colorado.
- [8] K. Morrison,F. K. Dejene, **(2020)**. "Thermal Imaging of the Thomson Effect". Physics, 13, 137.
- [9] R.Kim, S.Datta, M. S. Lundstrom **(2009)**. Influence of dimensionality on thermoelectric device performance. Journal of Applied Physics, 105(3), 034506.

-
- [10] J. Zou, A. Balandin, **(2001)**. "Phonon heat conduction in a semiconductor nanowire". *Journal of Applied Physics*, 89(5), 2932–2938.
- [11] John M. Ziman, **(2001)**. "Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids". Oxford University Press. pp
- [12] O.Bourgeois , D. Tainoff, A. Tavakoli, M. Boukhari, ... **(2016)**. "Reduction of phonon mean free path: From low-temperature physics to room temperature applications in thermoelectricity". *Comptes Rendus Physique*, 17(10), 1154-1160.
- [13] J. Mao, Z.Liu, Z. Ren ,**(2016)**. "Size effect in thermoelectric materials". *npj Quantum Materials*, 1(1), pp.1-9. published online on nature.
- [14] R.Landauer, **(1957)**. "Spatial Variation of Currents and Fields Due to Localized Scatterers in Metallic Conduction". *IBM Journal of Research and Development*. 1 (3): 223–231.
- [15] M. Buttiker, Y. Imry, R. Landauer, and S. Pinhas, **(1985)**."Generalized many-channel conductance formula with application to small rings". *Physical Review B*, 31(10), 6207.
- [16] M. V. Moskalets,**(2012)**." Scattering Matrix Approach to Non-Stationary Quantum Transport."(Imperial College Press,2012,uk),chapt.1-3.
- [17] M. Di Ventra ,**(2008)** ." Electrical Transport in Nanoscale Systems" (First published 2008, Cambridge University Press,uk),chapt.3.
- [18] J. Andrew, ,PhD thesis,**(2015)**. "Quantum Edge Transport in Topological Insulators" . Stanford University.
- [19] Y. M. Lin , M. S Dresselhaus.**(2003)**. "Thermoelectric properties of superlattice nanowires". *Physical review B*, 68(7), 075304
- [20] Ö.C. Yelgelab and G.P. Srivastava **(2014)**, " Thermoelectric properties of Bi₂Se₃/Bi₂Te₃/Bi₂Se₃ and Sb₂Te₃/Bi₂Te₃/Sb₂Te₃ quantum well systems" *Philosophical Magazine*, 114,3, pp 444
- [21] Y. Yan, Q.F. Liang ,H. Zhao, Wu, C.-Q. **(2012)**. "Thermoelectric properties of hexagonal graphene quantum dots". *Physics Letters A*, 376(12-13).

- [22] E.M. Salman, M.R. Jubayr. **(2018)**. "A Theoretical Investigation of Enhanced Thermoelectric Figure of Merit of Low-Dimensional Structures". Ibn Al-Haitham Journal For Pure And Applied Science, 23, 95-105.
- [23] H. Osterhage, J. Gooth ,B. Hamdou, P. Gwozdz,R. Zierold, **(2014)**. "Thermoelectric properties of topological insulator Bi₂Te₃, Sb₂Te₃, and Bi₂Se₃ thin film quantum wells". Applied Physics Letters, 105(12), p.123117.
- [24] X. Zou,X. Chen, H. Huang, Y. Xu, W. Duan,**(2015)**. "Enhanced thermoelectric figure of merit in thin GaAs nanowires". Journal Nanoscale, 7(19), 8776-8781.
- [25] A. Samarelli,L. Ferre Llin ,S. Cecchi, J. Frigerio , T. Etzelstorfer, E. Müller, **(2013)**. "The thermoelectric properties of Ge/SiGe modulation doped superlattices". Journal of applied physics, 113(23), 233704.
- [26] v. Vargiamidis,O. Valassiades, and D. S. Kyriakos et al,**(2003)**, "Lippmann Schwinger equation approach to scattering in quantum wires", physica status solidi, Vol. 236, No. 3, pp. 597-613.
- [27] J. J. Sakurai, **(1994)**. " Modern Quantum Mechanics (Addison, New York, 1994), Chapt. 7
- [28] C. Jeong,R. Kim, M. Luisier, S. Datta, M. Lundstrom **(2010)**. "On Landauer versus Boltzmann and full band versus effective mass evaluation of thermoelectric transport coefficients". Journal of Applied Physics, 107(2), 023707.
- [29] C.Jeong, S. Datta, , M. Lundstrom, **(2011)**. "Full dispersion versus Debye model evaluation of lattice thermal conductivity with a Landauer approach". Journal of Applied Physics, 109(7), 073718.

Aabstract

In recent years, an interest to the thermoelectric phenomenon has increased significantly due to its attractiveness. In fact, since the early 1990s, the study of this phenomenon in nanoscale and the use of nanostructures showed that the more we move towards structures with smaller dimensions, the more we will see a significant increase in the thermoelectric figure of merit. A review of previous studies shows that research in this area has led to promising results in recent years. In the present study, the thermoelectric properties of a quantum well wire have been investigated. The Lippmann-Schwinger equation was used to calculate the electron transmission coefficients of the system. The Landauer approach was used to determine the thermoelectric coefficients. The results of calculations in GaAs quantum well wire system show the role of decrease in dimensionality in increasing the figure of merit. In addition, the change in the figure of merit of the system with changes in temperature, Fermi energy and width of the quantum well wire has been investigated.

Keywords: Thermoelectric, Figure of merit, Quantum Well-Wire, Mean Free path, Lippmann-Schwinger Equation, Landauer Approach



Faculty Of physics and Nuclear Engineering

MSc Thesis in Nano physics

study of thermoelectric properties of a quantum well wire

By: Hossein tejenjari

Supervisor:

Dr. Saeid Hessami Pilehrood

October 2021