





دانشکده فیزیک و مهندسی هسته ای

پایان نامه کارشناسی ارشد نانو فیزیک

تاثیر پراکندگی الکترون بر روی اثرات ترموالکتریکی در حضور میدان مغناطیسی کوانتیزه کننده

نگارنده: محمد تحقی علیائی

استاد راهنما

دکتر سعید حسامی پيله رود

مهر ۱۴۰۰

سپاسگزاری...

اکنون که با عنایت و یاری خداوند متعال مراحل پژوهش، تدوین و نگارش تحقیق به پایان رسیده است؛ بر خود واجب می دانم از عزیزانی که طی مراحل مختلف از راهنمایی و یاری آنها بهره بردم سپاسگزاری نمایم.

در ابتدا سپاس بیکران خود را بر همدلی و همراهی پدرم، مادرم و برادر مهربانم تقدیم میکنم.

از استاد راهنمای بزرگوارم جناب آقای دکتر حسامی که با مساعدت بی دریغ خود مسیر انجام تحقیق را هموار نمودند، کمال تشکر را دارم.
همچنین از تمام عزیزانی که من را در این مسیر یاری نمودند سپاسگزارم.

تعهد نامه

اینجانب محمد تحقیقی علیائی دانشجوی کارشناسی ارشد رشته نانوفیزیک فیزیک و مهندسی هسته ای دانشگاه شاهرود، نویسنده پایان نامه با عنوان **تاثیر پراکندگی الکترون بر روی اثرات ترموالکتریکی در حضور میدان مغناطیسی کوانتیزه کننده**، 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.

محمد تحقیقی علیائی

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

معیار شایستگی مواد ترموالکتریک، ZT ، که کارایی آن ها را در یک دستگاه ترموالکتریک تعیین می کند، برای اکثر مواد کپه ای (غیرنانویی) پایین است. مواد در مقیاس نانو یکی از راه های امیدوارکننده برای افزایش معیار شایستگی ترموالکتریک است. در این تحقیق به بررسی تاثیر پراکندگی الکترون ها در حضور میدان مغناطیسی کوانتیزه کننده بر روی اثرات ترموالکتریکی پرداخته شده است. با استفاده از معادله ی لیپمن – شوینگر ضرایب گذار دستگاه مورد مطالعه به دست آمد و در آخر با استفاده از رهیافت لاندائور – بوتیکر ضرایب ترموالکتریکی به دست آورده شد. سیستم مورد مطالعه در این تحقیق گاز الکترونی دو بعدی در ساختار نامتجانس $GaAs/AlGaAs$ بود. نتایج به دست آمده نشان دادند که میدان مغناطیسی، انرژی فرمی و مسافت آزاد میانگین فونونی باعث کاهش معیار شایستگی و دما باعث افزایش معیار شایستگی ترموالکتریک در دستگاه مورد مطالعه می شود.

کلمات کلیدی: ترموالکتریک، معیار شایستگی، میدان مغناطیسی، معادله لیپمن – شوینگر، رهیافت لاندائور – بوتیکر، گاز الکترونی دو بعدی

فهرست مطالب

ک	فهرست تصاویر
س	پیشگفتار
۱	۱ تعاریف اولیه
۱	۱.۱ مقدمه
۱	۲.۱ اثر ترموالکتریک
۲	۱.۲.۱ اثر سبک
۳	۲.۲.۱ اثر پلتیر
۳	۳.۲.۱ اثر تامسون
۵	۴.۲.۱ معیار شایستگی ترموالکتریک
۵	۳.۱ فونون
۵	۱.۳.۱ مسیر آزاد میانگین
۶	۲.۳.۱ رسانندگی گرمایی
۷	۳.۳.۱ رسانندگی الکتریکی
۸	۴.۱ نانو مواد
۸	۱.۴.۱ نانو مواد صفر بعدی
۹	۲.۴.۱ نانو مواد یک بعدی
۹	۳.۴.۱ نانو مواد دو بعدی
۹	۴.۴.۱ نانو مواد سه بعدی
۱۰	۵.۴.۱ تراز های لاندائو
۱۱	۶.۴.۱ چگالی حالت ها
۱۳	۵.۱ جمع بندی
۱۵	۲ مروری بر کارهای گذشته
۱۵	۱.۲ تاثیر پراکندگی الکترون بر روی اثر ترموالکتریک

۲.۲	ویژگی های ترموالکتریکی یک نانوسیم لوله ای در حضور میدان مغناطیسی	۱۶
۳.۲	نظریه افزایش خواص ترموالکتریک مواد با اجزای نانو	۱۶
۴.۲	ویژگی های ترموالکتریکی لایه های نازک پلی کریستالی تحت یک میدان مغناطیسی خارجی	۱۸
۵.۲	اثرات میدان مغناطیسی بر روی خصوصیات ترموالکتریک گرافن تک لایه	۱۹
۶.۲	افزایش معیار شایستگی ترموالکتریک در نانوسیم نازک GaAs	۲۱
۳	بررسی رهیافت	۲۳
۱.۳	مقدمه	۲۳
۲.۳	معادله ی لیپمن - شوینگر در سیستم های دو بعدی	۲۴
۱.۲.۳	پراکندگی از پتانسیل دلتای دیراک	۲۹
۳.۳	تعیین ضرایب ترموالکتریک از طریق رهیافت لاندائور- بوتیکر	۳۱
۱.۳.۳	جمع بندی	۳۶
۴	اثر ترموالکتریک در یک دستگاه شبه یک بعدی در حضور میدان مغناطیسی کوانتیزه کننده	۳۷
۱.۴	مقدمه	۳۷
۲.۴	معادله شرودینگر	۳۸
۱.۲.۴	معادله لیپمن - شوینگر و تابع گرین دستگاه	۴۰
۲.۲.۴	پتانسیل پراکندگی دلتای دیراک	۴۲
۳.۴	نتایج	۴۴
۱.۳.۴	بررسی نحوه ی تغییرات رسانایی الکتریکی	۴۴
۲.۳.۴	بررسی نحوه ی تغییرات ضریب سبیک	۴۷
۳.۳.۴	بررسی نحوه ی تغییرات رسانایی گرمایی	۵۰
۴.۳.۴	بررسی نحوه ی تغییرات معیار شایستگی ترموالکتریک	۵۴
۴.۴	مروری بر نتایج	۵۷
۵.۴	پیشنهادهای	۵۸
۶.۴	جمع بندی	۵۸
۶۱	مراجع	

فهرست تصاویر

۲	۱.۱ طرح واره ای از اثر سبیک
۳	۲.۱ ترموکوپل
۴	۳.۱ اثر پلتیر
۴	۴.۱ اثر تامسون
۶	۵.۱ طرح واره ای ساده برای تعیین مسیر آزاد میانگین [۷]
۸	۶.۱ طرح واره ای از ساختارهای صفر بعدی، یک بعدی و دو بعدی [۱۱]
۱۱	۷.۱ طرح واره ای از فضای سه بعدی k [۱۵]
۱۳	۸.۱ چگالی حالت ها در نانو ساختارهای صفر، یک و دو بعدی و حالت کپه ای [۱۶]
۱۷	۱.۲ ضریب سبیک بر حسب میدان مغناطیسی با پتانسیل شیمیایی $\mu = 4/2 meV$ و $T_L = T_R - 8 K (T_L \approx T_R)$ [۱۹]
۱۷	۲.۲ رسانندگی و رسانایی گرمایی بر حسب میدان مغناطیسی برای تعدادی دمای مشخص شده سمت راست، طول نانوسیم $L = 100 nm$ و شعاع آن $R = 3 nm$ [۱۹]
۱۷	۳.۲ معیار شایستگی بر حسب میدان مغناطیسی وقتی که پتانسیل شیمیایی برابر $\mu = 4/2 meV$ [۱۹]
۲۰	۴.۲ وابستگی دمایی رسانندگی الکتریکی در میدان های مغناطیسی متفاوت [۲۲]
۲۰	۵.۲ وابستگی دمایی رسانندگی گرمایی در میدان های مغناطیسی متفاوت [۲۲]
۲۱	۶.۲ وابستگی دمایی ضریب سبیک در میدان های مغناطیسی متفاوت [۲۲]
۲۲	۷.۲ تغییرات معیار شایستگی ترموالکتریک نسبت به دما برای نیمرسانای نوع p (مربع توخالی) و نیمرسانای نوع n (مربع توپر) [۲۳]
۲۸	۱.۳ پراکندگی بین حالت های انتشاری و محو شونده در یک سیم کوانتومی شبه یک بعدی با انرژی $E = E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ مد های انتشاری با منحنی های رو به بالا و مدهای محو شونده ($ik_n = \kappa_n$) با منحنی های رو به پایین مشخص شده است [۲۴]

۳۲	۲.۳ طرح واره ای از سیستم دو ترمیناله در رهیافت لاندائور [۲۵].
۴۴	۱.۴ اثر تغییرات میدان مغناطیسی بر روی رسانایی الکتریکی در دماهای $T=5^{\circ}K$ ، $T=15^{\circ}K$ ، $T=300^{\circ}K$ و $T=350^{\circ}K$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$
۴۵	۲.۴ نحوه ی تغییرات رسانایی الکتریکی نرمالایز شده بر حسب میدان مغناطیسی در دماهای $T=5^{\circ}K$ ، $T=15^{\circ}K$ ، $T=300^{\circ}K$ و $T=350^{\circ}K$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$
۴۶	۳.۴ اثر تغییرات انرژی فرمی بر روی رسانایی الکتریکی در میدان مغناطیسی $B=3T$ در دمای $T=300^{\circ}K$
۴۷	۴.۴ اثر تغییرات دمایی بر روی رسانایی الکتریکی در میدان های مغناطیسی $B=1T$ ، $B=3T$ ، $B=5T$ و $B=7T$ با انرژی فرمی $E_F = E'_F$
۴۷	۵.۴ نحوه ی تغییرات ضریب سبیک نسبت به میدان مغناطیسی در دماهای $T=5^{\circ}K$ ، $T=15^{\circ}K$ ، $T=300^{\circ}K$ و $T=350^{\circ}K$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$
۴۸	۶.۴ نحوه ی تغییرات ضریب سبیک نرمالایز شده بر حسب میدان مغناطیسی در دماهای $T=5^{\circ}K$ ، $T=15^{\circ}K$ ، $T=300^{\circ}K$ و $T=350^{\circ}K$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$
۴۹	۷.۴ اثر تغییرات انرژی فرمی بر روی ضریب سبیک در میدان مغناطیسی $B=3T$ در دمای $T=300^{\circ}K$
۴۹	۸.۴ اثر تغییرات دمایی بر روی ضریب سبیک در میدان های مغناطیسی $B=1T$ ، $B=3T$ ، $B=5T$ و $B=7T$ در انرژی فرمی $E_F = E'_F$
۵۰	۹.۴ مقایسه ی تغییرات رسانایی های گرمایی فونونی و الکترونی با تغییرات میدان مغناطیسی در دمای $T=300^{\circ}K$ ، انرژی فرمی $E_F = E'_F$ و مسافت آزاد میانین فونونی $\lambda = 100nm$
۵۰	۱۰.۴ اثر تغییرات میدان مغناطیسی بر روی رسانایی گرمایی در دماهای $T=5^{\circ}K$ ، $T=15^{\circ}K$ ، $T=300^{\circ}K$ و $T=350^{\circ}K$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$ با مسیر آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100nm$
۵۱	۱۱.۴ نحوه ی تغییرات رسانایی گرمایی نرمالایز شده بر اساس تغییرات میدان مغناطیسی در دماهای $T=5^{\circ}K$ ، $T=15^{\circ}K$ ، $T=300^{\circ}K$ و $T=350^{\circ}K$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$ با مسیر آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100nm$
۵۲	۱۲.۴ مقایسه ی تغییرات رسانایی های گرمایی فونونی و الکترونی با تغییرات انرژی فرمی در دمای $T=300^{\circ}K$ ، میدان مغناطیسی $B=3T$ و مسافت آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100nm$
۵۳	۱۳.۴ مقایسه تغییرات رسانایی های گرمایی فونونی و الکترونی با تغییرات مسافت آزاد میانگین فونونی در دمای $T=300^{\circ}K$ ، $B=3T$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$

- ۱۴.۴ مقایسه تغییرات رسانایی های فونونی و الکترونی با تغییرات دمایی در
میدان مغناطیسی $B=3T$ ، انرژی فرمی $E_F = E_F^0$ و مسافت آزاد میانگین
فونونی $\lambda = 100nm$ ۵۳
- ۱۵.۴ اثر تغییرات دمایی بر روی رسانایی گرمایی در میدان های مغناطیسی
 $B=1T$ ، $B=3T$ ، $B=5T$ و $B=7T$ و انرژی فرمی $E_F = E_F^0$ با مسیر آزاد
میانگین فونونی $\lambda = 100nm$ ۵۴
- ۱۶.۴ اثر تغییرات میدان مغناطیسی بر روی معیار شایستگی ترموالکتریک در
دماهای $T=5^\circ K$ ، $T=15^\circ K$ ، $T=300^\circ K$ و $T=350^\circ K$ و انرژی فرمی $E_F = E_F^0$
با مسیر آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100nm$ ۵۵
- ۱۷.۴ نحوه ی تغییرات معیار شایستگی ترموالکتریک نرمالایز شده بر اساس تغییرات
میدان مغناطیسی در دماهای $T=5^\circ K$ ، $T=15^\circ K$ ، $T=300^\circ K$ و $T=350^\circ K$
و انرژی فرمی $E_F = E_F^0$ با مسیر آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100nm$ ۵۵
- ۱۸.۴ اثر تغییرات انرژی فرمی بر روی معیار شایستگی ترموالکتریک در میدان
مغناطیسی $B=3T$ و دمای $T=300^\circ K$ با مسیر آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100nm$ ۵۶
- ۱۹.۴ اثر تغییرات دمایی بر روی معیار شایستگی ترموالکتریک در میدان های
مغناطیسی $B=1T$ ، $B=3T$ ، $B=5T$ و $B=7T$ و انرژی فرمی $E_F = E_F^0$ با مسیر
آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100nm$ ۵۶
- ۲۰.۴ اثر تغییرات مسافت آزاد میانگین فونونی بر روی معیار شایستگی ترموالکتریک
در میدان مغناطیسی $B=3T$ و انرژی فرمی $E_F = E_F^0$ ۵۷

پیشگفتار

در سال های گذشته به دلیل افزایش جمعیت کره زمین و به دنبال آن افزایش تقاضا برای انرژی الکتریکی و گرمایی ، گازهای گلخانه ای به طور چشمگیری افزایش پیدا کرده است . به همین علت پیدا کردن راهکاری برای تامین انرژی پاک و تجدید پذیر مورد توجه قرار گرفته است . فناوری تبدیل انرژی ترموالکتریک یکی از راهکارها برای پاسخ دادن به این نیاز است. ترموالکتریک تبدیل انرژی الکتریکی به گرمایی و بالعکس است.

ماده ترموالکتریک خوب باید قابلیت بالای تبدیل گرما به الکتریسیته را داشته باشد تا اختلاف پتانسیل مورد نیاز را فراهم کند. برای حصول این خاصیت باید هدایت الکتریکی ماده زیاد باشد، همچنین هدایت حرارتی باید تا حد امکان کم باشد تا از اتلاف حرارتی تا حد امکان جلوگیری کند. این اثر جمعی خواص و فرایندهای موثر در بازده اثر ترموالکتریک با ضریبی به نام معیار شایستگی، ZT ، اندازه گیری می شود.

به جهت معیار شایستگی کوچک دستگاه ها و ساختارهای مورد استفاده، بازده ترموالکتریک آنها مطلوب نبوده و افزایش بازده چالش اصلی در استفاده موثر از آنها است. پدیده ترموالکتریک تا اواسط دهه ۵۰ میلادی جای خود را در صنعت باز نکرد. در دهه ۹۰ میلادی هیکس^۱ و درسل هاوس^۲ پیشنهاد کردند که نانو مواد، مواد مناسب تری برای استفاده در حوزه ترموالکتریک می باشند و فناوری نانو یکی از دستاوردهایی است که می توان به کمک آن بازدهی تبدیل ترموالکتریک را بهبود بخشید.

تا کنون بخش قابل توجهی از فعالیت های انجام پذیرفته در زمینه ترموالکتریک تحقیقات تجربی پرهزینه بوده است. به جهت شناخت دقیق تر فرایندهای موثر بر پدیده ترموالکتریک در ساختارهای نانو و کاهش هزینه های تحقیقات تجربی مطالعات نظری و روش های مبتنی بر مدلسازی عددی بسیار مورد توجه قرار گرفته اند. از مزایای بهره گیری از روشهای نظری و محاسباتی می توان سریع بودن، هزینه پایین و امکان بررسی شرایط مختلف بدون دربرداشتن هزینه را نام برد. پژوهش حاضر گامی برای توسعه شناخت بنیادی پدیده ترموالکتریک در ساختارهای نانو و مشارکت در تلاش های نظری مفید در نیل به اهداف فوق خواهد بود.

این پژوهش با در نظر گرفتن دستگاه گاز الکترون دوبعدی تحت اثر میدان مغناطیسی قوی

¹L. D. Hicks

²M. S. Dresselhaus

و در حضور گرادیان دمایی و با احتساب اثرات پراکندگی های الکترونی در صدد بررسی اثر آنها در ویژگی های ترموالکتریک دستگاه خواهد بود.

فصل ۱

تعاریف اولیه

۱.۱ مقدمه

شایسته است تا در گام نخست به معرفی مبانی و مفاهیم پایه مرتبط با مطالعه حاضر پرداخته شود. در ابتدا مفهوم ترموالکتریک، تاریخچه و سیر پیشرفت آن تا اکنون بیان می شود و در نهایت به موضوعات مرتبط با علم نانو و همچنین برخی مفاهیم کاربردی مرتبط با مطالعه حاضر بررسی خواهد شد.

۲.۱ اثر ترموالکتریک

اثر ترموالکتریک نوعی تبدیل انرژی است. در این اثر انرژی گرمایی به انرژی الکتریکی و بالعکس تبدیل می شود. اثر ترموالکتریک شامل سه اثر جداگانه زیر می باشد:

۱. اثر سبک^۱

۲. اثر پلتیر^۲

۳. اثر تامسون^۳

^۱Seebeck Effect

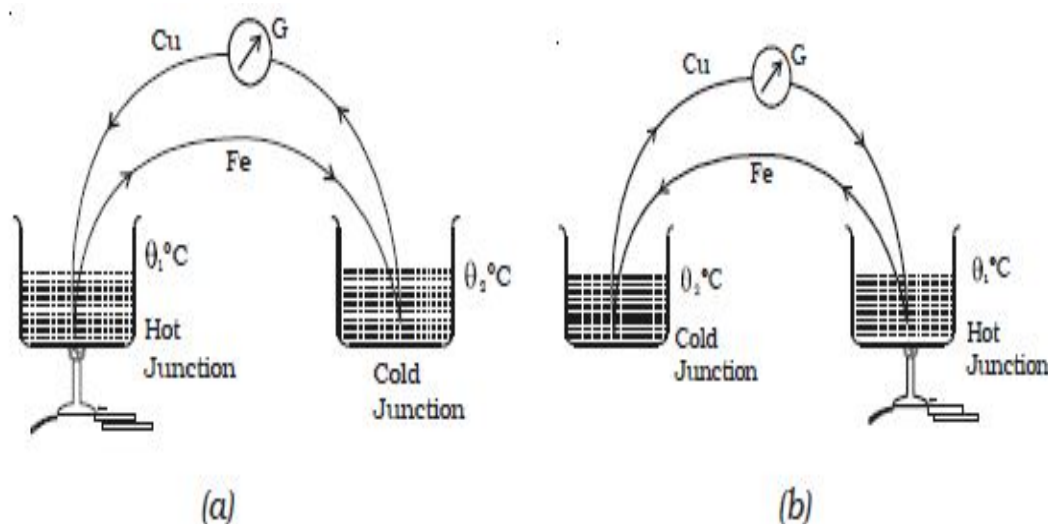
^۲Peltier Effect

^۳Thomson Effect

که در اینجا به معرفی آنها پرداخته می شود.

۱.۲.۱ اثر سبیک

در سال ۱۸۲۱ سبیک نشان داد که با گرم کردن محل اتصال بین دو رسانای الکتریکی متفاوت (ناهم جنس) می توان نیروی محرکه الکتریکی ایجاد کرد. اثر سبیک را می توان با ایجاد ارتباط بین سیم هایی از فلزات متفاوت (به عنوان مثال مس و آهن) نشان داد. مطابق طرح نمایش داده شده در شکل (۱.۱) با اتصال انتهای این دو سیم به یک گالوانومتر یا ولت متر حساس، در صورت گرم شدن محل اتصال دو سیم، پیدایش اختلاف پتانسیل کوچکی مشاهده خواهد شد. [۱]



شکل ۱.۱: طرح واره ای از اثر سبیک

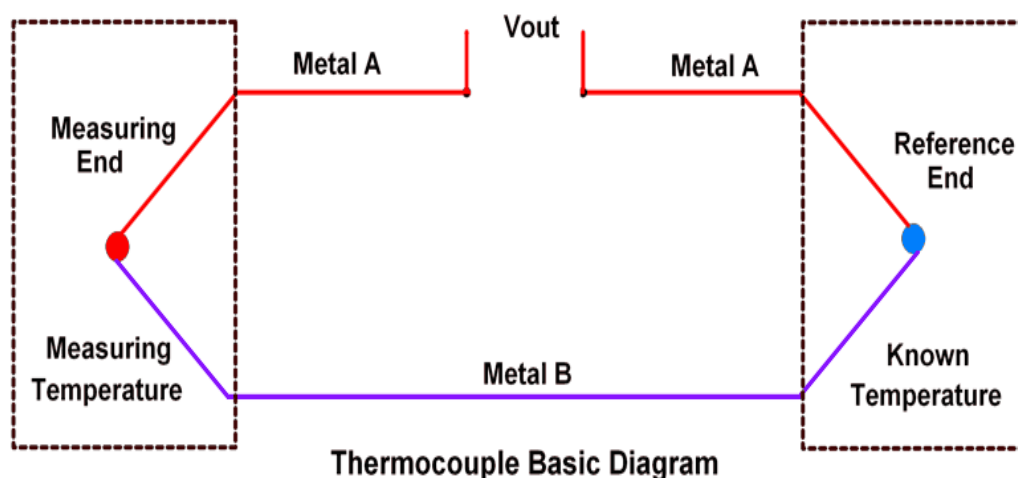
برای به دست آوردن این اختلاف پتانسیل، برای سادگی تصور می کنیم که رساناها ایزوتروپ هستند.

مطابق شکل (۲.۱) تصور نمایید رسانای B از هر دو انتها به رسانای A متصل شده است فرض کنید بین دو محل اتصال اختلاف دمای ΔT ایجاد شده و دو انتهای آزاد رسانای A در یک دما حفظ شوند. سپس به طور کلی مشخص خواهد شد که یک اختلاف پتانسیل V بین دو انتهای آزاد ظاهر می شود. می توان ولتاژ ظاهر شده را به صورت زیر بیان نمود:

$$V = \alpha_{AB} \Delta T \quad (1.1)$$

که در آن α_{AB} ضریب سبیک می باشد [۱].

¹Seebeck



شکل ۲.۱: ترموکوپل

۲.۲.۱ اثر پلتیر

سیزده سال پس از کشف سیبک ، پلتیر ، ساعت ساز فرانسوی ، دومین اثر ترموالکتریک را مشاهده کرد. وی دریافت که عبور جریان الکتریکی از داخل ترموکوپل ، بسته به جهت آن اثر گرمایی یا خنک کنندگی کمی ایجاد می کند. در واقع اثر پلتیر برعکس اثر سیبک می باشد. اثر پلتیر را می توان طبق شکل (۳.۱) اینگونه بیان کرد: هنگامی که جریان از رسانای B به رسانای A می رسد گرما جذب شده و هنگامی که جریان از رسانای A به رسانای B می رسد اتلاف گرما داریم ، در صورت تغییر جهت جریان الکتریکی، جایگاه های جذب و اتلاف گرما جابجا می شود. دلیل این پدیده این است که هنگامی که یک جریان از یک ماده به ماده دیگر می رسد ، انرژی منتقل شده توسط الکترونها تغییر می کند ، تفاوت به عنوان گرم شدن یا خنک شدن در محل اتصال ظاهر می شود .

ضریب پلتیر را می توان به صورت زیر تعریف کرد :

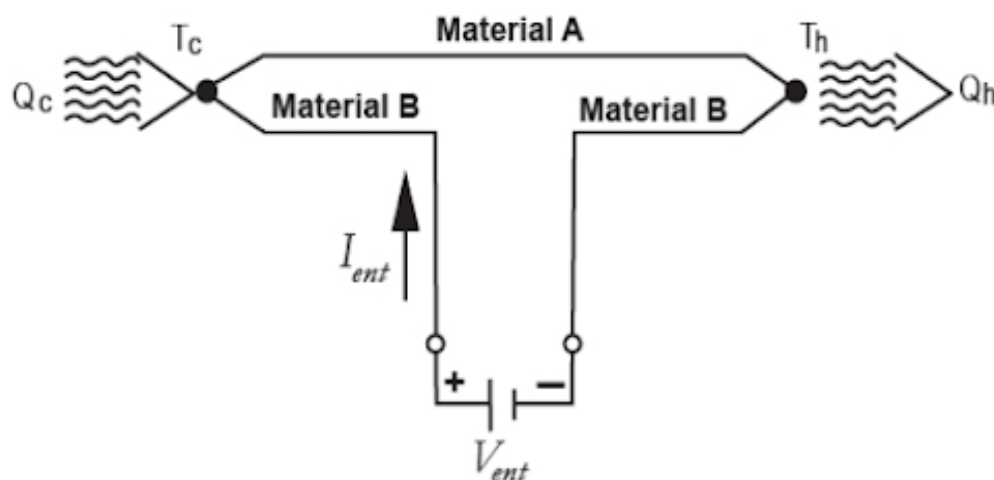
$$\Pi_{AB} = \frac{Q}{I} \quad (۲.۱)$$

Π برابر است با نسبت نرخ Q (گرمایش یا خنک سازی) در هر اتصال به جریان الکتریکی I

۳.۲.۱ اثر تامسون

در سال ۱۸۵۵ تامسون (معروف به لرد کلونین) توانست رابطه ای بین ضرایب توصیف کننده اثرات سیبک و پلتیر برقرار کند ، که این رابطه به صورت زیر است :

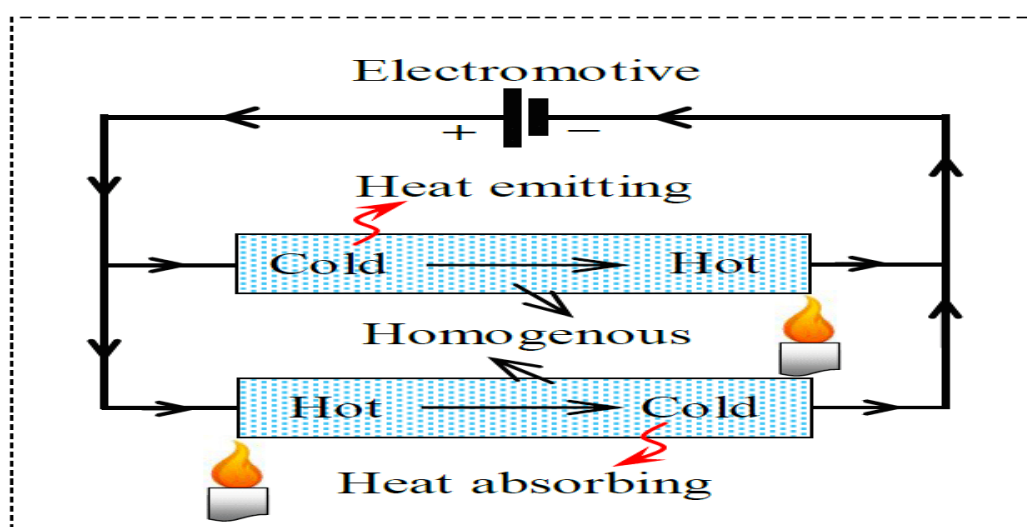
$$\Pi_{AB} = \alpha_{AB} T \quad (۳.۱)$$



شکل ۳.۱: اثر پلتیر

نظریه وی همچنین نشان داد که باید یک اثر ترموالکتریک سوم نیز در یک رسانای همگن وجود داشته باشد که به عنوان اثر تامسون شناخته می شود. این اثر، به طور خلاصه، گرمایش یا خنک سازی یک رسانای حامل جریان که دارای شیب دمایی است، را توصیف می کند. شکل (۴.۱). ضریب تامسون با رابطه ی زیر داده می شود:

$$\tau = T \frac{d\alpha}{dT} \quad (۴.۱)$$



شکل ۴.۱: اثر تامسون

۴.۲.۱ معیار شایستگی ترموالکتریک

عملکرد ترموالکتریکی یک ماده با کمیتی بدون بعد به نام معیار شایستگی مشخص می شود که رابطه آن به صورت زیر است:

$$ZT = \frac{\alpha^2 GT}{k_e + k_l} \quad (۵.۱)$$

که در آن G رسانایی الکتریکی $(\frac{1}{\Omega})$ ، α ضریب سبیک $(\frac{V}{K})$ ، T دمای مطلق (K) ، k_e و k_l به ترتیب قسمت های الکترونی و فونونی رسانایی گرمایی $(\frac{W}{K})$ می باشد. به حاصل ضرب ضریب سبیک به توان دو در رسانایی الکتریکی $(\alpha^2 G)$ ضریب توان گفته می شود و ضریب توان بزرگ بدین معنی است که سیستم می تواند ولتاژ و جریان زیادی را تولید کند. برای به دست آوردن ZT مطلوب، نیازمند ضریب سبیک (α) و رسانایی الکتریکی (G) بزرگتر برای تولید توان خروجی بالا و همچنین رسانایی گرمایی (k) پایین برای حفظ شیب های دمایی بزرگ هستیم [۴، ۳، ۲].

۳.۱ فونون

بر خلاف مایعات و گازها، اتم های جامد قادر به حرکت نیستند. آنها فقط در اطراف موقعیت های تعادلی خود ارتعاش می کنند. این ارتعاشات و الکترونها ی آزاد مسئول انتقال انرژی در جامدات هستند. از دیدگاه کوانتوم، فونون ها کوانتاهای ارتعاشات اتم های شبکه هستند. فونون ها در واقع شبه ذراتی هستند که جزو دسته ی بوزون ها محسوب شده و پیرو آمار بوز-انشتین هستند [۵، ۶].

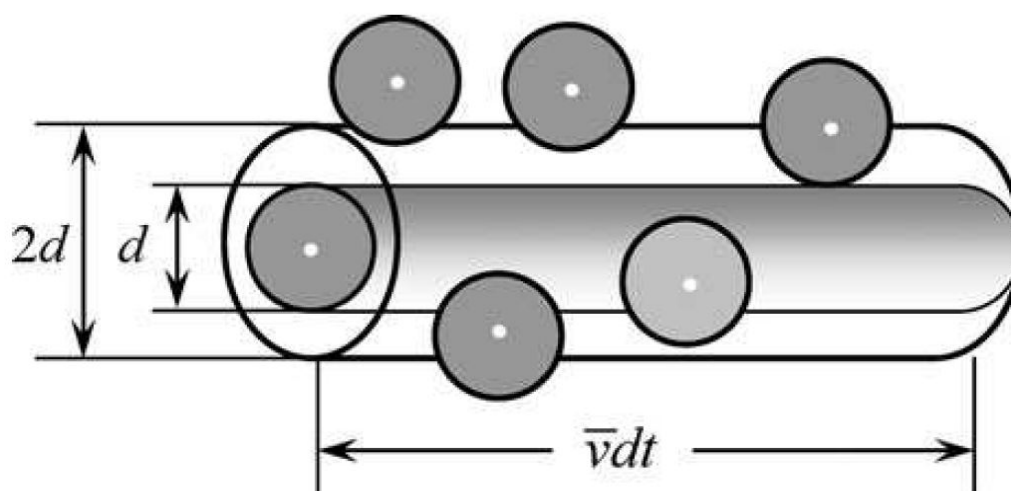
فونون ها در رسانایی گرمایی نقش مهمی ایفا می کنند که برای کنترل معیار شایستگی ترموالکتریک حائز اهمیت می باشد.

۱.۳.۱ مسیر آزاد میانگین

با توجه به شکل (۵.۱) ذره ای با قطر d و سرعت متوسط $\bar{v}$ حرکت می کند (با فرض این که بقیه ذرات در حال سکون قرار دارند). در فاصله زمانی dt ، حجم جاروب شده توسط ذره در فاصله ی d از خط مرکزی برابر $dV = \pi d^2 \bar{v} dt$ است.

$n dV$ ذره که مراکز آنها درون این عنصر حجمی هستند، با ذره متحرک برخورد می کنند. بنابراین، فراوانی برخوردها، یعنی تعداد برخوردها در واحد زمان برابر $\pi n d^2 \bar{v}$ است. زمان بین دو برخورد، t ، معکوس فرکانس برخورد است.

مسیر آزاد میانگین، Λ ، فاصله ای است که یک ذره (مانند فونون و الکترون) بین دو



شکل ۵.۱: طرح واره ای ساده برای تعیین مسیر آزاد میانگین [۷]

برخورد طی می کند و برابر است با نسبت سرعت متوسط به فرکانس برخورد.

$$\Lambda = \bar{v}\tau \approx (n\pi d^2)^{-1} \quad (۱.۱)$$

که τ ، میانگین زمان بین دو برخورد است که به زمان واهلش معروف است و میانگین فرکانس برخورد τ^{-1} ، نرخ پراکندگی یا نرخ برخورد است. نرخ پراکندگی متوسط تعداد برخوردهای است که یک ذره در واحد زمان تجربه می کند. همچنین مسافت آزاد میانگین به اندازه ذرات و عدد چگالی بستگی دارد [۷].

۲.۳.۱ رسانندگی گرمایی

به میزان توانایی یک ماده در انتقال گرما رسانندگی گرمایی (K) گفته می شود. در مواد گرما از طریق حامل های الکترونی، فونون ها، امواج الکترومغناطیسی، امواج چرخشی یا سایر برانگیختگی ها منتقل می شود. رسانندگی گرمایی کل یک ماده برابر اثر مجموع تمام اجزای برانگیختگی های مختلفی است که برای انتقال گرما در ماده رخ می دهد. اما، عوامل اصلی انتقال گرما در نیمه رساناها، حامل های بار و فونون ها هستند و سایر تحریکات به هدایت گرمایی کل کمک بسیار کمتری می کنند. بنابراین رسانندگی در نیمه رساناها از دو بخش الکترونی (K_e) و فونونی (K_l) تشکیل شده است.

$$K = K_e + K_l \quad (۲.۱)$$

طبق قانون رسانایی فوریه، رسانندگی گرمایی به عنوان سرعت جریان گرما از طریق یک متر مربع از ماده جامد که در آن گرادیان دما در جهت جریان گرما وجود داشته باشد تعریف

می شود و با معادله زیر داده می شود:

$$K = -\frac{Q}{\nabla T} \quad (3.1)$$

که Q شار گرمایی است.

رسانایی گرمایی نیز با $k(W/K)$ نمایش داده می شود و از طریق ابعاد نمونه به رسانندگی گرمایی مرتبط است :

$$k = \frac{A}{L} K \quad (4.1)$$

L طول نمونه و A سطح مقطع عمود بر جهت جریان است [۸].

۳.۳.۱ رسانندگی الکتریکی

به میزان توانایی مواد برای عبور جریان الکتریکی رسانندگی الکتریکی گفته می شود . رسانندگی الکتریکی ، در واقع به حرکت حامل های دارای بار الکتریکی در پاسخ به یک میدان الکتریکی اعمال شده اشاره دارد.

رسانندگی الکتریکی (با σ نشان داده می شود) با مقاومت ویژه ی الکتریکی مواد (با ρ نشان داده می شود)^۱ یعنی ویژگی از مواد که میزان مقاومت آن ها را در برابر جریان نشان می دهد، رابطه ی عکس دارد و با رابطه ی زیر نشان داده می شود :

$$\sigma = \frac{1}{\rho} \quad (5.1)$$

رسانندگی الکتریکی می تواند از طریق حرکت هر حامل بار ، از جمله الکترون ها و حفره ها و یون ها رخ دهد . رسانندگی الکتریکی مجموع تمام مکانیزم هایی است که به پاسخ کمک می کنند :

$$\sigma_{tot} = \sum_i n_i q_i \mu_i \quad (6.1)$$

که در آن n_i غلظت حامل های i و q_i بار هر حامل و μ_i تحرک هر حامل است . رسانایی الکتریکی نیز با $G(1/\Omega)$ نمایش داده می شود و از طریق ابعاد نمونه به رسانندگی الکتریکی مرتبط است :

$$G = \frac{A}{L} \sigma \quad (7.1)$$

L طول نمونه و A سطح مقطع عمود بر جهت جریان است [۹، ۱۰].

¹Electrical Resistivity

۴.۱ نانو مواد

ما در دنیایی زندگی می کنیم که دارای سه بعد فضایی و یک بعد زمانی می باشد. همه ی موجودات و جمادات دارای سه بعد فضایی (طول ، عرض ، ارتفاع) می باشند. حال اگر یکی از ابعاد فضایی ماده ای در محدوده ۱ تا ۱۰۰ نانو متر ($10^{-9}m$ تا $10^{-7}m$) باشد ، جزو گروه نانو مواد قرار می گیرد. همچنین به بعدی که در محدوده نانو متر قرار ندارد ، بعد آزاد گفته می شود. در محدوده نانو متر ویژگی های مواد به دلیل غالب شدن سطح به حجم (اثرات سطحی) و پدیدار شدن اثرات کوانتومی به شدت تغییر می کند. تغییرات ویژگی های مواد در این ابعاد باعث جذابیت علم نانو برای دانشمندان شده است .

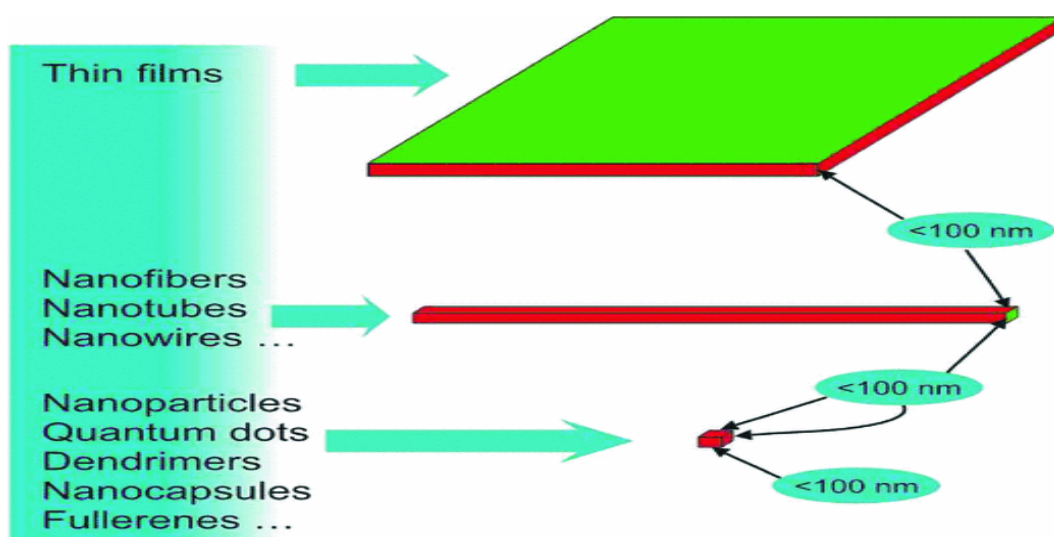
نانو مواد را بر اساس تعداد ابعاد فضایی آن که در محدوده نانو متر قرار داشته باشد به چهار گروه تقسیم می کنند :

۱. نانو مواد صفر بعدی

۲. نانو مواد یک بعدی

۳. نانو مواد دو بعدی

۴. نانو مواد سه بعدی



شکل ۴.۱: طرحواره ای از ساختارهای صفر بعدی ، یک بعدی و دو بعدی [۱۱].

۱.۴.۱ نانو مواد صفر بعدی

به موادی که هر سه بعد فضایی آن ها در محدوده نانو متر است و هیچ بعد آزادی ندارند ، نانو مواد صفر بعدی گفته می شود. معمولاً به این دسته از نانو مواد ذرات نانو گفته می شود.

این دسته به عنوان معروفترین نانو مواد محسوب می‌شوند که به دلیل روش سنتز ساده‌تر و هزینه پایین تر تولید آن‌ها است. از انواع نانو مواد صفر بعدی می‌توان به نقاط کوانتومی^۱ و نانو خوشه‌ها^۲ اشاره کرد. نقاط کوانتومی به عنوان نانو کریستال‌های غیر آلی نیمه هادی شناخته می‌شوند که معمولاً اندازه ای بین ۲ تا ۱۰ نانومتر دارند [۱۲]. نانو خوشه‌ها معمولاً حداکثر از ۱۰ اتم تشکیل شده‌اند و در دسته ی فلزات قرار دارند. از نانوخوشه‌ها در کاربردهای مرتبط با پزشکی و کاربردهای فوتوکاتالیستی استفاده می‌شود.

۲.۴.۱ نانو مواد یک بعدی

به موادی که دو بعد فضایی آن‌ها در محدوده نانو متر و یک بعد آن آزاد باشد نانو مواد یک بعدی گفته می‌شود. نانو لوله‌ها^۳، نانو سیم‌ها^۴، نانو الیاف‌ها^۵ و نانو میله‌ها^۶، از انواع نانو مواد یک بعدی هستند. این نوع ساختار به دلیل قابلیت رسانندگی حامل، کاربرد زیادی در حوزه الکترونیک دارد.

۳.۴.۱ نانو مواد دو بعدی

به موادی که یک بعد فضایی آن‌ها در محدوده نانو متر و دو بعد دیگر آن آزاد باشد نانو مواد دو بعدی گفته می‌شود. لایه نازک^۷ از معروفترین نوع این ساختار می‌باشد لایه‌های نازک به دلیل دارا بودن خواص عالی مانند خواص اپتیکی و مقاومت در برابر خوردگی و سایش، در صنایع مختلف مانند ساخت ادوات الکترونیکی و اپتیکی به کار می‌روند. همچنین لایه‌های نازک در ایجاد ویژگی‌های سطحی مانند مقاومت در برابر خوردگی، مقاومت در برابر سایش و غیره کاربردهای فراوانی دارند.

۴.۴.۱ نانو مواد سه بعدی

این دسته از نانو مواد هیچ بعدی در محدوده ی نانو متر ندارند. گرچه این نوع مواد توده ای (بالک) هستند اما ساختار آن‌ها به نوعی به نانو مرتبط است. به عنوان مثال در مواد مزومتخلخل^۸، ابعاد ماده غالباً خیلی بزرگ تر از نانو متر است ولی داراي تخلخل هاي در محدوده نانو می باشد. از انواع نانو ساختارهای سه بعدی می‌توان به نانو کامپوزیت‌ها^۹،

¹Quantum Dot

²Nano Cluster

³Nanotubes

⁴Nanowires

⁵Nanofibers

⁶Nanorods

⁷Thin Film

⁸Mesoporous Material

⁹Nanocomposites

مواد مزو متخلخل و نانو بلورین ها ^۴ نام برد [۱۳].

۵.۴.۱ تراز های لاندائو

فرض کنید ذرات بارداری مانند الکترون ها در صفحه (X, Y) قرار دارند. اگر میدان مغناطیسی خارجی B عمود بر این صفحه اعمال کنیم سطوح انرژی ذرات باردار با مرتبه ای از $\hbar\omega_c$ از هم جدا می شوند. برای اثبات این موضوع باید معادله شرودینگر را برای الکترونی با بار q و جرم m که تحت میدان مغناطیسی عمود B قرار دارد حل کنیم. هامیلتونی سیستم ما به صورت زیر است:

$$H = \frac{1}{2m} \left(P - \frac{q}{c} A \right)^2 \quad (۱.۱)$$

که در آن $P = P_x + P_y$ می باشد. ما از پیمانه لاندائو $A = (-By, 0, 0)$ برای وارد کردن میدان مغناطیسی در هامیلتونی استفاده می کنیم و با قرار دادن این مفروضات در هامیلتونی خود داریم:

$$H = \frac{1}{2m} P_y^2 + \frac{1}{2m} \left(P_x + \frac{qBy}{c} \right)^2 \quad (۲.۱)$$

$$H = \frac{1}{2m} P_y^2 + \frac{1}{2m} \left(\hbar k_x + \frac{qBy}{c} \right)^2 \quad (۳.۱)$$

$$H = \frac{1}{2m} P_y^2 + \frac{m}{2} \left(\frac{qB}{mc} \right)^2 \left(y - \left(-\frac{c\hbar k_x}{qB} \right) \right)^2 \quad (۴.۱)$$

$$H = \frac{1}{2m} P_y^2 + \frac{m}{2} \omega_c^2 (y - y_0)^2 \quad (۵.۱)$$

که $\omega_c = \frac{qB}{mc}$ بسامد سیکلوترونی و $y_0 = -\frac{c\hbar k_x}{qB}$ و معادله ی (۵.۱) در واقع نشان دهنده ی نوسانگر هماهنگی است که با فرکانس سیکلوترونی ω_c نوسان می کند. بنابراین انرژی سیستم ما به صورت زیر است:

$$E_{k_x, n_y} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \quad (۶.۱)$$

بنابراین در حضور میدان مغناطیسی ما ترازهای انرژی داریم که با مرتبه ای از $\hbar\omega_c$ از هم جدا می شوند. به این تراز های انرژی، ترازهای لاندائو گفته می شود [۱۴].

⁴Nanocrystallines

۶.۴.۱ چگالی حالت ها

چگالی حالت ها ، به تعداد حالت های مجاز انرژی در واحد انرژی در واحد حجم در فضای حقیقی گفته می شود .

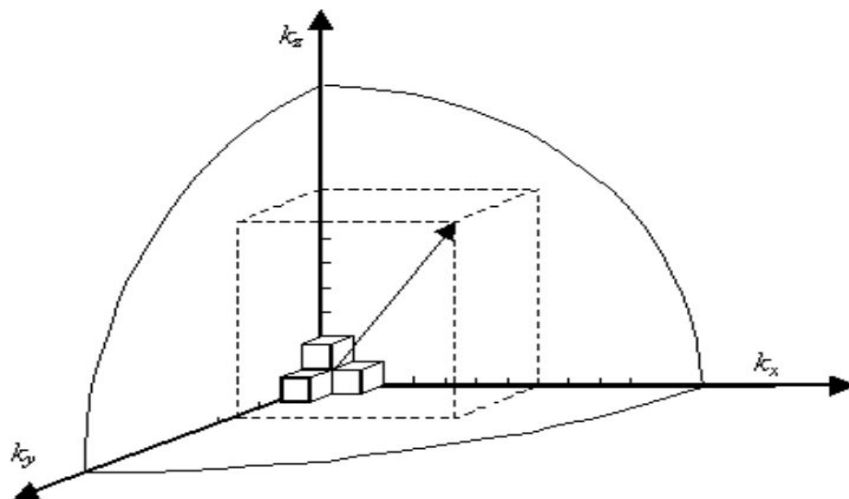
برای شروع یک نیمه رسانای مکعبی با ضلع L در نظر گرفته شده است. این فرض تاثیری در نتیجه ندارد زیرا چگالی حالت ها در واحد حجم نباید به اندازه یا شکل واقعی نیمه هادی بستگی داشته باشد. برای این سیستم تابع موج زیر با توجه به معادله شرودینگر در نظر گرفته شده است :

$$\psi = A \sin(k_x x) + B \cos(k_x x) \quad (7.1)$$

در $x = 0, L$ تابع موج به دلیل پتانسیل بی نهایت صفر می باشد . با توجه به این شرایط عدد موج به صورت زیر به دست می آید :

$$k_x = \frac{n\pi}{L} \quad , \quad n = 1, 2, \dots \quad (8.1)$$

اکنون می توان این تحلیل را در جهت y و z تکرار کرد. هر حل ممکن مطابق با مکعبی در فضای k با اندازه $\frac{n\pi}{L}$ است که در شکل زیر نشان داده شده است .



شکل ۷.۱: طرح واره ای از فضای سه بعدی k [۱۵].

تعداد حالت های کل به صورت زیر به دست می آید :

$$N = 2 \times \frac{1}{8} \times \frac{L^3}{\pi^3} \times \frac{4}{3} \pi k^3 \quad (9.1)$$

که یک هشتم حجم کره با شعاع k تقسیم بر حجم مکعب است و ضرب عدد دو به دلیل وجود دو اسپین لحاظ شده است. چگالی حالت های انرژی به صورت زیر به دست می آیند:

$$\frac{dN}{dE} = \frac{dN}{dk} \frac{dk}{dE} = \frac{L^3}{\pi^3} \pi k^2 \frac{dk}{dE} \quad (10.1)$$

انرژی جنبشی با عدد موج k بدین صورت رابطه دارد:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad k = \frac{\sqrt{2m^*E}}{\hbar}, \quad \frac{dk}{dE} = \frac{m^*}{\hbar^2 k} \quad (11.1)$$

چگالی حالت ها بر واحد حجم بر واحد انرژی را می توان به صورت زیر نوشت:

$$g(E) = \frac{1}{L^3} \frac{dN}{dE} = \frac{\lambda \pi \sqrt{2}}{h^3} m^{*3/2} \sqrt{E}, \quad E \geq 0 \quad (12.1)$$

حال برای نیمه رساناها چگالی حالت ها در نوار رسانش (E_c) به صورت زیر به دست می آید:

$$g_c(E) = \frac{1}{L^3} \frac{dN}{dE} = \frac{\lambda \pi \sqrt{2}}{h^3} m^{*3/2} \sqrt{E - E_c}, \quad E \geq E_c \quad (13.1)$$

$$g_c(E) = 0, \quad E < E_c \quad (14.1)$$

اکنون چگالی حالت ها را برای نانوساختارهای یک، دو و سه بعدی به صورت زیر به دست می آوریم [۱۷، ۱۵]:

تعداد حالت ها برای یک، دو و سه بعد بین k و $k + dk$ به صورت زیر است:

$$\frac{dN_{1D}}{dk} = 2 \left(\frac{L}{\pi} \right)^2 \pi k^2, \quad \frac{dN_{2D}}{dk} = 2 \left(\frac{L}{\pi} \right)^2 \pi k, \quad \frac{dN_{3D}}{dk} = 2 \left(\frac{L}{\pi} \right) \quad (15.1)$$

که $\left(\frac{L}{\pi} \right)$ چگالی الکترون ها برای هر بعد از فضای k می باشد.

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2\pi^2 m^*} \quad (16.1)$$

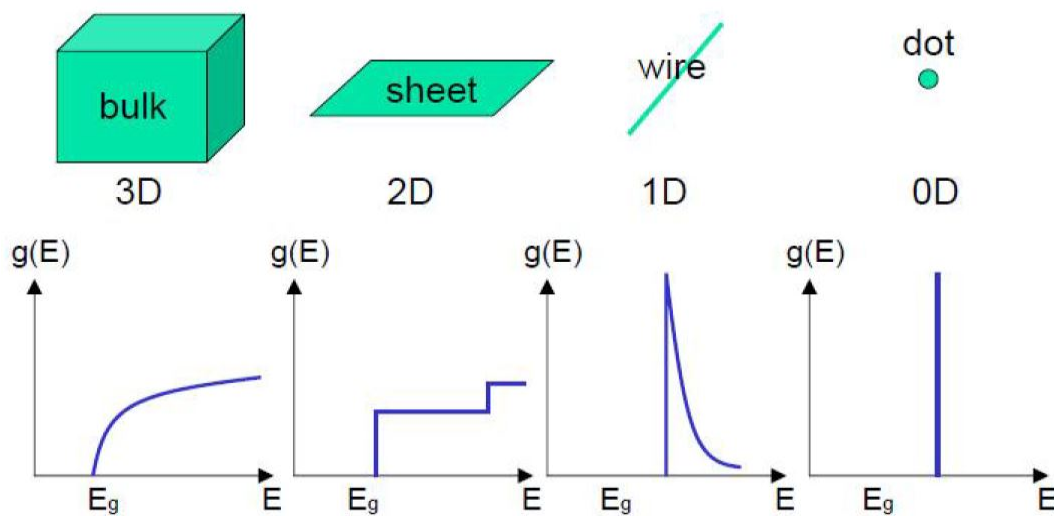
با توجه به روال قبل چگالی حالت ها برای یک، دو و سه بعد به صورت زیر به دست می آید:

$$g_{c,1D} = \frac{dN_{1D}}{dE} = \sqrt{\frac{2\pi m^*}{h^2}} \frac{1}{\sqrt{E - E_c}}, \quad E \geq E_c \quad (17.1)$$

$$g_{c,2D} = \frac{dN_{2D}}{dE} = \frac{4\pi m^*}{h^2} \quad , \quad E \geq E_c \quad (18.1)$$

$$g_{c,3D} = \frac{dN_{3D}}{dE} = \frac{4\pi\sqrt{2}}{h^3} m^{*3/2} \sqrt{E - E_c} \quad , \quad E \geq E_c \quad (19.1)$$

چگالی حالت ها در حالت کپه ای و نانوساختارهای یک ، دو و صفر بعدی در شکل (۸.۱) نشان داده شده است [۱۵].



شکل ۸.۱: چگالی حالت ها در نانو ساختارهای صفر، یک و دو بعدی و حالت کپه ای [۱۶].

۵.۱ جمع بندی

در این فصل به طور مقدماتی به مفاهیم پایه ی ترموالکتریک پرداخته شد. همچنین به صورت مقدماتی مفهوم نانو و انواع نانوساختارها بیان شد. برای بررسی سیستم مورد مطالعه، مفاهیم چگالی حالت ها، ترازهای لاندائو و فونون مرور شد.

فصل ۲

مروری بر کارهای گذشته

در این بخش برخی مطالعات که در گذشته در زمینه ی اثر ترابرد الکترونی و میدان مغناطیسی بر روی پدیده ترموالکتریک، طرح واره ای انجام شده است به طور خلاصه مرور می شود.

۱.۲ تاثیر پراکندگی الکترون بر روی اثر ترموالکتریک

لی^۱ و همکارانش ویژگی های تراپردی الکترون در حضور پراکندگی در یک نانوسیم را بررسی کردند . آن ها برای بررسی سیستم خود از راهبرد تابع گرین غیر تعادلی^۲ استفاده کردند [۱۸]. آن ها اثر پراکندگی الکترون ها را تحت سه شرط ۱- در غیاب میدان خارجی ۲- با ولتاژ بایاس ۳- اختلاف دمای محدود، مورد تجزیه و تحلیل قرار دادند. آن ها متوجه شدند که قدرت پراکندگی ضعیف و قوی از راه های مختلف بر ترابرد الکترون تأثیر می گذارد. قدرت پراکندگی ضعیف باعث به دام افتادن الکترون ها شده و این امر افزایش چگالی الکترونی را به همراه دارد. افزایش چگالی الکترونی باعث افزایش رسانایی شده که این امر باعث می شود ضریب سبیک کمی کاهش پیدا کند اما با این وجود ضریب توان ترمواکتریک همچنان افزایش پیدا می کند.

قدرت پراکندگی قوی باعث پراش^۳ الکترون ها می شود که این موضوع توزیع مجدد

¹Jing Li

² Non-Equilibrium Green's Function

³Diffraction

الکترونی را در پی دارد، الکترون ها در انتهای سیم تجمع می کنند و شار جریان مسدود می شود. به این دلیل رسانایی به طور قابل ملاحظه ای کاهش پیدا می کند. اگرچه ضریب سیبک کمی افزایش پیدا می کند اما ضریب قدرت ترموالکتریک همچنان کاهش پیدا می کند. در یک قدرت پراکندگی بهینه^۱ ضریب توان به میزان ۶ تا ۱۸ درصد افزایش پیدا کرد.

۲.۲ ویژگی های ترموالکتریک یک نانوسیم لوله ای در حضور میدان مغناطیسی عرضی

هریس و همکارانش جریان بار و گرمای مرتبط با الکترون ها را محاسبه کردند. آن ها این جریان ها را به وسیله ی شیب دمایی و اختلاف پتانسیل شیمیایی بین دو انتهای یک نانوسیم لوله ای با شعاع 3 nm در حضور میدان مغناطیسی عمود بر محور آن، ایجاد کردند [۱۹]. آن ها یک نانوسیم از ماده نیم رسانا را در نظر گرفتند و از رهیافت لاندائور – بوتیکر^۲ برای محاسبه ی مقادیر ترابرد استفاده کردند. آن ها تغییرات دمایی را از صفر تا بیست درجه کلوین ($0\text{ K} < T < 20\text{ K}$) و تغییرات میدان مغناطیسی خارجی را از صفر تا سه تسلا ($0\text{ T} < B < 3\text{ T}$) برای به دست آوردن ضریب سیبک، رسانندگی گرمایی و معیار شایستگی در نظر گرفتند. به طور خاص نشان داده می شود که علامت ضریب سیبک در این حوزه از پارامترها تغییر می کند (شکل ۱.۲). افزایش میدان مغناطیسی منجر به کاهش رسانندگی گرمایی می شود، که این موضوع بیشتر در دماهای پایین نمود پیدا می کند (شکل ۲.۲). ضریب سیبک و معیار شایستگی با افزایش میدان مغناطیسی یک گذار ثابت به نوسانی دارند. برای مثال برای سیلندری^۳ با شعاع 3 nm نانومتر معیار شایستگی دو قله در میدان مغناطیسی $1/8$ و $2/5T$ دارد که وجود این دو قله در میدان های مغناطیسی ذکر شده مستقل از دما می باشند (شکل های ۱.۲ و ۳.۲). این ویژگی قابل توجه اجازه می دهد تا با تغییر دما یا با اعمال یک میدان مغناطیسی خارجی، پاسخ ترموالکتریک نانوسیم را تنظیم کنید.

۳.۲ نظریه افزایش خواص ترموالکتریک مواد با اجزای نانو

فلیف^۴ و همکارش بر اساس مفهوم خمش نواری^۵ در رابط های فلزی – نیمه هادی به عنوان فیلتر انرژی برای الکترون ها، نظریه ای برای افزایش خواص ترموالکتریک مواد نیمه هادی با

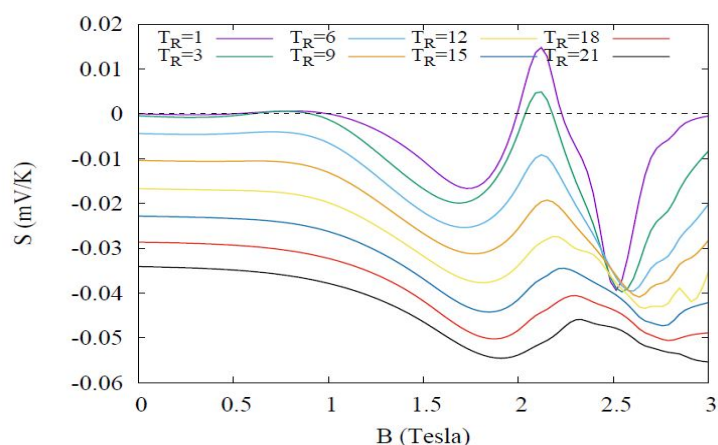
¹Optimum

²Landaur-Buttiker

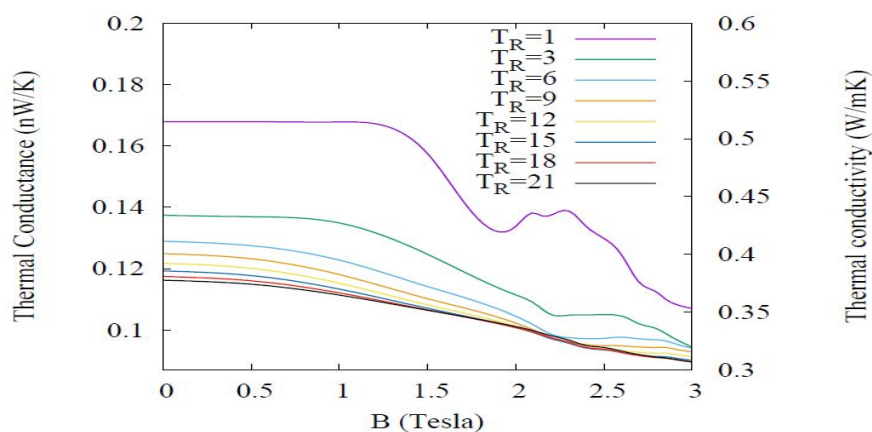
³Cylinder

⁴Faleev V. Sergey

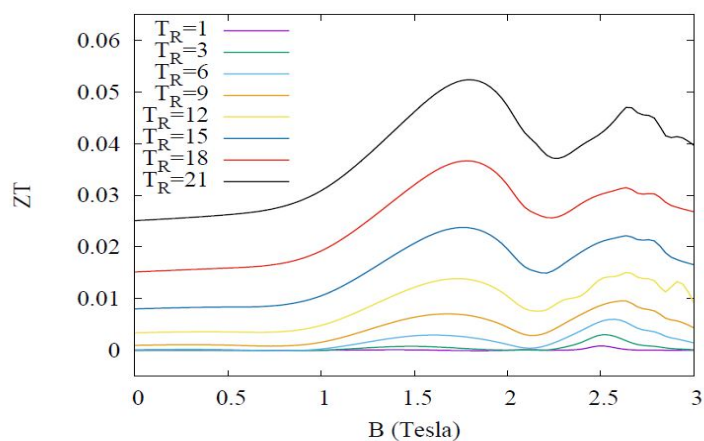
⁵Band-Bending



شکل ۱.۲: ضریب سبک بر حسب میدان مغناطیسی با پتانسیل شیمیایی $\mu = 4/2 meV$ و $T_L = 0/1 K$ ($T_L \approx T_R$) [۱۹].



شکل ۲.۲: رسانندگی و رسانایی گرمایی بر حسب میدان مغناطیسی برای تعدادی دمای مشخص شده سمت راست، طول نانوسیم $L = 100 nm$ و شعاع آن $R = 3 nm$ [۱۹].



شکل ۳.۲: معیار شایستگی بر حسب میدان مغناطیسی وقتی که پتانسیل شیمیایی برابر $\mu = 4/2 meV$ [۱۹].

اجزای نانو^۱ فلزی ارائه دادند [۲۰]. آن‌ها نظریه ای را توسعه دادند که امکان محاسبه ضریب ZT و اجزای آن را برای سیستمی از یک ماده میزبان نیمه هادی با ترکیبات نانو فلزی کرووی فراهم می‌کند. آن‌ها نشان دادند که ضریب سبک به واسطه زمان پراکندگی الکترونی که به شدت وابسته به انرژی است، می‌تواند به میزان قابل توجهی افزایش پیدا کند. در آرایش^۲ زیاد، پراکندگی الکترون برای افزایش معیار شایستگی مهم است. در حالی که در آرایش کم، کاهش رسانندگی گرمایی فونونی برای افزایش معیار شایستگی مهم است. با استفاده از این نظریه می‌توان با انتخاب بهینه متغیرها مقدار بیشینه برای معیار شایستگی به دست آورد.

۴.۲ ویژگی‌های ترموالکتریکی لایه‌های نازک پلی کریستالی تحت یک میدان مغناطیسی خارجی

گائو^۳ و همکارش یک مدل نظری برای پیش بینی ضریب سبک و رسانندگی الکتریکی در یک لایه نازک ترموالکتریک پلی کریستالی تحت یک میدان مغناطیسی خارجی ارائه کردند. این مدل، توزیع الکترون را در ریزساختارهای مواد لایه نازک ترموالکتریک در نظر گرفته و اثر پراکندگی الکترون در مرز دانه^۴ را به عنوان شرایط مرزی انتقال الکترون در دانه در نظر گرفته است. آن‌ها روابط بین ضریب سبک، رسانندگی الکتریکی و ضریب انتقال را مورد مطالعه قرار دادند. ضریب انتقال برای توصیف احتمال عبور الکترون از سد پتانسیل مرز دانه معرفی می‌شود. آن‌ها تأثیر ضخامت دانه و ضریب انتقال بر خصوصیات ترموالکتریکی لایه‌های نازک را مورد مطالعه قرار دادند. محاسبات آن‌ها برای به دست آوردن ضریب سبک، رسانندگی الکتریکی، و ضریب توان لایه‌های نازک ترموالکتریک پلی کریستالی نشان داد که میدان مغناطیسی خارجی اعمال شده تأثیر قابل توجهی بر خصوصیات ترموالکتریکی لایه‌های نازک دارد. مدل آن‌ها همچنین می‌تواند به طور موثر تأثیر اندازه را بر ضریب سبک و رسانندگی الکتریکی توصیف کند. این نتایج می‌تواند به طور بالقوه اطلاعاتی در مورد ساختارهای مواد ترموالکتریک و دستگاه‌های مورد استفاده در محیط‌های الکترومغناطیسی پیچیده فراهم کند [۲۱].

¹Nanoinclusions

²Doping

³Gao Yuan-Wen

⁴Grain Boundary

۵.۲ اثرات میدان مغناطیسی بر روی خصوصیات ترموالکتریک گرافن تک لایه

کریسن^۱ و همکارانش پاسخ ترموالکتریک در سیستم های گرافن تک لایه^۲ را در حضور یک میدان مغناطیسی ضعیف خارجی تجزیه و تحلیل کرده اند با این فرض که مکانیسم اصلی پراکندگی به دلیل همبستگی ناخالصی های بار است. آن ها ضرایب ترموالکتریکی، رسانندگی الکتریکی، ضریب سبیک و رسانندگی گرمایی را در نظر گرفتند و در مورد وابستگی آنها به دما و میدان مغناطیسی خارجی بحث کردند. کارایی پاسخ ترموالکتریکی سیستم بر اساس معیار شایستگی مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت. پراکندگی توسط ناخالصی های باردار قبلاً به عنوان مکانیسم اصلی پراکندگی در نمونه های گرافن تک لایه در نظر گرفته شده بود. چنین مکانیسمی می تواند رفتار غیر معمول رسانندگی الکتریکی را در نقطه دیراک توضیح دهد، اما با ایجاد همبستگی بین ناخالصی ها نیز می تواند رفتار زیر خطی رسانندگی الکتریکی را در حد چگالی حامل بالا توضیح دهد. در محدوده ی دماهای پایین، رسانندگی الکتریکی سیستم به عنوان تابعی از دما کاهش می یابد و به کمینه مقدار در حوالی $k_B T / E_F \sim 0.4$ می رسد (شکل ۴.۲). از طرف دیگر، در محدوده دماهای پایین، ضریب سبیک و رسانندگی گرمایی به شدت نسبت به دما افزایش پیدا می کنند. علاوه بر این، این دو پارامتر در آخر در حد $T \rightarrow 0$ به صفر میل پیدا می کنند اشکال (۵.۲) (۶.۲). در دماهای بالا، رسانندگی الکتریکی و حرارتی تقریباً به صورت تابعی از دما افزایش می یابند. اشکال (۵.۲) (۴.۲)

به طور متفاوت، ضریب سبیک یک بیشینه را در حوالی $k_B T / E_F \sim 1$ نشان می دهد و سپس در دماهای بالا اشباع می شود (شکل ۶.۲). آن ها همچنین پاسخ ترموالکتریکی گرافن تک لایه را در حضور یک میدان مغناطیسی خارجی مورد تجزیه و تحلیل قرار دادند. آن ها یک میدان مغناطیسی ضعیف را در نظر گرفتند، بنابراین تأثیر اصلی این میدان را می توان با توجه به شکافت زیمنان^۳ در رابطه پراکندگی انرژی الکترون درک کرد. آن ها متوجه شدند که کنترل پاسخ ترموالکتریکی دستگاه در دماهای پایین توسط یک میدان مغناطیسی نسبتاً ضعیف امکان پذیر است. با افزایش دما، اثرات میدان مغناطیسی کاهش یافته و کنترل پاسخ ترموالکتریک دستگاه بر اساس میدانهای مغناطیسی خارجی غیرممکن می شود.

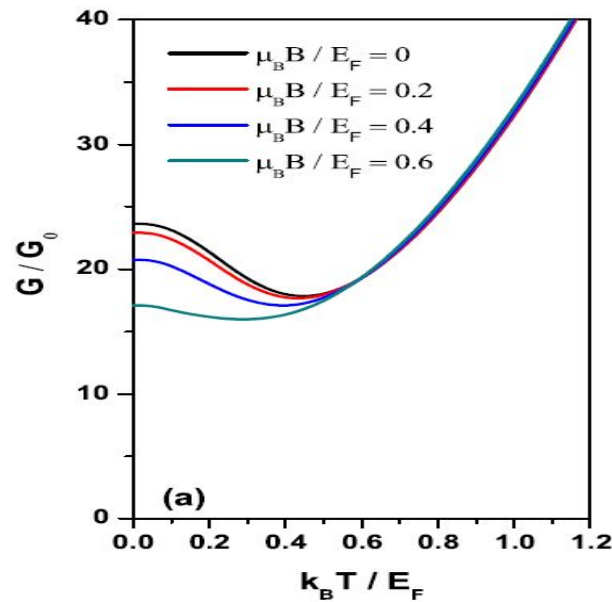
نتایج آن ها نشان می دهد که معیار شایستگی دستگاه به عنوان تابعی از دما تا حدود $ZT \sim 4$ افزایش می یابد. این مقدار باید با احتیاط در نظر گرفته شود، زیرا محاسبات آن ها اثرات مربوط به فونون ها در رسانندگی گرمایی دستگاه را در بر نمی گیرد. تأثیر فونون ها می تواند هنگام بالا رفتن دما نتایج بدست آمده را تغییر دهد و باید سهم بیشتری در هدایت گرمایی دستگاه در نظر گرفته شود. به طور خاص، سهم فونون ها می تواند مهم باشد

¹Crisan Mircea

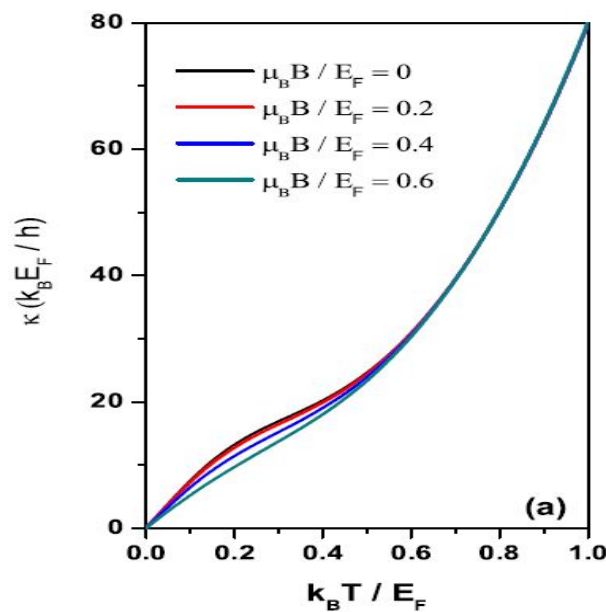
²Monolayer Graphene

³Splitting Zeeman

زیرا در دماهای بالا پراکندگی فونون بین دره ای^۱ قابل توجه می شود. برآوردهای آن ها به این واقعیت اشاره دارد که کنترل معیار شایستگی دستگاه به وسیله ی میدان مغناطیسی در محدوده ی دماهای پایین امکان پذیر است، جایی که اثر تحریکات دمایی بر اثرات مربوط به میدان مغناطیسی غلبه نمی کند [۲۲].

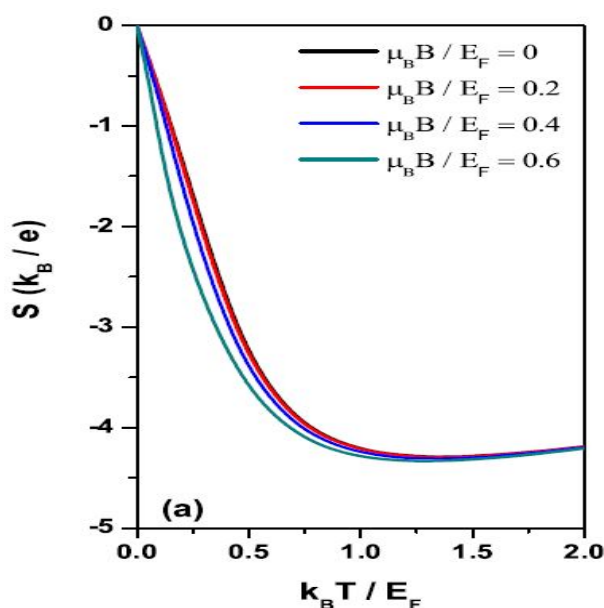


شکل ۴.۲: وابستگی دمایی رسانندگی الکتریکی در میدان های مغناطیسی متفاوت [۲۲].



شکل ۵.۲: وابستگی دمایی رسانندگی گرمایی در میدان های مغناطیسی متفاوت [۲۲].

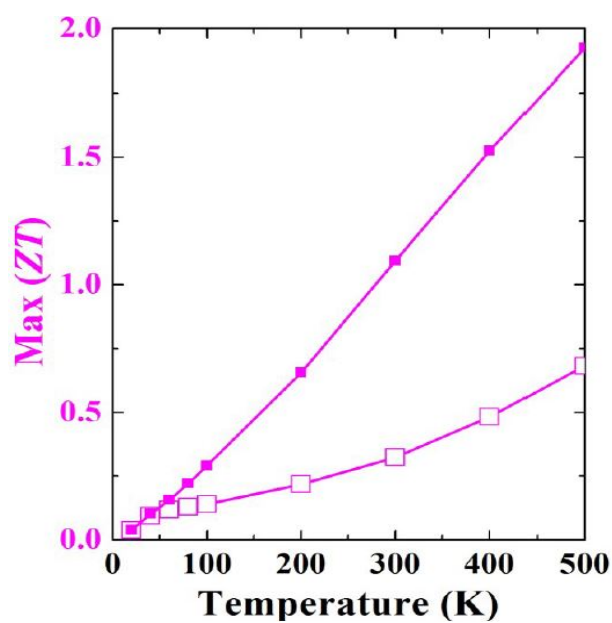
¹Inter-Valley



شکل ۶.۲: وابستگی دمایی ضریب سبیک در میدان های مغناطیسی متفاوت [۲۲].

۶.۲ افزایش معیار شایستگی ترموالکتریک در نانوسیم نازک GaAs

زو و همکارانش ویژگی های ترموالکتریکی نانوسیم های نازک GaAs را با استفاده از ترکیب نظریه تابع چگالی و رهیافت تابع غیر تعادلی گرین ، بررسی کردند. اگرچه معیار شایستگی ترموالکتریک در گالیوم آرسناید کپه ای بسیار پایین است اما نتایج آن ها نشان داد که معیار شایستگی ترموالکتریک در نانوسیم های گالیوم آرسناید به طور قابل توجهی نسبت به حالت کپه ای آن افزایش پیدا می کند. با توجه به شکل (۷.۲) معیار شایستگی ترموالکتریک نانوسیم نازک گالیوم آرسناید در دمای $T=300K$ برابر $1/34$ است که به کاهش رسانندگی گرمایی (k) و افزایش ضریب توان ($\alpha^2 \sigma$) نانوسیم های نازک ارتباط دارد [۲۳].



شکل ۷.۲: تغییرات معیار شایستگی ترموالکتریک نسبت به دما برای نیمرسانای نوع p (مربع توخالی) و نیمرسانای نوع n (مربع توپر) [۲۳].

فصل ۳

بررسی رهیافت

۱.۳ مقدمه

یکی از اصلی ترین موضوعات مورد بحث در پدیده ترمو الکتریک نحوه ی حرکت الکترون ها می باشد. در پدیده ی ترمو الکتریک شیب دمایی باعث حرکت الکترون ها شده و آن ها در طی حرکت به وسیله ی اتم ها و نقص های بلوری پراکنده می شوند. کمیت هایی مانند شار جریان الکتریکی^۱ و ضرایب عبور^۲ که بسیار مهم هستند از طریق بررسی ترابرد الکترونی به دست می آیند.

برای مطالعه ی پراکندگی الکترون ها از رهیافت های مختلفی استفاده می شود. در این فصل از دو روش مهم ، معادله ی لیپمن – شوینگر^۳ و رهیافت لاندائور – بوتیکر^۴ استفاده خواهد شد. در این فصل نحوه ی محاسبه ی ضرایب عبور و استفاده از آن ها در به دست آوردن ضرایب ترموالکتریک مورد مطالعه قرار می گیرد.

^۱Electric Current Flux

^۲Transmission Coefficient

^۳Lippmann-Schwinger Equation

^۴Landauer-Buttiker Approach

۲.۳ معادله ی لیپمن – شوینگر در سیستم های دو بعدی

در اینجا یک سیم کوانتومی بی نهایت در نظر گرفته شده است که در آن الکترون ها در راستای y محدود شده اند و در راستای x (راستای انتشار) آزاد هستند. هامیلتونی سیستم به صورت زیر در نظر گرفته شده است :

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

این رابطه از دو بخش H_0 (هامیلتونی سیستم در غیاب پراکننده) و V (پراکننده) تشکیل شده است . ناخالصی ها و نقص ها در سیم کوانتومی از عوامل به وجود آمدن پراکننده می باشد. در غیاب عوامل پراکندگی ، $V = 0$ می باشد. هامیلتونی سیستم در غیاب پراکننده شامل دو بخش عملگر انرژی جنبشی $(\frac{P^2}{2m})$ ^۱ و پتانسیل محدود کننده $(V_c(y))$ ^۲ است.

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

می توان فرض نمود که پتانسیل محدوده کننده بدین صورت است :

$$V_c(y) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 y^2 \quad (3.3)$$

ویژه حالت ها و ویژه مقادیر سیستم در غیاب پراکننده $V = 0$ به صورت زیر به دست می آید :

$$H_0 |\Psi^{(0)}\rangle = E |\Psi^{(0)}\rangle \quad (4.3)$$

$$\langle x | \Psi^{(0)} \rangle = \langle x | p_x, n \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ip_x x}{\hbar}} \phi_n(y) \quad (5.3)$$

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + E_n \quad (6.3)$$

در رابطه (۵.۳) $\phi_n(y)$ ها ویژه حالت های نویسانگر هماهنگ ساده یک بعدی بوده و با رابطه زیر تعریف می شوند :

$$\phi_n(y) = \xi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! y_0 \sqrt{\pi}}} H_n(y) \quad (7.3)$$

¹Kinetic Energy Operator

²Confinement Potential

که $H_n(y)$ ها توابع هرمیت می باشند که با روابط بازگشتی زیر تعریف می شوند :

$$\begin{aligned} H_0(y) &= 1 \\ H_1(y) &= 2x \\ H_{n+1}(y) &= 2xH_n(y) - 2nH_{n-1}(y) \end{aligned} \quad (۸.۳)$$

E_n ها نیز در رابطه (۶.۳) مقادیر مجاز انرژی در کف زیرنوارهای دستگاه الکترونی مورد مطالعه را بدست می دهند و با رابطه زیر تعریف می شوند :

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 \quad (۹.۳)$$

تا اینجا هامیلتونی سیستم در غیاب پراکننده بررسی شد، حال پراکننده به سیستم مورد مطالعه اضافه می شود.

در حضور پراکننده معادله شرودینگر به شکل زیر نوشته می شود :

$$(H_0 + V)|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (۱۰.۳)$$

با اعمال تغییراتی در معادله (۱۰.۳) داریم :

$$V|\Psi\rangle = (E - H_0)|\Psi\rangle \quad (۱۱.۳)$$

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{E - H_0} V|\Psi\rangle \quad (۱۲.۳)$$

انتظار این است که وقتی پراکننده به صفر میل پیدا می کند ($V \rightarrow 0$) ویژه حالت در حضور پراکننده به سمت ویژه حالت در غیاب پراکننده میل پیدا کند ($|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi^{(0)}\rangle$) :

$$|\Psi\rangle = |\Psi^{(0)}\rangle + \frac{1}{E - H_0} V|\Psi\rangle \quad (۱۳.۳)$$

در نهایت برای جلوگیری از صفر شدن مخرج مقدار بسیار کوچک (ϵ) را به آن اضافه می کنیم:

$$|\Psi\rangle = |\Psi^{(0)}\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V|\Psi\rangle \quad (۱۴.۳)$$

به رابطه ی (۱۴.۳) معادله ی لیپمن – شوینگر گفته می شود .

برای به دست آوردن تابع موج در پایه مکان، $\langle x|$ را از سمت چپ در معادله ی لیپمن – شوینگر ضرب می کنیم .

$$\langle x|\Psi^{(+)}\rangle = \langle x|\Psi^{(0)}\rangle + \int dx' \langle x|\frac{1}{E - H_0 + i\epsilon}|x'\rangle \langle x'|V|\Psi^{(+)}\rangle \quad (15.3)$$

از رابطه زیر در معادله (۱۵.۳) که یک معادله انتگرالی برای مساله پراکندگی است استفاده شده است.

$$\int dx' |x'\rangle \langle x'| = 1 \quad (16.3)$$

حال هسته ی انتگرال رابطه ی (۱۵.۳) را به عنوان یک تابع گرین^۱ محاسبه می کنیم.

$$G_+(x, x') = \frac{\hbar^2}{m} \langle x|\frac{1}{E - H_0 + i\epsilon}|x'\rangle \quad (17.3)$$

در عبارت بالا $E = \frac{\hbar^2 k^2}{m}$ است.

با توجه به کامل بودن عبارت زیر

$$\sum_n \int dp_x |p_x, n\rangle \langle p_x, n| = 1$$

رابطه ی (۱۷.۳) را می توان بدین گونه نوشت :

$$G_+(x, x') = \frac{\hbar^2}{m} \sum_{n', n''} \int dp'_x \int dp''_x \langle x|p'_x, n'\rangle \langle p'_x, n'| \frac{1}{E - \left[\frac{p'^2_x}{m} + E_{n'}\right] + i\epsilon} |p''_x, n''\rangle \langle p''_x, n''|x'\rangle \quad (18.3)$$

بااستفاده از دو رابطه ی

$$\langle x|p_x, n\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}} e^{\frac{ip_x x}{\hbar}} \phi_n(y) \quad (19.3)$$

و

$$\begin{aligned} \langle p'_x, n'|p''_x, n''\rangle &= \int dx \langle p'_x, n'|x\rangle \langle x|p''_x, n''\rangle \\ &= \frac{1}{\pi\hbar} \int dx e^{\frac{i(p''_x - p'_x)x}{\hbar}} \int dy \phi_{n'}^*(y) \phi_{n''}(y) \\ &= \delta(p'_x - p''_x) \delta_{n'n''} \end{aligned} \quad (20.3)$$

¹Green's Function

رابطه ی (۱۸.۳) را باز می کنیم :

$$G_+(x, x') = \frac{\hbar^2}{\gamma m} \sum_{n'} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp'_x}{\gamma \pi \hbar} \frac{e^{\frac{i p'_x (x-x')}{\hbar}}}{E - \left[\frac{p'^2_x}{\gamma m} + E_{n'} \right] + i\epsilon} \quad (21.3)$$

اکنون با تغییر متغیر $E - E_{n'} = \frac{\hbar^2 k'^2_{n'}}{\gamma m}$ و $p'_x = \hbar q$ در انتگرال رابطه ی (۲۱.۳)، می توان آن را به شکل زیر نوشت :

$$G_+(x, x') = \sum_{n'} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \left(\frac{-1}{\gamma \pi} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{e^{iq(x-x')}}{q^2 - k'^2_{n'} - i\epsilon} \quad (22.3)$$

که در آن $k'^2_{n'} = \frac{\gamma m}{\hbar^2} (E - E_{n'})$ است. با توجه به شکل (۱.۳) اگر مقدار انرژی فرمی بیشتر از انرژی کف هر زیر نوار باشد ($E_F > E_n$)، n' مد انتشاری^۱ است که در اثر پتانسیل پراکندگی از مد سمت چپ n به مد سمت راست n' منتشر شده است. اما اگر انرژی فرمی کمتر از انرژی کف هر زیر نوار باشد ($E_F < E_n$)، n' مد محو شونده^۲ است. مقدار $k_{n'}$ برای مد های محو شونده

$$k'^2_{n'} = \frac{\gamma m}{\hbar^2} (E_{n'} - E) \quad (23.3)$$

است.

برای به دست آوردن انتگرال رابطه ی (۲۲.۳) از روش حساب مانده ها استفاده می شود. در ابتدا ریشه های مخرج به دست می آیند :

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

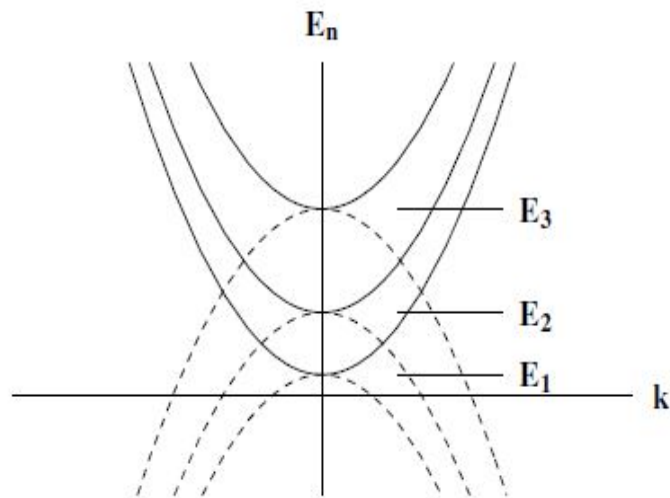
$$q = \pm k_{n'} \sqrt{1 + \frac{i\epsilon}{k'^2_{n'}}} = \pm (k_{n'} + i\epsilon)$$

در ادامه برای به دست آوردن انتگرال بدین صورت عمل می شود :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\gamma \pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{iq(x-x')}}{q^2 - k'^2_{n'} - i\epsilon} &= \frac{1}{\gamma \pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{iq(x-x')}}{(q + k_{n'} + i\epsilon)(q - k_{n'} - i\epsilon)} \\ &= \frac{1}{\gamma \pi} (\gamma \pi i) \frac{e^{ik_{n'}(x-x')}}{\gamma k_{n'}} + \frac{1}{\gamma \pi} (-\gamma \pi i) \frac{e^{ik_{n'}(x-x')}}{\gamma k_{n'}} \end{aligned}$$

^۱Propagating Mode

^۲Evanescence Mode



شکل ۱.۳: پراکندگی بین حالت های انتشاری و محو شونده در یک سیم کوانتومی شبه یک بعدی با انرژی $E = E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. مد های انتشاری با منحنی های رو به بالا و مدهای محو شونده ($ik_n = \kappa_n$) با منحنی های رو به پایین مشخص شده است [۲۴].

با ساده سازی و جایگذاری $ik_{n'} = \kappa_{n'}$ در بخش دوم جواب انتگرال که بر روی مدهای محو شونده است و اعمال آن در رابطه ی (۲۲.۳)، تابع گرین به صورت زیر به دست می آید :

$$G_+(x, x') = \sum_{n'=1}^{n_F^{max}} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \frac{e^{ik_{n'}|x-x'|}}{2ik_{n'}} - \sum_{n'=n_F^{max}+1}^{\infty} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \frac{e^{\kappa_{n'}|x-x'|}}{2\kappa_{n'}} \quad (24.3)$$

در جمع اول رابطه ی (۲۴.۳)، n_F^{max} نماینده ی بالاترین مد انتشاری در انرژی فرمی و همچنین جمع دوم بر روی مدهای محو شونده می باشد.

با جایگذاری تابع گرین در رابطه ی (۱۵.۳) معادله ای انتگرالی به دست می آید که متناسب است با پراکندگی الکترون هایی که در زیر نوار n هستند به سایر نوارها که معادله آن به صورت زیر است :

$$\Psi^{(+)}(x, y) = \Psi^{(\circ)}(x, y) + \frac{\gamma m}{\hbar^2} \int dx' \int dy' G_+(x, y; x', y') V(x', y') \Psi^{(+)}(x', y') \quad (25.3)$$

تعبیر فیزیکی معادله ی انتگرالی (۲۵.۳) قابل توجه است. تابع موج $\Psi^{(+)}(x)$ دامنه ی احتمال پیدا کردن ذره در x را بیان می کند. دامنه احتمال حضور ذره در x که امکان دارد قبلاً در مکان x' ، (در برهم کنشی که $V(x')$ نمایانگر آن می باشد) شرکت داشته باشد، برابر است با جمع روی حاصلضرب دامنه برهمکنش ذره در هر x' ، در دامنه احتمال انتشار از آن x' به x . بنابراین احتمال انتشار یک ذره از $(x', y') \rightarrow (x, y)$ بعد از برهمکنش در (x', y') را می توان به عنوان تفسیری از تابع گرین بیان کرد [۲۴].

۱.۲.۳ پراکندگی از پتانسیل دلتای دیراک

در این بخش مساله پراکندگی الکترون تحت تاثیر پتانسیل دلتای دیراک در یک نانوسیم بررسی می شود. با حل معادله ی انتگرالی (۲۵.۳) تابع موج کل به دست می آید. سپس از طریق تابع موج کل دامنه های عبور^۱ و بازتاب^۲ در هر یک از مدها به دست آورده و در آخر ضرایب عبور^۳ و بازتاب^۴ تعیین می شوند.

سیستم مورد نظر یک سیم کوانتومی بسیار بلند است که در راستای عرضی y الکترون ها تحت پتانسیل محدود کننده v_c (معادله (۳.۳)) محبوس بوده و در برابر حرکت آن ها راستای x محدودیتی وجود ندارد و آزادانه در حرکت هستند. مقادیر انرژی در کف زیرنوارهای دستگاه از

$$E_n = (n + \frac{1}{4})\hbar\omega_0 \quad (26.3)$$

به دست می آیند.

یک انتخاب سراسر برای پتانسیل پراکندگی، تابع پتانسیل دلتای دیراک در دو بعد به قرار زیر است:

$$V(x, y) = \gamma\delta(x)\delta(y - y_i) \quad (27.3)$$

با جایگذاری تابع پتانسیل دلتای دیراک در معادله ی انتگرالی (۲۵.۳) تابع موج کل به شکل زیر خواهد شد:

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

با جایگذاری مقادیر $x = \circ$ و $y = y_i$ در رابطه ی (۲۸.۳)، $\Psi^{(+)}(\circ, y_i)$ مشخص می شود.

$$\Psi^{(+)}(\circ, y_i) = \Psi^{(\circ)}(\circ, y_i) + \frac{\Upsilon m\gamma}{\hbar^2} G_+(\circ, y_i; \circ, y_i) \Psi^{(+)}(\circ, y_i) \quad (29.3)$$

$$\Psi^{(\circ)}(\circ, y_i) = [1 - \frac{\Upsilon m\gamma}{\hbar^2} G_+(\circ, y_i; \circ, y_i)] \Psi^{(+)}(\circ, y_i) \quad (30.3)$$

اگر عبارت داخل کروشه با D نمایش داده شود:

$$\Psi^{(\circ)}(\circ, y_i) = D\Psi^{(+)}(\circ, y_i) \quad (31.3)$$

¹Transmission Amplitudes

²Reflection Amplitudes

³Transmission Coefficient

⁴Reflection Coefficient

$$\Psi^{(+)}(\circ, y_i) = \frac{1}{D} \Psi^{(\circ)}(\circ, y_i) \quad (32.3)$$

با جایگذاری مقدار $\Psi^{(+)}(\circ, y_i)$ در رابطه ی (۲۸.۳) به دست می آید :

$$\Psi^{(+)}(x, y) = \Psi^{(\circ)}(x, y) + \frac{\Upsilon m \gamma}{\hbar^2 D} G_+(x, y; \circ, y_i) \Psi^{(\circ)}(\circ, y_i) \quad (33.3)$$

که در آن D بدین صورت به دست می آید :

$$\begin{aligned} D &= 1 - \frac{\Upsilon m \gamma}{\hbar^2} G_+(\circ, y_i; \circ, y_i) \\ &= 1 - \frac{\Upsilon m \gamma}{\hbar^2} \left[\sum_{n'=1}^{n_F^{max}} \phi_n(y_i) \phi_{n'}(y_i) \frac{1}{\Upsilon i k_{n'}} - \sum_{n'=n_F^{max}+1}^{\infty} \phi_n(y_i) \phi_{n'}(y_i) \frac{1}{\Upsilon \kappa_{n'}} \right] \end{aligned} \quad (34.3)$$

در نهایت

$$D = 1 - \sum_{n'=1}^{n_F^{max}} \frac{s_{n'n'}}{\Upsilon i k_{n'}} + \sum_{n'=n_F^{max}+1}^{n_c} \frac{s_{n'n'}}{\Upsilon \kappa_{n'}} \quad (35.3)$$

که در آن از

$$s_{nn'} = \frac{\Upsilon m \gamma}{\hbar^2} \phi_n(y_i) \phi_{n'}(y_i) \quad (36.3)$$

استفاده شده و همچنین n_c در جمع دوم نمایانگر بالاترین مد محو شونده به حساب آمده در محاسبات است.

در نهایت با جایگذاری تابع گرین [رابطه ی (۲۴.۳)] در رابطه ی (۳۳.۳) می توان تابع موج کل را جوری نوشت که دامنه های پراکندگی در هر مد به دست بیاید.

$$\begin{aligned} \Psi_p^{(+)}(x, y) &= \frac{1}{\sqrt{\Upsilon \pi}} e^{ik_n x} \phi_n(y) + \sum_{n'=1}^{n_F^{max}} e^{ik_{n'} |x|} \phi_{n'}(y) \frac{-i}{\Upsilon k_{n'} D} s_{nn'} \\ &+ \sum_{n'=n_F^{max}+1}^{n_c} e^{-\kappa_{n'} |x|} \phi_{n'}(y) \frac{-1}{\Upsilon \kappa_{n'} D} s_{nn'} \end{aligned} \quad (37.3)$$

در رابطه ی (۳۷.۳) جمع اول بر روی مدهای انتشاری و جمع دوم بر روی مدهای محوشونده است. همچنین n بیانگر حالت فرودی و n' بیانگر حالت پس از پراکندگی است. با توجه به رابطه ی (۳۷.۳) دامنه ی گذار و بازتاب الکترون ها تحت تاثیر پتانسیل دلتای دیراک از مد فرودی (n) به مد پراکندگی (n') بدین صورت خواهد بود :

$$t_{nn'}(E) = \delta_{nn'} - \frac{i}{\Upsilon k_{n'} D} s_{nn'} \quad (38.3)$$

$$r_{nn'}(E) = \frac{-i}{\sqrt{k_{n'}}D} s_{nn'} \quad (۳۹.۳)$$

اگر n' مد محوشونده باشد، در روابط (۳۸.۳) و (۳۹.۳) به جای $k_{n'}$ ، $i\kappa_{n'}$ را جایگذاری می کنیم. ($k_{n'} = i\kappa_{n'}$)

دامنه ی عبور داخل زیر نوار ($t_{nn}(E)$) نشان دهنده ی ذراتی است که تحت تاثیر پراکننده قرار نگرفتند. و دامنه ی عبور بین زیرنوارها ($t_{nn'}(E)$) نشان دهنده ی ذراتی است که تحت تاثیر پراکننده از مد n به مد n' عبور می کنند.

دامنه عبور جریان، احتمال این که الکترونی که در مد n فرود آمده به مد n' انتشار پیدا کند را نشان می دهد که بدین صورت است :

$$\tilde{t}_{nn'} = \sqrt{\frac{k_{n'}}{k_n}} t_{nn'} \quad (۴۰.۳)$$

همچنین ضرایب عبور جریان عبارتند از :

$$T_{nn'} = \frac{k_{n'}}{k_n} t_{nn'} t_{nn'}^* \quad (۴۱.۳)$$

عبارت بالا احتمال این که الکترونی که در یک سو در حال انتشار در مد n بوده است پس از پراکندگی در سوی دیگر در مد n' مشاهده شود را به دست می دهد. همچنین ضریب عبور کل متوسط و رسانایی دستگاه عبارتند از :

$$\bar{T}(E) = \sum_{n,n'} \frac{k_{n'}}{k_n} t_{nn'} t_{nn'}^* \quad (۴۲.۳)$$

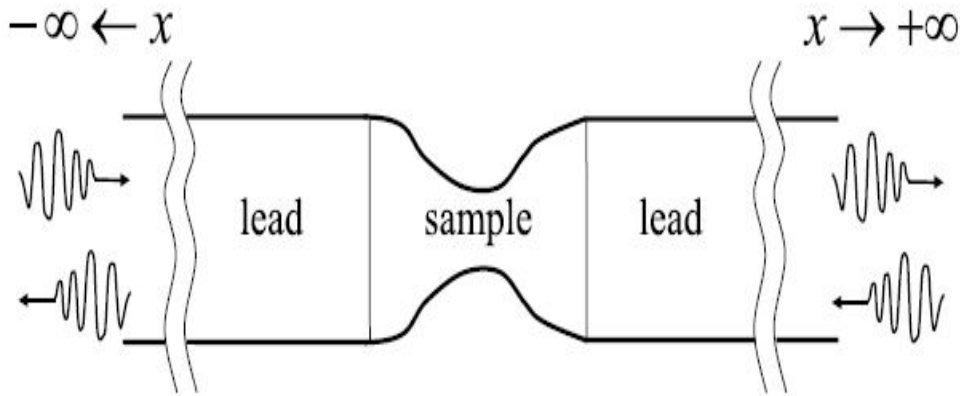
$$G = \frac{e^2}{\pi \hbar} \sum_{n,n'} \frac{k_{n'}}{k_n} t_{nn'} t_{nn'}^* \quad (۴۳.۳)$$

۳.۳ تعیین ضرایب ترموالکتریک از طریق رهیافت لاندائور- بوتیکر

مطابق با رهیافت لاندائور بوتیکر، در دستگاه های رسانشی مزوسکوپی،^۱ پدیده های تراپردی را می توان با کمک مساله ی پراکندگی کوانتوم مکانیکی توصیف کرد. کمیت های تراپردی از قبیل رسانایی الکتریکی و رسانایی گرمایی را می توان از طریق این رهیافت استخراج کرد. شکل (۲.۳)، نمونه ای مزوسکوپی که از دو طرف به دو منبع الکترونی ماکروسکوپی متصل شده را نشان می دهد. نمونه ی مزوسکوپی به عنوان اختلالی فرض شده که باعث پراکندگی الکترون ها می شود [۲۶].

^۱Mesoscopic

Landauer approach



شکل ۲.۳: طرح واره ای از سیستم دو ترمیناله در رهیافت لاندائور [۲۵].

$f_L(E)$ تابع توزیع الکترون ها در منبع الکترونی سمت چپ و $f_R(E)$ تابع توزیع الکترون ها در منبع الکترونی سمت راست دستگاه می باشد که به صورت زیر تعریف می شوند :

$$f_L(E) = \frac{1}{e^{\frac{(E-\mu_L)}{k_B T}} + 1}, \quad f_R(E) = \frac{1}{e^{\frac{(E-\mu_R)}{k_B T}} + 1} \quad (1.3)$$

که μ_L و μ_R به ترتیب پتانسیل شیمیایی در منبع^۳ الکترونی سمت چپ و راست می باشند. در رهیافت لاندائور جریان کل بار که بین دو منبع سمت چپ و راست، از چپ به راست از دستگاه عبور می کند عبارت است از :

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \bar{T}(E) [f_L(E) - f_R(E)] \quad (2.3)$$

حال برای به دست آوردن رسانندگی الکتریکی به طریق زیر عمل می شود :
در حد بایاس^۴ بسیار کوچک $\mu_L - \mu_R \rightarrow 0$ ، با استفاده از بسط تیلور برای تابع توزیع الکترونی داریم :

$$f_L(E) = f_R(E) - \left. \frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \right|_{\mu_R} (\mu_L - \mu_R) + \mathcal{O}[(\mu_L - \mu_R)^2] \quad (3.3)$$

با جایگذاری این رابطه در معادله ی (۲.۳) تا مرتبه ی اول داریم :

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \bar{T}(E) \left(- \left. \frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \right|_{\mu_R} \right) (\mu_L - \mu_R) \quad (4.3)$$

³Reservoir

⁴Bias

با معرفی اختلاف پتانسیل $V = \frac{(\mu_L - \mu_R)}{e}$ رابطه ی رسانایی الکتریکی به دست می آید :

$$G = \frac{I_{\Delta\mu}}{V} = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \bar{T}(E) \left(- \frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \Big|_{\mu_R} \right) \quad (5.3)$$

اکنون با فرض اختلاف دمای ناچیز بین دو منبع ، جریان حاصل از این اختلاف دما با استفاده از رابطه ی (۲.۳) به طریق زیر به دست می آید :

با این فرض برای تابع توزیع الکترونی منبع چپ با دمای T_L و منبع راست با دمای T_R و پتانسیل شیمیایی μ داریم :

$$f_L(E) = \frac{1}{e^{\beta_L(E-\mu)} + 1} \quad , \quad \beta_L = \frac{1}{k_B T_L} \quad (6.3)$$

$$f_R(E) = \frac{1}{e^{\beta_R(E-\mu)} + 1} \quad , \quad \beta_R = \frac{1}{k_B T_R} \quad (7.3)$$

با استفاده از بسط تیلور داریم :

$$f_L(E) = f_R(E) - \frac{\partial f_R(E)}{\partial T} \Big|_{T_R} (T_L - T_R) + \mathcal{O}[(T_L - T_R)^2] \quad (8.3)$$

با جایگذاری در رابطه ی (۲.۳) داریم :

$$I_{\Delta T} = \frac{2e}{h} (T_L - T_R) \int_{-\infty}^{+\infty} dE \bar{T}(E) \left(- \frac{\partial f_R(E)}{\partial T} \Big|_{T_R} \right) \quad (9.3)$$

با باز کردن جمله ی $\frac{\partial f_R(E)}{\partial T}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_R(E)}{\partial T} &= \frac{\partial f_R(E)}{\partial \beta_R} \frac{\partial \beta_R}{\partial T} \\ &= \frac{-(E - \mu) e^{\beta_R(E-\mu)}}{(e^{\beta_R(E-\mu)} + 1)^2} \times \frac{-1}{k_B T^2} \\ &= k_B T_R \frac{\partial f_R(E)}{\partial E} (E - \mu) \times \frac{1}{k_B T_R^2} \end{aligned}$$

رابطه ی (۹.۳) به صورت زیر به دست می آید :

$$I_{\Delta T} = \frac{2e}{h T_R} (T_L - T_R) \int_{-\infty}^{+\infty} dE \bar{T}(E) \left(- \frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \right) (E - \mu) \quad (10.3)$$

در نهایت حاصل جریان بر واحد اختلاف دمای بین دو منبع $(\frac{I_{\Delta T}}{\Delta T})$ به رسانایی الکتریکی (σ) ، ضریب سبک را نتیجه خواهد داد :

$$\alpha = \frac{I_{\Delta T} / \Delta T}{G} = \frac{k_B}{e} \frac{\int dE \left(\frac{E - \mu}{k_B T} \right) \left(- \frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \right) \bar{T}(E)}{\int dE \left(- \frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \right) \bar{T}(E)} \quad (11.3)$$

جریان الکتریکی کل را می توان به صورت زیر نوشت :

$$I = \left(\frac{I_{\Delta T}}{\Delta T} \right) \Delta T + \left(\frac{I_{\Delta \mu}}{\Delta \mu / e} \right) \Delta \mu / e \quad (۱۲.۳)$$

در رهیافت لاندائور جریان انرژی بین دو منبع با انرژی پتانسیل μ به صورت زیر تعیین می شود :

$$I = \frac{2}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \bar{T}(E) (E - \mu) [f_L(E) - f_R(E)] \quad (۱۳.۳)$$

در حد بایاس بسیار کوچک $\mu_L - \mu_R \rightarrow 0$ به طریق مشابه جریان الکتریکی، جریان انرژی در واحد بایاس به صورت زیر به دست می آید :

$$A = \frac{I_{E, \Delta \mu}}{V} = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \bar{T}(E) \left(- \frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \right)_{\mu_R} (E - \mu) \quad (۱۴.۳)$$

جریان انرژی در واحد اختلاف دما نیز بدین صورت خواهد شد :

$$B = \frac{I_{E, \Delta T}}{\Delta T} = \frac{2}{h T_R} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \bar{T}(E) \left(- \frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \right) (E - \mu)^2 \quad (۱۵.۳)$$

در نتیجه جریان انرژی کل عبارت است از :

$$I_E = \left(\frac{I_{E, \Delta T}}{\Delta T} \right) \Delta T + \left(\frac{I_{E, \Delta \mu}}{\Delta \mu / e} \right) \Delta \mu / e = B \Delta T + A V \quad (۱۶.۳)$$

با فرض اینکه جریان الکتریکی کل برابر صفر باشد $I = 0$ ، اختلاف دما به صورت $V = -\alpha \Delta T$ خواهد بود. در نتیجه شار گرما برابر با $I_E = (B - \alpha A) \Delta T$ خواهد بود. در نهایت رسانایی گرمایی الکترونی در جریان الکتریکی صفر ، برابر $k_e = I_E / \Delta T = B - \alpha A$ خواهد بود [۴، ۲۵].

رسانایی گرمایی الکترونی بدین صورت به دست می آید:

$$k_e = \left(\frac{I_{E, \Delta T}}{\Delta T} \right) - \frac{(I_{\Delta T} / \Delta T)}{(I_{\Delta \mu} / V)} \left(\frac{I_{E, \Delta \mu}}{V} \right) \quad (۱۷.۳)$$

$$k_e = \frac{2 T k_B}{h} \left\{ \int \left(\frac{E - \mu}{k_B T} \right)^2 \bar{T}(E) \left(- \frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) dE - \frac{\left[\int \left(\frac{E - \mu}{k_B T} \right) \bar{T}(E) \left(- \frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) dE \right]^2}{\int \bar{T}(E) \left(- \frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) dE} \right\} \quad (۱۸.۳)$$

رسانایی گرمایی فونونی را نیز می توان به روشی مشابه به دست آورد [۲۷، ۲۸، ۲۹]:

$$k_l = \frac{T_l k_B^2}{h} \int T_{ph}(\hbar\omega') M_{ph}(\hbar\omega') \left[\left(\frac{\hbar\omega'}{k_B T_l} \right)^2 \left(-\frac{\partial n_o}{\partial(\hbar\omega')} \right) \right] d(\hbar\omega') \quad (19.3)$$

که در آن

$$n_o(\hbar\omega') = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega'}{k_B T_l}} - 1} \quad (20.3)$$

تابع توزیع تعادلی بوز- انشتین می باشد.

همچنین $T_{ph}(\hbar\omega')$ معرف ضریب عبور فونونی است که به صورت زیر تعریف می شود :

$$T_{ph}(\hbar\omega') = \frac{\lambda(\hbar\omega')}{l + \lambda(\hbar\omega')} \quad (21.3)$$

$\lambda(\hbar\omega')$ معرف مسافت آزاد میانگین فونونی می باشد.

$$\lambda(\hbar\omega') = \lambda_o \left(\frac{\hbar\omega'}{k_B T_l} \right)^r, \quad (r = 0 \text{ for acoustic phonon scattering}) \quad (22.3)$$

$$\lambda_o \sim 10 - 20 \text{ nm}$$

$M_{ph}(\hbar\omega')$ معرف تعداد مدهای فونونی می باشد که به صورت زیر است :

$$M_{ph}(\hbar\omega') = \frac{3(\hbar\omega')^2}{4\pi(\hbar c_s)^3} \quad (23.3)$$

c_s سرعت موج صوتی می باشد.

برای رسانایی فونونی بالستیک ضریب عبور فونونی $T_{ph}(\hbar\omega') = 1$ می باشد . با در نظر گرفتن معادلات (۲۰.۳) (۲۱.۳) (۲۳.۳) و تغییر متغیر $x = \hbar\omega'/k_B T_L$ و اعمال آن ها در معادله ی (۱۹.۳) داریم :

$$(k_L)_{ballistic} = \frac{3 k_B^4 T_l^3}{8 \pi^2 \hbar^3 c_s^3} \int_0^{+\infty} dx \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} = \frac{\pi^2 k_B^4 T_l^3}{10 \hbar^3 c_s^3} \quad (24.3)$$

برای رسانایی فونونی پخشی داریم :

$$(k_L)_{diffusive} = \frac{\lambda_o}{l} (k_L)_{ballistic} \quad (25.3)$$

برای ترابردهای بالستیک و پخشی فونون، رسانایی گرمایی مورد انتظار برای M_{ph} فونون به ترتیب عبارت است از :

$$(k_l)_{ballistic} = \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3h} M_{ph} \quad (26.3)$$

$$(k_l)_{diffusive} = \frac{\lambda_0}{l} \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3h} M_{ph} \quad (27.3)$$

پیشینه مقدار ممکن رسانایی گرمایی بالستیک هر مد فونون عبارت است از :

$$g_0 = \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3h} \quad (28.3)$$

همچنین رسانایی گرمایی پخشی هر مد فونون به صورت زیر تعریف می شود :

$$g_0 = \frac{\lambda_0}{l} \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3h} \quad (29.3)$$

در نهایت با قرار دادن روابط (۵.۳) (۱۱.۳) (۱۸.۳) (۲۹.۳) در رابطه ی (۵.۱)، معیار شایستگی ترموالکتریکی سیستم به دست می آید.

۱.۳.۳ جمع بندی

در این فصل، ابتدا با استفاده از معادله ی لیپمن – شوینگر پراکندگی الکترونی در یک سیم کوانتومی مورد مطالعه قرار داده شده که در آن الکترون ها در راستای x آزادانه حرکت می کردند و در راستای y دارای محدودیت بودند . در ادامه تابع گرین دستگاه محاسبه شد . سپس با در نظر گرفتن پتانسیل دلتای دیراک به عنوان پراکننده تابع موج الکترون های دستگاه محاسبه شد .

با استفاده از تابع موج حاصل ضرایب گذار محاسبه شده و در نهایت با استفاده از رهیافت لاندائور ضرایب ترموالکتریکی دستگاه برای محاسبه ی معیار شایستگی به دست آمد .

فصل ۴

اثر ترموالکتریک در یک دستگاه شبه یک بعدی در حضور میدان مغناطیسی کوانتیزه کننده

۱.۴ مقدمه

در این فصل با استفاده از معادله لیپمن – شوینگر و رهیافت لاندائور به بررسی دستگاه مورد نظر پرداخته می شود.

سیستم مورد مطالعه گاز الکترونی دو بعدی در ساختار نامتجانس^۱ GaAs/AlGaAs است. طول دستگاه مورد مطالعه ۱۲۰ نانومتر در نظر گرفته شده است. این گاز الکترون دو بعدی تحت تاثیر میدان مغناطیسی کوانتیزه کننده قوی قرار گرفته و به وسیله ی پتانسیل الکتریکی $\frac{1}{4}m^*\omega_c^2 y^2$ ، یک محدودیت عرضی برایش ایجاد شده است. با استفاده از معادله ی لیپمن – شوینگر و رهیافت لاندائور ضرایب عبور دستگاه به دست آمده و در نهایت پارامترهای ترموالکتریکی سیستم مورد مطالعه به دست خواهند آمد.

¹Heterostructure

۲.۴ معادله شرودینگر

برای شروع کار از معادله شرودینگر برای به دست آوردن ویژه حالت ها و ویژه مقادیر سیستم مورد مطالعه استفاده می شود.

هامیلتونی حاکم بر تحول دستگاه بدون در نظر گرفتن پراکننده به شکل زیر است :

$$H_0 = \frac{1}{2m^*} \left(P - \frac{e}{c} A \right)^2 + V_c(y) \quad (1.4)$$

که در آن $P = P_x + P_y$ و $V_c(y) = \frac{1}{2} m^* \omega_c^2 y^2$ است . میدان مغناطیسی در جهت Z $(B = B\hat{k})$ به وسیله ی پیمانه ی لاندائو از طریق پتانسیل برداری $A = (-By, 0, 0)$ بیان می شود. همچنین از تاثیر برهمکنش اسپین با میدان مغناطیسی صرف نظر شده است . برای تعیین ویژه مقادیر و ویژه حالت های دستگاه ابتدا هامیلتونی آن بسط داده می شود :

$$H_0 = \frac{1}{2m^*} P_y^2 + \frac{1}{2m^*} \left(P_x + \frac{eBy}{c} \right)^2 + \frac{1}{2} m^* \omega_c^2 y^2 \quad (2.4)$$

با توجه به رابطه ی (۲.۴) عملگر تکانه در راستای x با هامیلتونی جا به جا پذیر است $[H, P_x] = 0$ و عملگر تکانه در راستای y جابه جا پذیر نبوده $[H, P_y] \neq 0$ ، پس می توان ویژه حالات هامیلتونی دستگاه را به صورت زیر تعریف کرد :

$$\Psi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_x x} \phi(y) \quad (3.4)$$

در ادامه برای حل هامیلتونی دستگاه با استفاده از معادله شرودینگر داریم :

$$H_0 \Psi(x, y) = E \Psi(x, y) \quad (4.4)$$

$$\left\{ \frac{1}{2m^*} P_y^2 + \frac{1}{2m^*} \left(\hbar k_x + \frac{eBy}{c} \right)^2 + \frac{1}{2} m^* \omega_c^2 y^2 \right\} \Psi(x, y) = E \Psi(x, y) \quad (5.4)$$

با توجه به رابطه ی (۳.۴) :

$$\left\{ \frac{1}{2m^*} P_y^2 + \frac{1}{2m^*} \left(\hbar k_x + \frac{eBy}{c} \right)^2 + \frac{1}{2} m^* \omega_c^2 y^2 \right\} \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_x x} \phi(y) = E \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_x x} \phi(y) \quad (6.4)$$

$$\left\{ \frac{1}{2m^*} P_y^2 + \frac{1}{2m^*} \left(\hbar k_x + \frac{eBy}{c} \right)^2 + \frac{1}{2} m^* \omega_c^2 y^2 \right\} \phi(y) = E \phi(y) \quad (7.4)$$

$$\left\{ \frac{1}{2m^*} P_y^2 + \frac{m^*}{2} \left(\frac{eB}{m^*c} \right)^2 \left(\frac{\hbar k_x c}{eB} + y \right)^2 + \frac{1}{2} m^* \omega_c^2 y^2 \right\} \phi(y) = E \phi(y) \quad (۸.۴)$$

$$\left\{ \frac{1}{2m^*} P_y^2 + \frac{1}{2} m^* \omega_c^2 (y - y_0)^2 + \frac{1}{2} m^* \omega_c^2 y^2 \right\} \phi(y) = E \phi(y) \quad (۹.۴)$$

$$y_0 = \frac{c \hbar k_x}{eB} = k_x l^2 \quad l = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}} \quad \omega_c = \frac{eB}{m^*c}$$

y_0 نقطه نوسانی و ω_c بسامد سیکلوترونی و l معرف طول مغناطیسی دستگاه هستند. اکنون جمله دوم و سوم هامیلتونی را با هم ترکیب می کنیم.

$$\left\{ \frac{1}{2m^*} P_y^2 + \frac{1}{2} m^* (\omega_c^2 + \omega_0^2) \left[y^2 - 2 \frac{\omega_c^2 y_0}{\omega_c^2 + \omega_0^2} y + \frac{\omega_c^4 y_0^2}{(\omega_c^2 + \omega_0^2)^2} \right] \right\} \phi(y) = E \phi(y) \quad (۱۰.۴)$$

به جمله ی داخل کروشه ، عبارت $\frac{\omega_c^4 y_0^2}{(\omega_c^2 + \omega_0^2)^2}$ را اضافه و کم می کنیم .

$$\left\{ \frac{1}{2m^*} P_y^2 + \frac{1}{2} m^* (\omega_c^2 + \omega_0^2) \left(y - \frac{\omega_c^2 y_0}{\omega_c^2 + \omega_0^2} \right)^2 + \frac{\omega_c^2 y_0^2}{\omega_c^2 + \omega_0^2} - \frac{\omega_c^4 y_0^2}{(\omega_c^2 + \omega_0^2)^2} \right\} \phi(y) = E \phi(y) \quad (۱۱.۴)$$

$$\left\{ \frac{1}{2m^*} P_y^2 + \frac{1}{2} m^* \omega^2 (y - y'_0)^2 + \frac{1}{2} m^* \frac{\omega_0^2 \omega_c^2 y_0^2}{\omega^2} \right\} \phi(y) = E \phi(y) \quad (۱۲.۴)$$

که ω بسامد حرکت ترکیبی و y'_0 معرف مرکز نوسان دستگاه است.

$$y'_0 = \frac{\omega_c^2 y_0}{\omega_c^2 + \omega_0^2} \quad , \quad \omega = \sqrt{\omega_c^2 + \omega_0^2}$$

$$\left\{ \frac{1}{2m^*} P_y^2 + \frac{1}{2} m^* \omega^2 (y - y'_0)^2 \right\} \phi(y) = E' \phi(y) \quad (۱۳.۴)$$

$$E' = E - \left(\frac{\omega_0^2}{\omega^2} \right) \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (۱۴.۴)$$

رابطه ی (۱۳.۴) شبیه به معادله ی نوسانگر هماهنگی است که حول y'_0 نوسان می کند . ویژه حالات سیستم به صورت زیر است :

$$\phi_n(y - y'_0) = \xi_n(y - y'_0) \quad (15.4)$$

که مطابق رابطه ی (۷.۳) ، $\xi_n(y - y'_0)$ ها متشکل از توابع هرمیت هستند .

$$\xi_n(y - y'_0) = \frac{1}{\sqrt{\gamma^n n! y'_0 \sqrt{\pi}}} H_n(y - y'_0) \quad (16.4)$$

و ویژه مقادیر رابطه ی (۱۳.۴) هماهنگی بدین صورت است :

$$E'_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (17.4)$$

با توجه به رابطه ی (۳.۴) ویژه حالت های کل دستگاه مورد مطالعه برابر هستند با :

$$\Psi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_x x} \phi_n(y - y'_0) \quad (18.4)$$

و با استفاده از رابطه ی (۱۴.۴) ویژه مقادیر انرژی دستگاه مورد مطالعه به صورت زیر به دست می آیند :

$$E_{n,k} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega + \left(\frac{\omega'_0}{\omega^2}\right) \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (19.4)$$

۱.۲.۴ معادله لیپمن - شوینگر و تابع گرین دستگاه

برای مطالعه ی پراکندگی حامل های دستگاه باید از معادله ی لیپمن شوینگر استفاده کرد که روش استفاده از آن در فصل ۳ توضیح داده شد.

حال از این روش برای دستگاه مورد مطالعه ی خود استفاده می کنیم. هامیلتونی دستگاهی که پراکنده در آن حضور دارد طبق رابطه ی (۱.۳) تعریف می شود.

$$H = \left\{ \frac{1}{2m^*} P^2 + \frac{1}{2} m^* \omega'^2 (y - y'_0)^2 \right\} + V \quad (20.4)$$

محاسبات را از تابع گرین [رابطه ی (۱۸.۳)] شروع می کنیم :

$$(21.4)$$

$$G_+(x, x') = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{n', n''} \int dp'_x \int dp''_x \langle x | p'_x, n' \rangle \langle p'_x, n' | \frac{1}{E - \left[\left(\frac{\omega'_0}{\omega^2} \right) \frac{p_x^2}{2m} + E'_{n'} \right] + i\epsilon} | p''_x, n'' \rangle \langle p''_x, n'' | x' \rangle$$

از روابط زیر

$$\langle x|p_x, n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ip_x x}{\hbar}} \phi_n(y - y_0) \quad (22.4)$$

$$\begin{aligned} \langle p'_x, n'|p''_x, n''\rangle &= \int dx \langle p'_x, n'|x\rangle \langle x|p''_x, n''\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{\frac{i(p'_x - p''_x)x}{\hbar}} \int dy \phi_{n'}^*(y - y_0) \phi_{n''}(y - y_0) \\ &= \delta(p'_x - p''_x) \delta_{n'n''} \end{aligned} \quad (23.4)$$

برای حل معادله ی انتگرالی (۲۱.۴) استفاده می شود :

$$G_+(x, x') = \frac{\hbar}{2m} \sum_{n'} \phi_{n'}(y - y_0) \phi_{n'}(y' - y_0) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp'_x}{2\pi\hbar} \frac{e^{\frac{ip'_x(x-x')}{\hbar}}}{E - \left[\left(\frac{\omega_0}{\omega} \right) \frac{p'^2}{2m} + E_{n'} \right] + i\epsilon} \quad (24.4)$$

حال با تغییر متغیر $\frac{\hbar^2 k_{n'}^2}{2m} = E - E_{n'} = \left(\frac{\omega_0}{\omega} \right) \frac{p'^2}{2m}$ و $p'_x = \hbar q$ در انتگرال رابطه ی (۲۴.۴)، می توان آن را به شکل زیر نوشت :

$$G_+(x, x') = \sum_{n'} \phi_{n'}(y - y_0) \phi_{n'}(y' - y_0) \left(\frac{-1}{2\pi} \right) \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{e^{iq(x-x')}}{q^2 - k_{n'}^2 - i\epsilon} \quad (25.4)$$

برای محاسبه ی انتگرال از روش حساب مانده ها استفاده می کنیم.
با استفاده از ریشه های مخرج

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

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

داریم :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{iq(x-x')}}{q^2 - k_{n'}^2 - i\epsilon} &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{iq(x-x')}}{(q + k_{n'} + i\epsilon)(q - k_{n'} - i\epsilon)} \\ &= \frac{1}{2\pi} (2\pi i) \frac{e^{ik_{n'}(x-x')}}{2k_{n'}} + \frac{1}{2\pi} (-2\pi i) \frac{e^{ik_{n'}(x-x')}}{2k_{n'}} \end{aligned} \quad (26.4)$$

با اعمال جواب انتگرال در رابطه ی (۲۵.۴) برای تابع گرین داریم :

$$G_+(x, x') = \sum_{n'=1}^{n_F^{max}} \phi_{n'}(y - y'_o) \phi_{n'}(y' - y'_o) \left(\frac{\omega}{\omega_o} \right)^2 \frac{e^{ik_{n'}|x-x'|}}{2ik_{n'}} - \sum_{n'=n_F^{max}+1}^{\infty} \phi_{n'}(y - y'_o) \phi_{n'}(y' - y'_o) \left(\frac{\omega}{\omega_o} \right)^2 \frac{e^{\kappa_{n'}|x-x'|}}{2\kappa_{n'}} \quad (27.4)$$

در بخش دوم تابع گرین از $ik_{n'} = \kappa_{n'}$ استفاده شده است که جمع بر روی مدهای محوشونده است. همچنین جمله ی اول نشان دهنده ی مدهای انتشاری است که در آن n_F^{max} نماینده ی بالاترین مد انتشاری در انرژی فرمی است.

۲.۲.۴ پتانسیل پراکندگی دلتای دیراک

حال برای بررسی پتانسیل پراکندگی معرف یک پراکننده را وارد محاسبات می کنیم. در اینجا از پتانسیل دلتای دیراک به عنوان پتانسیل پراکندگی استفاده شده است که در فصل ۳ بیان شد و به صورت زیر است:

$$V(x, y) = \gamma \delta(x) \delta(y - y_i) \quad (28.4)$$

ادامه ی محاسبات مانند فصل ۳ پیش می رود تا به رابطه ی (۳۳.۳) برسیم.

$$\Psi^{(+)}(x, y) = \Psi^{(o)}(x, y) + \frac{\gamma m \gamma}{\hbar^2 D} G_+(x, y; o, y_i) \Psi^{(o)}(o, y_i) \quad (29.4)$$

D با استفاده از رابطه ی (۲۷.۴) به صورت زیر به دست می آید:

$$D = 1 - \frac{\gamma m \gamma}{\hbar^2} G_+(o, y_i; o, y_i) = 1 - \frac{\gamma m \gamma}{\hbar^2} \left(\frac{\omega}{\omega_o} \right)^2 \left[\sum_{n'=1}^{n_F^{max}} \phi_{n'}(y_i - y'_o) \phi_{n'}(y_i - y'_o) \frac{1}{2ik_{n'}} - \sum_{n'=n_F^{max}+1}^{\infty} \phi_{n'}(y_i - y'_o) \phi_{n'}(y_i - y'_o) \frac{1}{2\kappa_{n'}} \right] \quad (30.4)$$

در آخر D بدین صورت به دست می آید:

$$D = 1 - \left(\frac{\omega}{\omega_o} \right)^2 \sum_{n'=1}^{n_F^{max}} \frac{s_{n'n'}}{2ik_{n'}} + \left(\frac{\omega}{\omega_o} \right)^2 \sum_{n'=n_F^{max}+1}^{n_c} \frac{s_{n'n'}}{2\kappa_{n'}} \quad (31.4)$$

که $s_{nn'}$ به صورت زیر تعریف شده است:

$$s_{nn'} = \frac{\gamma m \gamma}{\hbar^2} \phi_n(y_i - y'_o) \phi_{n'}(y_i - y'_o) \quad (32.4)$$

برای به دست آوردن تابع موج کل ، تابع گرین [رابطه ی (۲۷.۴)] و رابطه ی (۱۸.۴) را در رابطه ی (۳۳.۳) اعمال می کنیم :

$$\begin{aligned} \Psi_p^{(+)}(x, y) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_n x} \phi_n(y - y'_o) \\ &+ \left\{ \frac{\gamma m \gamma}{\hbar^2 D} \sum_{n'=1}^{n_F^{max}} \phi_{n'}(y - y'_o) \phi_{n'}(y_i - y'_o) \left(\frac{\omega}{\omega_o} \right)^2 \frac{e^{ik_{n'} x}}{2ik_{n'}} \right. \\ &- \left. \sum_{n'=n_F^{max}+1}^{\infty} \phi_{n'}(y - y'_o) \phi_{n'}(y_i - y'_o) \left(\frac{\omega}{\omega_o} \right)^2 \frac{e^{-\kappa_{n'} x}}{2\kappa_{n'}} \right\} \times \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \phi_n(y - y'_o) \right\} \end{aligned} \quad (33.4)$$

در نهایت تابع موج کل می شود :

$$\begin{aligned} \Psi_p^{(+)}(x, y) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_n x} \phi_n(y - y'_o) + \sum_{n'=1}^{n_F^{max}} e^{ik_{n'} |x|} \phi_{n'}(y - y'_o) \left(\frac{\omega}{\omega_o} \right)^2 \frac{-i}{2k_{n'} D} s_{nn'} \\ &+ \sum_{n'=n_F^{max}+1}^{n_c} e^{-\kappa_{n'} |x|} \phi_{n'}(y - y'_o) \left(\frac{\omega}{\omega_o} \right)^2 \frac{-1}{2\kappa_{n'} D} s_{nn'} \end{aligned} \quad (34.4)$$

جمع اول بر روی مدهای انتشاری و جمع دوم بر روی مدهای محوشونده است .
دامنه های عبور و بازتاب الکترون ها تحت تاثیر پتانسیل دلتای دیراک از مد فرودی (n) به مد پراکندگی (n') بدین صورت خواهد بود :

$$t_{nn'}(E) = \delta_{nn'} - \left(\frac{\omega}{\omega_o} \right)^2 \frac{i}{2k_{n'} D} s_{nn'} \quad (35.4)$$

$$r_{nn'}(E) = \left(\frac{\omega}{\omega_o} \right)^2 \frac{-i}{2k_{n'} D} s_{nn'} \quad (36.4)$$

اگر n' مد محوشونده باشد ، به جای k_{n'} ، i\kappa_{n'} را جایگذاری می کنیم .
ضرایب گذار جریان :

$$T_{nn'} = \frac{k_{n'}}{k_n} t_{nn'} t_{nn'}^* \quad (37.4)$$

و همچنین ضرایب گذار متوسط و رسانایی سیستم

$$\bar{T}(E) = \sum_{n,n'} \frac{k_{n'}}{k_n} t_{nn'} t_{nn'}^* \quad (38.4)$$

$$G = \frac{e^2}{\pi \hbar} \sum_{n,n'} \frac{k_{n'}}{k_n} t_{nn'} t_{nn'}^* \quad (39.4)$$

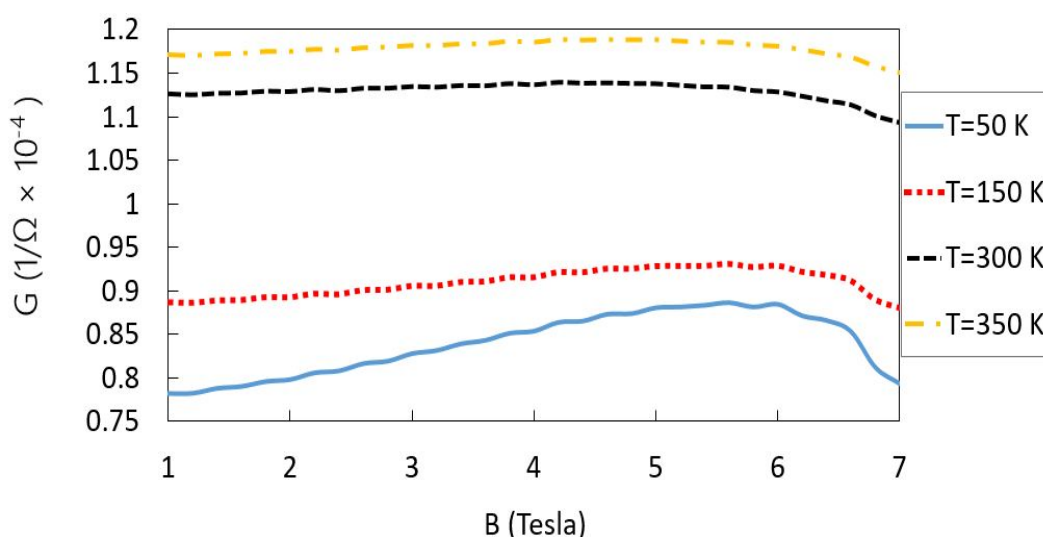
بدین صورت در فصل ۳ تعریف شد.

همچنین با استفاده از رهیافت لاندائور، در رژیم پاسخ خطی، رسانندگی الکتریکی، ضریب سبیک و رسانندگی گرمایی الکترونی و فونونی برای جریان الکتریکی صفر به ترتیب با روابط (۵.۳)، (۱۱.۳)، (۱۸.۳) و (۲۹.۳) به دست می آیند.

۳.۴ نتایج

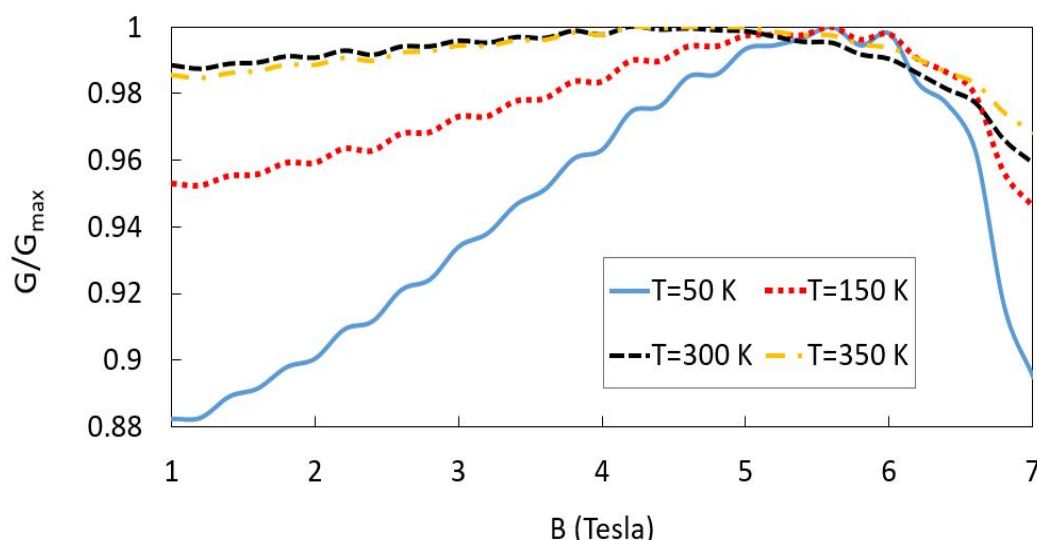
در این بخش نحوه ی تغییرات رسانایی الکتریکی، رسانایی گرمایی، ضریب سبیک و معیار شایستگی را برای یک گاز الکترون دو بعدی در ساختار نامتجانس GaAs/AlGaAs که تحت تاثیر میدان مغناطیسی کوانتیزه کننده قوی قرار گرفته و به وسیله ی یک پتانسیل الکتریکی عرضی محدود شده را مورد بررسی قرار می دهیم.

۱.۳.۴ بررسی نحوه ی تغییرات رسانایی الکتریکی



شکل ۱.۴: اثر تغییرات میدان مغناطیسی بر روی رسانایی الکتریکی در دماهای $T=5^\circ\text{K}$ ، $T=15^\circ\text{K}$ ، $T=30^\circ\text{K}$ و $T=35^\circ\text{K}$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$

در شکل (۱.۴)، نحوه ی تغییرات رسانایی الکتریکی بر حسب تابعی از میدان مغناطیسی در دماهای $T=5^\circ\text{K}$ ، $T=15^\circ\text{K}$ ، $T=30^\circ\text{K}$ و $T=35^\circ\text{K}$ با انرژی فرمی $E_F = E'_F$ رسم شده است.



شکل ۲.۴: نحوه ی تغییرات رسانایی الکتریکی نرمالایز شده بر حسب میدان مغناطیسی در دماهای $E_F = E_F^0$ و انرژی فرمی $T=350^\circ\text{K}$ و $T=300^\circ\text{K}$ ، $T=150^\circ\text{K}$ ، $T=50^\circ\text{K}$

مشاهده می شود که رسانایی الکتریکی در دماهای متفاوت تا محدوده ای از میدان مغناطیسی افزایشی است سپس کاهشی می شود و همچنین با افزایش دما رسانایی الکتریکی نیز افزایش پیدا می کند. برای درک بهتر این تغییرات شکل (۲.۴) که مدل نرمالایز شده ی شکل (۱.۴) است، رسم شده است.

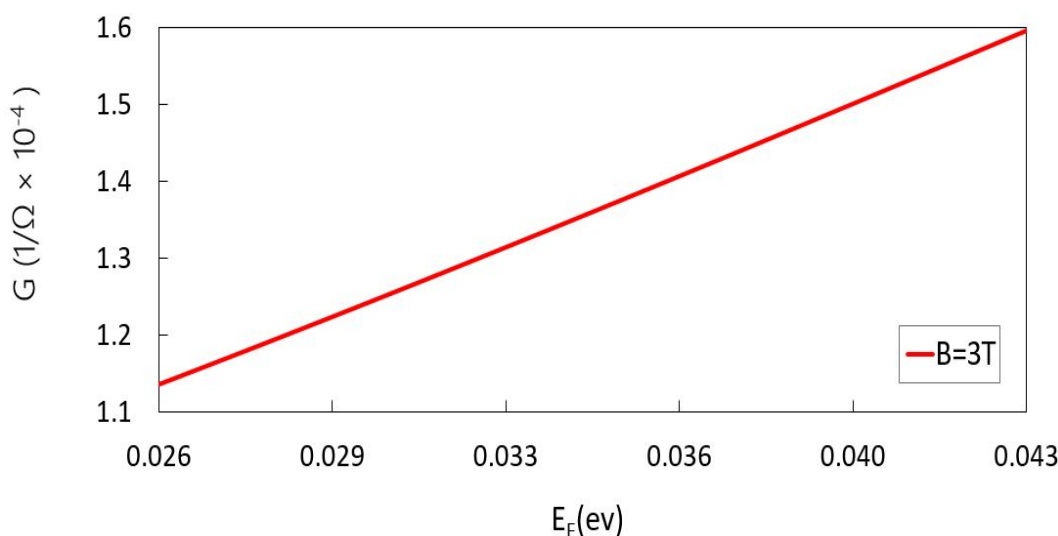
با توجه به رابطه ی رسانایی الکتریکی (۵.۳)، این کمیت به دو عامل شیب تغییرات تابع توزیع فرمی دیراک نسبت به انرژی $(\frac{\partial f(E)}{\partial E})$ و ضریب گذار متوسط $\bar{T}(E)$ مرتبط است. با بررسی شیب تغییرات تابع توزیع فرمی دیراک نسبت به میدان های مغناطیسی متفاوت متوجه شدیم که، تغییرات $(\frac{\partial f(E)}{\partial E})$ ناشی از تغییرات میدان مغناطیسی بسیار ناچیز است.

اما با بررسی ضریب گذار متوسط نسبت به تغییرات میدان مغناطیسی متوجه شدیم که، ضریب گذار متوسط با افزایش میدان مغناطیسی افزایشی است. بنابراین نتیجه می گیریم که رسانایی الکتریکی با افزایش میدان مغناطیسی باید افزایش پیدا کند. این تحلیل تا محدوده ی $B=5\text{T}$ قابل توجیه است. مشاهده می کنیم که از محدوده ی $B=5\text{T}$ رسانایی الکتریکی کاهشی می شود. بر اساس یک مدل کلاسیک، الکترونی که تحت اثر میدان مغناطیسی عمود بر صفحه حرکت خود قرار گرفته باشد حرکتی دورانی دارد:

$$evB = \frac{mv^2}{r}, \quad r = \frac{mv}{eB}$$

با توجه به این رابطه در یک سرعت ثابت مفروض، هرچه میدان مغناطیسی افزایش پیدا کند شعاع دوران الکترون کاهش پیدا می کند و باعث می شود دامنه حرکت الکترون محدود تر شود. در تصویر کوانتومی افزایش میدان مغناطیسی، کاهش شار چگالی احتمال و بنابراین کاهش ترابرد الکترونی را موجب خواهد شد. این فرآیند ارتباط مستقیمی با پتانسیل محدودکننده دارد، یعنی هرچه $\frac{1}{2}m^*\omega_c^2 y^2$ افزایش یابد، محدودیت نیز افزایش پیدا می کند در نتیجه الکترون

ها در شعاع نوسان کوچکتر نیز می توانند گذار انجام دهند .



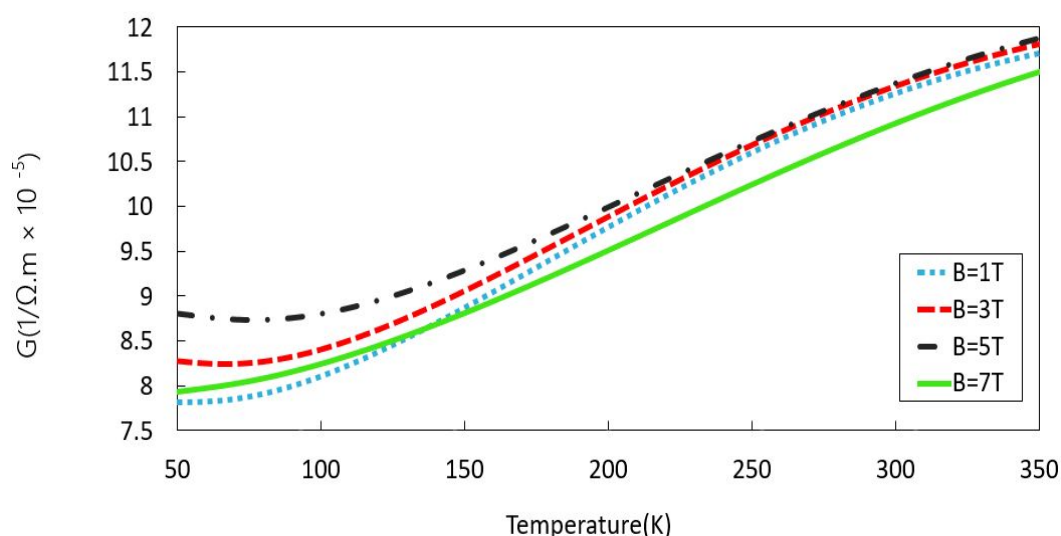
شکل ۳.۴: اثر تغییرات انرژی فرمی بر روی رسانایی الکتریکی در میدان مغناطیسی $B=3T$ در دمای $T=300K$

در شکل (۳.۴) ، تغییرات رسانایی الکتریکی بر حسب تابعی از تغییرات انرژی فرمی در میدان مغناطیسی $B=3T$ و دمای $T=300K$ مورد بررسی قرار گرفته است. مشاهده می شود که با افزایش انرژی فرمی رسانایی الکتریکی به صورت خطی افزایش پیدا می کند.

با افزایش انرژی فرمی، بالاترین مد انتشاری (n_F^{max}) افزایش پیدا می کند و در نتیجه تعداد مدهای محوشونده کاهش می یابد . مدهای انتشاری مسئول ترابرد حامل ها در سیستم می باشند و مدهای محوشونده نقشی در ترابرد حامل ها ندارند. در نتیجه با افزایش مدهای انتشاری ترابرد الکترون ها افزایش پیدا می کند . با افزایش ترابرد الکترون ها رسانایی الکتریکی افزایش پیدا می کند.

در نتیجه با افزایش انرژی فرمی رسانایی الکتریکی به صورت خطی افزایش پیدا می کند. در شکل (۴.۴) ، نحوه ی تغییرات رسانایی الکتریکی بر حسب دما در میدان های مغناطیسی $B=1T$ ، $B=3T$ ، $B=5T$ و $B=7T$ با انرژی فرمی $E_F = E'_F$ مورد مطالعه قرار گرفته است. مشاهده می شود که تا دمای $T=100K$ تغییرات بسیار ناچیز است سپس از این دما به بعد رسانایی الکتریکی با افزایش دما ، افزایش پیدا می کند .

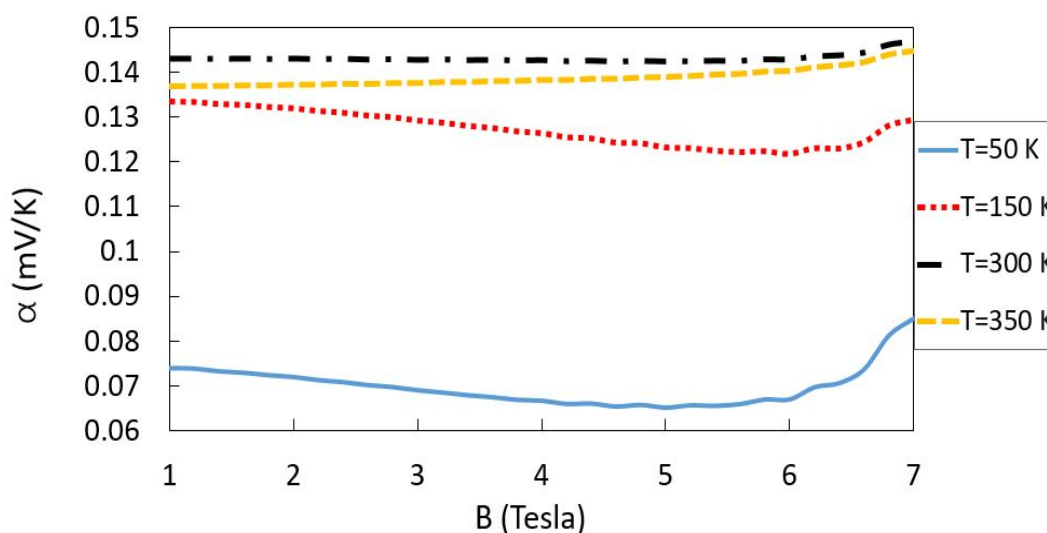
در دماهای پایین، بیشتر الکترون هایی با انرژی های نسبتاً کمتر در جریان الکتریکی مشارکت می نمایند. این الکترون ها مدهای کمی برای عبور و مشارکت در جریان الکتریکی در دسترس دارند. با افزایش دما الکترون های بیشتری از محدوده ی انرژی های بالاتر در گذار و جریان الکتریکی مشارکت می نمایند. این الکترون ها مدهای بیشتری برای ترابرد و مشارکت در جریان الکتریکی در دسترس دارند. همچنین $\bar{T}(E)$ با افزایش انرژی فرمی افزایش پیدا می کند . بنابراین دلیل رفتار مشاهده شده در شکل (۴.۴) جابجایی سهم الکترون های کم انرژی تر با



شکل ۴.۴: اثر تغییرات دمایی بر روی رسانایی الکتریکی در میدان های مغناطیسی $B=1\text{T}$ ، $B=3\text{T}$ ، $B=5\text{T}$ و $B=7\text{T}$ با انرژی فرمی $E_F = E'_F$

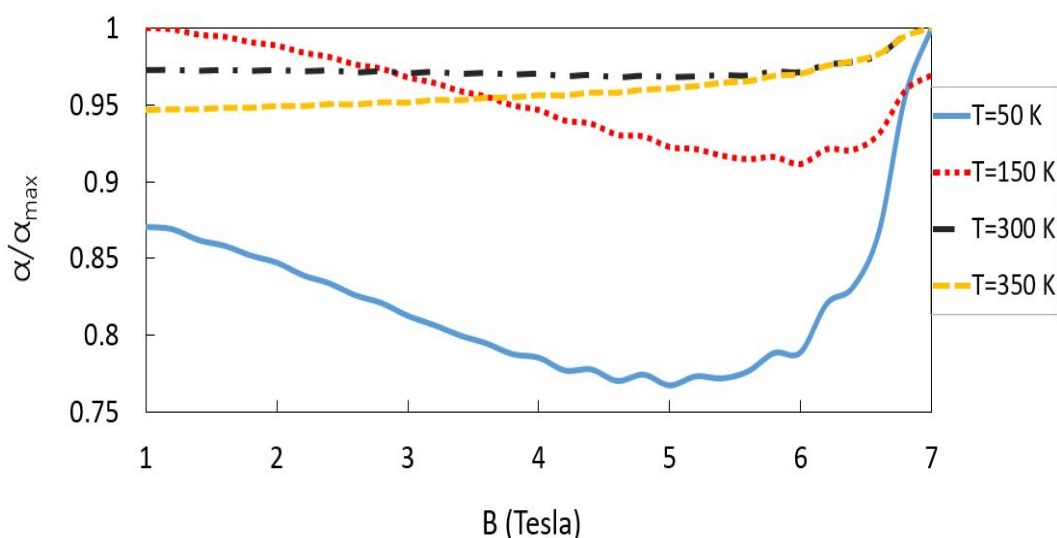
الکترون های پارانرژی تر با ضریب عبور کل بالاتر در جریان الکتریکی است.

۲.۳.۴ بررسی نحوه ی تغییرات ضریب سبیک



شکل ۵.۴: نحوه ی تغییرات ضریب سبیک نسبت به میدان مغناطیسی در دماهای $T=50\text{K}$ ، $T=150\text{K}$ ، $T=300\text{K}$ و $T=350\text{K}$ با انرژی فرمی $E_F = E'_F$

در شکل (۵.۴) ، نحوه تغییرات ضریب سبیک بر حسب میدان مغناطیسی در دماهای $T=50\text{K}$ ، $T=150\text{K}$ ، $T=300\text{K}$ و $T=350\text{K}$ با انرژی فرمی $E_F = E'_F$ رسم شده است. همچنین شکل (۶.۴) ، حالت نرمالیز شده ی شکل (۵.۴) ، بررسی بهتر نحوه ی تغییرات نسبی ضریب سبیک را به نمایش گذاشته است.



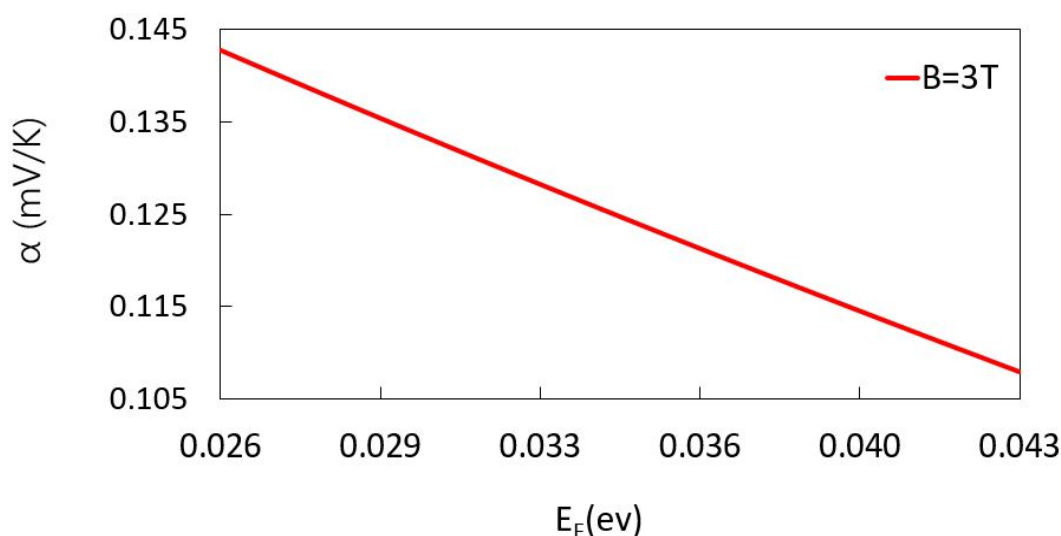
شکل ۶.۴: نحوه ی تغییرات ضریب سبیک نرمالایز شده بر حسب میدان مغناطیسی در دماهای $T=50\text{ K}$ ، $T=150\text{ K}$ ، $T=300\text{ K}$ ، $T=350\text{ K}$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$

مشاهده می شود که در دماهای پایین تا دمای اتاق ضریب سبیک با افزایش میدان روندی نزولی و سپس صعودی دارد و در دمای $T=350\text{ K}$ از همان ابتدا روند افزایشی بسیار کمی دارد. برای دریافت دلیل این تغییرات به ارتباط ضریب سبیک با جریان الکترونی ناشی از شیب دمایی، به ازاء واحد اختلاف دما، و رسانایی الکتریکی بایاس کوچک رابطه (۱۱.۳) مراجعه می نماییم. تغییرات رسانایی الکتریکی بایاس کوچک با میدان مغناطیسی در شکل (۱.۴) آورده شده است. با تغییر میدان مغناطیسی، تغییرات جریان الکترونی ناشی از شیب دمایی در واحد اختلاف دما نیز رفتاری متناظر با رسانایی الکتریکی را نمایش خواهد داد. با این تفاوت که تغییرات جریان الکترونی ناشی از شیب دمایی در واحد اختلاف دما نسبت به رسانندگی الکتریکی، در میدان های مغناطیسی بالاتر، سریع تر و در میدان های مغناطیسی پایین تر، کندتر اتفاق خواهد افتاد. بنابراین در هر دمای معین، رفتار مشاهده شده تا حدی بر خلاف رفتار مشاهده شده در نحوه تغییرات رسانایی الکتریکی بایاس کوچک با میدان مغناطیسی است.

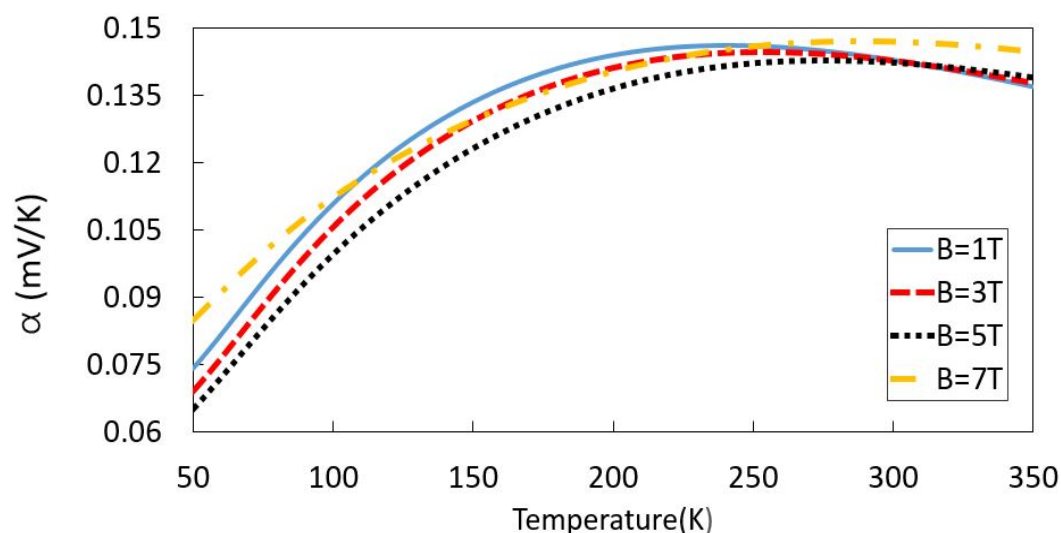
در شکل (۷.۴)، نحوه ی تغییرات ضریب سبیک بر حسب تغییرات انرژی فرمی در میدان مغناطیسی $B=3T$ و دمای $T=300\text{ K}$ مورد مطالعه قرار گرفته است.

مشاهده می شود که با افزایش انرژی فرمی، ضریب سبیک کاهش می یابد. رفتار مشاهده شده تا حدی بر خلاف رفتار مشاهده شده در نحوه تغییرات رسانایی الکتریکی بایاس کوچک با تغییر در انرژی فرمی است. به عبارتی در محدوده مورد مطالعه، تغییرات غالب در ضریب سبیک ناشی از تغییرات ظاهر شده در رسانایی الکتریکی است.

در شکل (۸.۴)، تغییرات ضریب سبیک بر حسب تغییرات دمایی در میدان های مغناطیسی $B=1T$ ، $B=3T$ ، $B=5T$ و $B=7T$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$ مورد بررسی قرار گرفته است. مشاهده می شود که ضریب سبیک تا محدوده ی دمای $T=250\text{ K}$ افزایش پیدا می کند و



شکل ۷.۴: اثر تغییرات انرژی فرمی بر روی ضریب سبیک در میدان مغناطیسی $B=3T$ در دمای $T=300K$



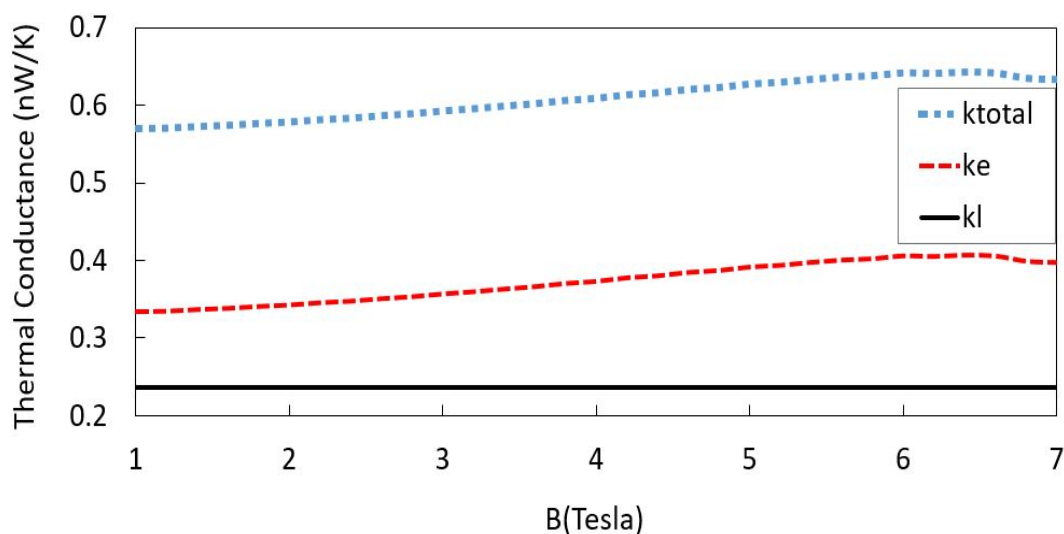
شکل ۸.۴: اثر تغییرات دمایی بر روی ضریب سبیک در میدان های مغناطیسی $B=1T$ ، $B=3T$ ، $B=5T$ و $B=7T$ در انرژی فرمی $E_F = E_F'$

بعد از آن دما ، نمودار ضریب سبیک بر حسب دما کاهشی می شود. تا محدوده ی دمای $T=250K$ ضرب عبارت های داخل صورت رابطه ی ضریب سبیک (۱۱.۳) ، سهم موثر از محدوده ی بیشتری از انرژی را نسبت به عبارت مخرج در بر می گیرد در نتیجه تا این محدوده روندی افزایشی داریم. اما با افزایش دما ، در محدوده ی دمای اتاق و بالاتر مخرج رابطه ی ضریب سبیک سهم موثر از محدوده ی انرژی بیشتری را نسبت به صورت در بر می گیرد و در نتیجه ضریب سبیک کاهشی می شود. از منظر فیزیکی نیز با توجه به رابطه ی (۱۱.۳) در دماهای پایین اثر جریان الکتریکی ناشی

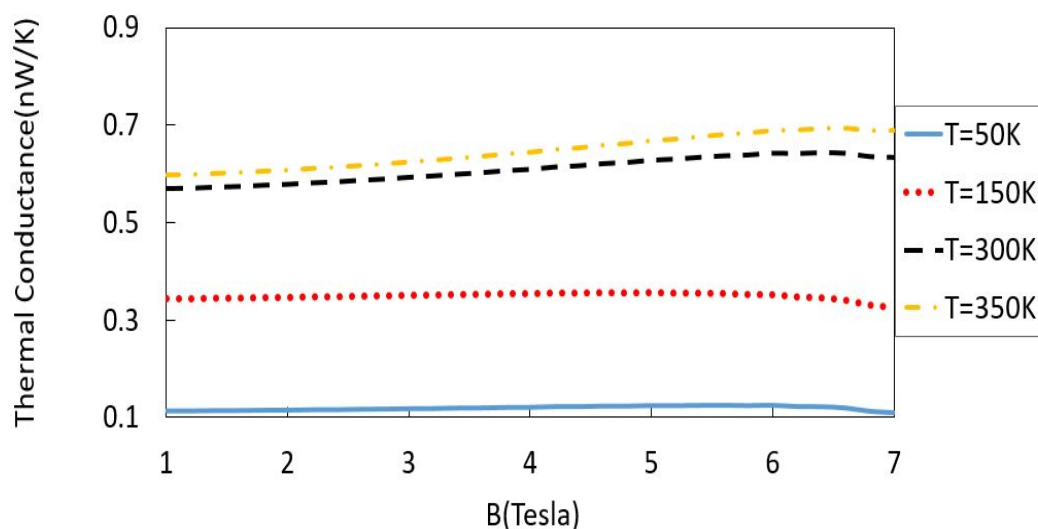
از شیب دمایی در واحد اختلاف دما غالب است اما در دماهای نزدیک به دمای اتاق و بالاتر رسانندگی الکتریکی اثر غالب را دارد.

۳.۳.۴ بررسی نحوه ی تغییرات رسانایی گرمایی

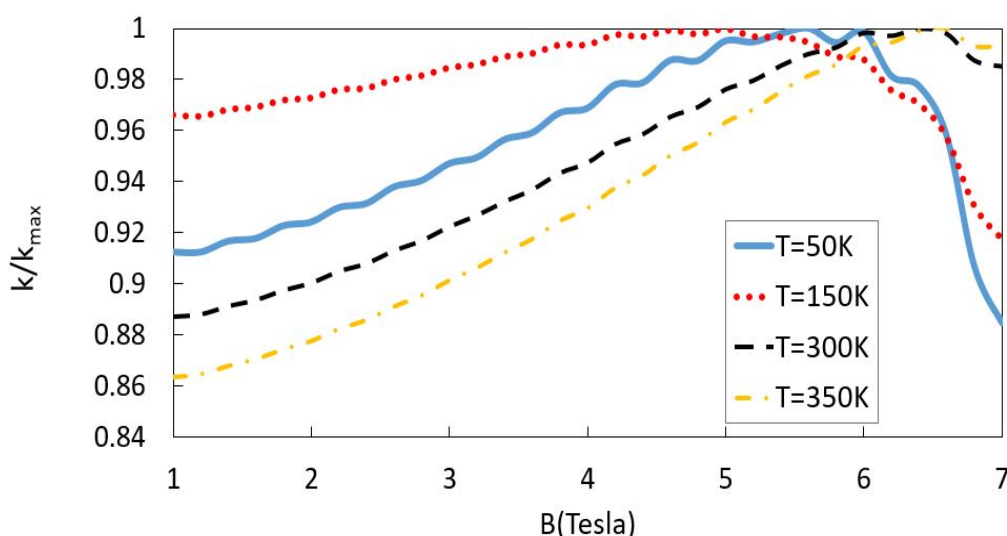
برای بررسی نحوه ی تغییرات رسانایی گرمایی کل ($k = k_e + k_l$)، از روابط (۱۸.۳) و (۲۹.۳) استفاده شده است.



شکل ۹.۴: مقایسه ی تغییرات رسانایی های گرمایی فونونی و الکترونی با تغییرات میدان مغناطیسی در دمای $T=300K$ ، انرژی فرمی $E_F = E'_F$ و مسافت آزاد میانین فونونی $\lambda = 100nm$



شکل ۱۰.۴: اثر تغییرات میدان مغناطیسی بر روی رسانایی گرمایی در دماهای $T=50K$ ، $T=150K$ ، $T=300K$ و $T=350K$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$ با مسیر آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100nm$



شکل ۱۱.۴: نحوه ی تغییرات رسانایی گرمایی نرمالایز شده بر اساس تغییرات میدان مغناطیسی در دماهای $T=50^{\circ}\text{K}$ ، $T=150^{\circ}\text{K}$ ، $T=300^{\circ}\text{K}$ و $T=350^{\circ}\text{K}$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$ با مسیر آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100\text{nm}$

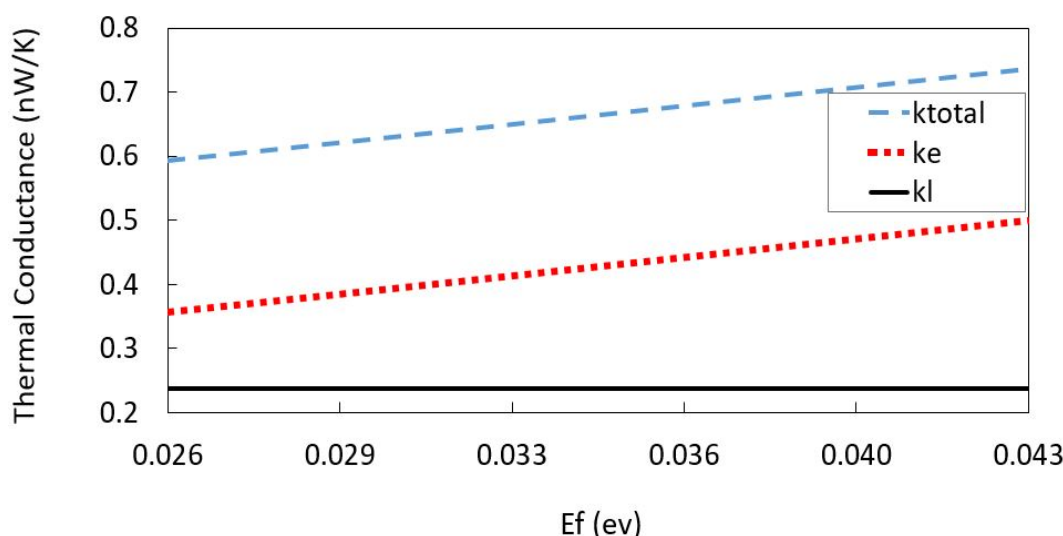
در شکل (۹.۴) نحوه ی تغییرات رسانایی گرمایی کل به تفکیک الکترونی و فونونی، در دمای $T=300^{\circ}\text{K}$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$ با مسافت آزاد میانین فونونی $\lambda = 100\text{nm}$ رسم شده است. مشاهده می شود که رسانایی گرمایی فونونی به میدان مغناطیسی وابسته نیست. در نتیجه رسانندگی گرمایی الکترونی سهم اصلی را در تغییرات رسانایی گرمایی کل بر حسب میدان مغناطیسی دارد. در شکل (۱۰.۴)، تغییرات رسانایی گرمایی کل به صورت تابعی از تغییرات میدان مغناطیسی در دماهای $T=50^{\circ}\text{K}$ ، $T=150^{\circ}\text{K}$ ، $T=300^{\circ}\text{K}$ و $T=350^{\circ}\text{K}$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$ با مسافت آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100\text{nm}$ رسم شده است. شکل (۱۱.۴) حالت نرمالیز شده ی شکل (۱۰.۴) است که برای بررسی بهتر تغییرات رسانایی گرمایی بر حسب میدان مغناطیسی رسم شده است.

مشاهده می شود که رسانایی گرمایی با افزایش میدان مغناطیسی تا محدوده ای از میدان مغناطیسی افزایشی است سپس کاهش پیدا می کند. با توجه به رابطه ی رسانایی گرمایی الکترونی (۱۸.۳)، نحوه ی تغییرات قابل توصیف خواهد بود.

با توجه به شکل های (۱.۴) و (۲.۴) می توان دریافت که احتمالاً مهمترین سهم در تغییرات رسانایی گرمایی متعلق به تغییرات ظاهر شده در رسانایی الکتریکی بوده و تغییر در انواع جریان های انرژی سهم کمتری را دارا می باشند.

در شکل (۱۲.۴)، تغییرات رسانایی های گرمایی فونونی (k_l) و الکترونی (k_e) بر حسب انرژی فرمی، برای مقایسه رسم شده است.

مشاهده می شود که رسانایی گرمایی فونونی با افزایش انرژی فرمی تغییری نکرده و رسانایی گرمایی الکترونی به صورت خطی نسبت به انرژی فرمی افزایش پیدا می کند. با توجه به رابطه ی (۲۹.۳) رسانایی گرمایی فونونی هیچ گونه وابستگی به انرژی فرمی ندارد.



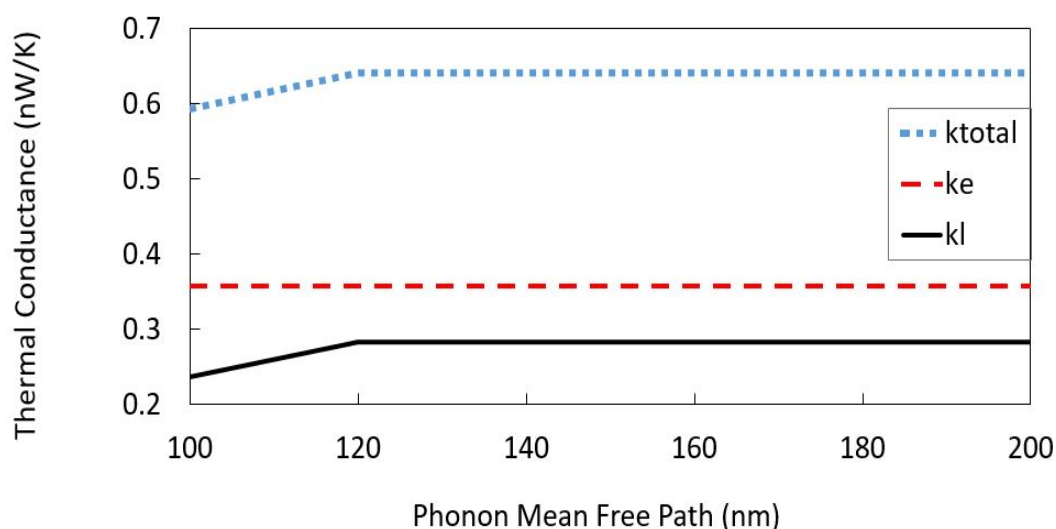
شکل ۱۲.۴: مقایسه ی تغییرات رسانایی های گرمایی فونونی و الکترونی با تغییرات انرژی فرمی در دمای $T=300K$ ، میدان مغناطیسی $B=3T$ و مسافت آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100nm$

اما با افزایش انرژی فرمی رسانایی گرمایی الکترونی به صورت خطی افزایش پیدا می کند. با توجه به تابع گرین سیستم [رابطه ی (۲۷.۴)]، با افزایش انرژی فرمی، بالاترین مد انتشاری (n_F^{max}) افزایش پیدا می کند و در نتیجه تعداد نسبی مدهای محوشونده کاهش می یابد. مدهای انتشاری مسئول ترابرد حامل ها در سیستم می باشند و مدهای محوشونده نقشی در ترابرد حامل ها ندارند. در نتیجه با افزایش مدهای انتشاری ترابرد الکترون ها افزایش پیدا می کند.

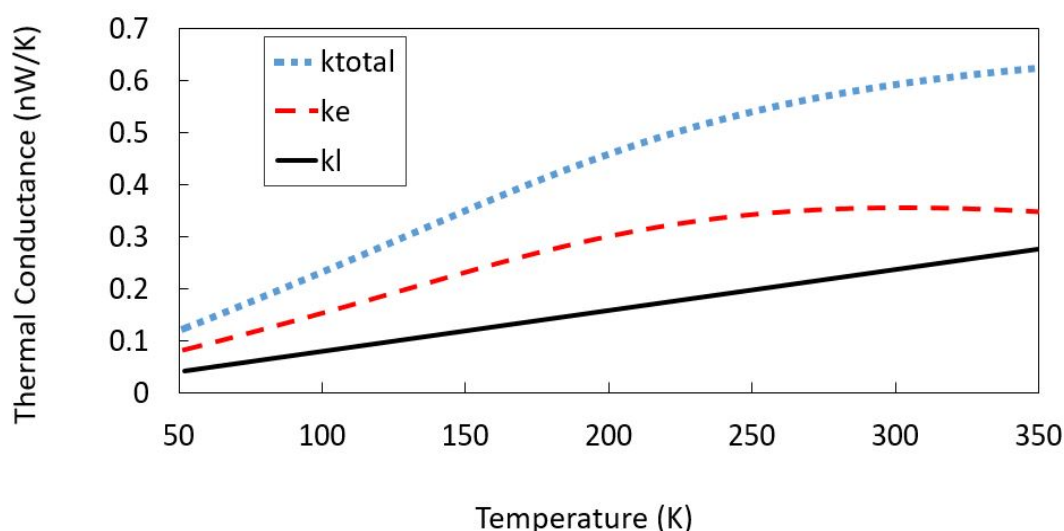
در رسانایی گرمایی الکترونی مسئول ترابرد گرمایی، الکترون ها هستند در نتیجه با افزایش ترابرد آن ها رسانایی گرمایی الکترونی افزایش پیدا می کنند. با توجه به این که ترابرد الکترون ها نقشی در رسانندگی گرمایی فونونی ندارند، رسانایی گرمایی کل مانند رسانایی گرمایی الکترونی افزایش پیدا می کند.

در نتیجه با افزایش انرژی فرمی، رسانایی گرمایی کل افزایش پیدا می کند. در شکل (۱۳.۴)، تغییرات رسانایی های گرمایی فونونی (k_l) و الکترونی (k_e) بر حسب مسافت آزاد میانگین فونونی برای مقایسه آورده شده است. برخلاف رسانایی گرمایی فونونی که به صورت مستقیم با مسافت آزاد میانگین فونونی در ارتباط است، رسانایی گرمایی الکترونی هیچ وابستگی به مسافت آزاد میانگین فونونی ندارد. با توجه به این که رسانایی گرمایی فونونی به صورت مستقیم با مسافت آزاد میانگین فونونی در ارتباط است تا $120nm$ روند افزایشی داریم. سپس به دلیل اینکه طول نمونه ی مورد مطالعه $120nm$ است بعد از این مقدار هیچگونه تغییری مشاهده نمی کنیم.

در شکل (۱۴.۴)، تغییرات رسانایی گرمایی کل به تفکیک الکترونی و فونونی به صورت تابعی از تغییرات دمایی در میدان مغناطیسی $B=3T$ و انرژی فرمی $E_F = E_F'$ با مسافت آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100nm$ رسم شده است.



شکل ۱۳.۴: مقایسه تغییرات رسانایی های گرمایی فونونی و الکترونی با تغییرات مسافت آزاد میانگین فونونی در دمای $T=300\text{K}$ ، $B=3T$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$

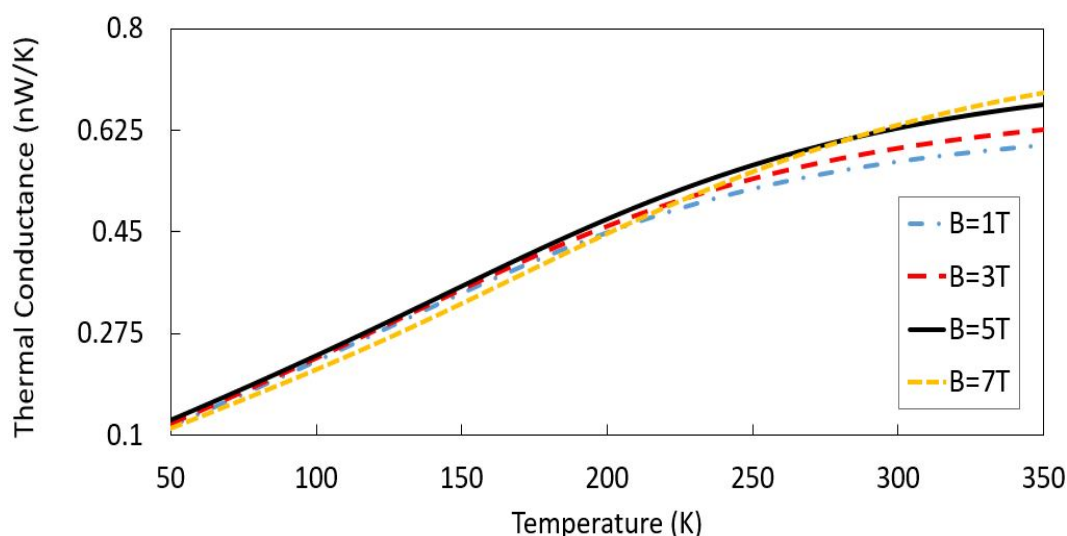


شکل ۱۴.۴: مقایسه تغییرات رسانایی های فونونی و الکترونی با تغییرات دمایی در میدان مغناطیسی $B=3T$ ، انرژی فرمی $E_F = E'_F$ و مسافت آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100\text{nm}$

مشاهده می شود که رسانایی گرمایی فونونی با افزایش دما به صورت خطی افزایش پیدا می کند. با توجه به رابطه ی (۲۹.۳)، رسانایی گرمایی فونونی رابطه مستقیم و خطی با دما دارد.

رسانایی گرمایی الکترونی با افزایش دما، افزایش پیدا می کند اما به صورت غیر خطی و در دمای اتاق و بالاتر به یک حالت اشباع می رسد.

در شکل (۱۵.۴) نحوه ی تغییرات رسانایی گرمایی کل بر حسب دما در میدان های مغناطیسی $B=1T$ ، $B=3T$ ، $B=5T$ و $B=7T$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$ با مسافت آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100\text{nm}$ رسم شده است. با بررسی عبارت رسانایی گرمایی الکترونی دریافتیم که



شکل ۱۵.۴: اثر تغییرات دمایی بر روی رسانایی گرمایی در میدان های مغناطیسی $B=1T$ ، $B=3T$ ، $B=5T$ و $B=7T$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$ با مسیر آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100nm$

بخش اول رابطه به خاطر عبارت جریان انرژی ناشی از شیب دمایی در دماهای پایین بسیار افزایشی است، اما با نزدیک شدن به محدوده ی دمای $T=250K$ روند کاهشی را در پیش می گیرد.

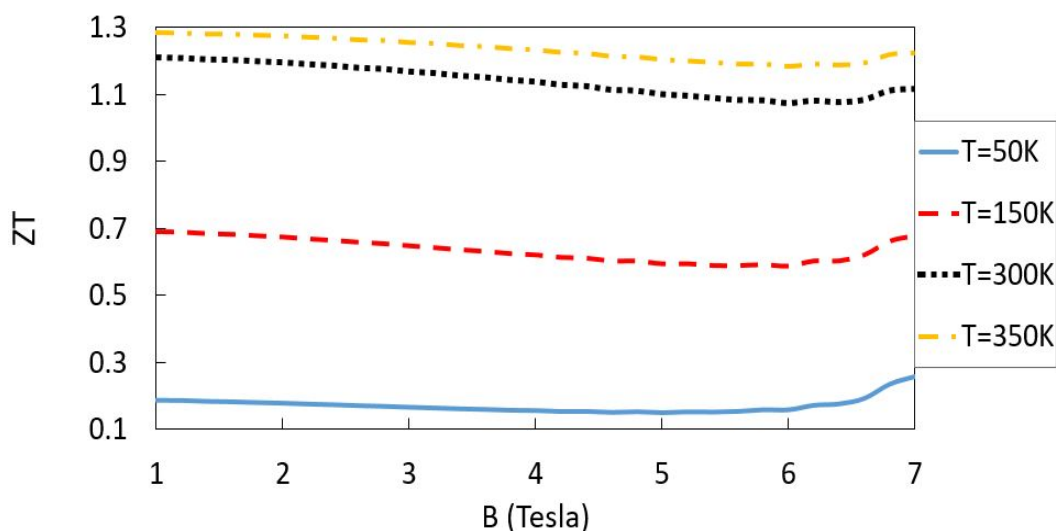
به عبارتی با توجه به رابطه ی (۱۷.۳) در واقع جریان انرژی در واحد اختلاف دما در دماهای پایین اثر غالب در رسانایی گرمایی است اما در دماهای بالاتر جمله ی دوم که حاصل ضرب ضریب سبیک در جریان انرژی در واحد اختلاف پتانسیل است اثرات خود را نشان می دهد .

۴.۳.۴ بررسی نحوه ی تغییرات معیار شایستگی ترموالکتریک

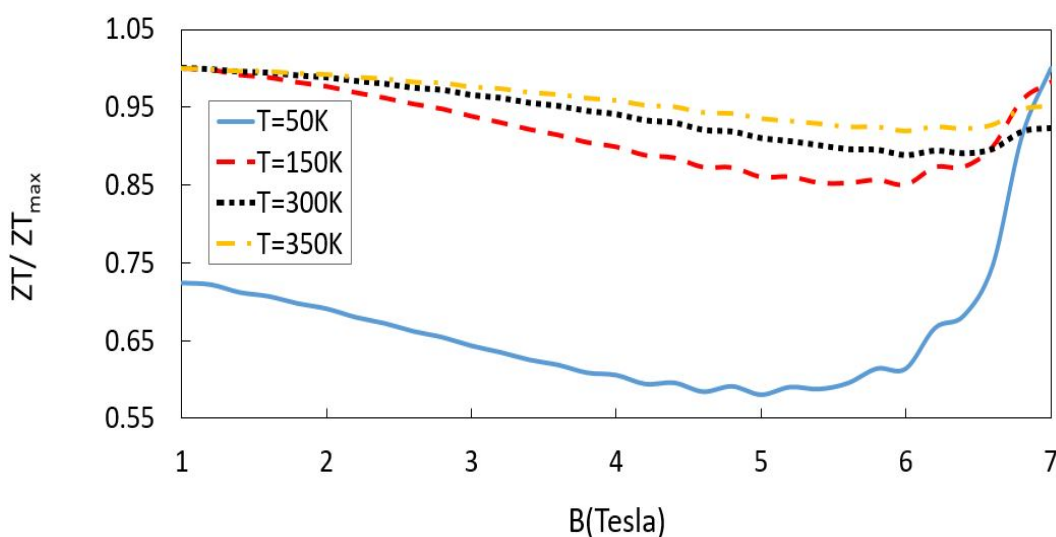
در شکل (۱۶.۴) نحوه ی تغییرات معیار شایستگی ترموالکتریک بر حسب تغییرات میدان مغناطیسی در دماهای $T=50K$ ، $T=150K$ ، $T=300K$ و $T=350K$ با انرژی فرمی $E_F = E'_F$ و مسیر آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100nm$ رسم شده است . شکل (۱۷.۴) حالت نرمالیز شده ی شکل (۱۶.۴) است که برای بررسی بهتر تغییرات معیار شایستگی ترموالکتریک بر حسب میدان مغناطیسی رسم شده است.

مشاهده می شود که معیار شایستگی ترموالکتریک با افزایش میدان مغناطیسی تا محدوده ی ۵ تا ۶ تسلا کاهش پیدا کرده سپس دارای روند افزایشی می شود. با توجه به رابطه ی معیار شایستگی (۵.۱) ، برای بررسی نحوه ی آن باید کمیت های داخل رابطه ی معیار شایستگی را بررسی کرد.

رسانایی گرمایی کل با افزایش میدان تا محدوده ی ۵ تا ۶ تسلا افزایشی است و بعد آن کاهش پیدا می کند . ضریب سبیک با افزایش میدان مغناطیسی تا محدوده ی ۵ تا ۶ تسلا کاهشی است و سپس افزایش می یابد. رسانایی الکتریکی تا محدوده ی ۵ تسلا افزایشی است



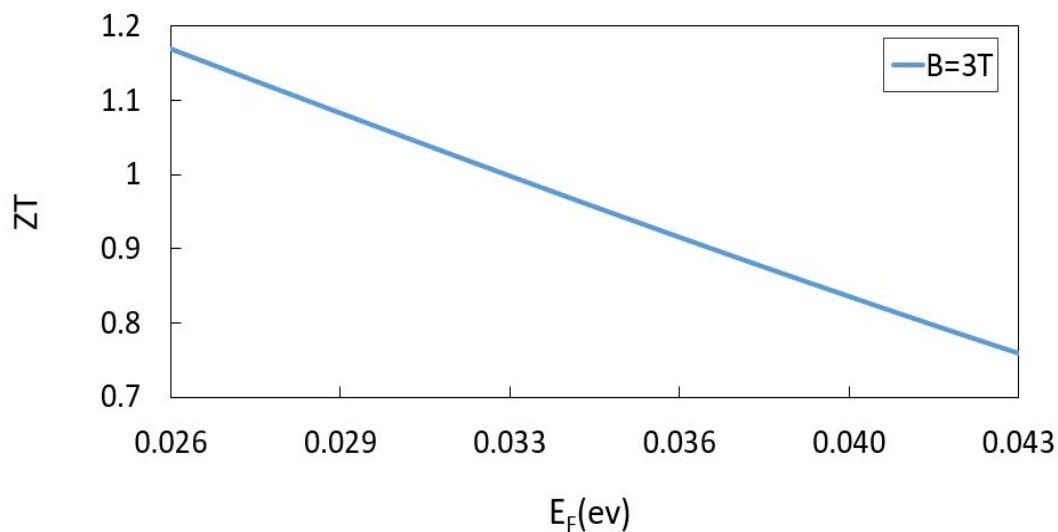
شکل ۱۶.۴: اثر تغییرات میدان مغناطیسی بر روی معیار شایستگی ترموالکتریک در دماهای $T=50K$ ، $T=150K$ ، $T=300K$ و $T=350K$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$ با مسیر آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100nm$



شکل ۱۷.۴: نحوه ی تغییرات معیار شایستگی ترموالکتریک نرمالایز شده بر اساس تغییرات میدان مغناطیسی در دماهای $T=50K$ ، $T=150K$ ، $T=300K$ و $T=350K$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$ با مسیر آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100nm$

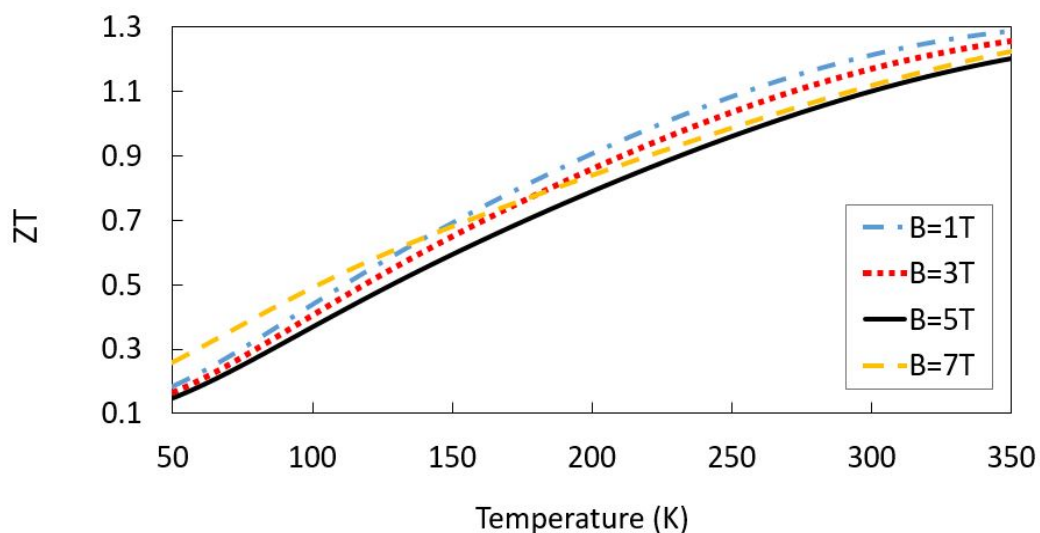
سپس کاهش می یابد. با توجه به این که معیار شایستگی با رسانایی گرمایی کل رابطه معکوس دارد و با توان دوم ضریب سبک رابطه ی مستقیم دارد پس نتیجه می گیریم معیار شایستگی ترموالکتریک با افزایش میدان مغناطیسی تا محدوده ی ۵ تا ۶ تسلا کاهش پیدا کرده سپس دارای روند افزایشی می شود.

در شکل (۱۸.۴)، نحوه ی تغییرات معیار شایستگی ترموالکتریک بر حسب انرژی فرمی در میدان مغناطیسی $B = 3T$ ، دمای $T = 300K$ و مسیر آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100nm$ مورد بررسی قرار گرفته است.



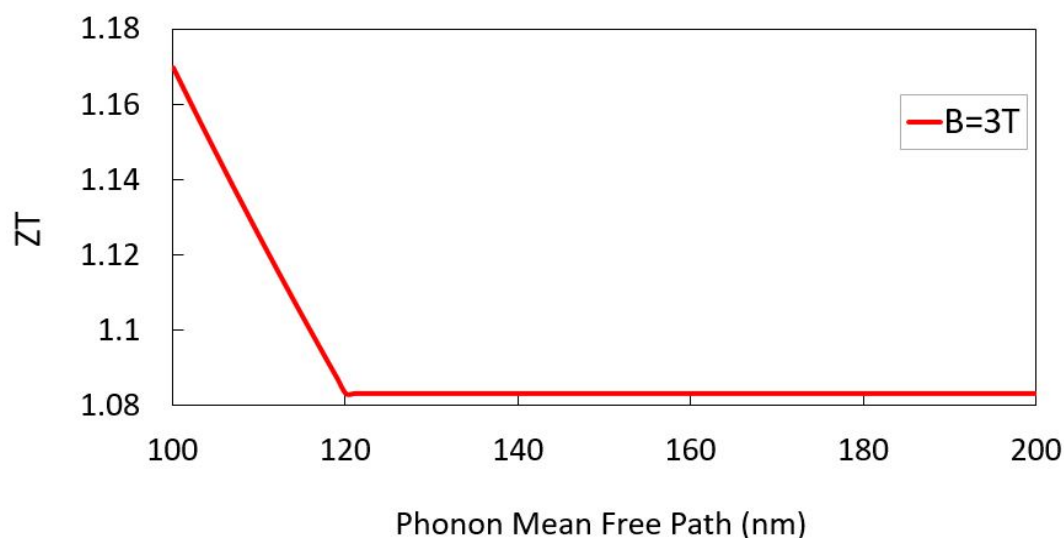
شکل ۱۸.۴: اثر تغییرات انرژی فرمی بر روی معیار شایستگی ترموالکتریک در میدان مغناطیسی $B=3T$ و دمای $T=300K$ با مسیر آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100nm$

مشاهده می شود که معیار شایستگی ترموالکتریک با افزایش انرژی فرمی ، کاهش پیدا می کند. رسانایی گرمایی کل با افزایش انرژی فرمی به طور خطی افزایش پیدا می کند و ضریب سیبک با افزایش انرژی فرمی به طور خطی کاهش پیدا می کند. با توجه به این که معیار شایستگی ترموالکتریک متناسب با توان دوم ضریب سیبک و عکس رسانایی گرمایی کل است، بنابراین معیار شایستگی ترموالکتریک کاهش پیدا می کند.



شکل ۱۹.۴: اثر تغییرات دمایی بر روی معیار شایستگی ترموالکتریک در میدان های مغناطیسی $B=1T, B=3T, B=5T$ و $B=7T$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$ با مسیر آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100nm$

در شکل (۱۹.۴)، تغییرات معیار شایستگی ترموالکتریک بر حسب تغییرات دمایی در میدان های مغناطیسی $B=1T, B=3T, B=5T$ و $B=7T$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$ با مسافت آزاد میانگین فونونی $\lambda = 100nm$ مورد مطالعه قرار گرفته است.



شکل ۲۰.۴: اثر تغییرات مسافت آزاد میانگین فونونی بر روی معیار شایستگی ترموالکتریک در میدان مغناطیسی $B=3T$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$

مشاهده می شود که معیار شایستگی ترموالکتریک با افزایش دما، افزایش پیدا می کند. رسانایی الکتریکی و رسانایی گرمایی کل با افزایش دما افزایش پیدا می کنند. ضریب سیبک نیز تا محدوده ی دمای $T=250K$ افزایشی است و سپس کاهش پیدا می کند. همچنین معیار شایستگی ترموالکتریک به صورت مستقیم با دما رابطه دارد. پس نتیجه می گیریم که معیار شایستگی ترموالکتریک با افزایش دما، افزایش پیدا می کند. در شکل (۲۰.۴)، تغییرات معیار شایستگی ترموالکتریک بر حسب تغییرات مسافت آزاد میانگین فونونی در میدان مغناطیسی $B=3T$ و انرژی فرمی $E_F = E'_F$ مورد مطالعه قرار گرفته است. با افزایش مسافت آزاد میانگین فونونی رسانایی گرمایی فونونی افزایش می یابد در نتیجه معیار شایستگی ترموالکتریک نسبت به مسافت آزاد میانگین فونونی کاهش پیدا می کند.

۴.۴ مروری بر نتایج

۱. رسانایی الکتریکی و رسانایی گرمایی کل با افزایش میدان مغناطیسی تا محدوده ای از میدان افزایشی هستند سپس کاهش پیدا می کنند. رسانایی گرمایی فونونی وابستگی به میدان مغناطیسی ندارد و تغییرات رسانایی گرمایی کل ناشی از تغییرات رسانایی گرمایی الکترونی است. ضریب سیبک نیز تا حدودی برخلاف رفتار مشاهده شده در نحوه تغییرات رسانایی با میدان مغناطیسی است یعنی با تا با افزایش میدان مغناطیسی تا محدوده ای از آن افزایشی است سپس کاهش پیدا می کند. همچنین معیار شایستگی ترموالکتریک بر حسب میدان تا محدوده ای از میدان کاهشی است سپس افزایش پیدا می کند.

۲. رسانایی الکتریکی و رسانایی گرمایی الکترونی به صورت خطی با افزایش انرژی فرمی، افزایش پیدا می کنند. رسانایی گرمایی فونونی وابستگی به انرژی فرمی ندارد. ضریب سیبک با افزایش انرژی فرمی به صورت خطی کاهش پیدا می کند. همچنین معیار شایستگی ترموالکتریک بر حسب انرژی فرمی به صورت خطی کاهش پیدا می کند.

۳. رسانایی الکتریکی با افزایش دما تا حوالی $10^3 K$ تغییراتش بسیار ناچیز است سپس از این دما به بعد با افزایش دما افزایش پیدا می کند. رسانایی گرمایی الکترونی با افزایش دما افزایش پیدا می کند اما در دماهای بالا روند افزایشی آن کم شده و سپس کاهشی می شود. رسانایی گرمایی فونونی نیز به صورت خطی با افزایش دما افزایش پیدا می کند. ضریب سیبک با افزایش دما تا محدوده $T = 250 K$ افزایش پیدا می کند و بعد از آن دما، نمودار ضریب سیبک بر حسب دما کاهشی می شود. همچنین معیار شایستگی ترموالکتریک بر حسب دما افزایش پیدا می کند.

۴. رسانایی گرمایی فونونی با افزایش مسافت آزاد میانگین فونونی افزایش پیدا می کند در نتیجه معیار شایستگی ترموالکتریک نسبت به مسافت آزاد میانگین فونونی کاهش پیدا می کند.

۵.۴ پیشنهادات

۱. در این تحقیق برای بررسی پراکندگی از پتانسیل دلتای دیراک استفاده شد. می توان از پتانسیل های دیگر از جمله پتانسیل گوسی برای ادامه تحقیق استفاده کرد.

۲. برای مطالعه بیشتر می توان پتانسیل محدوده کننده را افزایش داد تا دامنه ی حرکت الکترون در حضور میدان مغناطیسی افزایش پیدا کند.

۳. سیستم مورد مطالعه در این تحقیق گاز الکترونی دو بعدی در ساختار نامتجانس $GaAs / AlGaAs$ است. می توان برای مطالعه بیشتر از ساختارهای عنصری دیگر نیز استفاده کرد. همچنین ما در این تحقیق نیمرسانای نوع n را بررسی کردیم، برای مطالعه بیشتر می توان از نیمرسانای نوع p استفاده کرد.

۶.۴ جمع بندی

در این فصل با استفاده از معادله ی شرودینگر ویژه حالت ها و ویژه مقادیر سیستم به دست آمد و سپس با استفاده از معادله ی لیپمن - شوینگر و رهیافت لاندائور ضرایب گذار و پارامترهای ترموالکتریک به دست آمد.

در نهایت نحوه ی تغییرات رسانایی الکتریکی و ضریب سیبک بر حسب میدان مغناطیسی، دما و انرژی فرمی مورد بررسی قرار گرفت. همچنین نحوه ی تغییرات رسانایی گرمایی و معیار شایستگی ترموالکتریک بر حسب میدان مغناطیسی، دما و انرژی فرمی مورد بررسی قرار گرفت.

مراجع

- [1] Goldsmid, H. J. (2010), "**Introduction to Thermoelectricity**", Vol. 121, University of New South , Wales., pp. 46
- [2] Alam H. and Ramakrishna S. (2013), " A review on the enhancement of figure of merit from bulk to nano-thermoelectric materials" **nano energy**, 2(2), 190-212.
- [3] Kaur K., and Kumar R. (2016), " Enhancement of figure of merit (ZT) by doping Bi in Mg_2Si for energy harvesting applications " **Materials International** , 26(6), 533-539.
- [4] Kim R. , Datta S. and Lundstrom M. S. (2009), "Influence of dimensionality on thermoelectric device performance" **Journal of Applied Physics** , 105(3), 034506.
- [5] Gholivand, H. (2017), MS thesis, "PHONON MEAN FREE PATH IN FEW LAYER, TWO-DIMENSIONAL HEXAGONAL STRUCTURES" , Middle East Technical University
- [6] Mc McClintock P. V. E., Meredith D. J. and Wigmore J. K. (1992), "**Low-Temperature Physics: an introduction for scientists and engineers**", Springer, Dordrecht.
- [7] Zhang, Zhuomin M., Zhuomin M. Zhang, and Luby. (2007), "**Nano/microscale heat transfer**", Vol. 410, New York: McGraw-Hill.
- [8] Tritt T. M. (Ed.). (2005), "**Thermal Conductivity Theory, Properties, and Applications**", Clemson University
- [9] Webster J. G. (Ed.). (2003), "**ELECTRICAL MEASUREMENT, SIGNAL PROCESSING, and DISPLAYs**", CRC Press

-
- [10] Trolier-McKinstry S., and Newnham R. E. (2018), "**Materials engineering: bonding, structure, and structure-property relationships**", Cambridge University Press
- [11] Ngo C. and Van de Voorde M. (2014), "**Nanotechnology in a Nutshell**", Francia: Atlantis Press.
- [12] Reshma V. G. and Mohanan P. V. (2019), "Quantum dots: Applications and safety consequences" **Luminescence** , 205, 287-298.
- [13] Tiwari J. N., Tiwari R. N. and Kim K. S. (2012), "Zero-dimensional, one-dimensional, two-dimensional and three-dimensional nanostructured materials for advanced electrochemical energy devices" **Progress in Materials Science** , 57(4), 724-803.
- [14] Tong D. (2017), "**Applications of Quantum Mechanics**" , University of Cambridge Part II Mathematical Tripos.
- [15] Van Zeghbroeck, B. (2004), "**Principles of semiconductor devices**" , Colarado University, 34.
- [16] Ilouno, J. , Audu I. J. , Mafuyai M. Y. and Okpara N. (2018), "Evaluation of Energy and Density of States of Two Dimensional Quantum Structure (Quantum Well)" **Asian Journal of Research and Reviews in Physics** , 1-6.
- [17] Harrison P. and Valavanis A. (2016), "**Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures**", John Wiley and Sons.
- [18] Li J. , Cheung Au Yeung T. and Hin Kam C. (2012), " Influence of electron scatterings on thermoelectric effect" **Journal of Applied Physics**, 112(3), 034306.
- [19] Heris H. R., Kateb M. , Erlingsson S. I. and Manolescu A. (2020), " Thermoelectric properties of tubular nanowires in the presence of a transverse magnetic field" **Nanotechnology**, 31(42), 424006.
- [20] Faleev S. V. and Léonard F. (2008), " Theory of enhancement of thermoelectric properties of materials with nanoinclusions" **Physical Review B** , 77(21), 214304.

- [21] Gao Y. W. and Jia X. D. (2012), " Thermoelectric Properties of Polycrystalline Thin Films Under an External Magnetic Field" **Journal of electronic materials** , 41(3), 552-559.
- [22] Crisan M., Grosu I. and Tifrea I. (2020), " Magnetic field effects on the thermoelectric properties of monolayer graphene" **Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures** ,124, 114361.
- [23] Zou X., Chen X., Huang H., Xu Y. and Duan W. (2015), " Enhanced thermoelectric figure of merit in thin GaAs nanowires" **Nanoscale** , 7(19), 8776-8781.
- [24] Vargiamidis V., Valassiades O. and Kyriakos D. S. (2003), " Lippmann-Schwinger equation approach to scattering in quantum wires" **Physica Status Solidi(b)** , 236(3), 597-613
- [25] Di Ventra M. (2008), "**Electrical Transport in Nanoscale Systems**"Cambridge University Press
- [26] Moskalets M. V. (2011), "**Scattering Matrix Approach to Non-Stationary Quantum Transport**" , World Scientific.
- [27] Jeong C., Datta S. and Lundstrom M. (2011), " Full dispersion versus Debye model evaluation of lattice thermal conductivity with a Landauer approach" **Journal of Applied Physics** , 109(7), 073718.
- [28] Jeong C., Kim R., Luisier, M., Datta S. and Lundstrom M. (2010), " On Landauer versus Boltzmann and full band versus effective mass evaluation of thermoelectric transport coefficients" **Journal of Applied Physics** , 107(2), 023707.
- [29] Kruglyak Y. (2014), " Landauer-Datta-Lundstrom Generalized Transport Model for Nanoelectronics" **Journal of Nanoscience** , 2014.

Aabstract

The figure of merit of thermoelectric materials, ZT , which determines their efficiency in a thermoelectric device, is low for most bulk materials. Nanoscale materials and structures are one promising way to increase the thermoelectric figure of merit. In this study, the effect of electron scattering on the thermoelectric properties, under quantizing magnetic field, has been investigated.

Using the Lippmann-Schwinger equation, the electronic transition coefficients of the studied device were obtained, and finally, using the Landauer-Buttiker approach, thermoelectric coefficients were calculated. The system studied in this research is a two-dimensional electron gas in the heterogeneous structure of GaAs / AlGaAs with a lateral confinement. The results showed that the increase of the magnetic field, Fermi energy, and phonon mean free path decreased the figure of merit of the studied device but the rise of the temperature increased it.

keywords : Thermoelectric, Figure of merit, Magnetic field, Lippmann-Schwinger equation, Landauer-Buttiker approach, Two-dimensional electron gas



Faculty Of Physics and Nuclear Engineering

MSc Thesis in Nano Physics

**Effect of electron scattering on the
thermoelectric effects under quantizing
magnetic field**

By: Mohammad Tahaghoghi

Supervisor:

Dr.Saeid Hessami Pilehrood

October 2021