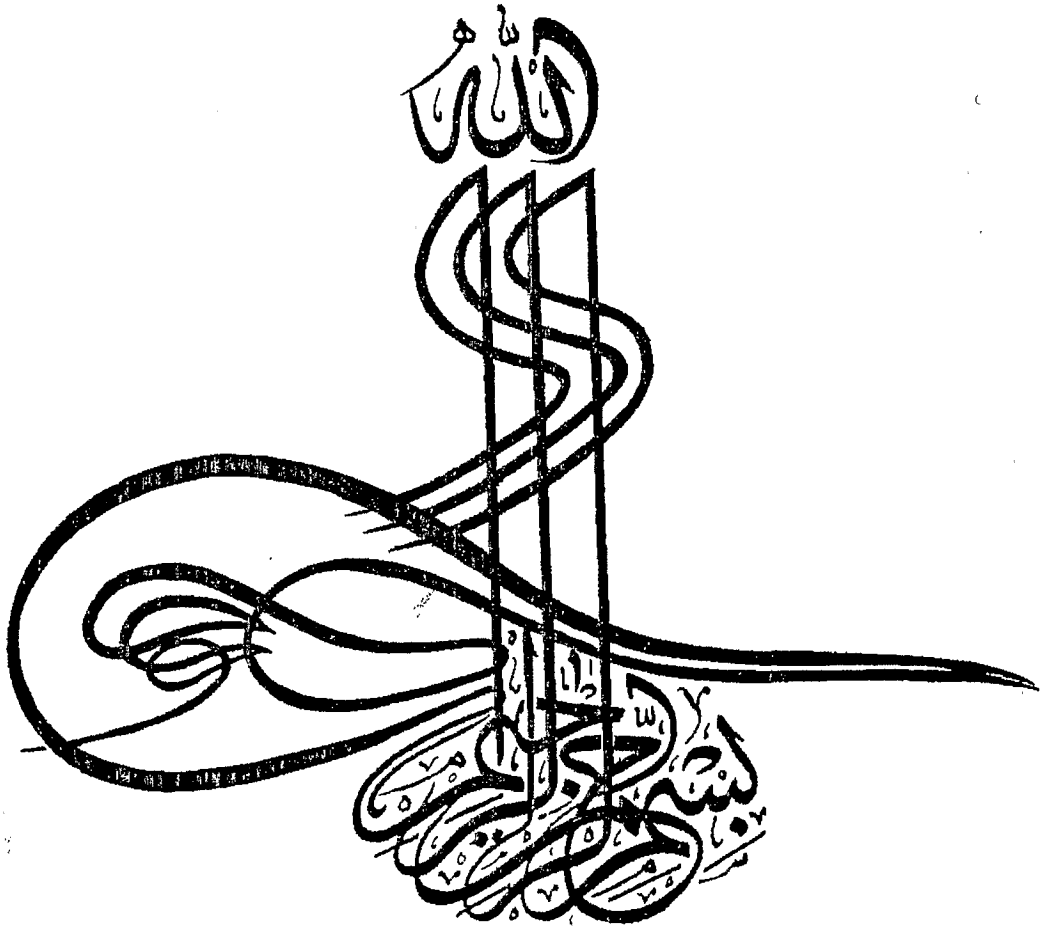
QC
910
سانتا صدلرک



١٠٤/١٠

دانشگاه پیام نور

مرکز شیراز

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

بررسی خواص دینامیکی اسپین و سطوح انرژی در سیم های کوانتومی

پایان نامه

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته فیزیک

توسط:

آزاده شهیم آئین

اساتید راهنما:

دکتر رضا خرداد

دکتر علیرضا کشاورز

۱۳۸۷ /۲/ ۱۱

مهرماه ۸۶

۱۰۴۱۱۰

صورتجلسه دفاع پایان نامه

پایان نامه تحت عنوان **بررسی خواص دینامیکی اسپین و سطوح انرژی در سیم های کوانتومی** که توسط **آزاده شهیم آئین** دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته فیزیک مرکز شیراز تهیه و به هیأت داوران ارائه گردیده است، مورد تأیید می باشد.

تاریخ دفاع :۸۶/۷/۳ **نمره**:-/۱۸ **درجه ارزشیابی**:عالی

اعضای هیأت داوران:

نام و نام خانوادگی	هیأت داوران	مرتبه علمی	امضا
۱) دکتر رضا خرداد	استاد راهنما	استادیار	
۲) دکتر علیرضا کشاورز	استاد راهنما	استادیار	
۳) دکتر پرویز الهی	استاد مشاور	استادیار	
۴) دکتر عبدالرسول قرائتی	داور	استادیار	
۵) دکتراحمدخاکساری	نماینده تحصیلات تکمیلی	استادیار	

تقدیم به همسر عزیزم، آنکه میراث عشق را از او به یادگار دارم

و پدر و مادر مهربانم که دریای مهر، آسمان وفا و گیتی عشق اند.

سپاس نامه

"من علمنی حرفاً فقد صیرنی عبداً"

سپاس بیکران پروردگارمهربان راکه به بشر، دانش وحکمت ارزانی نمود و وی را اشرف مخلوقات قرارداد. در پرداختن این پایان نامه، بزرگانی دست مرا گرم فشردند وبا رهنمودهای بی دریغ و زمزمه محبتشان، مرا در ارائه هرچه نیکوتر این تحقیق یاری نمودند.

من چه درپای تو ریزم که پسند تو بود سروجان را نتوان گفت که مقداری هست

بنابراین ازراهنمایی و ارشاد استادان محترم راهنما جناب آقای دکتر خرداد و دکتر کشاورز خالصانه تشکر و قدردانی می نمایم و برای آن ها بهروزی بیش از پیش آرزو می نمایم و امیدوارم که خداوند همواره به ایشان توفیق دهد تا تشنگان وادی علم و معرفت همواره از دریای بیکران علم و دانش ایشان سیراب گردند. ((دل هاشان همچنان برآمدن گاه خورشید باد)).

از استاد مشاور محترم جناب آقای دکترالهی و نیز از جناب آقای دکتر قرائتی و دکتر خاکساری که در سمت داور و نماینده تحصیلات تکمیلی دانشگاه، مرا همراهی نمودند نیز تشکر می کنم.

همچنین برخود لازم می دانم که از لطف و فداکاری همسر مهربانم که صمیمانه مرا یاری نمود، نیز قدردانی نموده و برای وی نیز آرزوی موفقیت و سلامتی نمایم. همچنین از پدر، مادر و خواهران خوبم که همواره دعای خیرشان بدرقه راه من بوده و می باشد هم بسیار ممنون و سپاسگزارم و امیدوارم که خداوند وجود پربرکتشان را از جمیع بلاهای ارضی و سماوی مصون و محفوظ نگه دارد.

فصل اول

کلیات

۱-۱- مقدمه

تحولات زیادی در زمینه علوم و فناوری، زندگی انسان را از گذشته تا کنون تحت تأثیر قرار داده و متحول نموده است. ساخت دستگاه های الکترونیکی و کامپیوتر ها از آخرین نمونه های پیشرفت علمی بشر به شمار می آید. امروزه از فناوری نانو[۱] و کاربردهای آن در علوم مختلف، به عنوان انقلابی عظیم در آینده نه چندان دور یاد می شود که بسیاری از پیشرفتهای آینده را پایه گذاری خواهد کرد. توانایی طراحی، ساخت، تعمیر، نگهداری و توسعه را در مجموع فناوری می گوییم.

کلمه نانو در زبان یونانی به معنی کوتوله است و فناوری نانو به نوعی فناوری در مقیاس نانو اطلاق می شود. برای مقایسه یک نانومتر با یک متر می توان یک تاس را با کره زمین مقایسه کرد. یکی از وجوه تمایز فناوری نانو و سایر فناوری ها این است که فناوری نانو منحصر به رشته خاصی نیست. در واقع این فناوری، یک علم جدید نیست بلکه رویکردی جدید به تمام رشته ها است و تمام علوم مختلف را در خود جای می دهد.

از دیدگاه دیگر می توان گفت که فناوری نانو، توانایی طراحی ابزارها در مقیاس یک تا صد نانومتر، ویا توانایی به دست گرفتن کنترل ماده در مقیاس های بسیار کوچک است.

۱-Nano Technology

با استفاده از فناوری نانو می توان امکانات جدیدی را در عرصه های مختلف علوم، از جمله مخابرات، شیمی، بیوتکنولوژی وغیره ایجادکرد.

بنیانگذار فناوری نانو دانشمندی به نام ریچارد فاینمن[۲] است. وی که متخصص کوانتوم نظری و برنده جایزه نوبل در سال ۱۹۶۵ میلادی بوده است، در مورد استفاده از *DNA* در کامپیوترها و توانایی بالقوه ارگانیسم حیات در ساخت ماشین های کوچک نه تنها برای ذخیره داده ها بلکه برای ساختن، سخن به میان آورد. " وی به بررسی بُعد رشد نیافته ای از علم پرداخت که اساس عمل و اندیشه جهان را تغییر می دهد و با سخن گفتن راجع به ساخت دستگاه ها و مواد در حد مقیاس های اتمی/مولکولی مخاطبان خویش را هیجان زده کرد[۱].

هدف فناوری نانو دخل و تصرف در چگونگی آرایش اتمها یا مولکول ها و استفاده از مواد و سیستم هایی با توانایی های جدید و کاربردهای تازه است.

برخی قابلیت های فناوری نانو به قرار زیر می باشند:

۱-اندازه گیری با دقت یک اتم

۲-ساخت حس گرهایی[۳] برای تشخیص مواد سمی

۳-ساخت فیلترهایی که اتم ها و مولکول ها را با دقت جدا می کنند.

۴-ساخت موادی که خواص آنها مطابق خواسته ما تغییر می کنند.

۵-ساخت روبات های نانویی که می توانند وارد بدن شده و با بیماری ها مبارزه کنند.

۶-ساخت نانو لوله های[۴] کربنی

۲-Richard Feynman

۳-Sensors

۴-Nano tubes

کاربردهای فعلی نانوتکنولوژی[۲, ۳] عبارتند از:

۱- نانو ذرات دی اکسید تیتانیوم

۲- شیشه های خود تمیز کن

۳- لیزرهای نیم رسانای پهن باند

۴- لباس های همیشه تمیز

۱-۲- مواد نیم رسانا

می دانیم که مواد جامد به طور عمده به سه دسته تقسیم می شوند[۴]:

(الف) نارساناها : موادی مانند شیشه و کوارتز که رسانندگی آن ها بسیار کم و در حدود $10^{-18}\ s/cm$ تا $10^{-8} s/cm$ است.

(ب) رساناها: موادی مانند آلومینیوم و نقره که رسانندگی آن ها زیاد و در حدود $10^{4} s/cm$ تا $10^{6} s/cm$ است و مقاومت الکتریکی آن ها با افزایش دما زیاد می شود.

(ج) نیم رساناها: موادی هستند که رسانندگی آن ها بین رسانندگی رساناها و نارساناها است . به طور کلی رسانندگی مواد نیم رسانا به دما، روشنایی، میدان مغناطیسی و مقداردقیق ناخالصی اتم ها بستگی دارد.

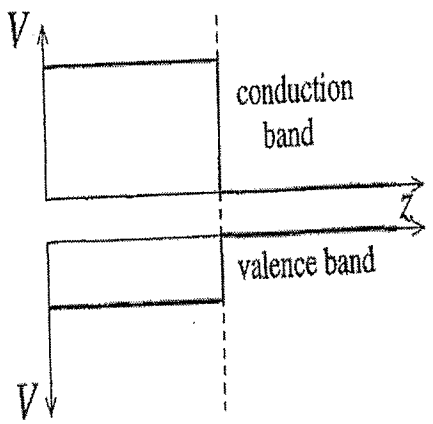
مواد نیم رسانا در دماهای خیلی پایین هیچگونه جریانی را از خود عبور نمی دهند و مقاومت الکتریکی آنها بسیار بالا است و نارسانا به حساب می آیند، اما با افزایش دما به رسانا تبدیل شده و قادر به عبور جریان می شوند. ولی بر خلاف مواد رسانا، با افزایش دما مقاومت الکتریکی آنها کاهش می یابد[۵،۶،۷].

برای توضیح رسانندگی مواد عموماً از نظریه های مختلفی استفاده می شود که یکی از این نظریه ها، نظریه نواری می باشد که در بخش بعد به توضیح و بررسی آن می پردازیم[۶].

۱-۳- نظریه نواری رسانش

درون نیم رساناها دو تراز انرژی مجزا وجود دارد. تراز پایین تر پر از الکترون است. این تراز از الکترون های ظرفیت تشکیل شده است که دارای پیوندهای کووالانسی هستند و اتم ها را در بلور به هم متصل نگه می دارد. به این تراز، باند ظرفیت (والانس)[۵] می گویند.

تراز بالایی تقریباً خالی از الکترون است و باند رسانش(هدایت)[۶] نامیده می شود و اختلاف انرژی بین این دو باند را "باند ممنوع"[۷]می نامیم[۸]. در شکل ۱-۱ باند ظرفیت و باند رسانش نشان داده شده است.



شکل(۱-۱) باند ظرفیت و باند رسانش

۵-Valance banb

۶- Conduction band

۷-Band Gap

چون مقاومت الکتریکی مواد نیم رسانا در اثر افزایش دما کاهش می یابد، لازم است که نظریه نواری رسانش را به طور دقیق تر بررسی و بیان کنیم. طبق این نظریه تمام الکترون های درون ماده در نوارهای ویژه انرژی به نام نوارهای مجاز انرژی قرار دارند و این نوارها به ترتیب از پایین به بالا پر شده و پهنای آنها و فاصله بین نوارها (یعنی گاف انرژی)بستگی به نوع ماده دارد و در مواد مختلف، متفاوت است.

بر این اساس می توانیم مواد رسانا، نارسانا و نیم رسانا را به صورت زیر نیز تعریف کنیم:

(الف) موادی که در آنها بالاترین نوار اشغال شده توسط الکترون همیشه نیمه پر است، مواد رسانا هستند.

(ب) موادی که در آنها بالا ترین نوار اشغال شده توسط الکترون کاملاً پراست و فاصله آن با نوار مجاز بالاتر در حدود چندین الکترون ولت (حدود پنج الکترون ولت) می باشد را مواد نارسانا می گویند. در این دسته ازمواد الکترون ها نمی توانند از اتم هایشان جدا شوند و همواره نارسانا باقی می مانند.

(ج) موادی که در دماهای پایین، بالاترین نوار مجازشان کاملاً پراست اما اختلاف انرژی آن با نوار مجاز بالاتر در حدود یک الکترون ولت می باشد را مواد نیم رسانا می نامند. در این دسته از مواد، الکترونها در دماهای بالا با دریافت انرژی به نوار مجاز بالاتر منتقل می شوند و یک نوار نیمه پر(نوار رسانش) را تشکیل می دهند[۶-۵].

پس می توانیم بگوییم که در نیم رساناها، الکترون هایی که به باند رسانش منتقل می شوند، عامل رسانش می باشند. علاوه بر این الکترون ها، حفره های ایجاد شده در باند ظرفیت (والانس) نیزعامل رسانش نیم رساناها هستند. چون با انتقال الکترون از باند والانس یک فضای خالی ازالکترون (خلأ ابر الکترونی) ایجاد می شود که به منزله یک بار مثبت (به اندازه بار الکترون)رفتار می کند و در حین حرکت در باند ظرفیت، در عمل رسانش شرکت می کند.

این حفره برای رسیدن به حالت پایدار(یعنی کمترین مقدار انرژی ممکن)، سعی می کند به بالاترین زیرترازهای[۸] باند والانس منتقل شود و نیز با افزایش انرژی به تراز های پایین تر منتقل می شود. از طرفی الکترونهای منتقل شده به باند رسانش نیز در حالت عادی در تراز انرژی با کمترین مقدار قرار می گیرند. بنابراین با افزایش انرژی، به بالای باند رسانش منتقل می شوند. بنابراین با افزایش انرژی، الکترونها به بالای باند رسانش و حفره ها به پایین باند والانس کشیده می شوند و فاصله آنها افزایش می یابد[۷].

نکته دیگر راجع به وضعیت الکترونهای موجود در باند رسانش این است که این الکترونها می توانند آزادانه به تمام نقاط بلور منتقل شوند، بنابراین آنها را مانند الکترونهای آزاد در نظر می گیریم [۹]. بنابراین انرژی آنها برابر با $E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ و اندازه حرکت آنها نیز برابر با $\vec{p}=\hbar\vec{k}$ می باشد.

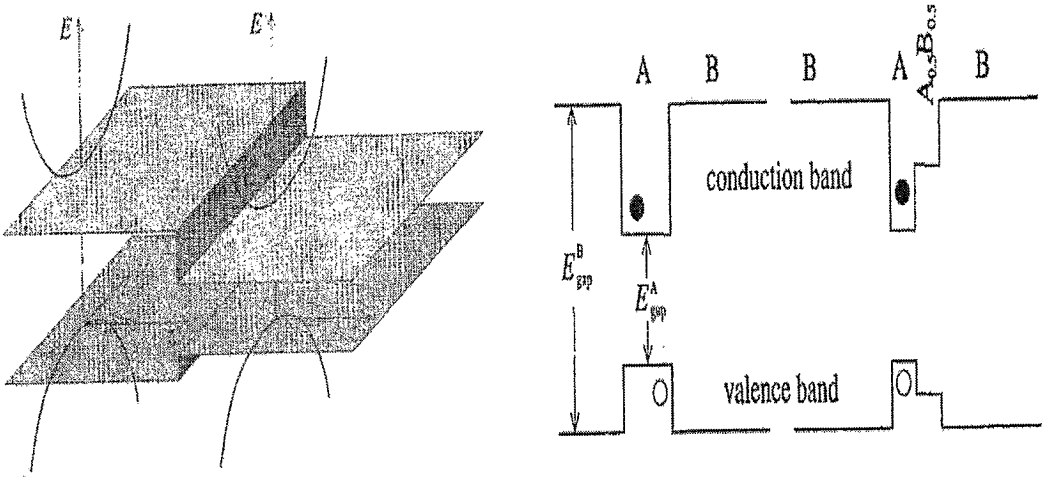
لازم به ذکر است که در بررسی این الکترون ها گاهی اوقات از نظریه الکترون نیمه آزاد نیز استفاده می شود که اساس این نظریه توسط سامرفیلد[۹] پایه گذاری شده است[۱۰].

۸- Subbands

۹- Samerfield

۱-۴- انواع نانوساختارها[۱۰]

با توجه به مطالبی که در مورد نیم رساناها بیان شد، اکنون می توانیم انواع نانوساختارها را تعریف کنیم. به طور کلی از قرار گرفتن دو بلور نیم رسانا در کنار یکدیگر، به شرط اینکه باند رسانش و ظرفیت آنها با هم متفاوت باشد، ساختاری به وجود می آید که به آن چند پیوندی[۱۱] گفته می شود. همچنین از قرار گرفتن تعدادی چند پیوندی در مجاور هم، یک چند ساختاری[۱۲]تشکیل می شود که در شکل ۱-۲نشان داده شده اند[۱۱].



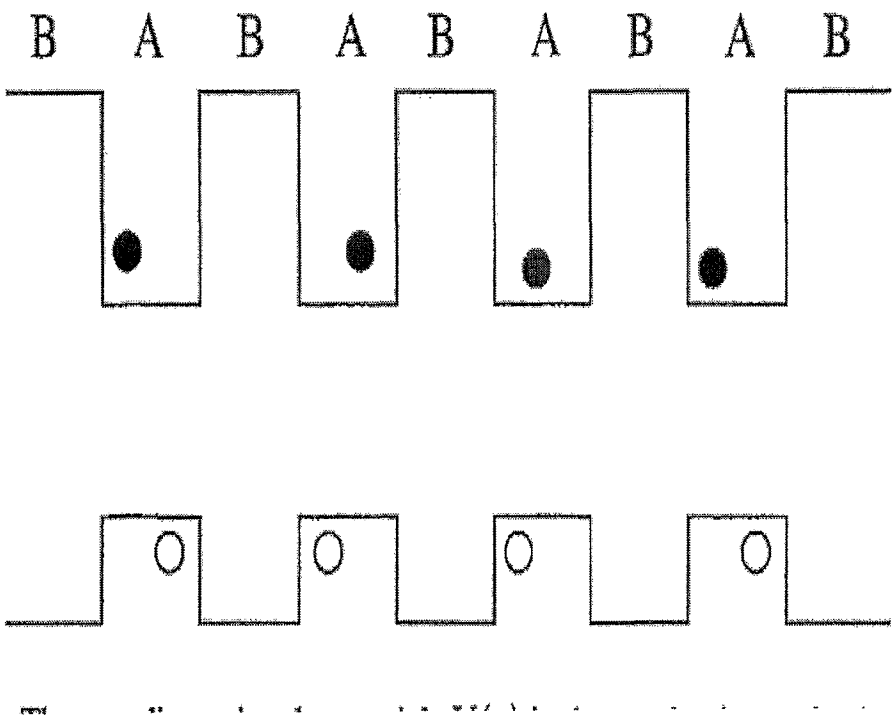
شکل (۱-۲): سمت راست:چند ساختاری سمت چپ: چند پیوندی

۱۰- Nano structure

۱۱- Heterojunction

۱۲- Heterostructure

در شکل های قبل، اگر لایه A به حد کافی نازک باشد، به ترکیب حاصل چاه کوانتومی[۱۳] گفته می شود [۱۲] که در شکل ۱-۳ دیده می شود.



شکل ۱-۳: چاه کوانتومی

۱۳-Quantum Well

با کاهش ابعاد حرکت الکترون های محدود شده (یا حفره ها) در یک لایه نیم رسانا، در رفتار آنها تغییر اتی به وجود می آید. منظور از ابعاد حرکت، تعداد درجات آزادی در اندازه حرکت الکترون ها می باشد. در چاه کوانتومی، الکترون در یک جهت محدود می شود. حال اگر الکترون در دو جهت محدود شود، یعنی تعداد درجات آزادی به یک کاهش یابد، یک سیم کوانتومی[۱۴] تشکیل می شود[۱۳].

به طور کلی، هر گاه یک نیم رسانا را با یک نیم رسانای دیگر، که تراز رسانش بالاتری دارد، طوری محدود کنیم که الکترون در آن فقط در یک راستا آزادی حرکت داشته باشد، یک سیم کوانتومی تشکیل می شود. اگر تعداد درجات آزادی[۱۵] را با D_f و تعداد جهت های محدودیت[۱۶] را با D_c نشان دهیم، در سیم های کوانتومی، $D_f = 1$ و $D_c = 2$ می باشد. سیم های کوانتومی دارای شکل های مختلفی هستند و برای به دست آوردن ویژه توابع و ویژه مقادیر انرژی الکترون در آنها باید به سطح مقطع آن توجه کنیم و در صورت لزوم از تقریب های خاصی استفاده کنیم[۱۵-۱۴].

همچنین اگر یک نیم رسانا طوری درون نیم رسانای دیگر قرار گیرد که الکترون در هر سه جهت محدود شود، ($D_c = 3$) و تعداد درجات آزادی آن صفر باشد،($D_f = 0$) ساختار تشکیل شده یک نقطه کوانتومی[۱۷] است. نقاط کوانتومی به دو صورت مکعبی(جعبه های کوانتومی[۱۸]) و کروی می باشند که نقاط کوانتومی کروی کاربرد بیشتری دارند و به طور وسیعتری مورد مطالعه قرار گرفته اند[۱۵].

۱۴- Quantum Wire

۱۵- Degrees of freedom

۱۶- Degrees of confinement

۱۷- Quantum Dot

۱۸- Quantum Boxes

۱-۵- مروری بر فصل های آینده

در فصل دوم این پایان نامه، به طور خلاصه روش های حل معادله شرودینگر در سیم های کوانتومی با سطح مقطع های مختلف را بیان می کنیم و سپس در مورد نقطه های کوانتومی با سطح مقطع بیضوی صحبت خواهیم کرد[۱۶] و معادله شرودینگر را در آن ها با استفاده از نظریه اختلال حل می کنیم و برای نقاط کوانتومی با شعاع های متفاوت نمودار مقادیر انرژی را رسم خواهیم کرد.

در فصل سوم، سطوح انرژی و گذارهای مغناطو- اپتیکی[۱۹] را در سیم های کوانتومی با جفت شدگی اسپین- مدار[۲۰] بررسی می کنیم و سپس معادله شرودینگر را برای یک سیم کوانتومی با جفت شدگی اسپین- مدار حل می کنیم. در ادامه گذارهای دو قطبی مجاز را در یک سیم کوانتومی در حضور جفت شدگی اسپین- مدار مورد مطالعه قرار می دهیم و نهایتاً سطوح انرژی الکترون در یک سیم کوانتومی را در حضور جفت شدگی اسپین- مدار محاسبه می کنیم و نمودار حالتهای انرژی پائین را برای الکترونهای درون سیم کوانتومی برای دو نیم رسانای $InAs$ و $GaAs$ رسم کرده و نتایج را بیان می کنیم.

در فصل چهارم، خصوصیات دینامیکی اسپین و جمعیت زیرباندها[۲۱] را در یک سیم کوانتومی شبه یک بعدی[۲۲]، با در نظر گرفتن جفت شدگی حرکت مداری و اسپینی[۲۳] و همچنین اثر راشبا[۲۴] بررسی می کنیم. برای انجام این کار، یک سیم کوانتومی شبه یک بعدی را تحت تأثیر یک میدان مغناطیسی

۱۹- Magneto- Optical transition

۲۰- Spin – Orbit Coupling

۲۱-Sub band population

۲۲- Qusi one dimensional Quantum Wire

۲۳- Spin – Orbit Coupling

۲۴- Rashba Effect

که بر سیم عمود است، قرار می دهیم. همچنین یک میدان الکتریکی را در قالب پتانسیلی که با تقریب خوبی به شکل سهموی است و به ان پتانسیل تحدید[۲۵] گفته می شود، اعمال می کنیم[۱۷].

سپس با توجه به اینکه الکترون های درون سیم تحت تأثیر پتانسیل تحدید هستند، مقادیر چشمداشتی اسپین($\sigma_i (i = x, y, z)$) و جمعیت زیرباندها ($N = a^+ a$)را به کمک عملگر چگالی[۲۶]به دست می آوریم و نمودار آن ها را بر حسب زمان، برای سیم های مختلف رسم می کنیم و نتایج را به صورت عددی بیان می کنیم.

۲۵-Confinement potential

۲۶- Density Operator

فصل دوم

حل معادله شرودینگر در سیم های کوانتومی[1] و نقطه های کوانتومی[2]

۲-۱- مقدمه

همانطور که در فصل اول بیان شد، سیم ها و نقطه های کوانتومی از انواع نانوساختارها[3] می باشند که کاربرد زیادی دارند[۱۴]. در این فصل انواع سیم ها و نقطه های کوانتومی را نام برده، معادله شرودینگر را در آن ها حل خواهیم کرد و ویژه مقادیر انرژی را در هر مورد به دست می آوریم. برای نوشتن هامیلتونی در این نانو ساختارها باید از تقریب جرم مؤثر[4] استفاده کنیم [۱۸] که در ابتدای این فصل آن را توضیح می دهیم.

در مورد نقطه های کوانتومی که دارای تقارن بیضوی هستند، می توانیم ویژه مقادیر انرژی را با استفاده از نظریه اختلال مرتبه اول [۱۶] به دست آوریم که در انتهای این فصل آن را توضیح می دهیم.

۱-Quantum wires
۲-Quantum Dots
۳-Nano structures
٤- Effective mass

۲-۲- تقریب جرم مؤثر

با توجه به مطالب بیان شده در مورد نظریه نواری رسانش، می توانیم تقریب جرم مؤثر را توضیح دهیم. اگر الکترونی به طور آزاد در باند رسانش درون یک نیم رسانا در حال حرکت باشد، تحت تأثیر تمام اتم های بلور نیم رسانا قرار می گیرد و بنابراین جرم یا لختی کمتری از خود نشان می دهد. به این مقدار لختی، جرم مؤثر الکترون می گوییم.

از نقطه نظر فیزیکی این کاهش جرم به دلیل اندرکنش الکترون با اتم های بلور، برخورد الکترون به اتم های بلور و انتقال اندازه حرکت الکترون به آن ها می باشد.هر چند جرم مؤثر الکترون باید به مکان آن بستگی داشته باشد، ولی می توانیم با توجه به اینکه اتم ها به طور تصادفی در بلور قرار گرفته اند، یک مقدار ثابت برای جرم مؤثر الکترون در نظر بگیریم. البته جرم مؤثرالکترون به نوع ماده بستگی دارد.

همچنین می توانیم بگوییم هر قدر الکترون در پتانسیل قویتری قرار بگیرد، جرم مؤثر کمتری از خود نشان می دهد زیرا تحت تأثیر اندرکنش قویتری قرار می گیرد. پس الکترون های باند والانس دارای جرم مؤثر کمتری نسبت به الکترون های باند رسانش هستند.

۲-۳- معادله شرودینگر در سیم های کوانتومی

۲-۳-۱- سیم کوانتومی با سطح مقطع مستطیلی

ساده ترین نوع سیم کوانتومی، سیمی با سطح مقطع مستطیلی می باشد[۱۴]. می دانیم که در سیم کوانتومی الکترون یا حفره فقط در یک جهت به طور آزادانه حرکت می کند. بنابراین معادله شرودینگر سه بعدی در حالت کلی در تقریب جرم مؤثر به صورت زیر می باشد:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z)+V(x,y,z)\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z) \qquad (۱-۲)$$

که E ویژه مقدار انرژی، m جرم مؤثر الکترون و $\psi(x,y,z)$ تابع موج الکترون درون سیم کوانتومی می باشد.فرض می کنیم الکترون در راستای طول سیم (یعنی محور x ها) آزادانه حرکت می کند، بنابراین پتانسیل در این راستا برابر با صفر است، $V(x)=0$ و می توانیم بنویسیم:

$$V(x,y,z)=V(y,z) \qquad (۲-۲)$$

با استفاده از روش جداسازی متغیرها و سپس جایگزینی در معادله (۲-۱) خواهیم داشت:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}=E_x\psi(x) \qquad (۳-۲)$$

و

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[\frac{\partial^2\psi(y,z)}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi(y,z)}{\partial z^2}]+V(y,z)\psi(y,z)=E_{y,z}\psi(y,z) \qquad (۴-۲)$$

معادله (۲-۴) ، معادله شرودینگر برای پتانسیل محدود دو بعدی در سیم کوانتومی است که برای سیم های کوانتومی با سطح مقطع های مختلف از آن استفاده می کنیم.برای مثال در قسمت بعد یک سیم کوانتومی با سطح مقطع دایره ای را بررسی می کنیم.

۲-۳-۲- سیم کوانتومی با سطح مقطع دایره ای

اکنون به معادله شرودینگر در یک سیم کوانتومی با سطح مقطع دایره ای توجه می کنیم[۱۹]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[\frac{\partial^2\psi(y,z)}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi(y,z)}{\partial z^2}]+V(y,z)\psi(y,z)=E_{y,z}\psi(y,z) \qquad (۵-۲)$$

دراین مورد بهتر است از مختصات قطبی استفاده کنیم. فاصله r و زاویه θ را به صورت زیر تعریف می کنیم:

$$r = \sqrt{y^2 + z^2} \qquad (۶-۲)$$

$$y = r\sin\theta \qquad (۷-۲)$$

$$z = r\cos\theta \qquad (۸-۲)$$

تابع موج $\psi(y,z)$ را می توان بر حسب عبارتهایی از متغیرهای جدید r,θ نوشت. به علت وجود تقارن دایره ای توابع موج به θ بستگی ندارند. بنابراین تابع موج $\psi(r)$ است و معادله شرودینگر عبارت است از :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2})\psi(r)+V(r)\psi(r)=E_r\psi(r) \qquad (۹-۲)$$

که اندیس r در E_r نشان دهنده این است که ویژه مقدارانرژی الکترون با حرکت سطح مقطعی محدود سروکار دارد که در طول محور سیم است.

به روش زیر می توانیم معادله شرودینگر را بر حسب r بنویسیم:

$$\frac{\partial}{\partial y}\psi(r)=\frac{\partial}{\partial r}\psi(r)\times\frac{\partial r}{\partial y} \qquad (۱۰-۲)$$

$$\frac{\partial r}{\partial y}=\frac{1}{2}(y^2+z^2)^{\frac{-1}{2}}\times 2y=\frac{y}{r}\rightarrow\frac{\partial\psi(r)}{\partial y}=\frac{\partial\psi(r)}{\partial r}\times\frac{y}{r} \qquad (۱۱-۲)$$

$$\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial y}\psi(r)=\frac{\partial}{\partial y}[\frac{\partial}{\partial r}\psi(r)\times\frac{y}{r}]\rightarrow\frac{\partial^2\psi(r)}{\partial y^2}=\frac{\partial^2\psi(r)}{\partial r^2}\times\frac{\partial r}{\partial y}\times\frac{y}{r}+\frac{\partial\psi(r)}{\partial r}\times\frac{\partial}{\partial y}(\frac{y}{r}) \qquad (۱۲-۲)$$