

۱۳۳۵/۱۰/۱۸
۱۳۳۵/۱۰/۱۸

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

۱۳۳۵/۱۰/۱۸



دانشکده علوم

پایان نامه کارشناسی ارشد در رشته فیزیک

اثر پارامتر راشبا و میدان مغناطیسی بر حالت‌های اسپینی الکترون در نانوساختارهای
نقطه ای و حلقوی یکسویه

کتابخانه تخصصی فیزیک
دانشگاه شیراز

۱۳۸۷ / ۱۰ / ۱۳

توسط:

رزا صفایی اسدآبادی

استاد راهنما:

دکتر محمد مهدی گلشن

شهریور ۸۷

۱۰۸۰۵۹

به نام خدا

اثر پارامتر راشبا و میدان مغناطیسی بر حالت‌های اسپینی الکترون در نانوساختارهای نقطه ای و حلقوی یکسویه

به وسیله ی:

رزا صفایی اسدآبادی

پایان نامه

ارائه شده به تحصیلات تکمیلی دانشگاه به عنوان بخشی
از فعالیت های تحصیلی لازم برای اخذ درجه کارشناسی ارشد

در رشته ی:

فیزیک

از دانشگاه شیراز

شیراز

جمهوری اسلامی ایران

ارزیابی شده توسط کمیته پایان نامه با درجه: عالی

دکتر محمد مهدی گلشن، استادیار بخش فیزیک (استاد راهنما)

دکتر محمود براتی، استاد بخش فیزیک

دکتر محمود مرادی، استاد بخش فیزیک

دکتر حبیب اله شهری، استادیار بخش فیزیک

شهریورماه ۱۳۸۷

سپاسگزاری

اینک فرصتی است تا از تلاشهای بی دریغ و دلسوزانه استاد گرانقدر جناب آقای دکتر محمد مهدی گلشن که در تهیه و تنظیم این رساله زحمات فراوانی متحمل شده و در تمام مراحل مرا یاری داده اند صمیمانه تشکر و قدردانی نمایم. همچنین از اساتید ارجمند آقایان دکتر محمود براتی، دکتر محمود مرادی و دکتر حبیب اله شهری که همواره مرا از راهنمایی های خویش بهره مند ساخته اند بی اندازه سپاسگزارم و از خداوند سعادت و کامیابی ایشان را آرزومندم.

چکیده

اثر پارامتر راشبا و میدان مغناطیسی بر حالت‌های اسپینی الکترون در نانوساختارهای نقطه ای و حلقوی یکسویه

به وسیله ی

رزا صفایی اسدآبادی

دستکاری و کنترل حالت‌های اسپینی الکترون نقش مهمی را در ساختار الکترونیک اسپینی بازی می‌کند. بدین منظور، با به کار بردن یک میدان مغناطیسی برای حذف تبهگنی کرامرز، حالت‌های اسپینی از طریق جفت شدگی اسپین-مدار راشبا که قدرت آن به ولتاژهای صفحات موجود بستگی دارد، دستکاری و کنترل می‌شود. در فصل مشترک چنین نانوساختارهایی الکترون‌های رسانش، یک گاز الکترونی دوبعدی تشکیل می‌دهند. به علاوه، تفاوت مواد سازنده ساختار ناهمگن، همراه با میدان الکتریکی خارجی منجر به محدود شدن آزادی حرکت الکترون به یک نانوسیم یک بعدی، نقطه کوانتومی دوبعدی، حلقه یکسویه کوانتومی و ... می‌شود. در این رساله، ابتدا دینامیک اسپین در نانوساختارهای نقطه ای و حلقوی یکسویه را تحت شرایط مذکور بررسی می‌کنیم. نتایج این رساله حاکی از وجود لنگش، علاوه بر حرکت تقدیمی حول میدان مغناطیسی، می‌باشد. حرکت تقدیمی در نقاط کوانتومی، دایروی است، در حالی که در حلقه های یکسویه بستگی به محل الکترون در حلقه دایروی یا بیضوی خواهد داشت. همچنین نشان خواهیم داد که میانگین های زیرلایه ای دچار پدیده فروهش و نمو به طور دوره ای می‌شوند.

علاوه بر این، یک حالت درهم تنیده کوانتومی نقش مهمی را در زمینه تئوری اطلاعات کوانتومی از قبیل ارتباطات کوانتومی و محاسبات کوانتومی بازی می‌کند. بنابراین ما در ادامه دینامیک درهم تنیدگی حالت‌های زیرلایه ای و اسپینی الکترون را در یک نقطه کوانتومی دوبعدی همسانگرد راشبا، همراه با یک میدان مغناطیسی با اندازه دلخواه مطالعه می‌کنیم. با توجه به نتایج موجود، درهم تنیدگی بین حالت‌های اسپینی و زیرلایه های ساختاری، تحت شرایطی خاص، دچار پدیده فروهش و نمو می‌شود.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱	فصل اول: مقدمه
۶	فصل دوم: نانو ساختارها
	۱-۲- مواد نانومقیاس (Nano scale) به عنوان
۷.....	حد واسط بین مواد اتمی و مواد کپه‌ای.....
۸.....	۲-۲- کوانتومی بودن رفتار ذرات در مواد نانومقیاس.....
۹.....	۳-۲- از اتم تامولکول و نقطه کوانتومی.....
۱۱.....	۴-۲- کوچک کردن ماده کپه‌ای تا حد نقطه کوانتومی.....
۱۲.....	۲-۴-۱- سیستمهای سه بعدی (مواد کپه‌ای).....
۱۵.....	۲-۴-۲- سیستمهای دو بعدی (چاههای کوانتومی).....
۱۸.....	۳-۴-۲- سیستمهای یک بعدی (سیم های کوانتومی).....
۲۰.....	۲-۴-۴- سیستمهای صفر بعدی (نقاط کوانتومی).....
۲۱.....	۵-۲- سطوح اثرژی یک نقطه کوانتومی نیمه رسانا.....
۲۴.....	۲-۶- نقاط کوانتومی دوبعدی.....
۲۵.....	۲-۷- پیوندهای ناهمگن.....
۲۹	فصل سوم: اثر راشبا
۳۰.....	۳-۱- جفت‌شدگی اسپین - مدار در سیستم های الکترونی دوبعدی.....
۳۱.....	۳-۲- استخراج برهم کنش اسپین - مدار در یک ماده کپه‌ای از معادله دیراک.....
۳۴.....	۳-۳- جفت‌شدگی اسپین - مدار راشبا در یک گاز الکترونی دوبعدی.....
۳۷	فصل چهارم: دینامیک کوانتومی و نقطه کوانتومی همسانگرد دوبعدی

۳۸-۱-۴- تحول زمانی و معادله شرودینگر.....

۳۸-۱-۱-۴- عملگر تحول زمانی.....

۴۰-۲-۱-۴- معادله شرودینگر برای عملگر تحول زمانی.....

۴۱-۳-۱-۴- تحول زمانی میانگین‌ها.....

۴۲-۲-۴- حرکت تقدیمی اسپین.....

۴۳-۳-۴- الکترون در یک نقطه کوانتومی همسانگرد دوبعدی.....

فصل پنجم: لنگش‌های دینامیکی حالت‌های اسپینی الکترون در یک نقطه کوانتومی همسانگرد
دوبعدی همراه با اثر راشبا ۴۶

۴۷-۱-۵- نمایش فوک داروین.....

۵۰-۲-۵- عملگر تحول زمانی در نمایش فوک داروین.....

۵۲-۳-۵- میانگین‌های زیرلایه ای و لنگش‌های اسپین.....

فصل ششم: حرکت تقدیمی اسپین در یک حلقه کوانتومی یکسویه شبه یک بعدی راشبا ۶۰

۶۱-۱-۶- هامیلتونی.....

۶۲-۲-۶- عملگر تحول زمانی.....

۶۶-۳-۶- رفتار دینامیکی حالت‌های اسپینی و میانگین‌های زیرلایه ای.....

فصل هفتم: درهم تنیدگی حالت‌های اسپینی و زیرلایه ای الکترون در یک نقطه کوانتومی
دوبعدی همسانگرد همراه با اثر راشبا ۷۱

۷۲-۱-۷- درهم تنیدگی کوانتومی.....

۷۴-۱-۱-۷- حالت‌های درهم تنیده.....

۷۴-۲-۱-۷- درهم تنیدگی دوتایی.....

۷۵-۲-۷- ویژگی‌های آن‌تروپایی درهم تنیدگی.....

۷۷-۳-۷- دینامیک درهم تنیدگی زیرلایه‌های ساختاری و اسپین.....

فصل هشتم: نتایج و پیشنهادات ۸۱

مراجع ۸۴

فهرست شکل ها

صفحه	عنوان
۱۰	شکل ۱-۲ سطوح انرژی الکترونی وابسته به تعداد اتمهای مقید، ...
۱۴	شکل ۲-۲ الکترون در یک جامد سه بعدی [۳۸]. (a) چنین جامدی ...
۱۶	شکل ۳-۲ مدل ذره در جعبه برای یک الکترون آزاد که در امتداد محور z ...
۱۷	شکل ۴-۲ الکترون در یک سیستم دو بعدی (a) یک جامد دو بعدی به طور ...
۱۹	شکل ۵-۲ (a) جامد یک بعدی (b) حالت‌های مجاز (k_x, k_y, k_z) ، به صورت ...
۲۰	شکل ۶-۲ یک جامد صفر بعدی (a) هر سه بعد جامد به اندازه ای که قابل ...
	شکل ۷-۲ (a) منحنی پاشندگی برای الکترونها و حفره ها در یک نیمه رسانای کپه ای
۲۲	(b) منحنی پاشندگی برای الکترونها و حفره ها در یک نقطه کوانتومی نیمه رسانا
	شکل ۸-۲ دو نیمه رسانای غیر یکسان با نوار باندهای متفاوت که برای تشکیل یک پیوند
۲۵	ناهمگن کنار یکدیگر قرار گرفته اند.
	شکل ۹-۲ پتانسیلهای یک بعدی $v(z)$ در باندهای والانس و رسانش در یک پیوند ناهمگن
۲۶	(نشان داده شده با خط چین) بین دو ماده غیر یکسان.
	شکل ۱۰-۲ پتانسیلهای یک بعدی $v(z)$ در باندهای والانس و رسانش برای یک چاه
	کوانتومی معمولی (شکل سمت چپ) و یک چاه کوانتومی پله ای (شکل
۲۶	سمت راست).
	شکل ۱۱-۲ پتانسیلهای یک بعدی $v(z)$ در باند والانس و رسانش برای چاههای
۲۷	کوانتومی دوگانه متقارن (شکل سمت چپ) و غیر متقارن (شکل سمت راست)
	شکل ۱۲-۲ پتانسیلهای یک بعدی $v(z)$ در باند والانس و رسانش برای چاه کوانتومی
۲۷	چند گانه یا ابرشبهه
	شکل ۱۳-۲ پتانسیلهای یک بعدی $v(z)$ در باندهای والانس و رسانش برای یک چاه
	کوانتومی نوع I (شکل سمت چپ) در مقایسه با یک سیستم نوع II (شکل
۲۸	سمت راست)
	شکل ۱۴-۲ پتانسیلهای یک بعدی $v(z)$ در باندهای والانس و رسانش بر یک ابرشبهه
۲۸	نوع I (شکل سمت چپ) در مقایسه با یک سیستم نوع II (شکل سمت راست)

شکل ۱-۳ سیستم مختصاتی که در سراسر این رساله، برای توصیف گاز الکترونی
دو بعدی قرار گرفته در میدان الکتریکی \vec{E} استفاده شده

۳۴

شکل ۱-۴ پتانسیل صفحات فلزی قرار گرفته روی گاز الکترونی دو بعدی (منحنی متشکل
از خطوط پیوسته) و تقریب سهموی مربوطه (منحنی خط چین)

۴۳

شکل ۲-۴ پتانسیل میکروسکوپیکی در یک نقطه کوانتومی. دوره تناوب پتانسیل

۴۴

شکل ۱-۵ مقدار چشم داشتی S_x به ازای $\alpha = 0.4 \times 10^{-12} eV m$ و $l_B = 1.5 \times 10^{-3} m$

۵۶

شکل ۲-۵ مقدار چشم داشتی S_x به ازای $\alpha = 0.5 \times 10^{-12} eV m$ و $l_B = 1.5 \times 10^{-3} m$

۵۶

شکل ۳-۵ مقدار چشم داشتی S_x به ازای $\alpha = 0.4 \times 10^{-12} eV m$ و $l_B = 4.7 \times 10^{-5} m$

۵۶

شکل ۴-۵ مقدار چشم داشتی S_x به ازای $\alpha = 0.5 \times 10^{-12} eV m$ و $l_B = 4.7 \times 10^{-5} m$

۵۶

شکل ۵-۵ مقدار چشم داشتی S_x به ازای $\alpha = 0.4 \times 10^{-12} eV m$ و $l_B = 4.7 \times 10^{-8} m$

۵۶

شکل ۶-۵ مقدار چشم داشتی S_x به ازای $\alpha = 0.5 \times 10^{-12} eV m$ و $l_B = 4.7 \times 10^{-8} m$

۵۶

شکل ۷-۵ مقدار چشم داشتی S_y به ازای $\alpha = 0.4 \times 10^{-12} eV m$ و $l_B = 1.5 \times 10^{-3} m$

۵۷

شکل ۸-۵ مقدار چشم داشتی S_y به ازای $\alpha = 0.5 \times 10^{-12} eV m$ و $l_B = 1.5 \times 10^{-3} m$

۵۷

شکل ۹-۵ مقدار چشم داشتی S_y به ازای $\alpha = 0.4 \times 10^{-12} eV m$ و $l_B = 4.7 \times 10^{-5} m$

۵۷

شکل ۱۰-۵ مقدار چشم داشتی S_y به ازای $\alpha = 0.5 \times 10^{-12} eV m$ و $l_B = 4.7 \times 10^{-5} m$

۵۷

شکل ۱۱-۵ مقدار چشم داشتی S_y به ازای $\alpha = 0.4 \times 10^{-12} eV m$ و $l_B = 4.7 \times 10^{-8} m$

۵۷

شکل ۱۲-۵ مقدار چشم داشتی S_y به ازای $\alpha = 0.5 \times 10^{-12} eV m$ و $l_B = 4.7 \times 10^{-8} m$

۵۷

شکل ۱۳-۵ مقدار چشم داشتی S_z به ازای $\alpha = 0.4 \times 10^{-12} eV m$ و $l_B = 1.5 \times 10^{-3} m$

۵۸

شکل ۱۴-۵ مقدار چشم داشتی S_z به ازای $\alpha = 0.5 \times 10^{-12} eV m$ و $l_B = 1.5 \times 10^{-3} m$

۵۸

شکل ۱۵-۵ مقدار چشم داشتی S_z به ازای $\alpha = 0.4 \times 10^{-12} eV m$ و $l_B = 4.7 \times 10^{-5} m$

۵۸

شکل ۱۶-۵ مقدار چشم داشتی S_z به ازای $\alpha = 0.5 \times 10^{-12} eV m$ و $l_B = 4.7 \times 10^{-5} m$

۵۸

شکل ۱۷-۵ مقدار چشم داشتی S_z به ازای $\alpha = 0.4 \times 10^{-12} eV m$ و $l_B = 4.7 \times 10^{-8} m$

۵۸

شکل ۱۸-۵ مقدار چشم داشتی S_z به ازای $\alpha = 0.5 \times 10^{-12} eV m$ و $l_B = 4.7 \times 10^{-8} m$

۵۸

شکل ۱۹-۵ مقدار چشم داشتی N_x یا N_y به ازای $\alpha = 0.4 \times 10^{-12} eV m$ و

۵۹

$$l_B = 1.5 \times 10^{-3} m$$

شکل ۲۰-۵ مقدار چشم داشتی N_x یا N_y به ازای $\alpha = 0.5 \times 10^{-12} eV m$ و

۵۹

$$l_B = 1.5 \times 10^{-3} m$$

شکل ۲۱-۵ مقدار چشم داشتی N_x یا N_y به ازای $\alpha = 0.4 \times 10^{-12} eV m$ و

۵۹

$$l_B = 4.7 \times 10^{-5} m$$

شکل ۲۲-۵ مقدار چشم داشتی N_x یا N_y به ازای $\alpha = 0.5 \times 10^{-12} eV m$ و

۵۹

$$l_B = 4.7 \times 10^{-5} m$$

- شکل ۲۳-۵ مقدار چشم‌داشتی N_x یا N_y به ازای $\alpha = 0.4 \times 10^{-12} eVm$ و $l_B = 4.7 \times 10^{-8} m$.
 ۵۹
- شکل ۲۴-۵ مقدار چشم‌داشتی N_x یا N_y به ازای $\alpha = 0.5 \times 10^{-12} eVm$ و $l_B = 4.7 \times 10^{-8} m$.
 ۵۹
- شکل ۱-۶ مقدار چشم‌داشتی S_x به ازای $\theta = 0$
 ۶۹
- شکل ۲-۶ مقدار چشم‌داشتی S_y به ازای $\theta = 0$
 ۶۹
- شکل ۳-۶ مقدار چشم‌داشتی S_x به ازای $\theta = \frac{\pi}{4}$
 ۶۹
- شکل ۴-۶ مقدار چشم‌داشتی S_y به ازای $\theta = \frac{\pi}{4}$
 ۶۹
- شکل ۵-۶ مقدار چشم‌داشتی S_x به ازای $\theta = \frac{\pi}{2}$
 ۶۹
- شکل ۶-۶ مقدار چشم‌داشتی S_y به ازای $\theta = \frac{\pi}{2}$
 ۶۹
- شکل ۷-۶ مقدار چشم‌داشتی S_z به ازای $\theta = 0$
 ۷۰
- شکل ۸-۶ مقدار چشم‌داشتی N به ازای $\theta = 0$
 ۷۰
- شکل ۹-۶ مقدار چشم‌داشتی S_z به ازای $\theta = \frac{\pi}{4}$
 ۷۰
- شکل ۱۰-۶ مقدار چشم‌داشتی N به ازای $\theta = \frac{\pi}{4}$
 ۷۰
- شکل ۱۱-۶ مقدار چشم‌داشتی S_z به ازای $\theta = \frac{\pi}{2}$
 ۷۰
- شکل ۱۲-۶ مقدار چشم‌داشتی N به ازای $\theta = \frac{\pi}{2}$
 ۷۰
- شکل ۱-۷ دینامیک درهم‌تنیدگی به ازای $\alpha = 0.3 \times 10^{-12} eVm$ و $l_B = 1.5 \times 10^{-6} m$
 ۸۰
- شکل ۲-۷ دینامیک درهم‌تنیدگی به ازای $\alpha = 0.4 \times 10^{-12} eVm$ و $l_B = 1.5 \times 10^{-6} m$
 ۸۰
- شکل ۳-۷ دینامیک درهم‌تنیدگی به ازای $\alpha = 0.3 \times 10^{-12} eVm$ و $l_B = 4.7 \times 10^{-8} m$
 ۸۰
- شکل ۴-۷ دینامیک درهم‌تنیدگی به ازای $\alpha = 0.4 \times 10^{-12} eVm$ و $l_B = 4.7 \times 10^{-8} m$
 ۸۰

فصل اول

مقدمه

۱- مقدمه

در دهه اخیر، سمت گیری های جدید تحقیقات مدرن که عموماً تکنولوژی و علم نانو مقیاس نامیده می شود، پدیدار شده است [۱،۲]. این رویدادهای جدید شامل توانایی ساختن و دستکاری ساختارهای مصنوعی است که خصوصیات آنها در سطح نانومتر قابل کنترل بوده و در زمینه های تحقیقی گوناگونی از جمله مهندسی، فیزیک، شیمی، علم مواد و زیست مولکولی کاربرد دارد. علم نانو و نانو تکنولوژی قطعاً اثر مهمی در بسیاری از زمینه های زندگی ما دارد که به طور عمده می توان به تکنولوژی اطلاعات، صنعت ارتباطات راه دور، مهندسی، علم مواد و پزشکی اشاره کرد. فناوری نانو واژه ای است کلی که به کلیه فناوری های پیشرفته در عرصه کار با مقیاس نانو اطلاق می شود. معمولاً منظور از مقیاس نانو ابعادی در حدود 1nm تا 100nm می باشد. اولین جرقه فناوری نانو (البته در آن زمان هنوز به این نام شناخته نشده بود) در سال ۱۹۵۹ زده شد. در این سال ریچارد فایمن طی یک سخنرانی با عنوان "فضای زیادی در سطوح پایین وجود دارد" ایده فناوری نانو را مطرح ساخت. وی این نظریه را که در آینده ای نزدیک می توانیم مولکولها و اتم ها را به صورت مستقیم دستکاری کنیم، ارائه داد.

واژه فناوری نانو اولین بار توسط نوریوتانیگوچی استاد دانشگاه علوم توکیو در سال ۱۹۷۴ بر زبانها جاری شد. او این واژه را برای توصیف ساختار مواد (وسایل) دقیقی که تلورانس ابعادی آنها در حد نانو متر می باشد، به کار برد. در سال ۱۹۸۶ این واژه توسط کی اریک در کسلر در کتابی تحت عنوان: "موتور آفرینش: آغاز دوران فناوری نانو" بازآفرینی و تعریف مجدد شد. وی این واژه را به شکل عمیق تری در رساله دکترای خود مورد بررسی قرار داده و بعدها آنرا در کتابی تحت عنوان "نانو سیستم ها، ماشینهای مولکولی، چگونگی ساخت و محاسبات آنها" توسعه داد.

پیشرفتهای قابل توجه در ساختارهای نیمه رسانای کم بعد در طول این دهه، امکان کاهش ابعاد مؤثر این مواد را از کپه ای سه بعدی به سیستمهای چاه کوانتومی شبه دو بعدی، سیمهای کوانتومی شبه یک بعدی و حتی نقاط کوانتومی شبه صفر بعدی فراهم کرده است. اثرات محدودیت کوانتومی در این سیستمهای نیمه رسانا همراه با ابعاد فضایی کاهش یافته، توجه زیادی را به خود جلب نموده. به خصوص خواص اپتیکی و الکترونیکی این سیستمها، که با تغییر در طراحی ساختار آنها قابل کنترل است و به همین علت نیمه

رساناهای محدود شده کوانتومی در زمینه هایی مثل میکروالکترونیک، اپتیک غیرخطی و ... کاربرد دارند [۳]. علاوه بر این در سالهای اخیر، خواص اسپین این نانوساختارها و درهم تنیدگی کوانتومی آن با دیگر زیرسیستم ها نیز به طور فزاینده ای مورد توجه قرار گرفته است [۴]. دستکاری اسپینها در جامدها می تواند راه را برای پیشرفت در تولید ابزارهای الکترونیکی مثل ترانزیستورهای اسپینی، فیلترهای اسپینی و ابزارهای حافظه اسپینی باز کند. حالت های درهم تنیده کوانتومی نیز در زمینه تئوری اطلاعات کوانتومی از قبیل ارتباطات کوانتومی [۵ و ۶] و محاسبات کوانتومی [۷، ۸، ۹، ۱۰] کاربرد دارد. محاسبات کوانتومی وسیله ای است برای حل دسته ای از مسائل که عملاً به وسیله محاسبات معمولی امکان پذیر نمی باشد [۱۱]. در میان تعداد زیادی از طرحها برای ساخت گیتها در کامپیوترهای کوانتومی، سیستم های حالت جامد متشکل از ساختارهای ناهمگن از اهمیت بسزایی برخوردارند [۱۲، ۱۳، ۱۴، ۱۵، ۱۶]. یک راه حل برای ساختن کامپیوترهای کوانتومی حالت جامد، بهره برداری از حالت های کوانتومی اتمهای مصنوعی (نقاط کوانتومی) یا دیگر نانوساختارها می باشد [۱۷، ۱۸].

ساختار ناهمگن، ترکیبی است از دو ماده متفاوت (به عنوان مثال در رساله GaAs و InGaAs) که بر روی هم قرار گرفته اند (با فصل مشترک سطحی). به خاطر گافهای انرژی متفاوت این دو ماده، یک پتانسیل عمیق نامتقارن در راستای عمود بر فصل مشترک تشکیل می گردد. عدم تقارن پتانسیل عمیق نامتقارن در راستای عمود بر فصل مشترک برهم کنش اسپین-مدار راشبا [۱۹] می شود. از آنجایی که اغلب اندازه گیری های اثرات اسپینی در نانوساختارهای نیمه رسانا تحت اثر یک میدان مغناطیسی صورت می گیرد، بنابراین دو برهم کنش وابسته به اسپین ذاتی به طور طبیعی ظاهر می شود: برهم کنش زیمنان که اسپین الکترون را با میدان به کار برده شده جفت می کند و جفت شدگی اسپین-مدار (اثر راشبا). در چنین نانوساختارهایی، الکترونهای رسانش یک گاز الکترونی دوبعدی را در فصل مشترک تشکیل می دهند [۲۰]. به علاوه، تفاوت مواد در ساختارهای ناهمگن، همراه با میدانهای الکتریکی خارجی به کار رفته، آزادی حرکت الکترون را کاهش داده و آن را در یک نقطه کوانتومی دوبعدی یا حلقه یکسویه شبه یک بعدی محدود می کند. این محدودیت می تواند در هر دو راستای یک نقطه کوانتومی همسانگرد دوبعدی، یکسان و سهمی شکل باشد [۲۰]. تبهگنی اسپینی کرامرز (ناشی از تقارن تحت برگشت زمان) را می توان با به کار بردن یک میدان مغناطیسی خارجی از بین برد [۲۱]. بنابراین در ادامه، یک الکترون محدود شده در یک نقطه کوانتومی دوبعدی و حلقه یکسویه شبه یک بعدی، با محدودیت سهمی شکل و در یک میدان مغناطیسی یکنواخت را در نظر خواهیم گرفت. دینامیک اسپین الکترونها، تحت شرایط ذکر شده، به دو دلیل قابل توجه است: اول اینکه اسپین الکترون، یک سیستم دو ترازه طبیعی است که دینامیک آن در

کدگذاری بیت‌های اطلاعاتی اهمیت دارد [۷،۹،۸،۱۰] و ثانیاً، دینامیک اسپین الکترون نسبت به نوفه‌های اجتناب‌ناپذیر الکترومغناطیسی حساس نیست [۲۲]. هدف این رساله، بررسی رفتار دینامیکی اسپین الکترون، در نقاط کوانتومی همسانگرد دوبعدی و حلقه‌های یکسویه شبه یک بعدی و درهم‌تنیدگی آن با زیرلایه‌های ساختاری در حلقه‌های یکسویه شبه یک بعدی واقع در یک میدان مغناطیسی یکنواخت است. با توجه به اینکه هر پیشرفتی در علم نانو لزوماً نیاز به فهم قوانین فیزیکی حاکم بر مواد نانومقیاس و اینکه چگونه اثر متقابل خواص فیزیکی متفاوت یک سیستم نانوسکوپیک تبدیل به رفتار یا خاصیت جدیدی می‌شود، دارد. بنابراین ارائه شرح مختصری از قوانین فیزیکی اساسی حاکم بر مواد نانومقیاس همراه با تأکید ویژه‌ای بر نقاط کوانتومی و حلقه‌های یکسویه سودمند است. نقطه کوانتومی مثالی از یک جامد است که همه ابعاد آن تا حد چند نانومتر کوچک شده‌اند. به این منظور ابتدا در فصل دوم علت تفاوت قابل توجه در رفتار مواد نانومقیاس با مواد کپه‌ای و سایر مواد را توضیح داده، همچنین در مورد کوانتومی بودن خواص آنها بحث خواهیم کرد. ساختار الکترونی یک نقطه کوانتومی حد واسط ساختار یک اتم و یک ماده کپه‌ای است. با استفاده از مدل گاز الکترونی آزاد و مفهوم محدودیت کوانتومی توضیح می‌دهیم که یک جامد وقتی که ابعادهای یکی بعد از دیگری کوچک می‌شوند چه اتفاقی می‌افتد و با استفاده از آن تعریف دقیقی را برای یک چاه کوانتومی، سیم کوانتومی، حلقه کوانتومی و یک نقطه کوانتومی ارائه خواهیم داد و در نهایت ساختار سطوح انرژی در یک نقطه کوانتومی و مفاهیمی چون پیوند ناهمگن و ساختار ناهمگن را بررسی می‌کنیم. در فصل سوم، منشأ اثر راشبا با استفاده از جوابهای کلی معادله دیراک برای یک گاز الکترونی، قرار گرفته در یک میدان الکتریکی خارجی، مورد بررسی قرار گرفته و همچنین هامیلتونی راشبا برای یک گاز الکترونی دوبعدی نیز ارائه شده است. در فصل چهارم به بررسی دینامیک کوانتومی و حرکت تقدیمی اسپین الکترون در یک میدان مغناطیسی یکنواخت می‌پردازیم و در ادامه به منظور بررسی این اثر در یک نقطه کوانتومی همسانگرد دوبعدی، هامیلتونی الکترون را برای این سیستم واقع در یک میدان مغناطیسی یکنواخت همراه با اثر راشبا بدست می‌آوریم. در فصل پنجم دینامیک اسپین را در چنین سیستمی مورد مطالعه قرار می‌دهیم. نتایج، حاکی از این است که برای یک حالت اولیه هم‌دوس اسپینی، اسپین حول میدان مغناطیسی علاوه بر حرکت تقدیمی روی دایره، دارای لنگش نیز می‌باشد و برای مؤلفه اسپین موازی با میدان مغناطیسی و جمعیت‌های زیر لایه‌ای پدیده فروهش و نمو به طور دوره‌ای رخ می‌دهد که جزئیات این نتایج فیزیکی و نکات قابل توجه نیز ذکر شده است [۲۳،۲۴،۲۵]. در فصل ششم، رفتار دینامیکی اسپین الکترون همراه با زیرلایه‌های ساختاری در یک حلقه کوانتومی شبه یک بعدی از جنس InAs تحت همان شرایط موجود برای نقطه کوانتومی

مورد مطالعه قرار می گیرد. در ابتدا هامیلتونی این سیستم را که شامل اثر راشبا و پتانسیل محدودیت شعاعی می باشد در حد میدان قوی نوشته، سپس با محاسبه عملگر تحول زمانی، میانگین های زیرلایه ای و مؤلفه های اسپین را برای شرط اولیه خاصی محاسبه و رسم می کنیم. بر اساس نتایج موجود، اسپین الکترون علاوه بر لنگش های ذاتی، حرکت تقدیمی بیضوی یا دایروی (بسته به محل الکترون در حلقه یکسویه) حول میدان مغناطیسی انجام می دهد در حالی که میانگین های زیرلایه ای دچار پدیده فروهش و نمو به طور دوره ای و با فرکانس متغیر می شوند [۲۸]. رفتار دینامیکی درهم تنیدگی حالت های اسپینی با زیرلایه های ساختاری، در یک نقطه کوانتومی همسانگرد دوبعدی در فصل هفتم مورد بررسی قرار می گیرد. در این فصل بعد از مروری مختصر بر برخی مفاهیم در مورد درهم تنیدگی کوانتومی، به محاسبه تحول زمانی این کمیت با استفاده از آنتروپی فون-نویمان به عنوان معیاری از آن، برای شرایط اولیه خاصی و عملگر تحول زمانی موجود در فصل پنجم می پردازیم. نشان می دهیم که برای درهم تنیدگی اسپین الکترون و زیرلایه ها، پدیده فروهش و نمو به طور دوره ای رخ می دهد. نتایج بدست آمده، روش جدیدی را برای کنترل درهم تنیدگی توسط اثر راشبا و میدان مغناطیسی خارجی ارائه می دهد که نیاز اساسی فرآیند پردازش اطلاعات کوانتومی در حالت جامد می باشد [۲۶، ۲۷]. فصل آخر نیز به مروری بر نتایج بدست آمده در این رساله، همچنین بحث و بررسی آن ها می پردازیم.

فصل دوم

نانوساختارها

۲- نانو ساختارها

این فصل شرح مختصری از قوانین فیزیکی اساسی حاکم بر مواد نانومقیاس با تأکیدی خاص روی نقاط کوانتومی می باشد. نقاط کوانتومی نمونه‌ای از یک جامد هستند که همه ابعاد آنها تا حد چندنانومتر کوچک شده است. در این فصل در ابتدا رفتار مواد نانومقیاس با مواد کپه‌ای و اتمی مقایسه می‌شود و در ادامه با استفاده از قوانین مکانیک کوانتومی، مدل گاز الکترونی آزاد و مفهوم محدودیت کوانتومی حالت‌های انرژی یک جامد با ابعاد خیلی کوچک بررسی خواهد شد و با استفاده از آنها مفهوم چاه کوانتومی، سیم کوانتومی و نقطه کوانتومی بیان می‌گردد و در نهایت مفهوم پیوندهای ناهمگن و نقاط کوانتومی چندگانه مطرح خواهد شد.

۲-۱- مواد نانومقیاس^۱ به عنوان حد واسط بین مواد اتمی و مواد کپه‌ای

مواد در ابعاد نانو رفتاری از خود نشان می‌دهند که حدواسط بین جامد ماکروسکوپی و سیستم مولکولی یا اتمی است. به عنوان مثال، یک کریستال معدنی^۲ متشکل از چند اتم را در نظر بگیرید. هرچند خصوصیات این کریستال با خصوصیات یک تک اتم متفاوت است، ولی این خصوصیات مشابه یک جامد کپه‌ای هم نیست. تعداد اتمها روی سطح کریستال، کسر مهمی از تعداد کل اتمهاست و تأثیر زیادی روی خصوصیات کلی کریستال دارد. به سادگی می‌توان حدس زد که این کریستال، واکنش‌پذیری شیمیایی بالاتری نسبت به جامد کپه‌ای مشابه دارد و احتمالاً در دمای پایین تری ذوب خواهد شد. اینک مثال یک نانو لوله کربنی را در نظر بگیرید. این نانو لوله را می‌توان به عنوان یک ورقه گرافیتی پیچیده شده به طریقی که اتمهای کربن روی یک لبه ورقه به طور کولانسی به اتمهای روی لبه مقابل پیوند دارند تصور کرد. برخلاف اجزای تشکیل دهنده یکسان این کریستال، یک نانو لوله کربن از نظر شیمیایی کاملاً پایدار است زیرا لایه والانس همه اتمهای کربن آن اشباع شده‌اند. به علاوه، حدس می‌زنیم که نانو لوله‌های کربنی رساناهای خوبی باشند. زیرا الکترونها می‌توانند آزادانه در طول ساختارهای ریز سیم مانند آنها حرکت کنند. این مواد نانوسکوپی می‌توانند خصوصیتی داشته باشند که

¹ Nanoscale

² Inorganic

همتاهای بزرگتر (کپه‌ای) یا کوچکتر (اتمها) آنها ندارند. ولی بسیاری از خصوصیات آنها به سادگی قابل درک نیست. این خصوصیات به رفتاری مربوط می‌شوند که حاملهای بار (الکترونها و حفره‌ها) وقتی که در چنین ساختارهایی قرار دارند، از خود نشان می‌دهند که فقط با قوانین مکانیک کوانتومی قابل توضیح‌اند [۲۹].

۲-۲- کوانتومی بودن رفتار ذرات در مواد نانومقیاس

یک جنبه مهم مکانیک کوانتومی، دوگانگی ذره - موج است که به وسیله دوبروی معرفی شد و براساس آن هر ذره می‌تواند به یک موج مادی که طول موج آن به صورت زیر است، ارتباط داده شود.

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (۱-۲)$$

وقتی ابعاد یک سیستم فیزیکی با طول موج ذراتی که با این سیستم برهم‌کنش می‌کنند، قابل مقایسه باشد، رفتار ذرات به وسیله قوانین مکانیک کوانتومی توصیف می‌شود [۳۰]. همه اطلاعاتی که در مورد ذره نیاز داریم با حل معادله شرودینگر به دست می‌آید. جوابهای این معادله حالت‌های فیزیکی ممکن را که سیستم می‌تواند در آنها یافت شود، نشان می‌دهد. به عنوان نمونه مورد الکترونهای چرخنده به دور یک هسته را می‌توان نام برد که طول موج مربوط به آنها از مرتبه اندازه فاصله هسته - الکترون است. خوشبختانه، مکانیک کوانتومی نیازی به شرح و توصیف حرکت اجسام در جهان ماکروسکوپی ندارد. طول موج مربوط به جسم ماکروسکوپی خیلی کوچکتر از اندازه جسم است و مسیر چنین جسمی به خوبی با استفاده از اصول مکانیک کلاسیک قابل استخراج است. ما می‌توانیم از مفهوم دوگانگی ذره - موج برای ارائه توصیفی ساده درباره حاملهای بار در یک نانو کریستال نیمه رسانا استفاده کنیم. در یک نیمه‌رسانای معدنی کپه‌ای، الکترونهای باند هدایت (وحفره‌های باند والانس) در سراسر کریستال آزادانه حرکت می‌کنند و حرکت آنها می‌تواند به وسیله ترکیبی خطی از امواج تخت که طول موجشان از مرتبه نانومتر است توصیف شود. این بدان معناست که وقتی ابعاد جامد نیمه‌رسانا با این طول موجها قابل مقایسه شود، یک حامل بار آزاد محدود شده در این ساختار مانند یک ذره در جعبه رفتار می‌کند [۳۱]. جوابهای معادله شرودینگر در این مورد امواج ایستاده محدود شده در چاه پتانسیل هستند و انرژی‌های مربوط به دو تابع موج مختلف، متفاوت و ناپیوسته می‌باشند. یعنی انرژی ذره هر مقداری نمی‌تواند داشته باشد و سیستم دارای یک طیف انرژی گسسته است. گذارهای بین دو تراز به صورت پیکهای گسسته در طیف اپتیکی دیده می‌شود.

اگر ابعاد یک کریستال نیمه‌رسانا تا حد چند نانومتر کوچک شود، سیستم حاصل یک نقطه کوانتومی نامیده می‌شود^۳ که موضوع بحث ما در سراسر این فصل خواهد بود. مطلب اصلی در اینجا این است که به منظور پیش‌بینی و درک خواص فیزیکی مواد نانومقیاس، مثل رسانایی گرمایی و الکتریکی یا طیف جذبی و تابشی، در ابتدا نیاز به تعیین ساختار ترازهای انرژی آنها داریم.

برای سیستمهای محدود شده کوانتومی^۳ مثل نقاط کوانتومی، محاسبه ساختار انرژی به دو روش امکان‌پذیر است. روش اول، مطالعه تحول ساختار باند یک جامد کپه‌ای وقتی که ابعاد آن تا حد چند نانومتر کوچک می‌شود، است. این روش با جزئیات در بخش ۲-۴ توضیح داده خواهد شد. در روش دوم، از حالت‌های الکترونی اتمهای منزوی که در بخش ۲-۳ نشان داده شده شروع می‌کنیم و سپس به مطالعه چگونگی تحول سطوح انرژی، وقتی که اتمها به هم نزدیکتر شده و باهم شروع به برهم‌کنش می‌کنند، می‌پردازیم.

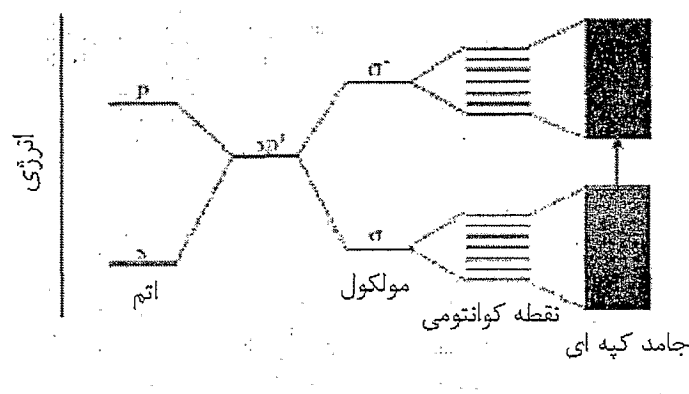
۲-۳- از اتم تا مولکول و نقطه کوانتومی

از نقطه‌نظر یک شیمیدان، اجزای سازنده مواد الکترونها و هسته‌ها هستند. در یک اتم، الکترونها حول یک هسته می‌چرخند و تعداد الکترونها به عنصر مورد نظر بستگی دارد. در ساده‌ترین مورد یعنی اتم هیدروژن، یک الکترون حول یک پروتون می‌چرخد. حالت‌های الکترونی اتم هیدروژن به طور تحلیلی قابل محاسبه است [۳۲، ۳۳]. اگر بیش از یک الکترون وجود داشته باشد، محاسبه سطوح انرژی پیچیده‌تر می‌شود، چون علاوه بر برهم‌کنش بین الکترون و هسته، برهم‌کنش الکترون - الکترون نیز باید در نظر گرفته شود. اگرچه حالت‌های انرژی اتمهای چندالکترونی به طور تحلیلی قابل محاسبه نیست، ولی تقریب‌هایی مثل روش هارتری - فوک وجود دارد [۳۳]. هر الکترون به مدار مشخصی نسبت داده می‌شود که آنرا اوربیتال اتمی (AO) می‌نامند. بسته به تکانه زاویه‌ای مداری، اوربیتال‌های اتمی (AO_s) دارای شکلهای کروی (اوربیتال s)، دمبلی شکل (اوربیتال p) و شکلهای پیچیده‌تری (اوربیتال‌های f, d) می‌باشند. به عنوان مثال، هشت الکترون والانس اتم نئون، یک اوربیتال s و سه اوربیتال p اطراف هسته را اشغال می‌کنند. به طوریکه در هر اوربیتال یک الکترون با اسپین up و یک الکترون با اسپین down وجود دارد [۳۳]. سطح انرژی اوربیتال s پایین‌تر از سطوح اوربیتال‌های p است. براساس قوانین مکانیک کوانتومی، سطوح انرژی گسسته است.

ساختار (ذره) بزرگتر بعدی که از ترکیب چند اتم به دست می‌آید، مولکول است که در آن الکترونها به طور جمعی حول بیش از یک هسته می‌چرخند. در یک مولکول، الکترونها موجود

³ quantum confined

در باندهای کووالانس بین اتمها، متعلق به اتم خاصی نیستند، بلکه بین همه آنها مشترک‌اند. به عنوان مثال، در متان (CH_4) هر کدام از چهار اوربیتال اتمی sp^3 مربوط به اتم مرکزی به طور خطی با اوربیتال s یک اتم هیدروژن ترکیب شده‌اند تا یک اوربیتال پیوند (σ) و یک اوربیتال پادپیوند (σ^*) تشکیل شود [۳۲]. از آنجا که این اوربیتالها بین اتمها مشترک‌اند، اوربیتالهای مولکولی نامیده می‌شوند (MO، شکل ۱-۲) در اینجا فقط پایین ترین اوربیتالهای انرژی (پیوند) اشغال شده و این بیانگر پایداری نسبی متان است [۳۳]. به کمک اصولی مشابه، امکان بررسی ساختار الکترونی سیستم‌های مرکب مثل مولکولهای بزرگ یا خوشه‌های اتمی فراهم می‌شود. وقتی اتمها ترکیب می‌شوند تا مولکول به وجود آید، ما از سطوح انرژی گسسته اوربیتالهای اتمی شروع می‌کنیم و انتظار داریم که به سطوح گسسته برای اوربیتالهای مولکولی برسیم [۳۲].



اتمهای پیوندی

شکل ۱-۲ سطوح انرژی الکترونی وابسته به تعداد اتمهای مقید، سطوح انرژی گسسته اوربیتالهای اتمی با افزایش تعداد اتمهای مقید با هم ترکیب شده و باندهای انرژی را تولید می‌کنند (در اینجا برای مواد نیمه رسانا رسم شده است) [۳۹]. بنابراین مواد نانومقیاس نیمه رسانا (نقاط کوانتومی) می‌توانند به صورت حد واسط مولکولهای کوچک و مواد کپه ای مورد توجه و بررسی قرار گیرد.

وقتی اندازه یک سیستم چنداتمی بزرگتر می‌شود، محاسبه ساختار الکترونی بر حسب ترکیبی از اوربیتالهای اتمی ممکن نخواهد بود [۳۴، ۳۵، ۳۶]. اما ساده‌سازی، هنگامی که سیستم تحت مطالعه، یک کریستال نامحدود دوره‌ای باشد امکان‌پذیر است. ساختار الکترونی جامدهای کریستالی بر حسب ترکیبهای دوره‌ای اوربیتالهای اتمی (توابع بلوخ) قابل بررسی است [۳۷، ۳۸]. در این مدل فرض می‌شود که ساختار کریستال تقارن انتقالی کامل دارد و سهم سطح کریستال با فرض نامتناهی بودن کریستال قابل صرفنظر است (شرایط مرزی دوره‌ای). الکترونها به عنوان ترکیبی از امواج تخت گسترده در سراسر جامد توصیف می‌شوند. بر خلاف اتمها و مولکولها، ساختار انرژی یک جامد شامل سطوح انرژی گسسته نیست، بلکه به صورت