

بسم الله الرحمن الرحيم

١٠٢٧٥٥



دانشگاه اصفهان

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه دکتری فیزیک نظری گرایش ماده - چگال

بررسی نوسانات بلوخ و انتقال ذره در مقیاس نانو به  
روش‌های جبری

استاد راهنما:

دکتر فریدین خیر اندیش

پژوهشگر:

حسن پهلوانی

دیماه ۱۳۸۶

۱۳۸۷ / ۰۵ / ۲۸

۱۵۲۶۵۵

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات،  
ابتکارات و نوآوری های ناشی از تحقیق  
موضوع این پایان نامه متعلق به دانشگاه  
اصفهان است.



دانشگاه اصفهان

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه ی دکتری رشته ی فیزیک نظری گرایش ماده چگال آقای حسن پهلوانی

تحت عنوان

**بررسی نوسانات بلوخ و انتقال ذره در مقیاس نانو به روش های جبری**

در تاریخ ۱۳۸۶/۱۰/۲۲ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه **جیب**..... به تصویب نهایی رسید.

امضا

۱- استاد راهنمای پایان نامه دکتر فردین خیر اندیش با مرتبه ی علمی استادیار

امضا

۲- استاد داور داخل گروه دکتر محمد علی شاهزمانیان با مرتبه ی علمی استاد

امضا

۳- استاد داور داخل گروه دکتر سید جواد اخترشناس با مرتبه ی علمی استادیار

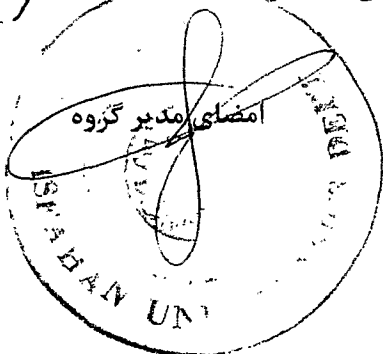
امضا

۴- استاد داور خارج از گروه دکتر منصور حقیقت با مرتبه ی علمی دانشیار

امضا

۵- استاد داور خارج از گروه دکتر کیوان آقابابایی سامانی با مرتبه ی علمی استادیار

امضای مدیر گروه



## تشکر و قدردانی

خدای را هزاران سپاس که توفیق تحریر، تدوین و تکمیل این پایان نامه و توان به انجام رساندن آن را به اینجانب عنایت فرمود.

قبل از هر چیز از استاد گرامی و برادر ارجمند جناب آقای دکتر فردین خیراندیش به خاطر هدایت و راهنمایی این مجموعه کنکاش، کمال تشکر و سپاس گذاری را دارم.

از اساتید بزرگوارم جنابان آقای پرفسور محمد علی شاهزمانیان و دکتر سید جواد اختر شناس به عنوان داوران داخلی که حوصله به خرج دادند و این پایان نامه را مطالعه کرده اند تشکر و قدردانی می نمایم.

از آقایان دکتر کیوان آقابابایی و دکتر منصور حقیقت به عنوان داوران خارجی، مدیران محترم گروه فیزیک در طی این دوره و همچنین از پدر و مادر بزرگوارم تشکر می کنم.

در نهایت از همسر مهربان و فداکارم و فرزند عزیزم که نتوانستم در طی این دوره آن گونه که شرع و عرف مقرر فرموده بود، حق و دینشان را ادا کنم قدردانی و سپاس گذاری می نمایم.

تقدیم به :

ستارگان آسمان هدایت، ائمه هدی علیهم السلام

پیشکش به:

همسر مهربان

و فرزند عزیزم نوید رضا

برون داده‌های پایان نامه

مقاله های چاپ شده:

1. "Deformed parafermionic algebra from single-band tight-binding dynamics" *Phy. Scr* 77 (2008)
2. "Driven Mesoscopic Electric Circuits" *Modern Physics Letters B* 22, (2008)

## چکیده

بررسی و شناخت نوسانات بلوخ که از تغییر مکان تابع موج الکترونی یک ذره کوانتومی باردار در پتانسیل تناوبی تحت اثر میدان خارجی ناشی می‌شوند، از مهم‌ترین موضوعات تحقیقاتی روز در مقیاس نانو و علم نانوالکترونیک است. به منظور تحقیق در این زمینه، دانستن قوانین حاکم بر رفتار ذرات کوانتومی باردار و چگونگی حرکت آن‌ها در نانو ساختارها مهم است.

دینامیک کوانتومی یک ذره باردار در زنجیره ای نامتناهی از چاه‌های کوانتومی یک بعدی در تقریب مدل بستگی قوی تحت تأثیر یک میدان الکتریکی یکنواخت به روش تحلیلی در فصل اول بررسی شده است. هم‌چنین سیمای کلی از نوسانات بلوخ و نا همدوسی آن‌ها در شبکه‌های اپتیکی بر اساس شواهد تجربی و کارهای محاسباتی مرور شده است. برای مطالعه دینامیک چنین ذره کوانتومی تحت تأثیر میدان خارجی وابسته به زمان اختیاری، در فصل دوم روش جبر دینامیکی برای سامانه‌هایی که هامیلتونی آن‌ها یک ترکیب خطی از جملاتی که مولدهای جبر لی را می‌سازند بررسی شده است. بنابراین ساختارهای جبری هامیلتونی نقش اصلی را در حل دقیق سامانه‌های وابسته به زمان بازی می‌کنند، هم‌چنین در ادامه فصل دوم جبر پارافرمیون ها بررسی شده است. در واقع پارافرمیون‌های یک نوع از جبر های چندجمله‌ای هستند، پارافرمیون های مرتبه  $p$  از یک نوع آمار معروف به پارا آمار مابین فرمیون ها و بوزون ها تبعیت می‌کنند، پارافرمیون‌های مرتبه  $p = 1$ ، فرمیون‌های معمولی‌اند. بر اساس این روش جبر دینامیکی، در فصل سوم تمام ویژگی‌های دینامیک کوانتومی ذره در مدل بستگی قوی تحت تأثیر میدان وابسته به زمان خارجی مطالعه شده است.

از آن جایی که در علم نانوالکترونیک و مقیاس نانو، الکترون‌ها معمولاً خواص شبه موجی از خود نشان می‌دهند، وقتی ابعاد سامانه در حدود طول همدوسی حامل‌هاست (حداکثر فاصله‌ای که یک ذره می‌تواند با حفظ اطلاعات مربوط به فاز خود طی کند) برای بررسی دینامیک سامانه نه تنها باید مکانیک کوانتومی به کار گرفته شود بلکه گسستگی بار الکترون نیز باید در نظر گرفته شود. بنابراین در فصل چهارم سامانه‌های مزوسکوپی معرفی شده‌اند و تئوری کوانتومی مدارهای الکتریکی مزوسکوپی بررسی می‌شود.

در مقیاس نانو با تعداد متناهی از تله‌های کوانتومی سروکار داریم. به طوری که عبور الکترون از این تله‌ها توسط تونل-زنی کوانتومی امکان پذیر است و خاصیت موجی ذره در این سامانه‌ها دارای اهمیت است. در فصل پنجم بر اساس روش‌های عملگری در مکانیک کوانتومی برای حرکت یک ذره باردار کوانتومی در یک سامانه متناهی که از تعداد مشخصی از تله کوانتومی ساخته شده است تحت تأثیر میدان خارجی وابسته به زمان با استفاده از شرایط مرزی دیریکله، توانسته‌ایم یک مدل جبری معرفی کنیم. این مدل با جبر پارافرمیون‌ها منطبق می‌شود. در حقیقت یک مدل واقعی برای پارافرمیون پیدا کرده‌ایم. برای مثال این مدل در دینامیک اتم‌های سرد در شبکه‌های اپتیکی و هم‌چنین در مدل سازی سیم کوانتومی در مدل بستگی قوی تحت یک میدان الکتریکی وابسته به زمان خارجی دیده می‌شود.

در فصل ششم ارتباط بین هامیلتونی که مدل بستگی قوی را توصیف میکند و هامیلتونی یک مدار کوانتومی مزوسکوپی با بار گسسته روشن گردیده است. بر اساس این ارتباط به روش جبر دینامیکی جریان ماندگاری برای یک حلقه کوانتومی محاسبه شده است. جریان ماندگاری و طیف انرژی یک مدار الکتریکی مزوسکوپی LC تحت تأثیر یک پتانسیل وابسته به زمان، پیدا شده است.



## کلمات کلیدی

مدل بستگی قوی، چاه‌های کوانتومی، نوسانات بلوخ، سامانه، شبکه‌های اپتیکی، جبر لی، جبر پارافرمیون‌ها،

مقیاس نانو، مدارهای کوانتومی مزوسکوپی، طول همدوسی، گسستگی بار، نانو ساختارها

## فهرست مطالب

صفحه	عنوان
	<b>فصل اول: سیمای کلی نوسانات بلوخ</b>
۱	۱-۱- مدل بستگی قوی .....
۳	۲-۱- نوسانات بلوخ .....
۶	۳-۱- شبکه‌های اپتیکی .....
۷	۱-۳-۱- پتانسیل‌های اپتیکی .....
۹	۴-۱- رفتار تحلیلی نوسانات بلوخ در تقریب مدل بستگی قوی .....
۱۱	۱-۴-۱- عملگر تحول زمانی در پایه‌های موج بلوخ .....
۱۲	۲-۴-۱- عملگر تحول زمانی در نمایش وانیر .....
۱۷	۵-۱- نوسانات بلوخ ناهمدوس .....
۱۷	۱-۵-۱- سامانه‌های چند ذره‌ای و برهم‌کنش اتم‌ها .....
۱۹	۲-۵-۱- برهم‌کنش اتم‌ها و مدل بوز-هابارد .....
۲۱	۳-۵-۱- بررسی مدل بوز-هابارد شبکه‌های اپتیکی با استفاده از شبیه‌سازی عددی .....

## فصل دوم: مروری بر جبرلی و معرفی جبر چند جمله‌ای پارافرمیونی

۲۸	۱-۲- مقدمه .....
۲۹	۲-۲- معرفی جبر لی .....
۳۰	۳-۲- عملگر تحول زمانی برای هامیلتونی وابسته به زمان به روش جبری لی .....
۳۱	۱-۳-۲- محاسبه عملگر تحول زمانی روش جبری لی .....
۳۳	۴-۲- جبرهای چند جمله‌ای .....
۳۵	۵-۲- روش ساخت جبرهای چند جمله‌ای .....
۳۶	۶-۲- نگاشت جبرهای چند جمله‌ای به جبرهای لی (جبرهای خطی) .....
۳۷	۷-۲- نوسانگرهای پارافرمیونی تغییر شکل یافته .....

۸-۲- ارتباط بین جبرهای پارافرمیونی و جبرهای چند جمله‌ای ..... ۳۹

### فصل سوم بررسی دینامیک نوسانات بلوخ به روش جبرلی

- ۱-۳- عملگر تحول زمانی در مدل بستگی قوی به روش جبر لی ..... ۴۵
- ۱-۱-۳- دینامیک تولید شده تحت میدان‌های خارجی مستقل از زمان ..... ۴۹
- ۲-۱-۳- میدان‌های خارجی نوسانی ..... ۵۰
- ۳-۱-۳- حالت‌های کلی شامل تر کیب میدان‌های خارجی متناوب و مستقیم ..... ۵۱
- ۲-۳- شبه انرژی‌ها ..... ۵۲
- ۳-۳- مقادیر چشمداشتهی ..... ۵۴
- ۴-۳- معادلات هایز نبرگ و مقادیر چشمداشتهی ..... ۵۶
- ۵-۳- مدل تک - نواری ..... ۶۰
- ۶-۳- معادله تحول جبر  $su(2)$  ..... ۶۲

### فصل چهارم تئوری کوانتومی برای مدارهای الکتریکی

- ۱-۴- مقدمه ..... ۶۴
- ۲-۴- طول‌های مشخصه در سامانه‌های مزوسکوپی ..... ۶۵
- ۱-۲-۴- طول موج دوپروی ..... ۶۵
- ۲-۲-۴- مسافت آزاد میانگین ..... ۶۶
- ۳-۲-۴- طول پخش ..... ۶۶
- ۴-۲-۴- طول استتار ..... ۶۷
- ۵-۲-۴- طول جای‌گزیده ..... ۶۸
- ۳-۴- مکانیک کوانتوی همدوس ..... ۶۹

۷۰	۴-۴- ظهور گسستگی بار الکتریکی
۷۱	۵-۴- کوانتس مدار الکتریکی مطابق با گسستگی بار الکتریکی
۷۵	۶-۴- رابطه عدم قطعیت و کمینه حالت عدم قطعیت
۷۶	۱-۶-۴- رابطه عدم قطعیت در فضای بار
۷۸	۳-۱-۴- مدار کوانتومی مزوسکوپی LC
۸۰	۷-۴- مدار کوانتومی مزوسکوپی L
۸۰	۸-۴- مدار کوانتومی خالص L
۸۱	۲-۸-۴- مدار L در حضور میدان یکنواخت
۸۲	۳-۸-۴- مدار L در حضور منبع خارجی وابسته به زمان
۸۳	۹-۴- مدار کوانتومی خالص C (حصار کولنی)
۸۵	۱۰-۴- محاسبه جریان ماندگاری در مدار خالص

### فصل پنجم جبر پارافرمیونی تغییر شکل یافته حاصل از دینامیک تک-نواری

#### در مدل بستگی قوی

۸۸	۱-۵- مقدمه
۹۱	۲-۵- جبر پارافرمیونی تغییر شکل یافته
۹۶	۱-۲-۵- نمایش جبر $su(2)$ برای حالت‌های ویژه ۲ و ۳ $N =$
۹۸	۳-۵- عملگر تحول زمانی
۹۹	۱-۳-۵- عملگر تحول زمانی برای حالت‌های ویژه ۲ و ۳ $N =$
۱۰۰	۲-۳-۵- عملگر تحول زمانی برای حالت کلی $N \geq 4$

## فصل ششم مدارهای الکتریکی مزوسکوپی واداشته

۱-۶- مقدمه	۱۰۵
۲-۶- ارتباط بین هامیلتونی مدل بستگی قوی و هامیلتونی مدارهای کوانتومی مزوسکوپی	۱۰۶
۳-۶- مدار کوانتومی مزوسکوپی L در حضور میدان خارجی اختیاری وابسته به زمان	۱۰۷
۴-۶- مدار کوانتومی مزوسکوپی LC	۱۱۱
۱-۴-۶- محاسبه جریان در مدار کوانتومی مزوسکوپی LC	۱۱۱
۲-۴-۶- طیف انرژی در مدار کوانتومی مزوسکوپی LC	۱۱۴
بحث و نتیجه گیری کلی	۱۱۸
کتابنامه	۱۲۰

## فهرست شکل‌ها

صفحه	عنوان
۳	شکل (۱-۱) آرایه‌ای منظمی از چاه‌های کوانتومی
۵	شکل (۲-۱) نوسانات الکترون در حضور میدان الکتریکی در منطقه اول بریلوئن
۱۱	شکل (۳-۱) حالت وانیر-استارک $\psi_0$ در نمایش بلوخ
۱۳	شکل (۴-۱) حالت وانیر $\psi_0$ در نمایش وانیر
۱۵	شکل (۵-۱) مد دمشی برای یک حالت اولیه ای در تقریب مدل بستگی قوی
۱۶	شکل (۶-۱) مد نوسانگری برای یک توزیع گاوسی تعمیم یافته در تقریب مدل بستگی قوی
۲۰	شکل (۷-۱) طرحواره اتم‌های سرد در یک شبکه اپتیکی بر اساس مدل بوز-هابارد
۲۳	شکل (۸-۱) توزیع اندازه حرکت اتم‌ها در یک شبکه اپتیکی
۲۴	شکل (۹-۱) دینامیک نوسانات بلوخ اتم‌ها، در میدان الکتریکی یکنواخت
۲۵	شکل (۱۰-۱) افت نوسانات بلوخ ناشی از برهم‌کنش اتم - اتم
۶۸	شکل (۱-۴) مقایسه بین پتانسیل کولنی استتار شده و نا استتار شده
۸۹	شکل (۱-۵) طرحواره ای از اتم‌های به دام افتاده در شبکه اپتیکی
۹۰	شکل (۲-۵) الگوی از مدل معرفی شده برای یک سامانه مزوسکوپی یک بعدی

معروف به سیم کوانتومی

## پیش‌گفتار

با پیشرفت‌های روز افزون فناوری نانو در عرصه‌های مختلف علمی به‌خصوص در ساخت وسایل اندازه‌گیری در مقیاس نانو و نانو الکترونی یک، دانستن قوانین حاکم بر رفتار ذرات و چگونگی حرکت آن‌ها در نانو ساختارها بسیار لازم و ضروری است. بررسی دینامیک یک ذره کوانتومی باردار در یک پتانسیل دوره‌ای تحت تاثیر میدان خارجی یکی از پدیده‌های جالب در فیزیک کوانتومی است [۲۰۱]. به طوری که وقتی به یک ذره کوانتومی باردار (الکترون) موجود در سامانه میدان خارجی اعمال می‌شود، نوسانات متناوبی توسط الکترون در بلور به وجود می‌آید که به نوسانات بلوخ معروف است [۳-۵] و دارای دوره تناوب بلوخ  $T_B = (2\pi\hbar/aF)$  هستند، به طوری که در آن  $F$  مقدار میدان ساکن و  $a$  دوره تناوب است. یک پایه متعامد مناسب برای تحقیق در مورد ساختارها با پتانسیل تناوبی حالت‌های جای-گزیده است. سامانه‌هایی که در آن‌ها حالت‌های جای‌گزیده نقش اصلی را بازی می‌کنند با مدل بستگی قوی<sup>۱</sup> توصیف می‌شوند. این حالت‌ها به حالت‌های وانیر-استارک<sup>۲</sup> معروفند [۶-۱۳] و طبیعت آن‌ها اثر ژرفی در خواص انتقال الکترونیکی در جامدات دارد. شرط تحقق نوسانات بلوخ این است که دوره تناوب نوساناتی که ذره در شبکه کسب می‌کند، از زمان واهلش (متوسط زمانی بین دو برخورد متوالی) کوچک‌تر باشد  $(T_B \ll \tau)$ ، معمولاً این شرط در سامانه‌های حالت جامدی برقرار نیست و نوسانات بلوخ را نمی‌توان در آن‌ها مشاهده کرد. این شرط معمولاً در شبکه‌های استاندارد ارضا می‌شود که در آن‌ها پارامتر شبکه از مرتبه آنگستروم باشد. اولین آزمایش تجربی مشاهده نوسانات بلوخ در سال ۱۹۹۲ در چنین سامانه‌هایی صورت پذیرفت [۱۴ و ۱۵]، به طوری که با در نظر گرفتن شبکه‌های اپتیکی که در آن‌ها امواج ایستاده لیزر نقش شبکه‌های بلور و اتم‌های سرد خنثی، نقش الکترون را بازی می‌کنند، مشکلات مربوط به فرآیندهای واهلش حل گردید و توانستند نوسانات بلوخ را ببینند. بر این اساس آزمایش‌های زیادی برای آشکار کردن نوسانات بلوخ انجام شد. این آزمایش‌ها را می‌توان برای الکترون‌ها در ابر شبکه‌های ماده چگال [۱۶-۱۹]، برای اتم‌های فرا سرد در شبکه‌های اپتیکی [۲۰-۲۶]، برای چگالش بوز-اینشتین [۱۵ و ۲۷-۳۳]، در شبکه‌های اپتیکی دو بعدی [۳۴ و ۳۵] و در کارهای مختلف دیگری از جمله [۳۶-۴۵] جستجو کرد. هم‌چنین کارهای نظری زیادی نیز در زمینه نوسانات بلوخ در فلزات و نیمه رساناها در تقریب مدل بستگی قوی به انجام رسیده است [۴۶-۵۰]. که بسیاری از آن‌ها به خواص کپه‌ای ماده اختصاص دارد. معمولاً در این بررسی‌ها حد ترمودینامیکی  $(N \rightarrow \infty)$  یعنی مواردی که در آن

<sup>1</sup> Tight-binding model

<sup>2</sup> Wannier-Stark

تعداد بسیار زیادی از تله‌های کوانتومی در نظر گرفته می‌شود بررسی شده است. در اصل برای مدل بستگی قوی بیان-های تحلیلی متعددی برای میدان‌های خارجی مستقل از زمان و وابسته به زمان وجود دارد [۵۱ و ۴۲ و ۴۳ و ۵۱ و ۵۲]. از جمله آن‌ها می‌توان به کارهای کرش<sup>۳</sup> و همکاران اشاره کرد [۵۱-۵۵]. آن‌ها توانستند دینامیک یک ذره کوانتومی باردار را در یک زنجیره نامتناهی از چاه‌های کوانتومی یک بعدی در تقریب مدل بستگی قوی و تحت اثر یک میدان اختیاری وابسته به زمان  $F(t)$  بررسی کنند که با هامیلتونی زیر توصیف می‌شود

$$\hat{H} = G \sum_{n=-\infty}^{+\infty} |n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n| + F(t) \sum_{n=-\infty}^{+\infty} n |n\rangle\langle n|, \quad (1-0)$$

کت  $|n\rangle$  در این‌جا، بیان‌گر یک حالت وانیر جای‌گزیده در مکان  $n$  است. این حالت‌ها متعامند. تابع حقیقی  $G$  تابع زوج شدگی انتگرال همپوشانی نزدیک‌ترین همسایه‌هاست. بر اساس روش جبر دینامیک هامیلتونی مدل بستگی قوی (۱-۰) را می‌توان به صورت زیر نوشت [۵۱]

$$\hat{H}(t) = G(\hat{K} + \hat{K}^\dagger) + F(t)\hat{N}, \quad (2-0)$$

که در آن عملگرهای بالا برنده  $\hat{K}^\dagger$  و پائین آورنده  $\hat{K}$  و عملگر موقعیت  $\hat{N}$ ، جبر لی زیر را ارضا می‌کنند

$$\begin{aligned} [\hat{N}, \hat{K}] &= -\hat{K}, & [\hat{N}, \hat{K}^\dagger] &= \hat{K}^\dagger, \\ [\hat{K}, \hat{K}^\dagger] &= 0. \end{aligned} \quad (3-0)$$

آن‌ها با انتخاب یک میدان خارجی مناسب (مستقل از زمان-هماهنگ و.....) بر اساس جبر لی در مورد دینامیک تولید شده توسط هامیلتونی بحث کردند.

گفتنی است که هامیلتونی (۲-۰) در غیاب نیروی خارجی ( $F=0$ ) در نمایش بلوخ به راحتی قطری می‌شود [۴۶ و ۴۸]

$$E = G \cos(ak). \quad (4-0)$$

وقتی به سامانه میدان وارد می‌گردد جای‌گزینی تدریجی توابع موج را باعث می‌شود و طیف پیوسته (۴-۰) به ترازهایی با فاصله مساوی از هم معروف به ترازهای وانیر-استارک تبدیل می‌گردد

$$E_m = mFa, \quad (5-0)$$

<sup>3</sup> Korsch



که در آن از طریق معادله  $T_B$  می‌توان عبارت  $Fa$  را به نوسانات بلوخ ربط داد. بنابراین نتیجه می‌گیریم که بررسی و شناخت نوسانات بلوخ از مهم‌ترین موضوعات تحقیقاتی روز در مقیاس نانو است. ساخت ترانزیستور بلوخ (نانو ترانزیستور) و ساخت وسایل بسیار دقیق (ابزار دقیق) برای اندازه‌گیری در مقیاس اتمی بعضی از کاربردهای نوسانات بلوخ در علم نانو الکترونیک است [۵۷ و ۵۶].

در مقیاس نانو صحبت بر سر انتقال یک الکترون یا در مورد کلی یک تک ذره باردار کوانتومی بین تعداد متناهی جزیره (منطقه پراکندگی) است. به طوری که اگر قطب‌های مثبت و منفی یک منبع به وسیله گاف عایقی از یک‌دیگر جدا شده باشند و در وسط گاف الکترونی به نام جزیره قرار گیرد عبور الکترون از گاف عایقی توسط تونل زنی کوانتومی صورت می‌گیرد. بنابراین و سایل مورد مطالعه در نانو الکترونیک از رفتار موجی الکترون تبعیت می‌کنند. همان طور که ذکر شد نوسانات بلوخ در حالت ماکروسکوپی برای تعداد نامتناهی از تله‌های کوانتومی به روش مدل بستگی قوی بررسی شده‌اند [۵۱ و ۴۸]، ما در این پایان نامه مدلی که از تعداد متناهی تله کوانتومی در مقیاس نانو و نیز در موردی که شرایط مرزی بسته یا دیریکله<sup>۴</sup> در آن در نظر گرفته می‌شود را معرفی می‌کنیم و دینامیک ذره کوانتومی باردار را در آن مطالعه می‌کنیم. این مدل از مهم‌ترین موضوعات تحقیقات روز در مقیاس نانو به شمار می‌رود زیرا با آن می‌توان، دینامیک اتم‌های سرد را در شبکه‌های اپتیکی در تقریب مدل بستگی قوی توصیف کرد [۵۸-۶۰]، در مورد پدیده‌های انتقال و یا خواص تراپردی ذرات کوانتومی باردار رساناها در مقیاس نانو می‌توان بحث نمود [۶۱ و ۶۲]، همچنین یک سیم کوانتومی در تقریب مدل بستگی قوی را که تحت تأثیر یک میدان خارجی اختیاری وابسته به زمان قرار می‌گیرد، می‌توان طراحی کرد [۶۳-۶۵].

با توجه به اهمیت این مدل، هامیلتونی وابسته زمانی که ما در نظر خواهیم گرفت، هامیلتونی یک سامانه متناهی با شرایط مرزی بسته و یا دیریکله است که به شکل زیر تعریف می‌شود

$$\hat{H} = G \sum_{n=1}^{N-1} (|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|) + F(t) \sum_{n=1}^N n |n\rangle\langle n|, \quad (۶-۰)$$

در این معادله  $|n\rangle$  یک حالت جای‌گزیده و انبساط روی مکان  $n$  است. مطالعه این مدل براساس یک روش جبری است که اساس آن بر پایه روش‌های عملگری در مکانیک کوانتومی استوار است [۴۸ و ۵۱]. بنابراین، با استفاده از نظریه گروه‌ها که ابزارهای محاسباتی مفیدی در فیزیک هستند، جبرهای چند جمله‌ای را بررسی می‌کنیم و با شناخت

<sup>۴</sup> Dirichlet

و مطالعه یک نوع از جبرهای چند جمله‌ای معروف به جبرهای پارافرمیونی می‌توانیم نشان دهیم که هامیلتونی (۳-۰) با شرایط مرزی دیریکله را می‌توان به عنوان یک مدل واقعی از جبرهای پارافرمیونی تغییر شکل یافته در نظر گرفت. پارافرمیون‌های مرتبه  $p$  در حالتی موازی با بوزون‌ها و فرمیون‌ها معرفی شده‌اند [۶۶-۶۸]. فرمیون‌های معمولی متناظر با پارافرمیون‌های مرتبه  $p = 1$  هستند و مطابق اصل پائولی، هر حالت توسط یک فرمیون اشغال می‌شود. از آن جایی که فرمیون‌ها از آمار فرمی-دیراک و بوزون‌ها از آمار بوز-انیشتن تبعیت می‌کنند، می‌توان فرض کرد که پارافرمیون‌ها از یک نوع آمار ما بین دو آمار ذکر شده معروف به پارا آمار تبعیت می‌کنند [۶۹-۷۱]. گُوسنه<sup>۵</sup> مفهوم جبر پارافرمیونی را گسترش داد [۷۲]، رابطه بین جبرهای پارافرمیونی و دیگر جبرها را می‌توان در مرجع [۷۳-۷۷] دید. جبر چند جمله‌ای پارافرمیونی مرتبه  $p$  به صورت زیر داده می‌شود [۶۶]

$$\begin{aligned}
 [\hat{M}, \hat{B}] &= -\hat{B}, \\
 [\hat{M}, \hat{B}^\dagger] &= \hat{B}^\dagger, \\
 \hat{B}^{p+1} &= (\hat{B}^\dagger)^{p+1} = 0, \\
 \hat{B}^\dagger \hat{B} &= \hat{M}(p-1-\hat{M}) = \phi[\hat{M}], \\
 \hat{B} \hat{B}^\dagger &= (\hat{M}+1)(p-\hat{M}) = \phi[\hat{M}+1], \\
 \hat{M} &= \frac{1}{2}([\hat{B}^\dagger, \hat{B}] + p).
 \end{aligned}
 \tag{۷-۰}$$

جبر پارافرمیونی تغییر شکل یافته به دست آمده در معادله (۵-۲۶) برای موارد ویژه  $N = 203$  دقیقاً با جبر پارافرمیونی (۷-۰) یکسان است و با یک نگاهت مناسبی تبدیل به جبر  $su(2)$  می‌شود، و برای  $N \geq 4$  یک جبر تغییر شکل یافته‌ای از جبر پارافرمیونی (۷-۰) است.

بنابراین نتیجه می‌گیریم که برای بررسی و تحقیق روش‌های تجربی در مقیاس نانومتر باید در زمینه انتقال الکترونیکی در ابعاد اتمی مطالعه کنیم. خواص انتقال در سامانه‌های مختلف به ساختار اتمی آن‌ها بستگی دارد. این مهم باعث شده است که در سال‌های اخیر برای محاسبه رسانش در چنین سامانه‌هایی بر اساس اصول اولیه کوشش‌های زیادی صورت پذیرد، به طوری که روش‌های مختلفی در این زمینه فرمول بندی شده است که پایه مشترکی در روش

<sup>5</sup> Quesne

لندور-باتایگر<sup>۶</sup> دارند. درچنین محاسباتی، سامانه شامل یک سیم کوانتومی معروف به ناحیه پراکندگی است که با اندازه متناهی بین دو اتصال فلزی (منبع پتانسیل خارجی وابسته به زمان) معروف به حمام قرار می‌گیرد [۶۳-۶۵ و ۷۸-۸۶].

گسستگی بار درمقیاس نانو، در نانو الکترونیک و سامانه‌های مزوسکوپی مهم است. سامانه‌هایی که ابعادی در حدود ۱۰ nm دارند به سامانه‌های مزوسکوپی یا نانو ساختارها معروفند. در چنین سامانه‌های رفتار الکترون به صورت موجی است و این رفتار به شکل هندسی نمونه بستگی دارد. وقتی ابعاد سامانه در حدود طول فاز همدوسی حامل‌هاست، (طول همدوسی حامل‌ها حداکثر فاصله‌ای است که یک ذره می‌تواند با حفظ اطلاعات مربوط به فاز خود طی نماید) برای بررسی دینامیک سامانه مکانیک کوانتومی به کارگرفته می‌شود. در این حالت گسسته بودن بار (بارها مضارب درستی از بار الکترون هستند) در بررسی مدارهای کوانتومی مزوسکوپی باید به حساب آورده شود.

نخستین بار لی و چن<sup>۷</sup> یک نظریه کوانتومی برای مدارهای مزوسکوپی با بار گسسته ارائه نمودند [۸۷]. در این نظریه گسسته بودن بار الکتریکی توسط عملگر خودالحاق بار  $\hat{q}$  در نظر گرفته می‌شود که دارای یک طیف گسسته است. یک مدل ساده از چنین سامانه‌هایی مدارهای کوانتومی  $LC$  هستند که با دو پارامتر اساسی خودالحاق  $L$  و ظرفیت  $C$  توصیف می‌شوند [۸۸-۹۰]. نظریه لی و چن در مسائل متنوعی مربوط به مدارهای مزوسکوپی به کار گرفته شده است [۸۸-۹۵]. در ادامه این پایان نامه، با در نظر گرفتن هامیلتونی مدل بستگی قوی با شرایط نامتناهی  $-\infty \leq n \leq \infty$  و هامیلتونی مدارهای کوانتومی مزوسکوپی با بار گسسته مطابق شکل زیر

$$\hat{H}(t) = G(\hat{K} + \hat{K}^\dagger) + F(t)N, \quad (A-0)$$

$$\hat{H}(t) = -\frac{\hbar^2}{2Lq_e^2}(\hat{Q} + \hat{Q}^\dagger - 2) + \varepsilon(t)\hat{q} + \frac{\hat{q}^2}{2C}.$$

و با توجه به این که عملگرهای  $\{K, K^\dagger, N\}$  و  $\{Q, Q^\dagger, q\}$  جبر یکسانی دارند، ارتباط بین دو هامیلتونی نشان داده شده است. به طور کلی می‌توان گفت نوسانات بار و جریان در مدارهای کوانتومی مزوسکوپی با بار گسسته، معادل نوسانات بلوخ در بلورهاست. این تشابه به کوانتسشن بار مربوط می‌شود، که در آن بار، نقش مشابه با ثابت شبکه را در بلور بازی می‌کند. بر این اساس، عملگرهای  $\hat{Q}$ ،  $\hat{Q}^\dagger$  و  $\hat{q}$  را نیز بر حسب حالت‌های جای‌گزیده

<sup>۶</sup> Landauer-Buttiker

<sup>۷</sup> Li and Chen

وانیر-استارک می‌توان نوشت و ویژگی‌های دینامیک کوانتومی مدارهای الکتریکی مزوسکوپی تحت میدان خارجی  
اختیاری بر اساس روش‌های جبر دینامیکی را بررسی کرد.

در فصل اول پایان نامه، سیمایی کلی از دینامیک نوسانات بلوخ از دیدگاه‌های نظری و محاسبات عددی و  
کارهای تجربی صورت پذیرفته، بررسی و مطالعه شده است.

در فصل دوم، با معرفی جبر لی، دینامیک سامانه‌های وابسته به زمان به روش جبر دینامیکی بررسی شده است.  
جبرهای چند جمله‌ای و رابطه آن‌ها با جبرهای پارافرمیونی و جبرهای پارافرمیونی مرتبه  $P$  و روابط ساختاری بین  
عملگرهای آن‌ها معرفی و به طور کامل بررسی شده است.

در فصل سوم، دینامیک نوسانات بلوخ به روش جبر دینامیکی برای سامانه‌هایی که تحت تأثیر میدان‌های  
خارجی وابسته به زمان هستند بررسی شده است.

در فصل چهارم، سامانه‌های مزوسکوپی معرفی و نظریه کوانتومی برای مدارهای الکتریکی مزوسکوپی مطالعه  
شده و نقش گسستگی بار الکتریکی در مدارها بررسی شده است و ویژگی‌های دینامیک کوانتومی مدارهای الکتریکی  
مزوسکوپی را در آن‌ها مطالعه کرده ایم.

در فصل پنجم، با معرفی مدلی در مقیاس نانو که از شرایط مرزی بسته و یا دیریکله تبعیت می‌کند، بر اساس  
روش‌های عملگری در مکانیک کوانتومی به مدلی واقعی برای جبر پارافرمیونی تغییر شکل دست می‌یابیم، این فصل  
هم‌چنین نشان می‌دهد، در شرایط خاصی جبر پارافرمیونی تغییر شکل یافته به جبر  $SU(2)$  تبدیل می‌شود و در حالت  
کلی یک جبر پارافرمیونی تغییر شکل یافته است. در ادامه این فصل عملگر تحول زمانی را برای یک سامانه با شرایط  
مرزی دیریکله به دست آمده است.

در فصل ششم، با به حساب آوردن گسسته بودن بار الکتریکی، ارتباط بین هامیلتونی که دینامیک تک-نواری  
مدل بستگی قوی توصیف می‌کند و هامیلتونی یک مدار کوانتومی مزوسکوپی با بار گسسته را روشن شده است. بر  
اساس دینامیک جبر لی جریان ماندگاری را برای مدارهای کوانتومی  $L$  واداشته به دست آورده و با یک روش تقریبی  
جریان ماندگاری و طیف انرژی را برای مدار کوانتومی مزوسکوپی  $LC$  محاسبه شده است.

در فصل هفتم بحث ونتجه گیری ارائه گردیده است