

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

۱۰۲۲۴۲

دانشگاه گیلان

دانشکده علوم

گروه فیزیک

گرایش حالت جامد



رساله ارائه شده برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

تونل زنی الکترون با اسپین قطبیده در نانوساختارهای مغناطیسی

در حضور ناکاملی



از:

افسانه دائمی

۱۳۸۷ / ۲ / ۲۱

استادان راهنما:

دکتر صابر فرجامی شایسته

دکتر علی اصغر شکری



پاییز ۱۳۸۶

۱۰۲۲۴۶

تقدیم به اسرار سلوک  
و سیر محمدیان حضرت شیخ

پرو و مادر بزرگوارم

## سپاسگزاری

ستایش، خدای مهربان و دانای بلندمرتبه را سزاست، که همواره حضور مهیمنش گرمابخش مسیر زندگی انسان‌هاست.

در این مجال، شایسته است مراتب سپاس و قدردانی خود را از کسانی که مرا در روند انجام پروژه و فراهم‌آوری این پایان‌نامه یاری نموده‌اند، ابراز نمایم.

از استادان ارجمندم جناب دکتر صابر فرجامی شایسته، برای راهنمایی‌های ارزشمندشان، و جناب دکتر علی‌اصغر شگری، برای همراهی و پیگیری‌های گرانقدرشان در امر پروژه، کمال تشکر را دارم. از مدیریت محترم پژوهشکده علوم نانو-پژوهشگاه دانش‌های بنیادی، جناب دکتر هاشم رفیعی تبار، به خاطر نقشی که این مرکز در پیشبرد روند تحقیقاتی اینجانب داشته است، و از مدیریت محترم گروه فیزیک دانشکده علوم دانشگاه گیلان، جناب دکتر عباس قاسمی‌زاد برای کمکهای ارزنده‌شان در پیشبرد امور اداری در این مدت، سپاسگزارم.

از استادان محترم، جناب دکتر اسفندیار رجایی و جناب دکتر حمیدرضا مشایخی که به بازخوانی و ویرایش این پایان‌نامه همت گماردند و رهنمودهای ارزشمندی را بیان کردند بی‌نهایت سپاسگزارم.

سزاست که استاد بزرگووارم، جناب دکتر امیرحسین احمدخان کردبچه، که در تمامی مراحل، هدایتگر من در گام‌نهادن در مسیر دانش بوده‌اند، سپاس بی‌دریغ مرا پذیرا باشند. همچنین، استاد مهربان و نیکوسرشتم، جناب آقای حمیدرضا جمشیدی، که برای آراستن این پایان‌نامه به خط زیبای خود بر من منت نهادند و همواره مشوق من در این راه بوده‌اند، شایسته درودی بیکران هستند. حضور سبز و آینه‌وار هنرمندی بزرگ‌منش، اسطوره مهر و تواضع، جناب استاد هوشنگ ظریف که همواره دستان خالی مرا با شکیبایی و محبت خویش از امید به آینده سرشار نمودند، شکرانه‌ای شگرف بر شانه‌های ناتوان من بر جای خواهد گذاشت. از تمامی دوستان عزیزی که در این مدت، حضور گرمشان پشتوانه‌ای قابل اطمینان برای من بود صمیمانه متشکرم.

در پایان؛ برای پدر و مادر صبور، مهربان و عزیزم که با قلب پاک و سرشار از اشتیاقشان و پایداری بی‌نهایتشان یار و پشتیبان من در راه زندگی و دانش بوده‌اند، بلندترین درودها و ژرف‌ترین سپاس‌های قلبم را پیشکش خواهم کرد.

## فهرست

ز.....	چکیده فارسی .....
ژ.....	چکیده انگلیسی .....
۱.....	فصل اول: ترابرد الکتریکی در سیستم‌های مزوسکوپیک .....
۱.....	۱-۱) پیش‌گفتار .....
۲.....	۲-۱) فرمول‌بندی‌های ترابرد کوانتومی .....
۲.....	۲-۱-۱) تئوری پاسخ خطی: فرمول کوپو .....
۴.....	۲-۲-۱) روش پراکندگی: فرمول لاندائور .....
۷.....	۳-۱) رسانایی یک رسانای بالستیک .....
۹.....	۴-۱) اتصال‌ها .....
۱۰.....	۴-۱-۱) اتصال‌های بدون بازتاب .....
۱۱.....	۴-۱-۲) مقاومت اتصال .....
۱۱.....	۵-۱) خلاصه .....
۱۲.....	فصل دوم: ترابرد الکتریکی وابسته به اسپین .....
۱۲.....	۱-۲) پیش‌گفتار .....
۱۳.....	۲-۲) تاریخچه .....
۱۴.....	۳-۲) مقاومت مغناطیسی .....
۱۵.....	۳-۲-۱) مقاومت مغناطیسی بزرگ (GMR) .....
۱۶.....	۳-۲-۲) مقاومت مغناطیسی تونل‌زنی (TMR) .....
۱۷.....	۴-۲) تونل‌زنی وابسته به اسپین .....

- ۱۸ ..... ۲-۴-۱) بررسی های اولیه
- ۱۸ ..... ۲-۴-۱) آزمایش های تدریجی و مزروی
- ۱۹ ..... ۲-۴-۲) مدل اشترن
- ۲۰ ..... ۲-۴-۳) آزمایش و مدل جولیر
- ۲۱ ..... ۲-۴-۴) مدل اسلونسکی
- ۲۲ ..... ۲-۴-۲) وابستگی های ساختارها به عوامل مختلف
- ۲۲ ..... ۲-۴-۱) بستگی به میدان مغناطیسی
- ۲۳ ..... ۲-۴-۲) بستگی به ولتاژ
- ۲۴ ..... ۲-۴-۳) بستگی به دما
- ۲۵ ..... ۲-۴-۴) بستگی به فرومغناطیس
- ۲۵ ..... ۲-۴-۵) بستگی به سد
- ۲۵ ..... ۲-۴-۶) بستگی به مرز
- ۲۶ ..... ۲-۴-۷) اثر سد کولمبی
- ۲۶ ..... ۲-۵) مدل های بررسی شده برای ساختارهای کامل
- ۲۶ ..... ۲-۵-۱) مدل الکترون آزاد
- ۲۷ ..... ۲-۵-۲) نوع پیوند در فصل مشترک F/I
- ۲۸ ..... ۲-۵-۳) مدل های بنیادی
- ۲۸ ..... ۲-۶) خلاصه
- ۲۹ ..... فصل سوم: سیستم های ناکامل
- ۲۹ ..... ۳-۱) پیش گفتار
- ۳۰ ..... ۳-۲) جایگزیدگی
- ۳۰ ..... ۳-۳) مدل بستگی قوی
- ۳۴ ..... ۳-۴) پراکندگی از ناخالصی و توابع گرین

- ۳۷ ..... نظریه اختلال (۱-۴-۳)
- ۳۸ ..... ناکاملی تکی (۲-۴-۳)
- ۴۰ ..... فرمولبندی سیستم شامل چند ناخالصی (۳-۴-۳)
- ۴۲ ..... تقریب بلور مجازی (VCA) (۱-۳-۴-۳)
- ۴۳ ..... تقریب ماتریس میانگین (ATA) (۲-۳-۴-۳)
- ۴۵ ..... تقریب پتانسیل همدوس (CPA) (۳-۳-۴-۳)
- ۴۷ ..... ناکاملی در پیوندهای تونل زنی مغناطیسی (۵-۳)
- ۴۷ ..... ناکاملی در فصل مشترک (۱-۵-۳)
- ۴۹ ..... اثر ناکاملی در سد (۲-۵-۳)
- ۵۱ ..... شرایط تشدید (۳-۵-۳)
- ۵۲ ..... خلاصه (۶-۳)
- ۵۳ ..... فصل چهارم: تونل زنی الکترون از طریق یک سیم کوانتومی در حضور ناکاملی (۵۳)
- ۵۳ ..... پیش گفتار (۱-۴)
- ۵۴ ..... فرمولبندی و شرح مدل (۲-۴)
- ۵۷ ..... تونل زنی الکترون در یک ساختار NM/QW/NM (۳-۴)
- ۵۸ ..... الکترودهای یک بعدی (۱-۳-۴)
- ۵۹ ..... سیم کامل (۱-۱-۳-۴)
- ۶۰ ..... سیم ناکامل (۲-۱-۳-۴)
- ۶۳ ..... الکترودهای کریستالی (۲-۳-۴)
- ۶۶ ..... سیم کامل (۱-۲-۳-۴)
- ۶۷ ..... سیم ناکامل (۲-۲-۳-۴)
- ۷۰ ..... جریان الکتریکی (۴-۴)
- ۷۱ ..... جریان الکتریکی در یک ساختار NM/QW/NM (الکترودهای کریستالی) (۱-۴-۴)

- ۷۱ ..... ۴-۴-۱) جریان الکتریکی در یک سیم کامل
- ۷۲ ..... ۴-۴-۲) جریان الکتریکی در یک سیم ناکامل
- ۷۴ ..... ۴-۵) خلاصه
- ۷۶ ..... فصل پنجم: تونل زنی وابسته به اسپین از طریق سیم کوانتومی ناکامل
- ۷۶ ..... ۵-۱) پیش گفتار
- ۷۷ ..... ۵-۲) فرمولبندی و شرح مدل
- ۸۰ ..... ۵-۳) تونل زنی وابسته به اسپین الکترون در یک ساختار NM/(IMPURE\_QW)/NM
- ۸۰ ..... ۵-۳-۱) احتمال عبور
- ۸۲ ..... ۵-۳-۲) مقاومت مغناطیسی و قطبش - اسپینی
- ۸۳ ..... ۵-۳-۳) جریان اسپینی
- ۸۵ ..... ۵-۴) بررسی تونل زنی وابسته به اسپین الکترون بر حسب غلظت ناکاملی موجود در سیم
- ۸۶ ..... ۵-۴-۱) احتمال عبور
- ۸۷ ..... ۵-۴-۲) مقاومت مغناطیسی و قطبش - اسپینی
- ۸۸ ..... ۵-۵) خلاصه
- ۸۹ ..... فصل ششم: بحث و نتیجه گیری
- ۸۹ ..... ۶-۱) خلاصه نتایج
- ۹۰ ..... ۶-۲) پیشنهاد برای ادامه کار
- ۹۲ ..... مراجع
- ۹۴ ..... پیوست ۱: نانو ساختارها
- ۱۰۰ ..... پیوست ۲: پارامغناطش اسپینی یک گاز الکترون آزاد
- ۱۰۳ ..... پیوست ۳: کد کامپیوتری



## فهرست شکل‌ها

- شکل (۱-۱) یک رسانا با احتمال عبور T از طریق دو الکتروود به دو اتصال بزرگ وصل شده است ..... ۵
- شکل (۲-۱) نمایشی از یک رسانای بالستیک که بین دو اتصال ساندویچ شده است ..... ۷
- شکل (۳-۱)؛ مقایسه نمادین توزیع مدهای عرضی در فصل مشترک ..... ۱۰
- شکل (۱-۲) مقاومت مغناطیسی بزرگ ..... ۱۴
- شکل (۲-۲)؛ الف) راستای موازی و ب) عمودی شارش جریان بر لایه‌ها ..... ۱۵
- شکل (۳-۲)؛ الکترودهای با مغناطش الف) موازی و ب) پادموازی ..... ۱۶
- شکل (۴-۲) تونل زنی در F/I/S ..... ۱۸
- شکل (۵-۲) اولین مشاهده مقاومت مغناطیسی در ساختار پتپ در دمای اتاق ..... ۱۸
- شکل (۶-۲) ساختار نواری [Ni 110] حجمی برای اسپین الف) اکثریت و ب) اقلیت ..... ۱۹
- شکل (۷-۲)؛ مقاومت مغناطیسی بر حسب میدان مغناطیسی ..... ۲۲
- شکل (۸-۲)؛ نمایش اصلی مقاومت مغناطیسی ..... ۲۳
- شکل (۹-۲)؛ TMR در ۲ K به صورت تابعی از ضخامت لایه آلومینا ..... ۲۵
- شکل (۱-۳)؛ نمایش پتانسیل بلور ..... ۳۱
- شکل (۲-۳)؛ رسانایی محاسبه شده برای الکترون‌های با اسپین اکثریت و اقلیت ..... ۴۸
- شکل (۲-۳)؛ رسانایی نرمالیزه شده  $\langle G \rangle / S$  بر حسب ضخامت لایه نارسانا ..... ۴۹
- شکل (۳-۳)؛ رسانایی نرمالیزه  $\langle G \rangle / S$  به عنوان تابعی از  $\gamma$  ..... ۴۹
- شکل (۱-۴)؛ نمایشی از ترابرد به یک ابزار الکتریکی با ماتریس هامیلتونی [H] ..... ۵۶
- شکل (۲-۴)؛ یک سیم کوانتومی متصل به دو الکتروود ..... ۵۸
- شکل (۳-۴)؛ احتمال عبور الکترون بر حسب انرژی الکترون ورودی ..... ۵۹

- شکل (۴-۴): تغییرات احتمال عبور بر حسب انرژی الکترون ورودی به یک سیم تماماً ناکامل ..... ۶۱
- شکل (۴-۵): تغییرات احتمال عبور... در یک سیم جزئی ناخالص ..... ۶۲
- شکل (۴-۶): مقایسه تغییرات احتمال عبور ..... ۶۳
- شکل (۴-۷): نمایشی از یک سیم کوانتومی متصل به دو الکتروود کریستالی ..... ۶۴
- شکل (۴-۸): تغییرات احتمال عبور... در حضور الکترودهای کریستالی ..... ۶۶
- شکل (۴-۹): احتمال عبور الکترون بر حسب انرژی الکترون ورودی به یک سیم تماماً ناکامل ..... ۶۷
- شکل (۴-۱۰): تغییرات احتمال عبور... در یک سیم جزئی ناخالص ..... ۶۸
- شکل (۴-۱۱): مقایسه تغییرات احتمال عبور ..... ۶۹
- شکل (۴-۱۲): نمایشی از چگالی حالت‌های سه ناحیه ..... ۷۰
- شکل (۴-۱۳): نمایشی از اعمال تغییر در توزیع الکترونی ..... ۷۰
- شکل (۴-۱۲): تغییرات چگالی جریان نرمالیزه در یک سیم خالص ..... ۷۱
- شکل (۴-۱۵): تغییرات چگالی جریان نرمالیزه در یک سیم شامل  $80\%$  ناخالصی ..... ۷۲
- شکل (۴-۱۶): تغییرات چگالی جریان نرمالیزه در یک سیم کاملاً ناخالص ..... ۷۳
- شکل (۴-۱۷): تغییرات چگالی جریان نرمالیزه (مقایسه) ..... ۷۴
- شکل (۵-۱): شکل نمادین از اثر چرخش - اسپینی ..... ۷۸
- شکل (۵-۲): تغییرات احتمال عبور برای اسپین بالا پایین در حضور میدان ..... ۸۰
- شکل (۵-۳): تغییرات احتمال عبور در غیاب میدان مغناطیسی خارجی ..... ۸۱
- شکل (۵-۴): تغییرات احتمال عبور بر حسب انرژی الکترون تونل‌زننده ..... ۸۲
- شکل (۵-۵): تغییرات مقاومت مغناطیسی بر حسب انرژی ..... ۸۳
- شکل (۵-۶): تغییرات چگالی جریان بهنجار شده... در حضور میدان مغناطیسی خارجی ..... ۸۴
- شکل (۵-۷): تغییرات چگالی جریان بهنجار شده در غیاب میدان مغناطیسی خارجی ..... ۸۵
- شکل (۵-۸): تغییرات احتمال عبور بر حسب تعداد ناخالصی‌ها ..... ۸۶
- شکل (۵-۹): تغییرات مقاومت مغناطیسی تونل‌زنی بر حسب تعداد ناخالصی‌ها ..... ۸۷
- شکل (پ-۱-۱): نمایشی از یک ترانزیستور نانوساختار با دو پتانسیل اعمالی ..... ۹۶

- شکل (پ-۱-۲): چاه کوانتومی در یک بعد ..... ۹۷
- شکل (پ-۱-۳): ساختار نواری کامل ..... ۹۷
- شکل (پ-۱-۴): نمایشی از یک سیم کوانتومی ..... ۹۸
- شکل (پ-۱-۵): نقطه کوانتومی ..... ۹۸
- شکل (پ-۲-۱): نمایشی از پارامغناطش اسپینی پائولی برای یک گاز الکترون آزاد ..... ۱۰۰

## چکیده:

تونل‌زنی الکترون با اسپین قطبیده در نانوساختارهای مغناطیسی در حضور ناکاملی  
افسانه دائمی

ترابرد الکتریکی در نانوساختارها، که ابعاد آنها کوچکتر از مسیر آزاد میانگین الکترون است، در دماهای بسیار کمتر از دمای فرمی، در رژیم الاستیک بررسی خواهد شد. در این بازه ابعادی و دمایی، اجسام مانند پراکنده‌های کاملاً الاستیک عمل کرده و تنها به تغییر جهت، و نه تغییر انرژی، الکترون برخوردکننده به آنها پهنده می‌کنند. از طرفی، برهم‌کنش تبادلی بین حوزه‌های مغناطیسی فلزات مغناطیسی، به ایجاد دو کانال تونل‌زنی مستقل برای الکترون‌های با اسپین بالا و پایین می‌انجامد. از این رو، علاوه بر وجود بار الکتریکی، نوع اسپین نیز در مطالعه ترابرد اهمیت پیدا می‌کند، که منشأ الکترونیک اسپینی (اسپینترونیک) است.

در این رساله، به توصیف تونل‌زنی الکترون بین دو الکتروود فلزی از طریق یک سیم کوانتومی پرداخته شده است. اثر حضور ناخالصی‌های احتمالی درون سیم که به طور کاتوره‌ای جایگاه‌های انرژی آن را اشغال کرده‌اند، بر روی تونل‌زنی الکترون و جریان ناشی از آن، در دو حالت غیرمغناطیسی و پارامغناطیسی در رژیم کوانتومی همدوس بررسی شده است. علاوه بر آن، اثرات مستقیمی که میدان مغناطیسی خارجی در جهت‌گیری گشاورهای مغناطیسی ناخالصی‌های پارامغناطیسی می‌گذارد و نتایج جالب توجهی که از مقاومت مغناطیسی تونل‌زنی و قطبش وابسته به اسپین بدست می‌دهد، لزوم بررسی مسأله در حضور میدان مغناطیسی خارجی را برانگیخته است.

با استفاده از مدل بستگی قوی و روش تابع گرین در فرمولبندی لاندائور، اثر ناخالصی‌ها را به عنوان عوامل پراکنده در ساختارهای مورد نظر، در ترابرد الکتریکی مورد بررسی قرار گرفته است.

## کلید واژه‌ها:

نانوساختارها، الکترونیک اسپینی (اسپینترونیک)، سیم کوانتومی، ناخالصی، مقاومت مغناطیسی تونل‌زنی، قطبش وابسته به اسپین، مدل بستگی قوی، روش تابع گرین، فرمولبندی لاندائور.

**Abstract:*****Spin-Polarized Electron Tunneling in Magnetic Nanostructures  
in presence of Disorder*****Afsaneh Daemi**

Electronic transport in nanostructures whose linear dimensions in the direction of current-flow are small compared with the mean free path and at low temperature compared with the Fermi temperature will lead to the elastic regime. In this regime, bodies will therefore act as the predominantly elastic scatterers that influence only the direction (not the energy) of an electron that experiences a collision with them. Exchange interaction coupling between magnetic metals creates two independent tunneling channels and therefore the spin of electron also signifies in transport.

In this thesis, the theoretical description of electron tunneling across a quantum wire that contacts two metallic electrodes has been carried out. Electron tunneling and the current arises from that in both, nonmagnetic and magnetic situations and in quantum coherent regime has been investigated in the presence of some impurities that are assumed to spread out randomly in the region of wire and affect its on-site energy levels.

In addition, it has strengthened the essence of reviewing in the presence of an external magnetic field which affects directly on paramagnetic impurities and having some significant results of Tunneling MagnetoResistance (TMR) and Spin-Polarization (SP).

Using the Tight-Binding model and Green's function method due to Landauer formula, the effects of impurities as the elastic scatterers in the mentioned structures, has been investigated in electrical transport-both in regard or disregard to spin.

**Keywords:**

Nanostructures, spin-electronics (spintronics), quantum wire, impurity, Tunneling MagnetoResistance (TMR), Spin-Polarization (SP), Tight-binding model, Green's function method, Landauer formula.

*"In science one tries to tell people,  
in such a way as to be understood by everyone,  
something that no one ever knew before,  
but in poetry, it's the exact opposite."*

*Great Master Dirac, "godfather"  
of Quantum Mechanics*

## فصل اول

### ترابرد الکتریکی در سیستم‌های مزوسکوپی<sup>۱</sup>

#### ۱-۱) پیش‌گفتار

شاخه فیزیک مزوسکوپی در دودهم گذشته توجه بسیاری از فیزیک‌دانان نظریه‌پرداز و آزمایش‌گر را به خود جلب کرده است. انگیزه توسعه روش‌های آزمایشگاهی به پیشرفت قابل توجهی در درک پدیده‌های کوانتومی در ناحیه تداخل بین سیستم‌های فیزیکی میکروسکوپی و ماکروسکوپی انجامیده است. این شاخه حتی به اندازه‌ای پیشرفت کرده است که می‌توان در کاربردهای عملی نیز به طور جدی به آن پرداخت، که از آن جمله بررسی‌هایی است که در بازه ترابرد (الکترونیک) کوانتومی<sup>۲</sup> انجام شده است.

رساناهای کوچک که ابعادی در بازه بین اجسام میکروسکوپی و ماکروسکوپی دارند، مزوسکوپی خوانده می‌شوند. سیستم‌های مزوسکوپی به طور نوعی در بازه نانومتر (nm) و چند میکرومتر ( $\mu\text{m}$ ) بررسی می‌شوند. این گستره‌ها به طور قطع بسیار بزرگ‌تر از اندازه چند اتم یا مولکول (که مکانیک کوانتومی در آنجا کاربرد دارد) می‌باشند ولی به اندازه کافی برای این که بتوان بین آنها و اجسام کلاسیک (که به طور مثال برای آنها رساناها رفتاری اهمی نشان می‌دهند) تفاوت قائل شد، کوچک هستند.

مقیاس‌های گوناگون طول چشم‌اندازهای متفاوتی از فیزیک را در این شاخه می‌نمایاند. الکترون‌ها در رسانای مزوسکوپی به طور معمول مانند ذرات کلاسیک منتشر نمی‌شوند، بلکه مانند امواج الکترومغناطیس در یک موجبر انتشار

<sup>1</sup> Mesoscopic systems

<sup>2</sup> Quantum electronics

می‌یابند. طول موج  $\lambda$  بروکلی<sup>۱</sup>، که دامنه تغییرات آن از حدود چند آنگستروم در فلزات به مرتبه ۵۰ nm در نیمه رساناها می‌رسد، کوتاهترین مقیاس طول در سیستم شناخته می‌شود. از نگاه دیگر، الکترون‌ها به طور همگن (بدون هیچ تغییر فازی) و با مشخصه  $l_p$ ، که در بالاتر از آن الکترون‌ها به دلیل پراکندگی‌های غیر کشسان فآزشان را از دست می‌دهند، منتشر می‌شوند. این طول به طور کلی، همان‌گونه که به جزئیات میکروسکوپیک (مثل برهم کنش الکترون-الکترون و جفت‌شدگی الکترون-فونون) بستگی دارد به دمای سیستم نیز وابسته است. سومین مقیاس طول، مسیر آزاد میانگین است، که فاصله میانگینی است که یک الکترون بین برخوردهای الاستیکی که با ناخالصی‌های موجود در محیط دارد طی می‌کند.

در این فصل به فرمولبندی‌هایی که در ترابرد الکتریکی در ساختارهای مزوسکوپیک کاربرد دارند و چگونگی شارش جریان و ایجاد مقاومت در آنها پرداخته می‌شود.

## ۲-۱) فرمولبندی‌های ترابرد کوانتومی

در این مختصر به معرفی روش‌هایی متفاوت، بنا به کاربردشان، در فرمولبندی ترابرد (الکترونیک) کوانتومی می‌پردازیم. هدف ما در این رساله به بررسی بر پایه فرمولبندی لاندائور منتهی می‌شود و بنابر ضرورت این فرمولبندی به تفصیل شرح داده خواهد شد.

### ۱-۲-۱) تئوری پاسخ خطی<sup>۲</sup>: فرمول کوپو<sup>۳</sup>

اولین تئوری‌های ترابرد کوانتومی در نیمه دهه پنجاه پایه گذاری شدند و از آن میان، مهم‌ترین و پذیرفته‌ترین تئوری پاسخ خطی بر پایه فرمولبندی کوپو<sup>۱</sup> بوده است. این روش در مکانیک آماری کوانتومی غیر تعادلی بر پایه قضیه افت و خیز-اتلاف (FDT<sup>۴</sup>) بنا نهاده شده است. فرآیندهای برگشت‌ناپذیر غیرتعادلی را می‌توان با در نظر گرفتن افت و خیزهای گرمایی در حالت تعادل بررسی کرد. استفاده از FDT فرمولبندی کوپو را به حالت‌های غیرتعادلی نزدیک به تعادل محدود می‌کند. این تئوری از رابطه اینشتین برای ثابت پخش و قابلیت تحرک ذره براونی به وجود آمد.

با نوشتن هامیلتونی یک سیستم مختل شده به صورت:

<sup>1</sup> De Broglie

<sup>2</sup> Linear response theory

<sup>3</sup> Kubo

<sup>4</sup> Fluctuation-dissipation



$$H = H_0 + H', \quad (1-1)$$

که شامل هامیلتونی سیستم مختل نشده،  $H_0$ ، که مستقل از زمان است، و هامیلتونی اختلال،  $H'$ ، که در میدان خارجی خطی است. می‌توان معادله حرکت هایزنبرگ را به شکل زیر نوشت:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho = [H + H', \rho]. \quad (2-1)$$

مقدار اولیه عملگر  $\rho$  با استفاده از آنسامبل کانونی [۲] و در حالتی که  $H' = 0$  است به صورت:

$$\rho_0 = \exp[-\beta(H - \mu N)] / Z, \quad (3-1)$$

که در آن  $\beta = (k_B T)^{-1}$ ،  $Z = \text{Tr} \exp[-\beta(H - \mu N)]$  و  $\text{Tr} \rho_0 = 1$  است، بدست می‌آید.  $T$  دما و  $\mu$  پتانسیل الکتروشیمیایی سیستم است.

برای بدست آوردن پاسخ خطی سیستم، باید معادله (۲-۱) را تا اولین مرتبه بر حسب  $H'$  حل کنیم [۲]. تعریف می‌کنیم:

$$\rho(t) = S(t)^+ \sigma(t) S(t), \quad (4-1)$$

که در آن  $S$  عملگری یکانی است و معادلات زیر را برآورده می‌کند:

$$-i\hbar \left( \frac{\partial S}{\partial t} \right) = H S \quad (5-1)$$

$$i\hbar \left( \frac{\partial S^+}{\partial t} \right) = S^+ H.$$

اگر  $H$  به طور قطعی به  $t$  بستگی نداشته باشد، داریم:

$$S(t) = \exp(iHt/\hbar), \quad (6-1)$$

با جایگذاری در معادله حرکت هایزنبرگ (معادله (۲-۱))، و اعمال شرایط مرزی

$$\sigma(t=0) = S(t=0) \rho(t=0) S^+(t=0) = \rho_0,$$

به رابطه‌ای برای  $\rho$  دست می‌یابیم:

$$\rho(t) = \rho_0 - \frac{i}{\hbar} S^+(t) \left\{ \int_0^t [\hat{H}(t'), \rho_0] dt' \right\} S(t). \quad (7-1)$$

با دانستن چگالی مرتبط با هر کمیت فیزیکی (مانند بار، گشتاور مغناطیسی و ...) می‌توان میانگین گرمایی و کوانتومی آن

کمیت را محاسبه کرد:

$$\begin{aligned} \langle M \rangle &= \text{Tr} \rho(t) M \\ &= \text{Tr} \rho_0 M - \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \{ M S^+(t) \int_0^t [\hat{H}(t'), \rho_0] dt' S(t) \}, \end{aligned} \quad (8-1)$$

که در آن جمله اول مقدار تعادلی کمیت است و دومین جمله تغییرات  $\delta \langle M \rangle$  که توسط میدان القا شده می‌باشد. با در نظر گرفتن این حقیقت که:  $\text{Tr}(ABC\dots) = \text{Tr}(BC\dots A) = \text{Tr}(C\dots AB)$ ، می‌توان نوشت:

$$\delta \langle M \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_0^t \text{Tr} \{ \rho_0 [\hat{H}(t'), \hat{M}(t)] \} dt', \quad (9-1)$$

که همان فرمول کوپو است. با دنبال کردن چنین روندی در محاسبه رسانش به فرمول کوپو برای رسانایی در تئوری پاسخ خطی خواهیم رسید [۴ و ۳]:

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha,\beta}(q, \omega) &= -(Ne^2 / im\omega) \delta_{\alpha,\beta} \\ &+ \left( \frac{1}{\hbar\omega} \right) \int_{-\infty}^0 dt \langle [j_{\alpha}(q, 0), j_{\beta}(-q, t)] \rangle e^{-i\omega t}. \end{aligned} \quad (10-1)$$

### ۱-۲-۲) روش پراکندگی<sup>۱</sup>: فرمول لاندائور<sup>۲</sup>

بررسی مسائل ترابرد در رساناهای ناکامل به طور معمول با مطالعه سیستم (شبه) ذره یک بعدی در یک پتانسیل تصادفی (که توسط ناخالصی‌ها بوجود آمده است) انجام می‌شود. در ناحیه شامل ناکاملی از برهم‌کنش‌ها چشم‌پوشی می‌شود. فرمولبندی پراکندگی از پراکنده شدن شار ورودی به ناحیه رسانای ناکامل شکل می‌گیرد. این فرمولبندی سال‌ها قبل از تولد فیزیک مزوسکوپیک از بحث روی سیستم‌های یک بعدی توسط لاندائور [۵] ارائه شده بود. سپس توسط فیشر<sup>۳</sup> و لی<sup>۴</sup> به موارد چند کانالی نیز تعمیم داده شد [۶].

در سال ۱۹۷۵، لاندائور [۷] به دنبال یک مشاهده شگفت‌آور به توصیف رسانایی از طریق ضریب عبور پرداخت و فرمول مشهور خود را در این باره ارائه داد. توصیف لاندائور کشف بزرگی در پدیده رسانایی و فیزیک سیستم‌های مزوسکوپیک بود [۸]. پس از لاندائور، شاروین<sup>۵</sup> [۱۰ و ۹] ترابرد الکتریکی را در یک اتصال کوچک بین دو فلز که بر حسب

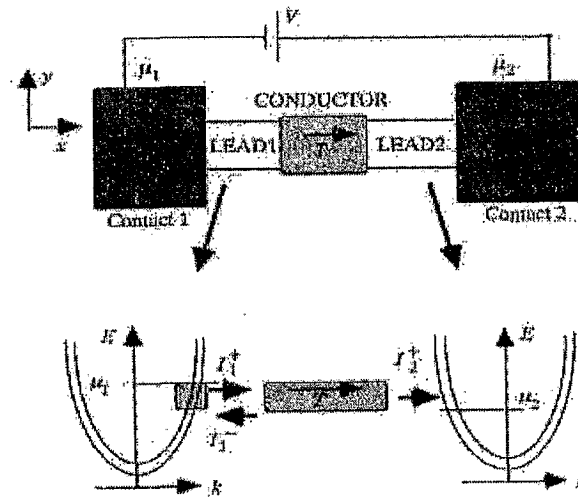
<sup>1</sup> Scattering approach

<sup>2</sup> Landauer

<sup>3</sup> Fisher

<sup>4</sup> Lee

<sup>5</sup> Sharvin



شکل (۱-۱): یک رسانا با احتمال عبور  $T$  از طریق دو الکترود به دو اتصال بزرگ وصل شده است.

دما صفر در نظر گرفته می‌شود تا توزیع انرژی الکترون‌های فرودی

در دو الکترود را بتوان به صورت پله‌ای فرض کرد.  $k$  نشان‌دهنده  $k_x$  است.

توابع موج الکترون آزاد توصیف می‌شود مورد بررسی قرار داد. چون طول اتصال کوچک بود، پراکندگی در آن قابل چشم‌پوشی بود و امکان این که بتوان احتمال عبور را به یک نزدیک دانست وجود داشت.

دو رابطه لاندائور و شاروین توسط اینگویست<sup>۱</sup> و اندرسون<sup>۲</sup> [۱۱]، با در نظر گرفتن اتصال مورد بررسی بین دو مولد تصحیح شد. آنها تفاوت این دو رابطه را به مقاومت موجود در فصل مشترک‌ها مرتبط دانستند.

رسانایی نمونه‌های بزرگ از قانون اهم پیروی می‌کند و با پیش‌روی به سمت ابعاد کوچکتر، دو تصحیح شامل این قانون می‌شود: اول آن که در فصل مشترک‌ها مقاومتی به وجود می‌آید که از طول  $L$  نمونه مستقل است و دوم آن که رسانایی دیگر به طور خطی با پهنای  $W$  تغییر نمی‌کند بلکه تغییرات آن گسسته بوده و به تعداد مدهای عرضی رسانا بستگی خواهد داشت.

لاندائور نظریه‌ای ارائه داد که مطابق آن فرآیند ترابرد با ترابرد بالستیک قابل مقایسه است. در روش لاندائور الکترون‌ها

در ناحیه رسانا، که توسط دو الکترود ۱ و ۲ به اتصال‌ها وصل شده‌اند حرکت می‌کنند (شکل (۱-۱)).

رسانایی  $\Gamma$  ناحیه رسانا توسط جریان  $I_{1,2}$ ، که با اعمال یک اختلاف پتانسیل بین دو الکترود جاری می‌شود بدست

می‌آید. به عبارت دیگر، جریان  $I_{1,2}$  از تفاضل جریان الکترون‌ها از الکترود ۱ به الکترود ۲ و برعکس ناشی می‌شود:

$$I_{1,2} = I_{1 \rightarrow 2} - I_{2 \rightarrow 1} \quad (11-1)$$

<sup>1</sup> Engquist

<sup>2</sup> Anderson

برای بدست آوردن معادله این جریان‌ها می‌توان کار را از یک مدل ساده یک‌بعدی شروع کرد.  $I_{1,2}$  به وسیله خروج الکترون‌ها از الکتروود ۱، ورود به ناحیه رسانا و ترک آن با ورود به الکتروود ۲ تعیین می‌شود. اگر ناحیه رسانا را با ساختار تک نواری با حالت‌های  $k > 0$  (که از الکتروود ۱ به ۲ منتشر می‌شوند) توصیف کنیم، جریان از انتگرال روی تمام حالت‌های  $k$  از صفر تا بردار موج فرمی  $k_F$  بدست می‌آید:

$$I_{1,2} = \int_0^{k_F} ev(k) dk, \quad (12-1)$$

که در آن  $v$  سرعت گروه حالت است که با رابطه

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}, \quad (13-1)$$

نشان داده می‌شود.

حال اگر با استفاده از تابع چگالی حالت  $n(E)$  انتگرال را روی تغییرات انرژی بازنویسی کنیم، داریم:

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^{\mu_1} \frac{e}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} n(E) dE \\ &= \int_0^{\mu_1} \frac{e}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} \frac{1}{\partial E / \partial k} \frac{1}{2\pi} dE \\ &= \int_0^{\mu_1} \frac{e}{h} dE = \frac{e}{h} \mu_1. \end{aligned} \quad (14-1)$$

که در آن انتگرال روی کل انرژی‌ها تا سطح انرژی فرمی (پتانسیل الکتروشیمیایی) الکتروود ۱ محاسبه می‌شود. این رابطه جریان ناشی از حرکت الکترون‌ها در عبور از الکتروود ۱ به ناحیه رسانا را بدست می‌دهد. حال با استفاده از محاسباتی مشابه برای الکترون‌هایی که از الکتروود ۲ وارد می‌شوند و جایگذاری در رابطه (۹-۱) داریم:

$$I_{1,2} = \frac{e}{h} (\mu_1 - \mu_2). \quad (15-1)$$

با تعریف اختلاف پتانسیل‌های الکتروشیمیایی  $\mu_1$  و  $\mu_2$  توسط ولتاژ اعمالی،  $eV = (\mu_1 - \mu_2)$ ، رابطه زیر برای رسانایی بدست می‌آید:

$$\Gamma = \frac{I_{1,2}}{V} = \frac{e^2}{h}, \quad (16-1)$$

این معادله دارای اهمیت بسیاری است، چرا که بیان‌کننده سهم یکسان نوارهای رسانش در رسانایی کل نمونه می‌باشد. بدون در نظر گرفتن چگالی یا سرعت گروه حالت‌های رسانشی، کوانتت رسانایی عبارت است از  $e^2/h$ . رابطه (۱۲-۱) بیان می‌کند