# Летняя практика 2024

8 июня 2024 г.

### 1 Распределение Больцмана

Распределение числа частиц по потенциальной энергии

$$f(E) = e^{-E/kT} = \exp\left(-\frac{E}{kT}\right)$$

$$e = 2.71828...$$

$$k = 8.617 \cdot 10^{-5} \frac{9B}{K}$$

Распределение Максвелла-Больцмана:

$$f(E) = \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT} - \frac{U}{kT}\right) = \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) \exp\left(-\frac{U}{kT}\right)$$

Работает для идеального газа, и приближенно для других типов частиц.

## 2 Распределение Ферми

Работает для фермионов, в том числе электронов:

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)}$$

 $E_F$  – энергия Ферми или уровень Ферми или химический потенциал (определяется исходя из числа электронов в системе).

Чтобы получить общее количество частиц, нужно ещё учесть плотность квантовых состояний – количество «мест», которые могут занимать электроны, на шкале энергий.

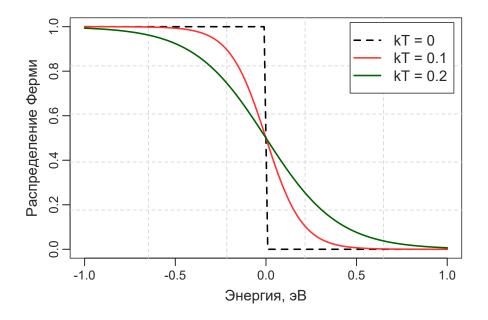


Рис. 1: Распределение Ферми

#### 2.1 Плотность состояний для металла

$$D(E) = A\sqrt{E}$$

Где A — коэффициент пропорциональности.

Чтобы получить общее количество частиц, мы должны проинтегрировать произведение плотности состояний на функцию Ферми:

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} D(E)f(E)dE = A \int_{0}^{\infty} \frac{\sqrt{E}}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} dE$$

#### 2.2 Плотность состояний для квантовой точки

$$D(E) = \frac{\gamma/\pi}{\gamma^2 + (E - E_0)^2}$$

 $\gamma$  — уширение уровня энергии в квантовой точке. Функция D(E) называется функцией Лоренца.  $\gamma$  — это ширина на половине высоты (FWHM — full width at half-maximum).

# 3 Ток через квантовую точку

Формула для тока в зависимости от напряжения имеет вид:

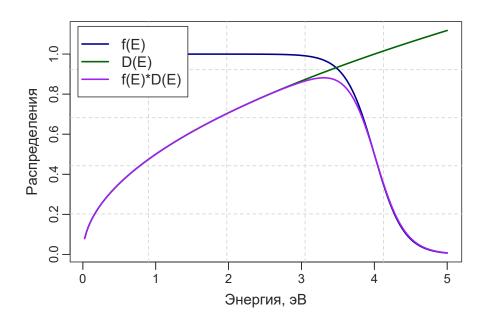
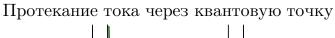


Рис. 2: Распределение Ферми и плотность состояний



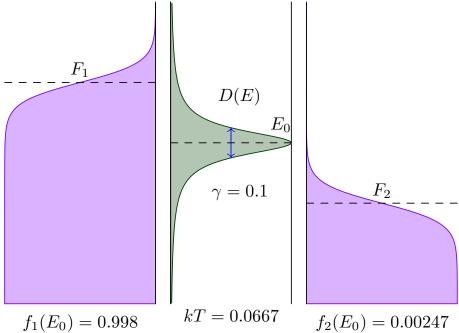


Рис. 3: Схема протекания тока через КТ между двумя металлами

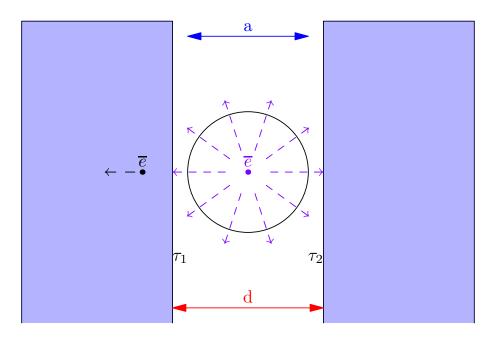


Рис. 4: Электрон в КТ между двумя металлами

$$I(V) = \frac{e}{\tau_1 + \tau_2} \int_{-\infty}^{\infty} D(E) \left[ f_1(E) - f_2(E) \right] dE$$

$$f_1(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{F1}}{kT}\right)}$$

$$f_2(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{F2}}{kT}\right)}$$
(1)

 $au_1, au_2$  — время, которое требуется электрону, чтобы перейти из металла 1 в KT и из KT в металл 2. Можно обозначить  $au_1 + au_2 = au$ . Есть важно соотношение (соотношение неопределенностей):

$$\Delta E \Delta t = \frac{\hbar}{2}$$

 $\hbar$  – постоянная Планка, измеряется в эВ·сек.

В нашем случае  $\Delta E = \gamma$ ,  $\Delta t = \tau$ :

$$\gamma = \frac{\hbar}{2\tau}, \quad \frac{1}{\tau} = \frac{2\gamma}{\hbar}$$

Можно взять  $E_{F2}=0,$  а  $E_{F1}=eV,$  тогда получаем:

$$I(V) = \frac{2e}{\hbar\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma(E)^2}{\gamma(E)^2 + (E - E_0)^2} \left[ \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - eV}{kT}\right)} - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E}{kT}\right)} \right] dE$$
 (2)

Если мы хотим учесть, что в KT несколько уровней энергии (например, N), тогда мы складываем токи, идущие по этим уровням:

$$I(V) = \frac{2e}{\hbar\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{N} \frac{\gamma(E)^{2}}{\gamma(E)^{2} + (E - E_{n})^{2}} \left[ \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - eV}{kT}\right)} - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E}{kT}\right)} \right] dE$$

Например, для кубической квантовой точки, нам нужно суммировать уровни по трём координатам x,y,z, поэтому получается:

$$\begin{split} D(E) &= \sum_{n_x,n_y,n_z=1}^N \frac{\gamma(E)^2}{\gamma(E)^2 + \left(E - E_{n_x,n_y,n_z}\right)^2} \\ E_{n_x,n_y,n_z} &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right), \quad n_x,n_y,n_z=1,2,3,4,\dots,N \\ &\frac{\hbar^2}{m} = 1.14 \text{ $9$B$·HM}^2 \end{split}$$

### 4 Вывод формулы для тока

Ток — это заряд в единицу времени.

Существуют разные режимы работы приборов. Постоянный и переменный ток, стационарные и нестационарные процессы. В стационарном режиме ток не только постоянный во времени, но и одинаковый во всей цепи (или во всём пространстве). Если бы он не был одинаковым в пространстве, это приводило бы к накоплению зарядка в каких-то участках.

Мы рассматриваем стационарный процесс, значит общий ток через нашу систему должен быть одинаковый во всех точках пространства.

 ${
m Y}$  нас есть два различных участка «цепи» — это контакт между первым металлом и KT, и вторым металлом и KT.

Значит, для вывод общей формулы, нам нужно рассматривать 4 тока — ток через участок 1 слева направо, через участок 1 справа налево, и то же самое для участка 2.

Токи из металлов достаточно легко найти:

$$I_{11} = \frac{e}{\tau_1} f_1 \left( E_0 \right)$$

$$I_{22} = -\frac{e}{\tau_2} f_2 \left( E_0 \right)$$

Что касается КТ, электрон может или находится в ней на уровне энергии  $E_0$ , или не находится, то есть там может быть или 1 электрон, или 0 электронов. Но так как нас интересует средний по времени ток, то мы рассматриваем среднее по времени количество электронов, которое обозначим буквой n:

$$n \in [0, 1]$$

Это значит, что токи из КТ в металлы равны:

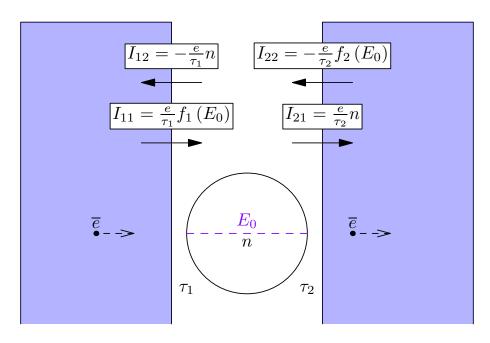


Рис. 5: Схема токов через КТ

$$I_{12} = -\frac{e}{\tau_1}n$$

$$I_{21} = \frac{e}{\tau_2} n$$

Пока мы не знаем n, но мы можем её найти из условия стационарности:

$$I = I_{11} + I_{12} = I_{21} + I_{22}$$

$$\frac{f_1}{\tau_1} - \frac{n}{\tau_1} = \frac{n}{\tau_2} - \frac{f_2}{\tau_2}$$

$$n = \frac{\tau_2 f_1 + \tau_1 f_2}{\tau_1 + \tau_2} \tag{3}$$

Тогда получается, что ток равен

$$I = \frac{e}{\tau_1} \left( f_1 - \frac{\tau_2 f_1 + \tau_1 f_2}{\tau_1 + \tau_2} \right)$$

$$I = \frac{e}{\tau_1 + \tau_2} \left( f_1(E_0) - f_2(E_0) \right) \tag{4}$$

Это для КТ с 1 уровнем. Если учитывать уширение уровня, или наличие нескольких уровней, то надо ввести плотность состояний, и формула получится такая же, как выше:

$$I(V) = \frac{e}{\tau_1 + \tau_2} \int_{-\infty}^{\infty} D(E) [f_1(E) - f_2(E)] dE$$
$$f_1(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{F_1}}{kT}\right)}$$
$$f_2(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{F_2}}{kT}\right)}$$

Так как времена туннелирования электронов в формуле присутствуют только в виде суммы, то можно ввести обозначение:

$$\tau_1 + \tau_2 = \tau$$

При этом для 1 уровня плотность состояний будет:

$$D(E) = \frac{\gamma/\pi}{\gamma^2 + (E - E_0)^2}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma/\pi}{\gamma^2 + (E - E_0)^2} dE = 1$$

Тогда формулу можно переписать:

$$I(V) = \frac{e}{\tau} \int_{-\infty}^{\infty} D(E) \left[ f_1(E) - f_2(E) \right] dE$$

Выведем соотношение между уширением уровня  $\gamma$  и временем туннелирования  $\tau$ . Они связаны соотношением неопределенностей, но надо найти конкретный коэффициент.

$$\gamma_1 \tau_1 = \frac{\hbar}{2}$$

$$\gamma_2 \tau_2 = \frac{\hbar}{2}$$

И введём общее соотношение:

$$\gamma \tau = \frac{\hbar}{2}$$

$$\hbar \approx 6.6 \cdot 10^{-16} \ \mathrm{эB\cdot cek}$$

Если это учесть, тогда получается формула, приведенная выше:

$$I(V) = \frac{2e}{\hbar\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma^2}{\gamma^2 + (E - E_0)^2} \left[ \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - eV}{kT}\right)} - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E}{kT}\right)} \right] dE$$

$$I(V) = \frac{2e}{\hbar\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{N} \frac{\gamma^2}{\gamma^2 + (E - E_n)^2} \left[ \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - eV}{kT}\right)} - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E}{kT}\right)} \right] dE$$

$$(5)$$

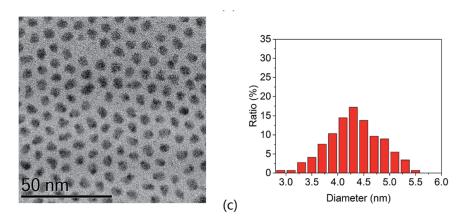


Рис. 6: Распределение КТ по размерам из работы [2]

## 5 Учёт разброса КТ по размерам

Учтём, что реальные KT всегда имеют разброс (дисперсию) по размерам. Например, возьмём экспериментальные данные из статьи [2]:

Это распределение можно аппроксимировать функцией Гаусса:

$$f(a) = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{(a-a_0)^2}{\sigma^2}\right)$$

Она описывает нормальное распределение случайных величин. Это значит, что когда отклонение частиц от среднего размера вызвано независимыми случайными процессами, то их распределение по размерам всегда будет примерно описываться этой функцией.

С помощью генератора случайных чисел можно создать распределение КТ с любой дисперсией и средним размером, а потом рассчитать их общий (или средний) ток.

Напомним, что от размера квантовой точки зависит положение уровня энергии  $E_0$  и некоторые другие параметры (например  $\gamma$ ). Рассмотрим два примера.

## Список литературы

- [1] S. Datta. Quantum Transport: Atom to Transistor. Cambridge University Press, UK. 2005
- [2] Lin Yuan, Robert Patterson, Wenkai Cao et al. Air-stable PbS quantum dots synthesized with slow reaction kinetics via a PbBr2 precursor. RSC Adv., 2015, 5, 68579

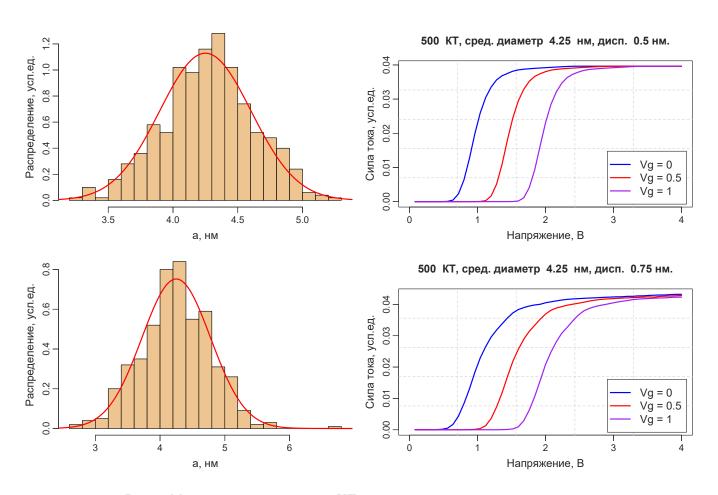


Рис. 7: Модельные распределения КТ по размерам и среднее значение тока