

Летняя практика 2024

8 июня 2024 г.

1 Распределение Больцмана

Распределение числа частиц по потенциальной энергии

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

$$e = 2.71828\dots$$

$$k = 8.617 \cdot 10^{-5} \frac{\text{эВ}}{\text{К}}$$

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.

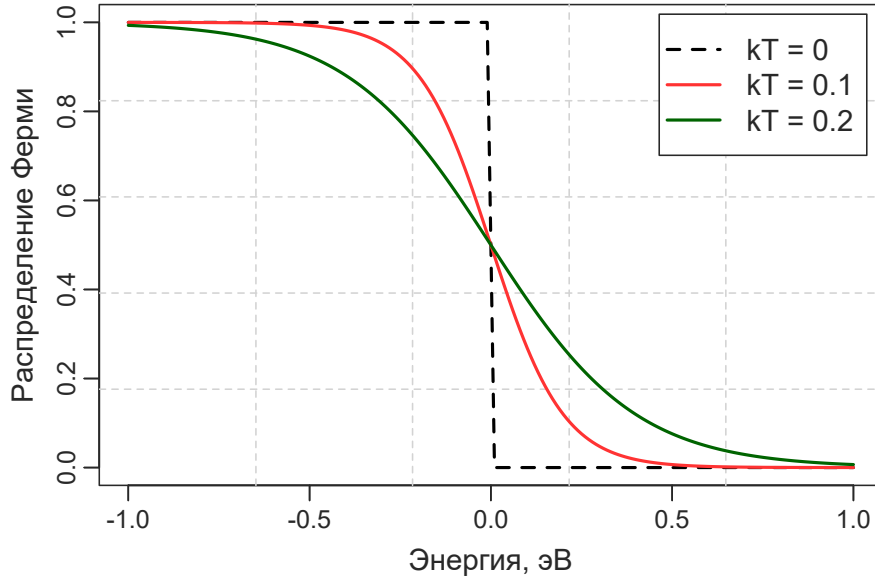


Рис. 1: Распределение Ферми

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

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

γ — уширение уровня энергии в квантовой точке. Функция $D(E)$ называется функцией Лоренца. γ — 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:

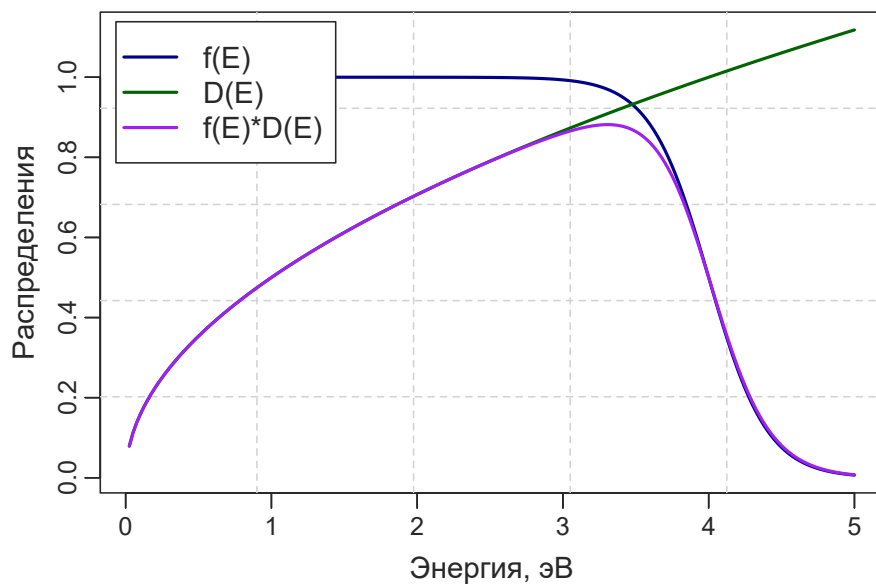


Рис. 2: Распределение Ферми и плотность состояний

Протекание тока через квантовую точку

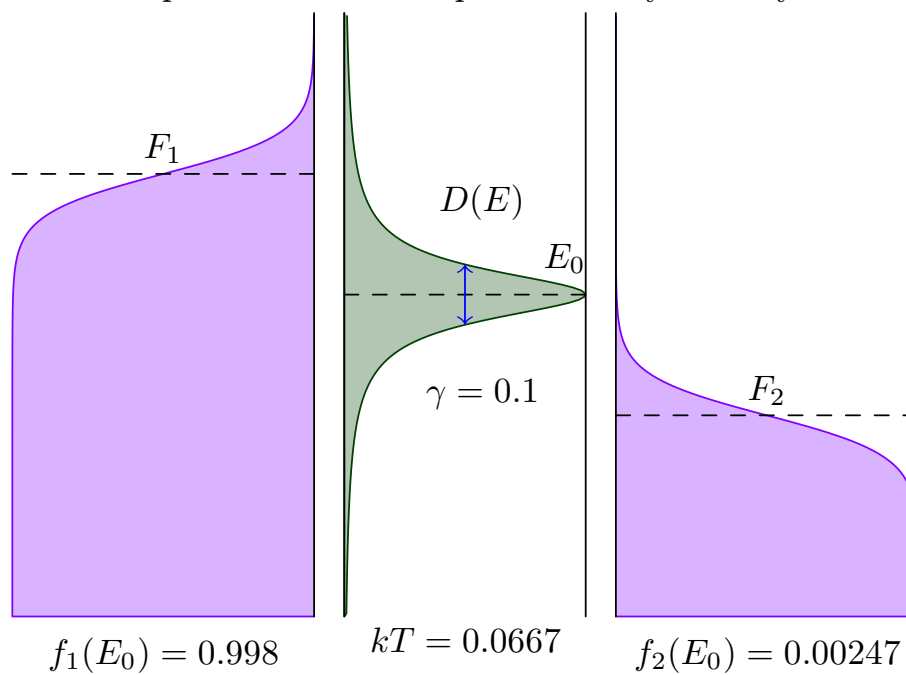


Рис. 3: Схема протекания тока через КТ между двумя металлами

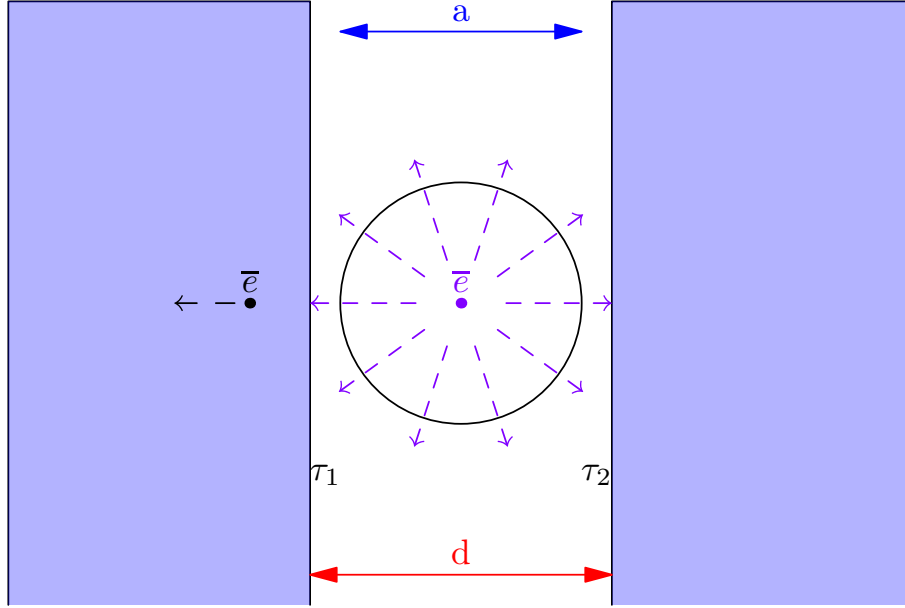


Рис. 4: Электрон в КТ между двумя металлами

$$I(V) = \frac{e}{\tau_1 + \tau_2} \int_{-\infty}^{\infty} D(E) [f_1(E) - f_2(E)] dE \quad (1)$$

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

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

τ_1, τ_2 – время, которое требуется электрону, чтобы перейти из металла 1 в КТ и из КТ в металл 2. Можно обозначить $\tau_1 + \tau_2 = \tau$. 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:

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

Если мы хотим учесть, что в КТ 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:

$$D(E) = \sum_{n_x, n_y, n_z=1}^N \frac{\gamma(E)^2}{\gamma(E)^2 + (E - E_{n_x, n_y, n_z})^2}$$

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2), \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, 4, \dots, N$$

$$\frac{\hbar^2}{m} = 1.14 \text{ эВ} \cdot \text{нм}^2$$

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 заряда в каких-то участках.

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

У нас есть два различных участка «цепи» — это контакт между первым металлом и КТ, и вторым металлом и КТ.

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:

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

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

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:

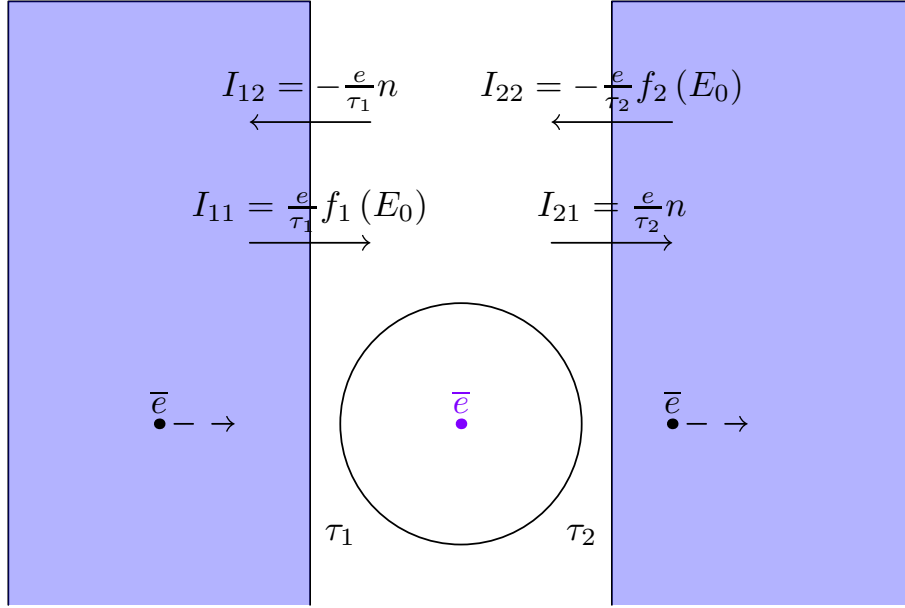


Рис. 5: Схема токов через КТ

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

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

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

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

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

$$n = \frac{\tau_2 f_1 + \tau_1 f_2}{\tau_1 + \tau_2} \quad (3)$$

Тогда получается, что ток равен

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

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

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:

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

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

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

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:

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

Выведем соотношение между уширением уровня γ и временем туннелирования τ . 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:

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

$$\hbar \approx 6.6 \cdot 10^{-16} \text{ эВ} \cdot \text{сек}$$

Если это учесть, тогда получается формула, приведенная выше:

$$I(V) = \frac{2e}{\hbar\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma^2}{\gamma^2 + (E - E_0)^2} \left[\frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - eV}{kT}\right)} - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E}{kT}\right)} \right] dE \quad (5)$$

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

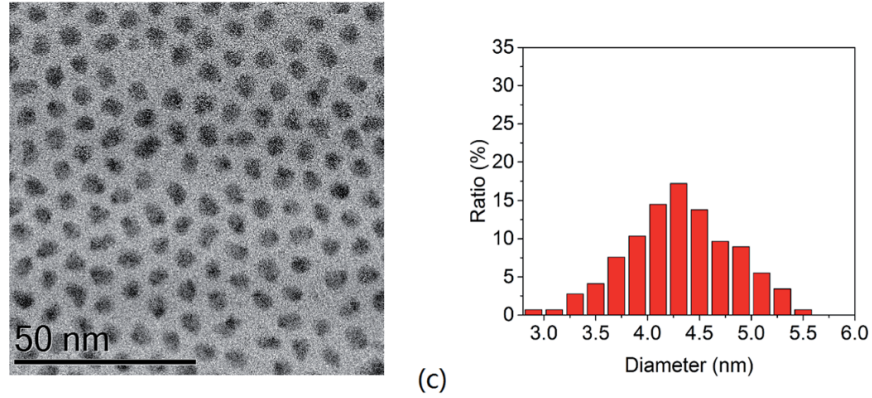


Рис. 6: Распределение КТ по размерам из работы [2]

5 Учёт разброса КТ по размерам

Учтём, что реальные КТ 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 γ). 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

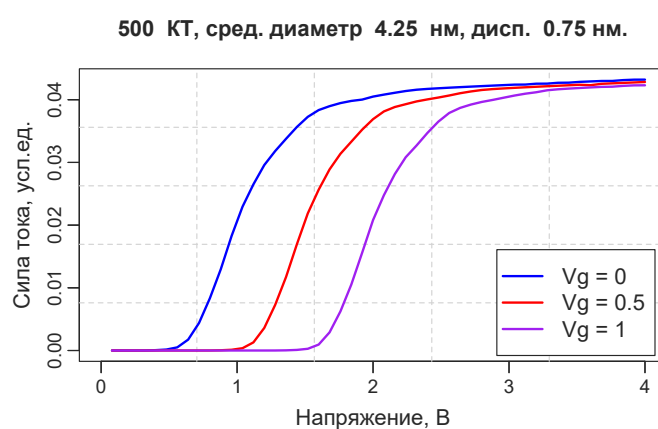
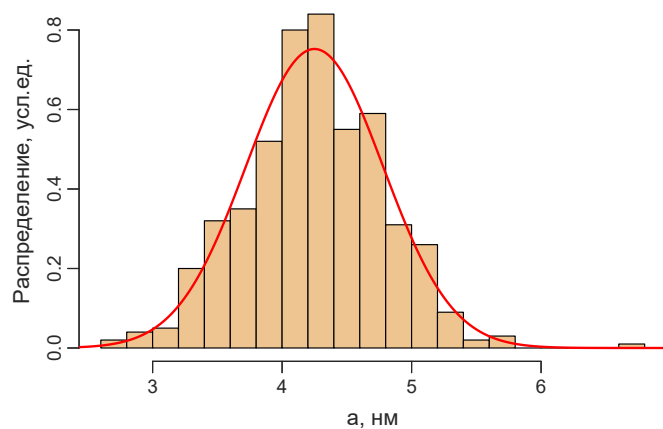
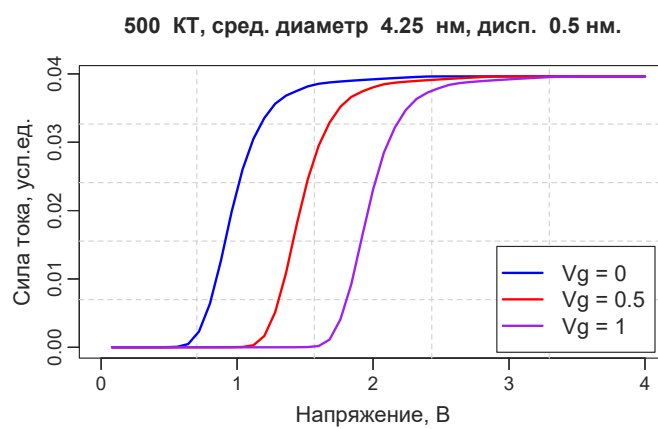
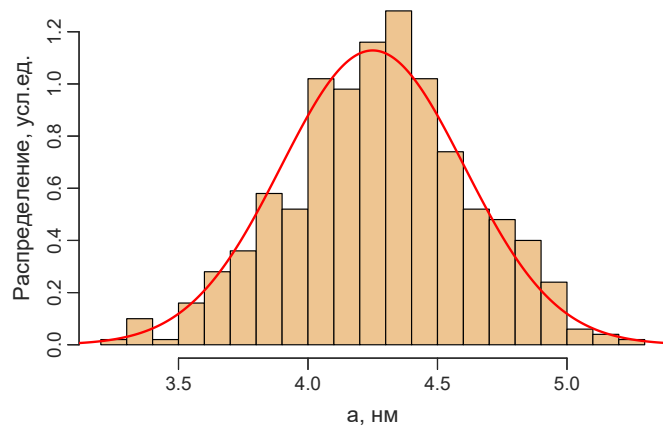


Рис. 7: Модельные распределения КТ по размерам и среднее значение тока