

การศึกษาระบบปั๊มอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวโดยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล

ปราโมทย์ รังศรี

วรวิทย์ บุญฤทธิ

สุธีร์ สัมพันธ์อภัย

เสนอต่อมหาวิทยาลัยมหาสารคาม เพื่อเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร

ปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์

เมษายน 2557

ลิขสิทธิ์เป็นของมหาวิทยาลัยมหาสารคาม

QUANTUM MONTE CARLO STUDY OF THE METALLIC
SINGLE-ELECTRON PUMP

PRAMOTE RUNGSRI

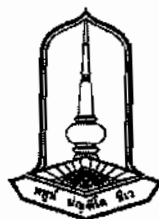
WORAWUT BOONRUESI

SUTEE SAMPAN-A-PAI

PRESENTED IN PARTIAL FULFILLMENT OF REQUIREMENTS FOR
THE BACHELOR OF SCIENCE IN PHYSICS

APRIL 2014

ALL RIGHTS RESERVED BY MAHASARAKHAM UNIVERSITY



คณะกรรมการสอบปริญญานิพนธ์ ได้พิจารณาปริญญานิพนธ์ของ นายปราโมทย์ รังศรี
นายวรุดิ บุญฤศิริ และ นายสุธีร์ สัมพันธ์ภัยแล้วเห็นสมควรรับเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตาม
หลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์ ของมหาวิทยาลัยมหาสารคาม

คณะกรรมการสอบปริญญานิพนธ์

..... ประธานกรรมการ
(อาจารย์ ดร. กฤษกร ปาสาโน)

..... กรรมการ
(อาจารย์ ดร. เจษฎา จุรีมาศ)

..... กรรมการ
(อาจารย์ ดร. สุชาติ โอษะคลัง)

..... กรรมการและอาจารย์ที่ปรึกษาร่วม
(อาจารย์ ดร. ศุภชัย ฤทธิ์เจริญวัตถุ)

..... กรรมการและอาจารย์ที่ปรึกษา
(อาจารย์ ดร. ประธาน ศรีวิไล)

.....
(อาจารย์ ดร. ปวีณา เหลากุล)
ประธานหลักสูตรสาขาฟิสิกส์

.....
(อาจารย์ ดร. นิติศักดิ์ ปาสาจะ)
หัวหน้าภาควิชาฟิสิกส์

วันที่ 9 เดือน เมษายน พ.ศ. 2557

ต้นฉบับไม่ปรากฏข้อมูล

ชื่อเรื่อง	การศึกษาระบบปั๊มอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวโดยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล	
ผู้ทำโครงการงาน	นาย ปราโมทย์ รังศรี	
	นาย วรวิทย์ บุญฤทธิ	
	นาย สุธีร์ สัมพันธ์ภักย์	
ปริญญา	วิทยาศาสตร์บัณฑิต	สาขาวิชา ฟิสิกส์
อาจารย์ที่ปรึกษา	อาจารย์ ดร. ประธาน ศรีวิไล	
อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม	อาจารย์ ดร. ศุภชัย ฤทธิ์เจริญวัฒนะ	
มหาวิทยาลัย	มหาวิทยาลัยมหาสารคาม	ปีที่พิมพ์ 2557

บทคัดย่อ

ในการศึกษาปั๊มอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ลำดับแรกคณะวิจัยได้สร้างแผนภาพเสถียรของระบบจากผลต่างของพลังงานการเพิ่มประจุที่ใช้ในการส่งผ่านอิเล็กทรอนิกส์ ซึ่งพลังงานดังกล่าวสะท้อนการเกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบโคลอมบ์ภายในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว แผนภาพเสถียรที่สร้างขึ้นมีลักษณะเป็นรูปหกเหลี่ยมเชื่อมต่อกันด้วยจุดทริปปเปิลพอยท์ ซึ่งเป็นเงื่อนไขที่สำคัญในการคำนวณค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดของปั๊มอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว จากการคำนวณค่าความนำไฟฟ้าด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ทำให้สามารถกำหนดตำแหน่งและค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดได้ เมื่อนำค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดไปเปรียบเทียบกับผลการทดลอง พบว่าความแตกต่างมีค่าน้อยกว่า 5 % โดยในกรณีที่อุณหภูมิต่ำ ($\beta E_c > 1$) ค่าความนำไฟฟ้าขึ้นกับค่าแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิด ซึ่งเป็นผลของปรากฏการณ์การขัดขวางแบบโคลอมบ์ นอกจากนั้น การเกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบโคลอมบ์สามารถอธิบายได้ด้วยค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล ซึ่งสามารถคำนวณได้ด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล โดยค่าของพารามิเตอร์ดังกล่าวเป็นฟังก์ชันของค่าความนำไฟฟ้ารวมและอุณหภูมิของระบบ

คำสำคัญ : ปั๊มอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว; ปรากฏการณ์การขัดขวางแบบโคลอมบ์; วิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล

TITLE	Quantum Monte Carlo study of the metallic single-electron pump		
AUTHORS	Pramote Rungsri		
	Worawut Boonruesi		
	Sutee Sampan-a-pai		
DEGREE	Bachelor of Science	MAJOR	Physics
ADVISOR	Dr. Prathan Srivilai		
CO-ADVISOR	Dr. Supachai Ritjareonwattu		
UNIVERSITY	Maharakham University	DATE	2014

ABSTRACT

The aim of this project is to study single-electron pumps using the quantum Monte Carlo method. Theoretically, a charging energy reflects to the Coulomb blockade phenomenon within single-electron devices. This energy will change when an electron tunnels into the island. In practice, stability diagrams of the system, which is required to investigate the characteristics of single-electron devices, can be sketched from the differences of charging energies. The triple point in the stability diagram was a major parameter for calculating the maximum conductance of the system. Therefore, it was used to define the condition in this work. The quantum Monte Carlo method was used to calculate the maximum conductance of the single-electron pump. The calculation results were then used to locate the position of the maximum conductance in each condition. These simulation results agreed to the experimental results since the deviation was less than 5 %. Also, the results show the great influence of the gate voltage on the Coulomb blockade phenomenon, and hence, it was used to control the conductance of the single-electron pump. Moreover, the effective charging energy was calculated to show the strength of the Coulomb blockade using the quantum Monte Carlo method. Evidently, the effective charging energy was the function of the total conductance and the system temperature.

Key Words : Single-electron pumps; Coulomb blockade phenomenon;
Quantum Monte Carlo method

สารบัญ

	หน้า
กิตติกรรมประกาศ	ก
บทคัดย่อภาษาไทย	ข
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ	ค
สารบัญ	ง
บัญชีตาราง	ฉ
บัญชีภาพประกอบ	ช
บทที่ 1 บทนำ	1
1.1 ที่มาและความสำคัญ	1
1.2 วัตถุประสงค์ของโครงการ	3
1.3 ขอบเขตของโครงการ	3
1.4 สถานที่ทำโครงการ	3
1.5 ประโยชน์ที่ได้รับ	3
บทที่ 2 ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง	4
2.1 อุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์	4
2.2 ทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์	9
2.2.1 แบบจำลองประจุของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์	10
2.2.2 แอ็กชันยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์	11
2.3 ป้อนอิเล็กทรอนิกส์	13
2.4 วิธีการมอดิเคอร์โล	19
2.4.1 การคำนวณหาค่าปริพันธ์ด้วยวิธีการมอดิเคอร์โล	19
2.4.2 การสุ่มตัวอย่างตามความสำคัญ	20
2.4.3 ระเบียบวิธีของเมโทรโพลิส	22
2.5 วิธีการควอนตัมมอดิเคอร์โล	22
บทที่ 3 แผนภาพเสถียร	25
3.1 แผนภาพเสถียรในระนาบของจำนวนประจุ	25
3.2 แผนภาพเสถียรในระนาบของแรงดันไฟฟ้า	34
3.2.1 พิจารณาขอบเขตของแกน V_1	36
3.2.2 พิจารณาขอบเขตของแกน V_2	37
3.2.3 แผนภาพการส่งผ่านของอิเล็กทรอนิกส์ในป้อนอิเล็กทรอนิกส์	38

สารบัญ (ต่อ)

	หน้า
บทที่ 4 พลังงานการเพิ่มประจุยังผลของป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว	40
4.1 แอ็กชันยังผลสำหรับการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล	40
4.1.1 ตัวเลขไวน์ดิง	42
4.1.2 ค่าแอ็กชันในรูปแบบที่ไม่ต่อเนื่อง	44
4.2 นิยามและการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว	46
4.3 ผลการคำนวณและอภิปรายผล	50
4.3.1 การวิเคราะห์ค่าสัมประสิทธิ์พลังงาน E_{C0}	53
4.3.2 การวิเคราะห์พจน์เอกซ์โพเนนเชียล	54
บทที่ 5 ค่าความนำไฟฟ้าของป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว	56
5.1 พารามิเตอร์	56
5.2 การคำนวณค่าคอร์รีเลชันฟังก์ชัน	58
5.3 การคำนวณค่าสเปกตรัลฟังก์ชันแบบสมมาตร	60
5.4 การคำนวณค่าความนำไฟฟ้า	62
5.5 ผลการคำนวณค่าความนำไฟฟ้า	64
บทที่ 6 สรุปผลและข้อเสนอแนะ	68
6.1 สรุปผล	68
6.2 ข้อเสนอแนะ	69
บรรณานุกรม	71
ภาคผนวก	74
ประวัติย่อผู้ทำโครงการ	80

บัญชีตาราง

	หน้า
ตาราง 2.1 ค่าพารามิเตอร์ทั้งหมดของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว ค่าความนำไฟฟ้าที่แต่ละรอยต่อการทะลุผ่าน $j \in \{L, M, R\}$ ถูกนิยามเป็น $g_j = G_j / G_K$ และ $G_K = e^2 / h$ และ G_0 เป็นค่าความนำไฟฟ้าแบบฉบับซึ่งเกิดที่อุณหภูมิสูงของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว [7]	14
ตาราง 4.1 ค่าสัมประสิทธิ์พลังงานในกรณีที่ว่า βE_c อยู่ในช่วง 1 ถึง 20	52
ตาราง 4.2 ความชันของกราฟระหว่าง $\ln(E_c' / E_c)$ กับค่าความนำไฟฟ้ารวมยกกำลังสอง (g_i^2) ในกรณีที่ว่า βE_c อยู่ในช่วง 1 ถึง 20	55
ตาราง 5.1 ผลการเปรียบเทียบค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดจากการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลกับผลการทดลองของลิบบัช	66

บัญชีภาพประกอบ

	หน้า
ภาพประกอบ 1.1	โครงสร้างของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว ที่ถ่ายด้วยกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนชนิดส่องกราด (scanning electron microscope; SEM) [7]
ภาพประกอบ 2.1	(a) แบบจำลองของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวซึ่งประกอบด้วยรอยต่อการทะลุผ่านและเกาะโลหะและ (b) วงจรสมมูลของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว [4]
ภาพประกอบ 2.2	(a) ความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานศักย์ไฟฟ้าสถิต $E_c(n_{min})$ ของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวกับจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิด (n_g) และ (b) จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยที่ทะลุผ่านรอยต่อการทะลุผ่าน $\langle n_{min} \rangle$ ที่ขึ้นกับจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิด
ภาพประกอบ 2.3	ความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวกับค่าอัตราส่วนของค่าความนำไฟฟ้าของการทะลุผ่าน $g = G_T / G_K$ [10]
ภาพประกอบ 2.4	(a) โครงสร้างของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวแบบ 4 รอยต่อ และ (b) วงจรสมมูลของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว (บริเวณภายในเส้นประ คือ บริเวณของเกาะโลหะ) [6]
ภาพประกอบ 2.5	ความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว โดยที่ค่า $g = 4.75$ ซึ่งถูกวัดโดยวอลลิสเซอร์และคณะ [15] (o) ข้อมูลที่ได้จากการทดลองและ (-) ข้อมูลที่ได้จากการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล
ภาพประกอบ 2.6	โครงสร้างของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวชนิดโลหะ ที่ถ่ายด้วยกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนชนิดส่องกราด จากงานวิจัยของลิ้มบัชและคณะ [7]
ภาพประกอบ 2.7	วงจรสมมูลของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว [7]
ภาพประกอบ 2.8	(a) แผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว และ (b) ผลการวัดค่าความนำไฟฟ้าของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งเป็นฟังก์ชันของแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิดทั้งสองชั่วที่อุณหภูมิ 150 mK [7]
ภาพประกอบ 2.9	การแกว่งกวัดของคุลอมบ์ของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวที่เกิดขึ้นในช่วงอุณหภูมิ 27 mK ($= 0.011E_c / k_B$) ถึง 1.1 K ($= 0.44E_c / k_B$) ซึ่งถูกแสดงผลโดยการวัดค่าความนำไฟฟ้าของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว เมื่อจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิดเปลี่ยนแปลง [7]

บัญชีภาพประกอบ (ต่อ)

	หน้า
ภาพประกอบ 2.10 (a) แผนภาพระดับพลังงานของเกาะโลหะที่เกิดค่าความนำไฟฟ้าต่ำสุด และ (b) แผนภาพระดับพลังงานของเกาะโลหะที่เกิดค่าความนำไฟฟ้าสูงสุด	18
ภาพประกอบ 2.11 ตัวอย่างการแบ่งเส้นทางจินตภาพออกเป็น 10 ช่วงเท่าๆ กัน	23
ภาพประกอบ 3.1 วงจรสมมูลของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว [7]	26
ภาพประกอบ 3.2 แผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งเป็นกรณีที่ไม่มีประจุลบเหนี่ยวนำในเกาะโลหะ	29
ภาพประกอบ 3.3 แผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งอยู่ในกรณีที่ประจุลบเหนี่ยวนำในเกาะโลหะมีค่าต่างๆ	30
ภาพประกอบ 3.4 แผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว	31
ภาพประกอบ 3.5 แผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว ในกรณีที่ $C_M \approx 0$	32
ภาพประกอบ 3.6 แผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวในกรณีที่ C_M มีค่าเพิ่มขึ้นเป็น 100 เท่า โดยเส้นตรงตัดกันเป็นรูปทรงสี่เหลี่ยมด้านขนาน	33
ภาพประกอบ 3.7 แผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวในระนาบ V_1 และ V_2	36
ภาพประกอบ 3.8 แผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว กรณีของสถานะประจุ (0,0)	36
ภาพประกอบ 3.9 แผนภาพการส่งผ่านอิเล็กตรอนของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวเมื่อมีการเปลี่ยนแปลงแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทางซ้ายและขวา (a) สภาวะที่ไม่จ่ายแรงดันไฟฟ้า ($V_1 = V_2 = 0$) (b) สภาวะที่จ่ายแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทางซ้าย ($V_1 > V_2 = 0$) (c) สภาวะที่จ่ายแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทางขวาและลดแรงดันไฟฟ้าขั้วเกตทางซ้าย ($V_2 > V_1 > 0$) และ (d) สภาวะที่ลดแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทางขวาและปรับแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทางซ้ายให้กลับไปสภาวะเริ่มต้น ($V_2 > V_1 = 0$) ทำให้เกิดการส่งผ่านของอิเล็กตรอนจากขั้วซอร์สไปยังขั้วเดรน	38
ภาพประกอบ 4.1 ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวที่ได้จากการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลในกรณีที่ค่าอัตราส่วนระหว่างพลังงานการเพิ่มประจุต่อพลังงานความร้อนเฉลี่ย (βE_C) อยู่ในช่วง 1 ถึง 20	50
ภาพประกอบ 4.2 ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวที่ได้จากการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลในกรณีที่ค่าอัตราส่วนระหว่างพลังงานการเพิ่มประจุต่อพลังงานความร้อนเฉลี่ย $\beta E_C = 20$	51

บัญชีภาพประกอบ (ต่อ)

		หน้า
ภาพประกอบ 4.3	(a) ความสัมพันธ์ระหว่าง $\ln(E_C^*/E_C)$ กับค่าความนำไฟฟ้ารวม (g_T) ของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวที่ $\beta E_C = 20$ และ (b) ความสัมพันธ์ระหว่าง $\ln(E_C^*/E_C)$ กับค่าความนำไฟฟ้ารวมยกกำลังสอง (g_T^2) ของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวเมื่อ $\beta E_C = 20$	51
ภาพประกอบ 4.4	ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัมประสิทธิ์พลังงานกับค่าอัตราส่วนระหว่างพลังงานการเพิ่มประจุต่อพลังงานความร้อนเฉลี่ย (βE_C) ในช่วง 1 ถึง 20 กรณีที่ค่าความนำไฟฟ้ารวมเป็นศูนย์ ($g_T = 0$)	52
ภาพประกอบ 5.1	ค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวที่อุณหภูมิค่าต่างๆ เมื่อจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิด $n_{l,0} = 0.3$ และ $n_{r,0} = 0.3$	59
ภาพประกอบ 5.2	ค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันที่อุณหภูมิ $T = 0.3 K$ ในกรณีที่จำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิด $n_{l,0} = 0$ และ $n_{r,0} \in \{0.00, 0.25, 0.50\}$	60
ภาพประกอบ 5.3	ค่าสเปกตรัมฟังก์ชันแบบสมมาตรที่อุณหภูมิค่าต่างๆ เมื่อจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิดรวม $n_c = 0$ ซึ่งมีความถี่คutoff $\omega_{\max} = 6$	61
ภาพประกอบ 5.4	ค่าความนำไฟฟ้าของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวเมื่อจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิดรวมอยู่ในช่วง $n_c = [0, 2]$ (a) ค่าความนำไฟฟ้าที่ประกอบด้วยข้อมูล 121 จุด (b) ปรัชญาการแผ่การแกว่งกวัดของคลอมบ์ที่อุณหภูมิ $0.3 K$ ของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวภายใต้เงื่อนไขที่ $n_{l,0} = n_{r,0}$	63
ภาพประกอบ 5.5	ผลการคำนวณค่าความนำไฟฟ้าของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวที่อุณหภูมิ $T = 0.3 K$ (a) ค่าความนำไฟฟ้าที่สร้างจากคู่อันดับจำนวน 121 คู่อันดับในลักษณะ 3 มิติ (b) ค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดที่ได้จากเทคนิคการคำนวณแบบเกาส์เซียนฟิต $G_{\max}/G_0 = 0.316$ เกิดขึ้นที่จุด $(n_{l,0}, n_{r,0}) = (0.371, 0.320)$	63
ภาพประกอบ 5.6	แนวโน้มการเกิดการแกว่งกวัดของคลอมบ์ของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวที่อุณหภูมิค่าต่างๆ $T \in \{2.0, 0.4, 0.3, 0.25\} K$ โดยที่ n_c อยู่ในช่วง $[0, 1]$	64

บัญชีภาพประกอบ (ต่อ)

	หน้า
ภาพประกอบ 5.7	65
การเปรียบเทียบค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดของป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวที่เป็นฟังก์ชันของอุณหภูมิ โดยเปรียบเทียบระหว่างผลการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลกับผลการทดลองของลิมบัชและคณะ [7]	
ภาพประกอบ 5.8	66
ค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดของป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวที่ได้จากการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลและจากการทดลองของลิมบัชและคณะ [7] ที่อุณหภูมิต่ำ	
ภาพประกอบ ผ.1	75
ลักษณะการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนทั้ง 6 กรณี	

บทที่ 1

บทนำ

1.1 ที่มาและความสำคัญ

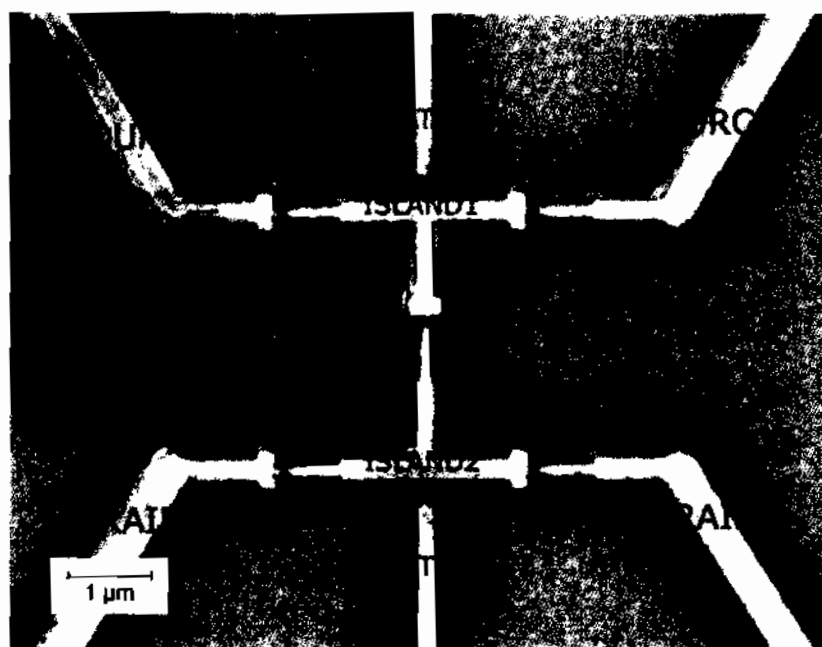
จากเทคโนโลยีในปัจจุบันที่สามารถสร้างอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ให้มีขนาดในระดับนาโนเมตร ทำให้คุณสมบัติทางไฟฟ้าของอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ดังกล่าวเปลี่ยนแปลงไป [1] เช่น ในกรณีที่โครงสร้างของอุปกรณ์อยู่ระหว่างไมโครเมตรถึงนาโนเมตร อุปกรณ์สามารถแสดงพฤติกรรมทางไฟฟ้าได้ทั้งควอนตัมและแบบฉบับ (quantum and classical behaviors) ซึ่งพฤติกรรมทางควอนตัมเป็นคุณสมบัติที่เกิดขึ้นในระดับอะตอม (atomic scale) ส่วนพฤติกรรมแบบฉบับเป็นคุณสมบัติที่เกิดขึ้นในระดับไมโครสเกล (microscopic scale) ระบบดังกล่าวถูกเรียกว่า ระบบเมโซสโคปิก (mesoscopic system) [2]

ในปี ค.ศ. 1987 ศาสตราจารย์ฟุตอลและคณะ (Futon et al) [3] ประสบความสำเร็จในการควบคุมอิเล็กตรอนให้เคลื่อนที่ทีละหนึ่งตัวในโครงสร้างที่อยู่ในสถานะของแข็ง (solid-state structure) ต่อมาในปี ค.ศ. 1991 ศาสตราจารย์ลาฟาร์กและคณะ (Lafarge et al) [4] ได้ประดิษฐ์โครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ที่ทำจากอลูมิเนียม เพื่อศึกษาผลของปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ (Coulomb blockade effect) ในอุปกรณ์ที่เรียกว่า กล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว (single-electron boxes) โดยแสดงให้เห็นว่าจำนวนอิเล็กตรอนภายในกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวสามารถควบคุมอิเล็กตรอนให้เพิ่มขึ้น (หรือลดลง) ทีละหนึ่งตัวด้วยการไหลผ่านไฟฟ้าที่เหมาะสม โดยพลังงานที่ใช้ในการเพิ่มจำนวนอิเล็กตรอนนี้เรียกว่าพลังงานการเพิ่มประจุ (charging energy) ซึ่งสามารถกล่าวได้ว่า ในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์แบบอิเล็กตรอนเดี่ยว (single-electron devices) [1-5] พลังงานการเพิ่มประจุเป็นตัวแปรที่สำคัญในการควบคุมอิเล็กตรอนให้เคลื่อนที่ผ่านอุปกรณ์ทีละหนึ่งตัว

ต่อมาในปี ค.ศ. 2002 วอลลิสเซอร์และคณะ (Wallisser et al) [6] ได้ศึกษาโครงสร้างที่เรียกว่า ทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว (single-electron transistors) ซึ่งเป็นอุปกรณ์ที่ประกอบด้วยเกาะโลหะ (metallic island) และรอยต่อของการทะลุผ่านสองรอยต่อคั่นอยู่ระหว่างเกาะโลหะและขั้วไฟฟ้าทั้งสอง ขั้วเกต (gate electrode) ทำหน้าที่ควบคุมจำนวนอิเล็กตรอนภายในเกาะโลหะด้วยสนามไฟฟ้าจากแหล่งไฟฟ้าภายนอก เพื่ออธิบายปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ที่เกิดขึ้นในทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว วอลลิสเซอร์และคณะได้เปรียบเทียบค่าความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวที่ได้จากผลการทดลองกับการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล (quantum Monte Carlo method) พบว่าผลการคำนวณที่ได้จากวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล สามารถอธิบายผลการทดลองได้อย่างถูกต้อง

ในปี ค.ศ. 2005 ลิมบัชและคณะ (Limbach et al) [7] ได้รายงานผลการทดลองของอุปกรณ์ปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว (single-electron pumps) ซึ่งประกอบไปด้วยเกาะโลหะสองเกาะที่เรียงต่อกัน

โดยมีรอยต่อการทะลุผ่านคั่นอยู่กึ่งกลางระหว่างเกาะโลหะและคั่นอยู่ระหว่างเกาะโลหะกับขั้วไฟฟ้าทั้งสอง โดยใช้ขั้วเกตทำหน้าที่ควบคุมจำนวนอิเล็กตรอนในเกาะโลหะ ซึ่งมีโครงสร้างดังภาพประกอบ 1.1



ภาพประกอบ 1.1 โครงสร้างของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว ที่ถ่ายด้วยกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนชนิดส่องกราด (scanning electron microscope; SEM) [7]

ลิ้มบัชและคณะ [7] ได้ทำการวัดค่าความนำไฟฟ้าที่อุณหภูมิค่าต่างๆ เพื่อเปรียบเทียบค่าที่คำนวณจากแบบจำลองซีควนเชียล (sequential model) พบว่า ทฤษฎีดังกล่าวนี้ไม่สามารถอธิบายผลการทดลองดังกล่าวได้ถูกต้อง โดยเฉพาะอย่างยิ่งในช่วงของอุณหภูมิที่เกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์

ในโครงงานนี้จึงมุ่งเน้นศึกษาปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ที่เกิดขึ้นในปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว โดยเริ่มจากการคำนวณแผนภาพเสถียร (stability diagram) ของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว ที่เงื่อนไขต่างๆ เพื่อนำไปสู่การคำนวณค่าความนำไฟฟ้าของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว โดยใช้วิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล แล้วนำผลที่ได้ไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองของลิ้มบัชและคณะ [7] นอกจากนี้งานวิจัยที่ผ่านมาได้มีการศึกษาไว้เฉพาะพลังงานการเพิ่มประจุยังผลในกรณีของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวเท่านั้น [8] โครงงานนี้จึงมีวัตถุประสงค์เพื่อนำเสนอนิยามและวิธีการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล (effective charging energy) ซึ่งเป็นลักษณะสมบัติที่สำคัญอย่างหนึ่งของอุปกรณ์อิเล็กตรอนเดี่ยว

1.2 วัตถุประสงค์ของโครงการ

- 1.2.1 เพื่อคำนวณแผนภาพเสถียรของบีมีอิเล็กตรอนเดี่ยว
- 1.2.2 เพื่อเสนอนิยามและวิธีการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของบีมีอิเล็กตรอนเดี่ยวที่อุณหภูมิต่างๆ
- 1.2.3 เพื่อคำนวณค่าความนำไฟฟ้าของบีมีอิเล็กตรอนเดี่ยวด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลเพื่อนำไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองจริง

1.3 ขอบเขตของโครงการ

- 1.3.1 เขียนแผนภาพเสถียรของบีมีอิเล็กตรอนเดี่ยวในกรณีที่มีการส่งผ่านแบบเชิงเส้น
- 1.3.2 คำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของบีมีอิเล็กตรอนเดี่ยวเมื่อค่าความนำไฟฟ้าอยู่ในช่วง $[0, 10]$
- 1.3.3 คำนวณค่าความนำไฟฟ้าในบีมีอิเล็กตรอนเดี่ยวชนิดโลหะที่อุณหภูมิอยู่ในช่วง $0.25 - 2.0 \text{ K}$ และจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกตรวม (n_x) อยู่ในช่วง $[0, 2]$

1.4 สถานที่ทำโครงการ

หน่วยวิจัยฟิสิกส์ทฤษฎีสารควบแน่น (Theoretical Condensed Matter Physics Research Unit) ห้อง SC1-211 ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหาสารคาม

1.5 ประโยชน์ที่ได้รับ

- 1.5.1 ได้องค์ความรู้สำหรับการอธิบายการออกแบบและประยุกต์ใช้งานบีมีอิเล็กตรอนเดี่ยว
- 1.5.2 ได้องค์ความรู้สำหรับการคำนวณค่าความนำไฟฟ้าของอุปกรณ์อิเล็กตรอนเดี่ยวที่มีความซับซ้อนมากยิ่งขึ้นได้
- 1.5.3 ได้ข้อมูลสำหรับตีพิมพ์เผยแพร่ผลงานในวารสารระดับประเทศหรือระดับนานาชาติ

บทที่ 2

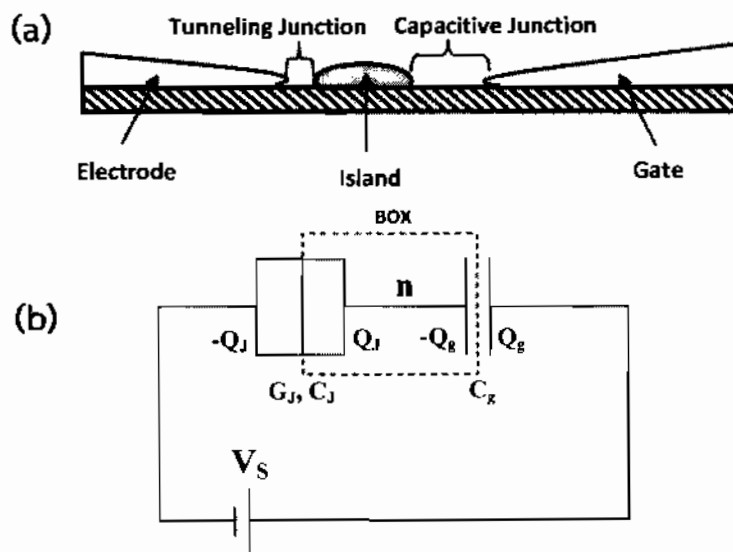
ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง

2.1 อุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว

เทคโนโลยีในปัจจุบันสามารถสร้างอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ที่มีค่าความจุไฟฟ้าขนาดประมาณ 1 เฟมโตฟารัด 1 fF ($1\text{ femto} = 10^{-15}$) ซึ่งทำให้โครงสร้างดังกล่าว สามารถแสดงปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์อันเป็นปรากฏการณ์ที่กระแสการทะลุผ่าน (tunneling current) ของอิเล็กตรอนมีค่าต่ำลงเนื่องจากอันตรกิริยาของแรงคูลอมบ์ (Coulomb interaction) ซึ่งเป็นปัจจัยสำคัญที่ทำให้สามารถควบคุมการส่งผ่านอิเล็กตรอนได้ที่ละหนึ่งตัว โดยพลังงานที่มีค่าน้อยที่สุดในการเพิ่มอิเล็กตรอนหนึ่งตัวเข้าไปในระบบเรียกว่า พลังงานการเพิ่มประจุ (E_C) ซึ่งนิยามดังสมการ

$$E_C = \frac{e^2}{2C_\Sigma} \quad (2.1)$$

เมื่อ e คือ ขนาดประจุอิเล็กตรอน ($e = |e| = +1.602 \times 10^{-19}\text{ C}$) และ C_Σ เป็นค่าความจุไฟฟ้ารวมของระบบ เพื่ออธิบายรายละเอียดของพลังงานดังกล่าว ในหัวนี้ได้ยกตัวอย่างระบบที่เรียกว่า กล้องอิเล็กตรอนเดี่ยว โดยมีโครงสร้างดังแสดงในภาพประกอบ 2.1



ภาพประกอบ 2.1 (a) แบบจำลองของกล้องอิเล็กตรอนเดี่ยวซึ่งประกอบด้วยรอยต่อการทะลุผ่านและเกาะโลหะและ (b) วงจรสมมูลของกล้องอิเล็กตรอนเดี่ยว [4]

โดยทั่วไปกล้องอิเล็กตรอนเดี่ยวประกอบไปด้วย รอยต่อการทะลุผ่านที่มีคุณสมบัติเสมือนเป็นตัวเก็บประจุ ในที่นี้กำหนดให้มีค่าความจุไฟฟ้าเท่ากับ C_J และค่าความนำไฟฟ้าของการทะลุผ่าน

เท่ากับ G_J นอกจากนี้ ระบบมีรอยต่อตัวเก็บประจุที่คั่นอยู่ระหว่างเกาะโลหะกับขั้วไฟฟ้าขนาด C_g ในระบบนี้แรงดันไฟฟ้าภายนอก (V_s) ถูกจ่ายเข้าไปเพื่อทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงประจุบนผิวทั้งสองข้างของรอยต่อ โดยมีขนาดเท่ากันแต่มีประจุตรงกันข้ามดังแสดงในภาพประกอบ 2.1 (b) ในกรณีนี้สามารถคำนวณค่าพลังงานศักย์ไฟฟ้าสถิตจากการพิจารณาผลรวมของประจุที่เพิ่มขึ้นในกล่องอิเล็กทรอนิกส์รอนเดี่ยวทั้งสองส่วน กล่าวคือ

$$-n_{un}e = Q_J - Q_g \quad (2.2)$$

เมื่อ n_{un} คือ จำนวนอิเล็กตรอนที่ทะลุผ่านรอยต่อการทะลุผ่าน Q_J คือ ประจุที่รอยต่อการทะลุผ่าน และ Q_g คือ ประจุที่ถูกเหนี่ยวนำโดยขั้วเกิด จากภาพประกอบ 2.1 (b) ตัวเก็บประจุในระบบต่อกันเป็นแบบอนุกรมเมื่อมองจากแหล่งจ่ายแรงดันไฟฟ้า มีค่า $C_{gs}^{-1} = C_J^{-1} + C_g^{-1}$ จึงทำให้แรงดันไฟฟ้าที่ให้ออกไปในระบบถูกแบ่งออกเป็นสองส่วน จาก $C = Q/V$ ดังนั้น

$$V_s = \frac{Q_J}{C_J} + \frac{Q_g}{C_g} \quad (2.3)$$

โดย พลังงานรวมของระบบที่เกิดขึ้นเนื่องจากประจุที่สะสมในระบบสามารถคำนวณได้ดังนี้

$$E_{sys} = \frac{Q_J^2}{2C_J} + \frac{Q_g^2}{2C_g} \quad (2.4)$$

จากสมการ (2.2) และ (2.3) สามารถเขียนประจุ Q_g และ Q_J ในพจน์ของค่า n_{un} และ V_s ดังสมการ

$$Q_g = \frac{C_g C_J V_s + C_g n_{un} e}{C_\Sigma} \quad (2.5)$$

และ

$$Q_J = \frac{C_g C_J V_s - C_J n_{un} e}{C_\Sigma} \quad (2.6)$$

เมื่อ $C_\Sigma = C_J + C_g$ คือ ความจุไฟฟ้ารวมของเกาะโลหะ ดังนั้น เมื่อนำค่า Q_g และ Q_J แทนในสมการ (2.4) พลังงานของระบบสามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$E_{sys} = \frac{C_g C_J V_s^2 + (n_{un} e)^2}{2C_\Sigma} \quad (2.7)$$

นอกจากนี้ประจุ Q_g ที่สะสมอยู่ในระบบได้รับงาน (W) เนื่องจากแหล่งแรงดันไฟฟ้า V_s ดังสมการ

$$W = Q_g V_s \quad (2.8)$$

ดังนั้น พลังงานศักย์ไฟฟ้าสถิต ($E_C(n_{lum}, n_g)$) จึงเกิดจากผลต่างระหว่างพลังงานรวมของระบบกับงานเนื่องจากแหล่งจ่ายแรงดันไฟฟ้า กล่าวคือ

$$E_C(n_{lum}, n_g) = E_{sys} - W \quad (2.9)$$

$$= \frac{(C_g C_J V_S^2 + (n_{lum} e)^2)}{2C_\Sigma} - \frac{(C_g C_J V_S + n_{lum} e C_g)}{C_\Sigma} V_S \quad (2.10)$$

$$= \frac{(-C_g C_J V_S^2 - 2C_g n_{lum} e V_S + (n_{lum} e)^2)}{2C_\Sigma} \quad (2.11)$$

ที่สภาวะสมดุล จะได้ $V_S = V_g$ และสามารถนิยามประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำโดยขั้วเกตได้ดังสมการ

$$Q_g = C_g V_g = C_g V_S = n_g e \quad (2.12)$$

แทนจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกต $n_g = (C_g V_S) / e$ ในสมการ (2.11) ได้

$$E_C(n_{lum}, n_g) = \frac{e^2}{2C_\Sigma} \left(-\frac{C_J}{eC_g} n_g^2 - 2n_g n_{lum} + n_{lum}^2 \right) \quad (2.13)$$

จากนิยามของพลังงานศักย์ไฟฟ้าสถิต การคำนวณค่าพลังงานน้อยที่สุดที่ใช้ในการเพิ่มประจุ n ตัวเข้าไปในระบบภายใต้สภาวะสมดุลความร้อนเป็นไปตามเงื่อนไข

$$\frac{\partial E_C(n_{lum}, n_g)}{\partial n_{lum}} = 0 \quad (2.14)$$

เมื่อนำสมการ (2.13) แทนในสมการ (2.14) พบว่า ภายใต้เงื่อนไขนี้ จะได้

$$n_{lum} = n_g \quad (2.15)$$

จากนั้น นำสมการ (2.15) แทนในสมการ (2.13) พบว่า พลังงานน้อยที่สุดที่ใช้ในการเพิ่มประจุ n_{lum} ตัวเข้าไปในระบบ ($E_C(n_{lum}, n_g)$) เป็นดังสมการ

$$E_C(n_{lum}, n_g) = \frac{e^2 n_g^2}{2C_\Sigma} \left(-\frac{C_J}{eC_g} - 1 \right) \quad (2.16)$$

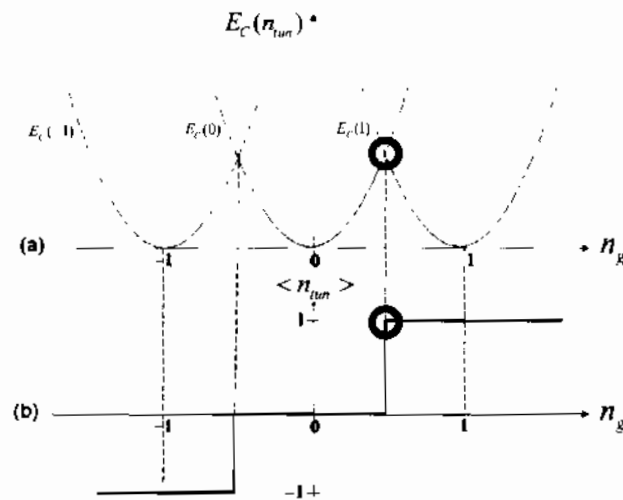
เนื่องจากพลังงานศักย์ไฟฟ้าสถิตมีลักษณะคล้ายกับแรงดันไฟฟ้า จึงสามารถกำหนดจุดใดๆ เป็นจุดอ้างอิง ในกรณีนี้ กำหนดให้ $E_C(n_{lum}, n_g) = 0$ ในสมการ (2.16) เป็นจุดอ้างอิง จะได้

$$C_J = -eC_g \quad (2.17)$$

เมื่อนำค่าดังกล่าวนี้ไปแทนในสมการ (2.13) พบว่า พลังงานศักย์ไฟฟ้าสถิตสามารถแสดงได้ดังสมการ

$$E_C(n_{lum}, n_g) = \frac{e^2 (n_{lum} - n_g)^2}{2C_\Sigma} \quad (2.18)$$

จากสมการ (2.18) พบว่า พลังงานศักย์ไฟฟ้าสถิตเป็นฟังก์ชันของจำนวนอิเล็กตรอนที่ทะลุผ่านรอยต่อการทะลุผ่าน n_{lum} และ n_g ซึ่งสามารถแสดงได้ดังภาพประกอบ 2.2



ภาพประกอบ 2.2 (a) ความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานศักย์ไฟฟ้าสถิต $E_C(n_{tun})$ ของกล่องอิเล็กตรอนเดียวกับจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกต (n_g) และ (b) จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยที่ทะลุผ่านรอยต่อการทะลุผ่าน $\langle n_{tun} \rangle$ ที่ขึ้นกับจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกต

จากภาพประกอบ 2.2 (a) จุดที่อยู่ในวงกลมสีน้ำเงินเป็นจุดที่มีสถานะประจุแตกต่างกันแต่มีค่าพลังงานเท่ากัน เรียกว่า จุดดีเจนเนอเรซี (degeneracy point) ซึ่งจุดดังกล่าว อยู่ในสภาวะที่จำนวนของอิเล็กตรอนในเกาะโลหะเกิดการทะลุผ่านระหว่างเกาะกับขั้วโลหะ จึงทำให้จำนวนอิเล็กตรอนในเกาะโลหะเกิดการเปลี่ยนแปลง โดย $(n_{dot} - 1/2) < n_g < (n_{dot} + 1/2)$ เป็นเงื่อนไขเสถียรภาพที่ทำให้จำนวนประจุในเกาะโลหะไม่เกิดการเปลี่ยนแปลงจนกว่าจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตจะมีค่าตามสมการ $n_g = n_{tun} \pm 1/2$ ซึ่งทำให้มีการเปลี่ยนแปลงของจำนวนอิเล็กตรอนที่ทะลุผ่านรอยต่อการทะลุผ่าน n_{tun} ในระบบเป็นแบบขั้นบันไดดังแสดงในภาพประกอบ 2.2 (b)

ในการศึกษาปรากฏการณ์การขัดขวางแบบโคลอมบ์ที่เกิดขึ้นในกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวสามารถอธิบายด้วยพลังงานการเพิ่มประจุยังผล (E_C^*) ซึ่งนิยามดังสมการ

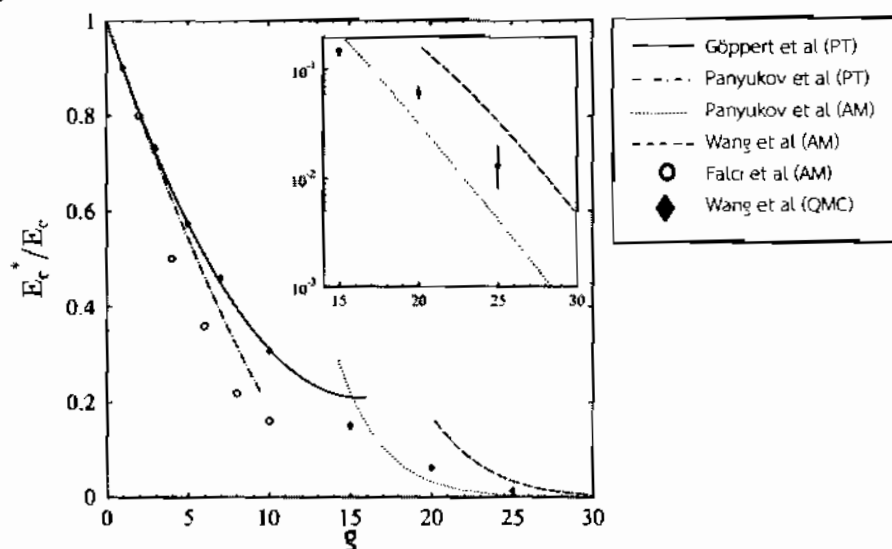
$$\frac{E_C^*}{E_C} = \frac{\partial \langle Q_{tun} \rangle}{\partial Q_g} \bigg|_{Q_g=0} \quad (2.19)$$

เมื่อ $\langle Q_{tun} \rangle$ คือ ประจุอิเล็กตรอนเฉลี่ยที่ทะลุผ่านรอยต่อการทะลุผ่านมีค่าดังสมการ $\langle Q_{tun} \rangle = e(n_g - \langle n_j \rangle)$ โดยที่ $\langle n_j \rangle$ คือ จำนวนประจุเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านภายในเกาะโลหะ และ $Q_g = n_g e$ [9] ดังนั้น เมื่อนำไปแทนในสมการ (2.19) พบว่า

$$\frac{E_C^*}{E_C} = \frac{\partial(n_g - \langle n_J \rangle)}{\partial n_g} \bigg|_{n_g=0} \quad (2.20)$$

$$= 1 - \frac{\partial \langle n_J \rangle}{\partial n_g} \bigg|_{n_g=0} \quad (2.21)$$

จากสมการ (2.21) พบว่า ในกรณีที่ระบบแสดงปรากฏการณ์การขีดขวางแบบคูลอมบ์อย่างเด่นชัดคือกรณีที่ค่า $G_T/G_K \ll 1$ เมื่อ G_T คือ ค่าความนำไฟฟ้าของการทะลุผ่าน (tunneling conductance) และ G_K คือ ค่าความนำไฟฟ้าทางควอนตัม (quantum conductance) ซึ่งในกรณีนี้จำนวนประจุเฉลี่ยที่ร่อยต่อการทะลุผ่านภายในเกาะโลหะจะไม่เกิดการเปลี่ยนแปลง ในช่วงที่ค่า $n_g \sim 0$ ดังนั้น E_C^* จึงมีค่าเท่ากับ E_C แต่ในกรณีที่ $G_T/G_K \gg 1$ เป็นกรณีที่ปรากฏการณ์การขีดขวางแบบคูลอมบ์เกิดขึ้นไม่เด่นชัด ส่งผลให้จำนวนประจุเฉลี่ยที่ร่อยต่อการทะลุผ่านภายในเกาะโลหะเกิดการเปลี่ยนแปลง กล่าวคือ $\partial \langle n_J \rangle / \partial n_g \rightarrow 1$ จึงทำให้พลังงานการเพิ่มประจุยังผลในกรณีนี้มีค่าลู่เข้าสู่ศูนย์



ภาพประกอบ 2.3 ความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวกับค่าอัตราส่วนของค่าความนำไฟฟ้าของการทะลุผ่าน $g = G_T / G_K$ [10]

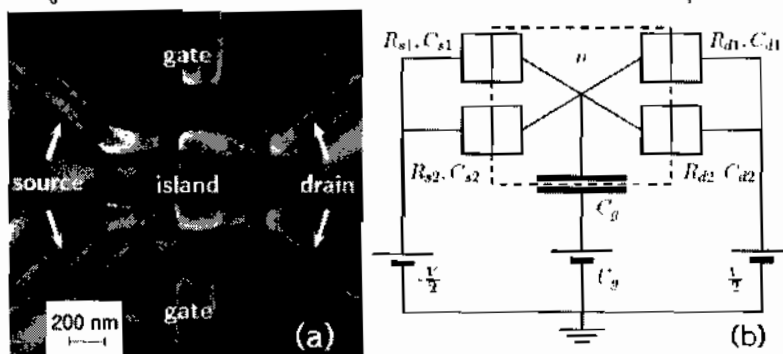
จากภาพประกอบ 2.3 แสดงผลการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลซึ่งเป็นฟังก์ชันของค่าความนำไฟฟ้าของการทะลุผ่านที่ไม่มีหน่วย ($g = G_T / G_K$) โดยในกรณีนี้ ค่าความนำไฟฟ้าทางควอนตัม $G_K = 25.8 \text{ k}\Omega$ พร้อมทั้งได้เปรียบเทียบผลการคำนวณกับงานวิจัยที่เกี่ยวข้องซึ่งแบ่งออกเป็นสองกรณี ในกรณีแรก ค่าความนำไฟฟ้าของการทะลุผ่านมีค่าน้อย ($g < 10$) สามารถอธิบายด้วยทฤษฎีเพอร์เทอร์เบชัน (perturbation theory; PT) ซึ่งเป็นผลงานวิจัย

ของป็นยูกอฟและคณะ (Panyukov et al) [11] (---) และของกอฟเพิร์ตและคณะ (Göppert et al) [12,13] (—) ส่วนในกรณีที่ค่าความนำไฟฟ้าของการทะลุผ่านมีค่ามาก ($g \geq 10$) เป็นผลการประมาณในแบบวิเคราะห์ (analytical method; AM) ของป็นยูกอฟและคณะ [11] (-----) และผลงานวิจัยของวางและคณะ (Wang et al) [10] (----) นอกจากนั้นฟาลซียและคณะ (Falci et al) [14] ได้รายงานผลการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล (๑) แต่อย่างไรก็ตาม ผลการคำนวณไม่ได้แสดงค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลตลอดทั้งช่วงของค่า g ยกเว้นผลงานวิจัยของวางและกราเบิร์ต [12] (๑) ที่สามารถอธิบายค่า E_c^+ / E_c^- ได้ตลอดทั้งช่วง g ของกล่องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว โดยได้ใช้วิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลในการคำนวณ สำหรับกราฟในกรอบสี่เหลี่ยมทางขวามือของภาพประกอบ 2.3 ได้แสดงความสัมพันธ์ของค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลกับอัตราส่วนของค่าความนำไฟฟ้าในรูปแบบของกราฟกึ่งลอการิทึม (semi-logarithmic) ในช่วงที่ค่าความนำไฟฟ้ามีค่าสูง

2.2 ทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว

จากหัวข้อที่ผ่านมาได้กล่าวถึงกล่องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวซึ่งเป็นอุปกรณ์ที่ประกอบด้วยรอยต่อการทะลุผ่านเพียงหนึ่งรอยต่อ ในหัวข้อนี้จะกล่าวถึงทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ซึ่งประกอบไปด้วยรอยต่อการทะลุผ่านสองรอยต่อ โดยปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคุลอมบ์ที่เกิดในอุปกรณ์ดังกล่าวได้มีการศึกษาเป็นครั้งแรกโดยฟูตอลและคณะ [3]

ใน ค.ศ. 2002 วอลส์ลิสเซอร์และคณะ [6] ได้สร้างทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวด้วยกระบวนการลิโทกราฟีด้วยลำอิเล็กตรอน (e-beam lithography) และกระบวนการซาโดอีวาพอเรชัน (shadow evaporation) ซึ่งประกอบไปด้วยรอยต่อการทะลุผ่านสี่รอยต่อ ดังแสดงในภาพประกอบ 2.4(a) อุปกรณ์ดังกล่าวประกอบไปด้วยขั้วซอร์ส (source electrode) และขั้วเดรน (drain electrode) อย่างละสองขั้วซึ่งถูกคั่นกลางด้วยเกาะโลหะ และมีรอยต่อการทะลุผ่านคั่นระหว่างขั้วซอร์สกับเกาะโลหะและขั้วเดรนกับเกาะโลหะ นอกจากนั้น มีขั้วเกต (gate electrode) อยู่ทั้งสองข้างของเกาะโลหะ โดยรอยต่อที่คั่นอยู่ระหว่างขั้วเกตกับเกาะโลหะทำหน้าที่เหมือนเป็นตัวเก็บประจุ



ภาพประกอบ 2.4 (a) โครงสร้างของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวแบบ 4 รอยต่อ และ (b) วงจรสมมูลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว (บริเวณภายในเส้นประ คือ บริเวณของเกาะโลหะ) [6]

ในการวัดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบโคลอมบ์ที่เกิดขึ้นในทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ขั้วซอร์สทั้งสองขั้วและขั้วเดรนทั้งสองขั้วถูกรวมเข้าด้วยกันดังวงจรสมมูลในภาพประกอบ 2.4 (b) จุดประสงค์ในการสร้างทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวให้มีสัณฐานนั้น เพื่อให้สามารถวัดค่าความต้านทานของทรอยด์ต่อได้ และสามารถกำหนดค่าความนำไฟฟ้ารวมที่ไม่มีหน่วย (dimensionless conductance) $g = (G_s + G_d)/G_K$ ของทรอยด์การทะลุผ่านได้ เมื่อ $G_s = G_{s1} + G_{s2}$ และ $G_d = G_{d1} + G_{d2}$ เป็นค่าความนำไฟฟ้าที่ทรอยด์ของขั้วซอร์สและขั้วเดรนตามลำดับ โดย $G_K = e^2/h$ คือ ค่าความนำไฟฟ้าทางควอนตัม นอกจากนี้ ค่าตัวเก็บประจุรวม $C_x = C_s + C_d + C_g$ ของระบบ ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ที่กำหนดค่าพลังงานการเพิ่มประจุ $E_C = e^2/2C_x$ เพื่อความสะดวกในการคำนวณ จึงกำหนดค่าพลังงานเฉลี่ยของอิเล็กตรอนด้วยค่า $\beta = (k_B T)^{-1}$ และแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตสามารถเขียนให้อยู่ในพจน์ของจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกต $n_g = (C_g V_g)/e$ ที่เพิ่มเข้ามาในเกาะโลหะด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกต V_g พารามิเตอร์ที่กล่าวมาเหล่านี้ สามารถนำไปใช้อธิบายปรากฏการณ์การขัดขวางแบบโคลอมบ์ในทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวได้ดังจะกล่าวในหัวข้อต่อไป

2.2.1 แบบจำลองประจุของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว

ในการคำนวณฟังก์ชันแบ่งส่วนของระบบทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวจำเป็นต้องกำหนดตัวดำเนินการแฮมิลโทเนียน (Hamiltonian) ของระบบทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ซึ่งสามารถแสดงได้ดังสมการ [15]

$$\hat{H} = \hat{H}_B + \hat{H}_C + \hat{H}_T \quad (2.22)$$

เมื่อ $\hat{H}_B$, $\hat{H}_C$ และ $\hat{H}_T$ คือ ตัวดำเนินการแฮมิลโทเนียนของอิเล็กตรอนในขั้วโลหะ ตัวดำเนินการแฮมิลโทเนียนศักย์ไฟฟ้าสถิตและตัวดำเนินการแฮมิลโทเนียนการทะลุผ่าน ตามลำดับ โดย $\hat{H}_B$ เป็นตัวดำเนินการที่แสดงอิเล็กตรอนอิสระที่อยู่ในขั้วไฟฟ้าทั้งสองและเกาะโลหื่อดังสมการ

$$\hat{H}_B = \sum_{j=0,1} \sum_{k,\sigma} E'_{k\sigma} \hat{c}_{k\sigma}^{(j)\dagger} \hat{c}_{k\sigma}^{(j)} + \sum_{q,\sigma} \epsilon_{q\sigma} \hat{d}_{q\sigma}^* \hat{d}_{q\sigma} \quad (2.23)$$

เมื่อ $E'_{k\sigma}$ เป็นพลังงานของอิเล็กตรอนที่มีเลขคลื่น k ในช่องการทะลุผ่าน σ ของขั้วไฟฟ้า j สำหรับพลังงานของอิเล็กตรอน $\epsilon_{q\sigma}$ ที่มี q เป็นเลขคลื่นในช่อง σ บนเกาะโลหะ ซึ่งตัวดำเนินการแฮมิลโทเนียนศักย์ไฟฟ้าสถิตของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวนิยามตามสมการ

$$\hat{H}_C = E_C (\hat{n} - \hat{n}_g)^2 \quad (2.24)$$

เมื่อ $E_C = e^2/2C_x$ โดยที่ $\hat{n}$ เป็นตัวดำเนินการจำนวนของอิเล็กตรอนที่อยู่บนเกาะโลหะและ $\hat{n}_g = (C_g V_g)/e$ เป็นตัวดำเนินการจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกต นอกจากนั้นอิเล็กตรอนสามารถทะลุผ่านจากขั้วไฟฟ้าไปเข้ายังเกาะโลหะหรือจากเกาะโลหะกลับมายัง

ข้อไฟฟ้า ซึ่งเหตุการณ์การทะลุผ่านนี้ถูกอธิบายด้วยตัวดำเนินการแฮมิลโตเนียนการทะลุผ่าน ($\hat{H}_T$) ดังสมการ

$$\hat{H}_T = \sum_{j,k,q,\sigma} [\hat{c}_{k\sigma}^{(\dagger)} \hat{\Lambda}'_{kq\sigma} \hat{d}_{q\sigma} + \hat{d}_{q\sigma}^\dagger \hat{\Lambda}_{kq\sigma}^* \hat{c}_{k\sigma}^{(\dagger)}] \quad (2.25)$$

โดยที่ $\hat{\Lambda}'_{kq\sigma} = t'_{kq\sigma} e^{i\phi}$ เมื่อ $t'_{kq\sigma}$ เป็นขนาดของการทะลุผ่าน (tunneling amplitude) ของอิเล็กตรอนในสถานะ $|q\sigma\rangle$ บนเกาะโลหะที่ผ่านไปยังข้อไฟฟ้า j และมีสถานะสุดท้ายเป็น $|k\sigma\rangle$ ตัวดำเนินการ ϕ เป็นสังยุค (conjugate) ของตัวดำเนินการจำนวนอิเล็กตรอน $\hat{n}$ บนเกาะโลหะ กล่าวคือ $[\hat{n}, \phi] = i$ (ในที่นี้กำหนดให้ค่า $\hbar = 1$)

2.2.2 แอ็กชันยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว

ในหัวข้อนี้จะกล่าวถึงนิยามของฟังก์ชันแบ่งส่วนของค่าแอ็กชันยังผล (effective action) และค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชัน (correlation function) ของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวตามลำดับ ซึ่งปริมาณเหล่านี้ถูกใช้ในการคำนวณค่าความนำไฟฟ้าของของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว [6] โดยฟังก์ชันแบ่งส่วนของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวสามารถแสดงได้ตามสมการ

$$Z = \mathcal{N} \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}} \int D[\varphi] e^{-\mathcal{N}[\varphi]} \quad (2.26)$$

เมื่อ $\mathcal{N}$ เป็นค่าคงที่ของการนอร์มัลไล (normalization factor) และ $S[\varphi] = S_C[\varphi(\tau)] + S_T[\varphi(\tau)]$ เป็นพจน์ของค่าแอ็กชันของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว [15] เมื่อ $S_C[\varphi(\tau)]$ เป็นค่าแอ็กชันของแรงคูลอมบ์ตามสมการ

$$S_C[\varphi(\tau)] = \int_0^\beta d\tau \left[\frac{\dot{\varphi}^2(\tau)}{4E_C} + in_g \varphi(\tau) \right] \quad (2.27)$$

และ S_T แสดงแอ็กชันของการทะลุผ่านของอิเล็กตรอนตามสมการ

$$S_T[\varphi(\tau)] = -g \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \alpha(\tau - \tau') \cos(\varphi(\tau) - \varphi(\tau')) \quad (2.28)$$

โดยที่เคอร์เนลการทะลุผ่าน (tunneling kernel) นิยามตามสมการ

$$\alpha(\tau - \tau') = \left[4\beta^2 \sin^2 \left(\frac{\pi}{\beta} (\tau - \tau') \right) \right]^{-1}$$

เมื่อ τ คือเวลาจินตภาพ นอกจากนั้น ในการคำนวณค่าความนำไฟฟ้าของอุปกรณ์อิเล็กตรอนเดี่ยว จำเป็นต้องเริ่มจากการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันของระบบ โดยค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันของระบบสามารถนิยามได้ตามสมการ [15]

$$C(\tau) = 4\pi G_\sigma \alpha(\tau) A(\tau) \quad (2.29)$$

เมื่อ G_σ คือ ค่าความนำไฟฟ้าแบบฉบับซึ่งเกิดที่อุณหภูมิสูงและ $A(\tau)$ นิยามได้ดังสมการ

$$A(\tau) = \frac{1}{Z} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \int_{\varphi(0)=0}^{\varphi(\beta)=2\pi k} D[\varphi] \cos(\varphi(\tau) - \varphi(0)) e^{-S[\varphi]} \quad (2.30)$$

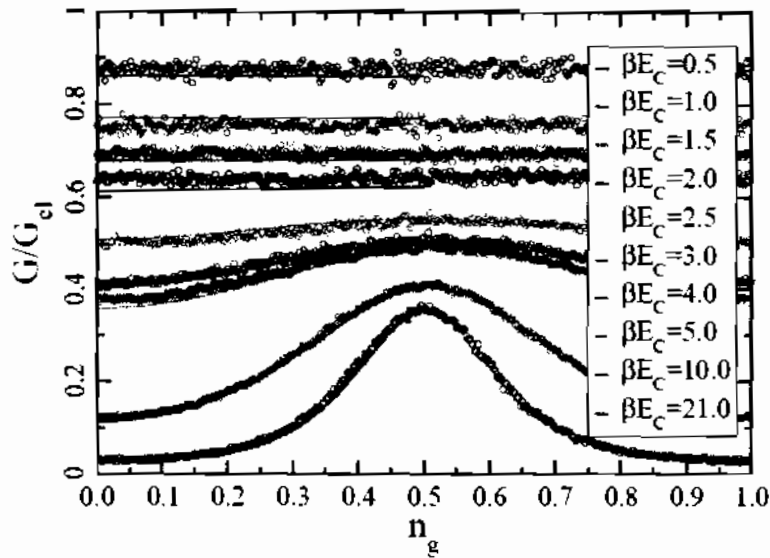
เมื่อ $S = S_C + S_T$ โดยที่ S_C และ S_T เป็นไปตามสมการ (2.27) และ (2.28) ตามลำดับ เมื่อคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันตามสมการ (2.30) แล้วนำไปคำนวณค่าสเปกตรัลฟังก์ชันแบบสมมาตร (symmetric spectral function; $A^s(\omega)$) ได้ตามสมการ

$$A(\tau) = (KA^s)(\tau) = \int_0^\infty d\omega \frac{\omega \cosh\left(\left[\frac{\beta E_C}{2} - \tau\right]\omega\right)}{2\pi \sinh\left(\frac{\beta E_C}{2}\omega\right)} A^s(\omega) \quad (2.31)$$

จากสมการนี้พบว่า ค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันสามารถคำนวณได้จากสมการ (2.30) โดยใช้วิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ดังนั้น ในการคำนวณค่าสเปกตรัลฟังก์ชันแบบสมมาตรจำเป็นต้องใช้วิธีการแก้ปัญหาแบบผกผัน (inverse problem) เพื่อคำนวณสมการอินทิกรัล (integral equation) ซึ่งรายละเอียดได้แสดงไว้ในเอกสารอ้างอิงที่ [15] จากนั้น นำค่าสเปกตรัลฟังก์ชันแบบสมมาตรที่ได้ไปหาค่าความนำไฟฟ้าตามสมการ

$$G = \frac{\beta E_C G_d}{2\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^2}{\cosh(\beta E_C \omega) - 1} A^s(\omega) \quad (2.32)$$

ในปี ค.ศ. 2002 วอลล์สเซอร์และคณะ [6] ได้รายงานผลการคำนวณค่าความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวจากสมการที่กล่าวมาข้างต้นเพื่อนำไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองที่อุณหภูมิต่างๆ ดังแสดงในภาพประกอบ 2.5

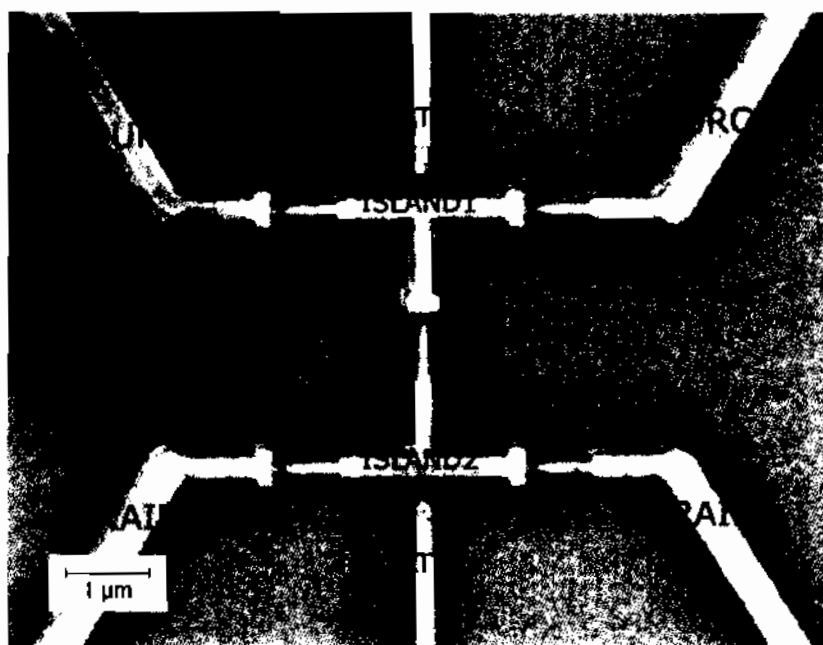


ภาพประกอบ 2.5 ความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว โดยที่ค่า $g = 4.75$ ซึ่งถูกวัดโดยวอลล์สเซอร์และคณะ [15] (o) ข้อมูลที่ได้จากการทดลองและ (-) ข้อมูลที่ได้จากการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล

จากภาพประกอบ 2.5 พบว่า ค่าความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวขึ้นกับแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตในสถานะที่ระบบมีอุณหภูมิต่ำ ซึ่งในสถานะนี้สามารถสังเกตพบปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ได้ กล่าวคือ ปรากฏการณ์ดังกล่าวจะเกิดขึ้นเมื่อพลังงานเฉลี่ยของอิเล็กตรอนมีค่าน้อยกว่าพลังงานการเพิ่มประจุ จากที่กล่าวมาข้างต้นแสดงว่า การคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลสามารถอธิบายผลการทดลองของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวได้ใกล้เคียงกับผลการทดลอง ดังนั้น ในโครงการนี้จึงประยุกต์ใช้วิธีการดังกล่าว เพื่ออธิบายปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ที่เกิดขึ้นในปั๊มอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ดังรายละเอียดในหัวข้อต่อไป

2.3 ปั๊มอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว

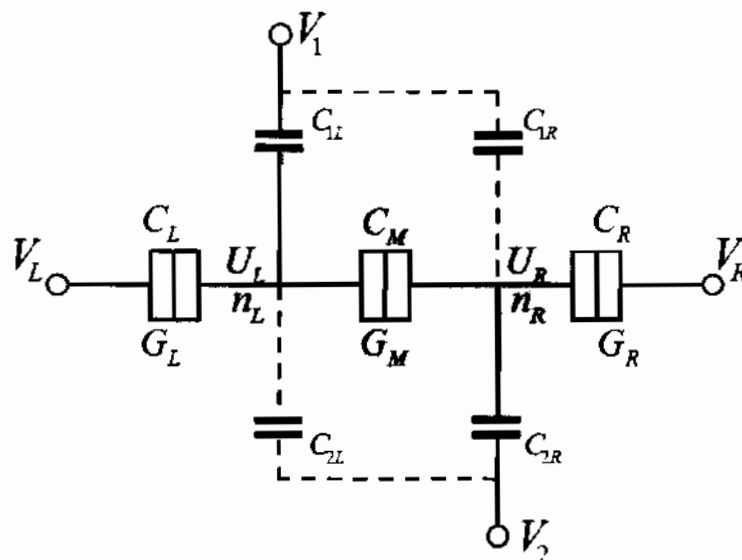
ปั๊มอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว (single-electron pumps) เป็นอุปกรณ์ที่ประกอบด้วยเกาะโลหะสองเกาะโลหะ โดยเกาะโลหะทั้งสองเชื่อมกันด้วยรอยต่อการทะลุผ่าน โครงสร้างของปั๊มอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวแสดงในภาพประกอบ 2.6



ภาพประกอบ 2.6 โครงสร้างของปั๊มอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวชนิดโลหะ ที่ถ่ายด้วยกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนชนิดส่องกราด จากงานวิจัยของลิบบัชและคณะ [7]

จากภาพประกอบ 2.6 แสดงให้เห็นว่า ปั๊มอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวมีรอยต่อการทะลุผ่าน 5 รอยต่อ ดังแสดงไว้ที่บริเวณหัวลูกศร กล่าวคือ รอยต่อการทะลุผ่านภายใน (inner tunneling contact) ซึ่งอยู่ตรงกลางของภาพและรอยต่อการทะลุผ่านภายนอก (outer tunneling contacts) ทั้งสี่รอยต่อทำมุม 90° กับรอยต่อการทะลุผ่านภายใน นอกจากนี้ ขั้วไฟฟ้าที่อยู่ด้านบนและด้านล่างของภาพคือ ขั้วเกตทำหน้าที่ควบคุมให้อิเล็กตรอนเคลื่อนที่ผ่านเกาะโลหะ ปั๊มอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวสามารถเชื่อมต่อกับ

ภายนอกได้ด้วยไฟฟ้าที่เรียกว่า ขั้วซอร์ส และขั้วเดรน ดังแสดงในภาพประกอบ 2.6 โดยปกติ ปีมัลติอิเล็กตรอนเดี่ยวประกอบด้วยรอยต่อการทะลุผ่าน 3 รอยต่อ แต่ในโครงสร้างนี้ได้ถูกออกแบบให้ประกอบด้วยรอยต่อการทะลุผ่าน 5 รอยต่อ เพื่อให้สามารถวัดความจุไฟฟ้าและค่าความนำไฟฟ้าของ รอยต่อการทะลุผ่านได้ทุกรอยต่อ ในโครงงานนี้พิจารณาโครงสร้างของปีมัลติอิเล็กตรอนเดี่ยวเฉพาะใน โครงสร้างที่ 2 ในเอกสารอ้างอิงที่ [7] เท่านั้น ซึ่งผลการวัดพารามิเตอร์ต่างๆ จากวงจรสมมูลดัง ภาพประกอบ 2.7 ได้แสดงผลการวัดของโครงสร้างที่ 2 ไว้ในตาราง 2.1 จากภาพประกอบ 2.7 ปีมัลติอิเล็กตรอนเดี่ยวประกอบด้วยขั้วไฟฟ้าจากภายนอกทั้งหมด 4 ขั้ว ประกอบด้วยขั้วซอร์ส ขั้วเดรน และขั้วเกต 2 ขั้ว สำหรับควบคุมอิเล็กตรอนให้เคลื่อนที่ไปทิศทางเดียวกัน จากภาพประกอบ 2.6 ลิ้มบัชและคณะรวมขั้วไฟฟ้าให้เหลือเพียง 4 ขั้ว [7] กล่าวคือ รวมขั้วซอร์สทั้งสองขั้วและขั้วเดรนทั้งสองขั้วเข้าด้วยกัน นอกจากนี้ ในกรณีที่พิจารณาการส่งผ่านอิเล็กตรอนเมื่อกำหนดให้สนามไฟฟ้าจาก ขั้วซอร์สและขั้วเดรนมีค่าประมาณศูนย์ ทำให้สามารถควบคุมการส่งผ่านอิเล็กตรอนได้โดยใช้ แรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทั้งสองขั้ว



ภาพประกอบ 2.7 วงจรสมมูลของปีมัลติอิเล็กตรอนเดี่ยว [7]

ตาราง 2.1 ค่าพารามิเตอร์ทั้งหมดของปีมัลติอิเล็กตรอนเดี่ยว ค่าความนำไฟฟ้าของแต่ละรอยต่อการ ทะลุผ่าน $j \in \{L, M, R\}$ ถูกนิยามเป็น $g_j = G_j / G_K$ และ $G_K = e^2 / h$ และ G_0 เป็นค่าความนำ ไฟฟ้าแบบฉบับซึ่งเกิดที่อุณหภูมิสูงของปีมัลติอิเล็กตรอนเดี่ยว [7]

Parameters	C_L	C_M	C_R	C_{1L}	C_{1R}	C_{2L}	C_{2R}	g_L	g_M	g_R	G_0
Values	181	173	236	50.5	18.0	21.5	58.6	0.52	1.32	0.83	10.0
Units	(aF)	(aF)	(aF)	(aF)	(aF)	(aF)	(aF)	-	-	-	(μS)

พลังงานศักย์ไฟฟ้าสถิตและแผนภาพเสถียร

ปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวประกอบด้วยเกาะโลหะ 2 เกาะโดยมีรอยต่อการทะลุผ่านคั่นระหว่างเกาะโลหะทั้งสอง พลังงานศักย์ไฟฟ้าสถิตของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว [7] แสดงดังสมการ (2.33)

$$E_C(n_L, n_R) = E_{CL}(n_L - n_{L0})^2 + E_{CR}(n_R - n_{R0})^2 + 2E_{CM}(n_L - n_{L0})(n_R - n_{R0}) \quad (2.33)$$

โดยที่
$$E_{CL} = \frac{e^2}{2} C_{\Sigma L} (C_{\Sigma L} C_{\Sigma R} - C_M^2)^{-1} \quad (2.34)$$

$$E_{CM} = \frac{e^2}{2} C_M (C_{\Sigma L} C_{\Sigma R} - C_M^2)^{-1} \quad (2.35)$$

$$E_{CR} = \frac{e^2}{2} C_{\Sigma R} (C_{\Sigma L} C_{\Sigma R} - C_M^2)^{-1} \quad (2.36)$$

$$C_{\Sigma i} = C_i + C_M + C_{V_i} + C_{2i} \quad (2.37)$$

และ

$$n_{i0} = \frac{C_i V_i}{e} + \frac{C_M V_1}{e} + \frac{C_{2i} V_2}{e} \quad (2.38)$$

เมื่อ $i \in \{L, R\}$ โดยที่ E_{CL} และ E_{CR} คือ พลังงานศักย์ไฟฟ้าสถิตของเกาะโลหะทางซ้ายและทางขวาตามลำดับ E_{CM} คือ พลังงานที่เชื่อมโยงระหว่างเกาะโลหะ n_{L0} และ n_{R0} คือ จำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทางซ้ายและทางขวาตามลำดับ ในการสร้างแผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวต้องคำนวณพลังงานศักย์ไฟฟ้าสถิตของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวจากสมการ (2.33) อย่างไรก็ดีตาม เพื่อให้สอดคล้องกับผลการทดลองปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวของลิ้มบัสและคณะ [7] จึงทำการแปลงสมการของพลังงานศักย์ไฟฟ้าสถิต ซึ่งเป็นฟังก์ชันของจำนวนประจุที่รอยต่อการทะลุผ่านภายในเกาะโลหะทางซ้าย (n_L) และทางขวา (n_R) ให้เป็นฟังก์ชันของจำนวนประจุที่รอยต่อการทะลุผ่านภายในเกาะโลหะรวม $n_s = n_L + n_R$ และผลต่างของจำนวนประจุที่รอยต่อการทะลุผ่านภายในเกาะโลหะ $\Delta n = n_L - n_R$ จากเงื่อนไขดังกล่าวจะได้

$$E_C(n_s, \Delta n) = E_{cx}(n_s - n_s)^2 + \frac{1}{4} E_m(n_s + \Delta n + \kappa n_s)^2 \quad (2.39)$$

เมื่อ
$$n_s = n_{L0} + n_{R0} \quad (2.40)$$

$$n_y = n_{R0} - n_{L0} - \kappa n_s \quad (2.41)$$

$$E_{cx} = e^2 / 2C_{\Sigma} \quad (2.42)$$

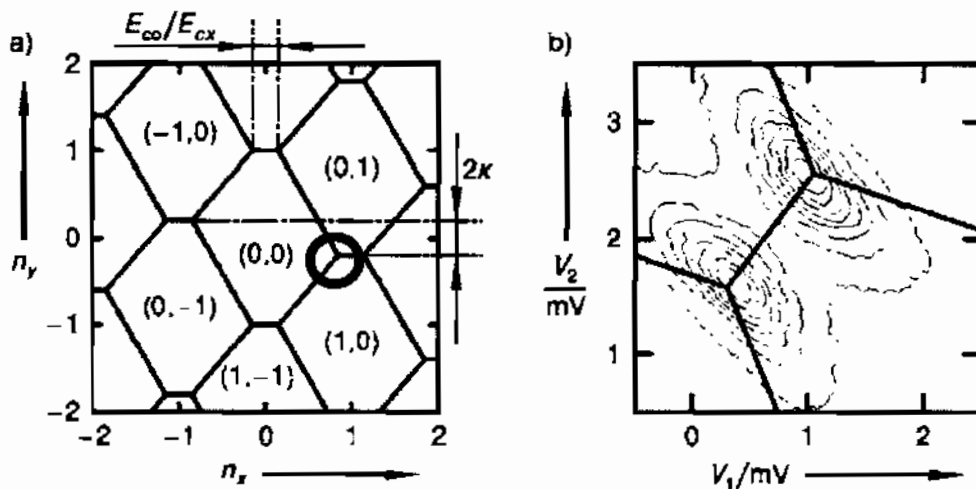
$$E_m = e^2 C_S / 2(C_{VL} C_S - C_{SL} C_{SR}) \quad (2.43)$$

$$C_S = C_L + C_{1L} + C_{2L} + C_R + C_{1R} + C_{2R} \quad (2.44)$$

เมื่อ C_S เป็นผลรวมของตัวเก็บประจุรอบนอกทั้งหมด C_{SL} เป็นผลรวมของตัวเก็บประจุรอบนอกของเกาะโลหะทางซ้ายและ C_{SR} ผลรวมของตัวเก็บประจุรอบนอกของเกาะโลหะทางขวา โดยนิยามให้

$$\kappa = (C_{SR} - C_{SL}) / C_S \quad (2.45)$$

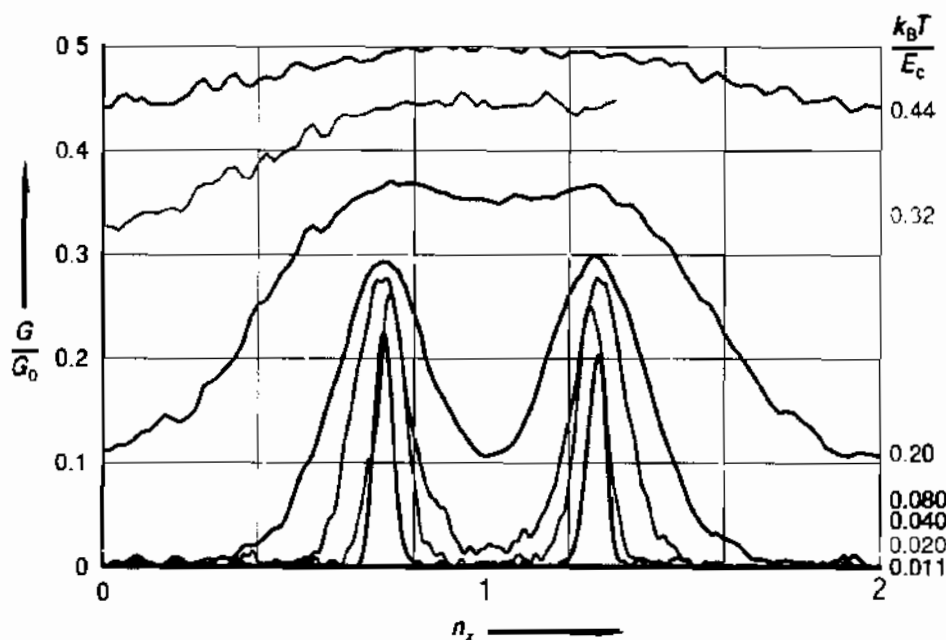
ในการศึกษาแผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว สามารถศึกษาการส่งผ่านของประจุได้ด้วยการเปลี่ยนแปลงแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทั้งสองขั้ว ซึ่งสามารถแสดงลำดับการส่งผ่านของประจุจากขั้วซอร์สไปยังขั้วเดรนได้ที่เงื่อนไขต่างๆ โดยลิบบ์และคณะได้สร้างแผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว เพื่อเปรียบเทียบกับผลการทดลองดังแสดงในภาพประกอบ 2.8 [7]



ภาพประกอบ 2.8 (a) แผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว และ (b) ผลการวัดค่าความนำไฟฟ้าของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งเป็นฟังก์ชันของแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทั้งสองขั้วที่อุณหภูมิ 150 mK [7]

จากภาพประกอบ 2.8 (a) เซลล์หกเหลี่ยมที่เกิดขึ้นมีศูนย์กลางที่แสดงจำนวนประจุที่รอยต่อการทะลุผ่านภายในเกาะโลหะทางซ้ายและขวา (n_L, n_R) โดยที่มุมของแต่ละเซลล์ถูกเรียกว่า จุดทริปเปิลพอยท์ ซึ่งเป็นจุดที่อิเล็กตรอนในสามสถานะมีระดับพลังงานเท่ากัน เมื่อเพิ่มแรงดันไฟฟ้าจนถึงจุดทริปเปิลพอยท์ในแผนภาพเสถียรซึ่งเป็นเงื่อนไขของการจ่ายแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทั้งสองขั้วเพื่อควบคุมให้ประจุเคลื่อนที่ผ่านปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวไปได้ดีที่สุด นอกจากนั้น แผนภาพเสถียรยังสามารถแสดงลำดับการส่งผ่านของประจุจาก $(0,0) \rightarrow (1,0) \rightarrow (0,1) \rightarrow (0,0)$ ซึ่งเป็นเงื่อนไขของการให้แรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทั้งสองขั้ว เพื่อควบคุมประจุให้เคลื่อนที่จากขั้วซอร์สไปยังขั้วเดรน ในทางตรงกันข้ามแผนภาพเสถียรจะสามารถใช้กำหนดแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทั้งสอง ซึ่งทำให้ลำดับของการส่งผ่านประจุให้เคลื่อนที่เปลี่ยนทิศทางจากขั้วเดรนกลับมาขั้วซอร์สได้ โดยมีลำดับดังนี้ $(0,0) \rightarrow (0,1) \rightarrow (1,0) \rightarrow (0,0)$ จากลำดับการส่งผ่านที่กล่าวมาทั้งสองกรณี อุปกรณ์นี้ถูกเรียกว่า ปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว

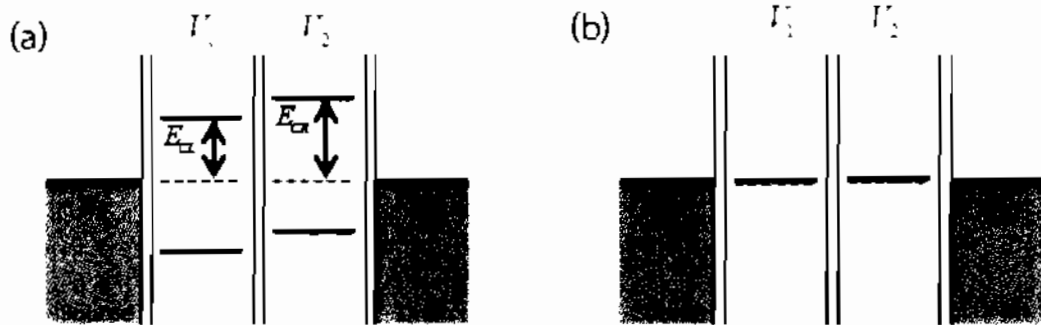
ภาพประกอบ 2.8 (b) แสดงผลที่ได้จากการวัดค่าความนำไฟฟ้าของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยว ในทางทฤษฎีจุดทริปเปิลพอยท์เป็นเงื่อนไขที่ทำให้เกิดการส่งผ่านของอิเล็กตรอนได้สูงสุดและเป็นจุดที่เกิดค่าความนำไฟฟ้าสูงสุด ($G_{\max}$) แต่จากผลการวัดแสดงให้เห็นว่าค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดเกิดขึ้นที่บริเวณใกล้เคียงกับจุดทริปเปิลพอยท์ เนื่องจากการสร้างแผนภาพเสถียรไม่คิดผลของพจน์การทะลุผ่าน ดังนั้น แผนภาพเสถียรของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวจึงไม่สามารถระบุตำแหน่งของค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดได้อย่างแม่นยำ ซึ่งการหาตำแหน่งที่แน่นอนของ $G_{\max}$ จะได้อธิบายในบทที่ 5



ภาพประกอบ 2.9 การแกว่งกวัดของคลอมบ์ของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวที่เกิดขึ้นในช่วงอุณหภูมิ 27 mK ($=0.011E_C/k_B$) ถึง 1.1 K ($=0.44E_C/k_B$) ซึ่งถูกแสดงผลโดยการวัดค่าความนำไฟฟ้าของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยว เมื่อจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิดเปลี่ยนแปลง [7]

ผลการวัดค่าความนำไฟฟ้าของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวที่อุณหภูมิต่างๆ ได้ถูกแสดงในภาพประกอบ 2.9 พิจารณาที่อุณหภูมิต่ำ เช่น เส้นสีเขียวซึ่งมีตัวเลขที่บ่งบอกอัตราส่วนระหว่างพลังงานที่เกิดจากความร้อนและพลังงานการเพิ่มประจุ $k_B T/E_C = 0.04$ พบว่า เมื่อแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิดเปลี่ยนแปลงไปค่าความนำไฟฟ้าจะเกิดการเปลี่ยนแปลงไปในปริมาณน้อยมาก อย่างไรก็ตาม พารามิเตอร์ n_x ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ที่ไม่มีหน่วยและแสดงถึงผลรวมของจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิดทั้งสอง จากกราฟในภาพประกอบ 2.9 บีมอิเล็กตรอนเดี่ยวเกิดค่าความนำไฟฟ้าสูงสุด บริเวณที่พารามิเตอร์ n_x มีค่าประมาณ 0.7 หรือ 1.3 เนื่องจากช่วงดังกล่าวเป็นสถานะที่อุปกรณ์ได้รับแรงดันไฟฟ้าจากชั่วเกิดทั้งสองอย่างเหมาะสม ทำให้อิเล็กตรอนสามารถไหลจากชั่วซอร์สไปยังชั่วเดรนได้สูงสุด แต่ช่วงที่แรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิดมีค่าน้อย พบว่า ค่าความนำไฟฟ้าเกิดขึ้นในช่วง

อุณหภูมิตำมีค่าต่ำ กล่าวคือ อิเล็กตรอนมีพลังงานไม่เพียงพอที่จะเข้าไปครอบครองสถานะว่างในเกาะโลหะ อิเล็กตรอนจึงมีโอกาสน้อยที่จะเคลื่อนที่จากขั้วซอร์สไปยังขั้วเดรน ทำให้ค่าความนำไฟฟ้ามีค่าน้อย ลักษณะที่เกิดขึ้นแสดงผลของปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ภายในปิ่นอิเล็กตรอนเดี่ยว นอกจากนี้ เพื่อให้เกิดความเข้าใจมากยิ่งขึ้นจะได้พิจารณาจากแผนภาพดังภาพประกอบ 2.10



ภาพประกอบ 2.10 (a) แผนภาพระดับพลังงานของเกาะโลหะที่เกิดค่าความนำไฟฟ้าต่ำสุด และ (b) แผนภาพระดับพลังงานของเกาะโลหะที่เกิดค่าความนำไฟฟ้าสูงสุด

พิจารณาภาพประกอบ 2.10 (a) ในกรณีอุณหภูมิต่ำและแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตมีค่าน้อย จากการการแกว่งกวัดของคูลอมบ์พบว่าเกิดค่าความนำไฟฟ้าน้อยมาก เนื่องจาก อิเล็กตรอนภายในเกาะจะครอบครองสถานะในเกาะโลหะทางซ้ายซึ่งอยู่ต่ำกว่าระดับพลังงานของขั้วซอร์สอยู่หนึ่งระดับและทำให้อิเล็กตรอนในขั้วซอร์สไม่สามารถเข้าครอบครองสถานะดังกล่าวได้ โดยเป็นผลจาก กฎการกีดกันของเพาลี (Pauli exclusion principle) ลักษณะที่เกิดขึ้นนี้เรียกว่า ปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ นอกจากนั้น อิเล็กตรอนในขั้วซอร์สจะมีโอกาสน้อยมากที่จะขึ้นไปครอบครองสถานะว่างที่อยู่สูงกว่าส่งผลให้โอกาสที่อิเล็กตรอนในขั้วซอร์สจะทะลุผ่านไปยังขั้วเดรนเกิดขึ้นได้น้อยมาก ด้วยเหตุนี้ ทำให้ค่าความนำไฟฟ้าที่วัดได้ในบริเวณดังกล่าวมีค่าประมาณศูนย์ ภาพประกอบ 2.10 (b) แสดงปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ในสภาวะที่เกิดค่าความนำไฟฟ้าสูงสุด เมื่อให้จำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตรวม (n_x) ทั้งสองขั้วให้มีค่าประมาณ 0.7 หรือ 1.3 ในทางปฏิบัติ การเพิ่มจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตรวมคือการเพิ่มแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกต ด้วยค่าแรงดันไฟฟ้าค่านี้ทำให้ระดับพลังงานว่างของเกาะโลหะทั้งสองลดลงมาอยู่ในระดับใกล้เคียงกับระดับพลังงานของอิเล็กตรอนในขั้วซอร์ส อิเล็กตรอนจากขั้วซอร์สจะครอบครองสถานะใหม่ได้หนึ่งตัวและขัดขวางไม่ให้อิเล็กตรอนตัวอื่นเข้ามาครอบครองสถานะนี้ร่วมกัน เมื่ออิเล็กตรอนที่ครอบครองสถานะในเกาะโลหะทางซ้ายเคลื่อนไปเกาะโลหะทางขวา แต่อิเล็กตรอนในขั้วซอร์สจะยังไม่สามารถเข้ามาครอบครองสถานะว่างในเกาะโลหะทางซ้ายได้ เนื่องจาก โครงสร้างนี้เกาะโลหะทั้งสองอยู่ในระยะที่อิเล็กตรอนจะส่งผลกระทบกักันขึ้นคลื่อนอีกเกาะโลหะหนึ่งได้ ในกรณีนี้ทำให้อิเล็กตรอนจากขั้วซอร์สถูกส่งผ่านไปขั้วเดรนได้หนึ่งตัวและระดับพลังงานอยู่ในแนวเดียวกันทำให้อิเล็กตรอนสามารถ

โหลได้ดีทำให้เกิดค่าความนำไฟฟ้าขึ้นสูงสุดที่ตำแหน่งนี้ แต่อย่างไรก็ตาม ปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์สามารถถูกทำลายด้วยผลของการกวัดแกว่งทางความร้อน (thermal fluctuation) ยกตัวอย่างเช่น ช่วง $k_B T / E_C = 0.32$ คือ เส้นสีม่วงในภาพประกอบ 2.9 ซึ่งแสดงค่าความนำไฟฟ้าที่อุณหภูมิสูง ค่าความนำไฟฟ้าในช่วงดังกล่าวมีค่าประมาณคงที่เมื่อแรงดันไฟฟ้าเปลี่ยนแปลง ซึ่งสามารถกล่าวได้ว่า ในสภาวะนี้ อิเล็กตรอนมีพลังงานเพียงพอที่จะเคลื่อนที่ผ่านเกาะโลหะทั้งสองได้โดยไม่ต้องการพลังงานศักย์จากแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิด

2.4 วิธีการมอนติคาร์โล

ในปี ค.ศ. 1949 ศาสตราจารย์สตา니스ลาฟ อูลาม (Stanislav Ulam) ได้ทำงานวิจัยร่วมกับศาสตราจารย์นิโคลัส คอนสแตนติน เมโทรโพลิส (Nicholas Constantine Metropolis) โดยได้เสนอวิธีการคำนวณแบบมอนติคาร์โล (Monte Carlo simulation) เป็นครั้งแรก [16] ซึ่งวิธีการดังกล่าวเป็นการประมาณโดยใช้ตัวเลขแบบสุ่ม (random numbers) มาช่วยในการแก้ปัญหาเชิงตัวเลข โดยแนวคิดและหลักการดังกล่าวสามารถประยุกต์ใช้แก้ปัญหาทางกลศาสตร์ควอนตัมอย่างมีประสิทธิภาพ

2.4.1 การคำนวณหาค่าปริพันธ์ด้วยวิธีการมอนติคาร์โล

เพื่อให้เข้าใจวิธีการมอนติคาร์โลซึ่งประกอบด้วยลำดับของตัวเลขแบบสุ่ม (sequence of random numbers) ที่เป็นจำนวนจริง มีการกระจายตัวอย่างสม่ำเสมอ ในหัวข้อนี้ได้แสดงวิธีการคำนวณหาค่าปริพันธ์ โดยเริ่มจากการพิจารณาการหาค่าปริพันธ์ของฟังก์ชัน $\Phi(x)$ ดังสมการ

$$I = \int_a^b \Phi(x) dx \quad (2.46)$$

ในการคำนวณค่าปริพันธ์นี้ โดยทั่วไปสามารถทำได้โดยการแบ่งขอบเขตของปริพันธ์ (a, b) ออกเป็น N ช่วง และประมาณค่าปริพันธ์ในรูปของผลรวม (summation) ดังสมการ

$$I_N \approx \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N \Phi(x_i) \quad (2.47)$$

เมื่อ

$$x_i = a + \left(i - \frac{1}{2}\right) \frac{b-a}{N} \quad (2.48)$$

จากสมการ (2.47) เป็นกรณีที่ว่า x_i มีการกระจายตัวอย่างสม่ำเสมอในช่วงของ (a, b) แต่ในกรณีที่ x_i ไม่มีการกระจายตัวอย่างสม่ำเสมอในช่วงของ (a, b) ซึ่งสามารถเขียนเป็นสมการใหม่ได้ดังนี้

$$x_i = a + (b-a)\xi_i \quad (2.49)$$

เมื่อ $\{\xi_i\}$ เป็นตัวเลขแบบสุ่มที่ถูกสุ่มในช่วง $(0, 1)$ โดยที่ $i = 1, 2, \dots, N$

นอกจากวิธีที่กล่าวมาข้างต้นมีอีกวิธีหนึ่งที่ใช้กันอย่างแพร่หลาย คือ วิธีการประมาณแบบมอนติคาร์โล ซึ่งมีรายละเอียดดังต่อไปนี้ กำหนดให้ค่า $\bar{I}_N$ เป็นการประมาณค่าปริพันธ์ด้วยวิธีการมอนติคาร์โล ค่าปริพันธ์ดังกล่าวนี้เป็นการสุ่มตัวอย่างจำนวน N ตัวอย่าง ซึ่งพบว่า เมื่อ $N \rightarrow \infty$ การประมาณค่า $\bar{I}_N \rightarrow I$ ในการกำหนดค่า N สำหรับการคำนวณเพื่อให้ค่า $\bar{I}_N$ ลู่เข้าสู่ค่าที่เป็นคำตอบจริง I ให้พิจารณาการคำนวณหาค่าคาดหวังของฟังก์ชัน $h(x)$ จากการสุ่มจากกลุ่มตัวอย่างซึ่งมีสมการดังนี้

$$\langle h \rangle_f = \int_{-\infty}^{+\infty} h(x) f(x) dx \quad (2.50)$$

กำหนดให้ $f(x)$ เป็นฟังก์ชันความหนาแน่นความน่าจะเป็น (probability density function) ของกลุ่มตัวอย่าง และฟังก์ชัน $h(x)$ เป็นฟังก์ชันที่ถูกทำการประมาณค่าคาดหวัง $\langle h \rangle_f$ ในลำดับแรก ทำการสุ่มตัวอย่าง x_i โดยใช้ความหนาแน่นความน่าจะเป็น $f(x_i)$ ทำให้ได้ชุดตัวอย่าง x_i เมื่อ $i=1,2,3,\dots,N$ และค่า $\bar{h}_N$ เขียนได้ดังสมการ

$$\bar{h}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N h(x_i) \quad (2.51)$$

ภายใต้เงื่อนไข $N \rightarrow \infty$ ทำให้ค่า $\bar{h}_N \rightarrow \langle h \rangle_f$ ซึ่งมีลักษณะเช่นเดียวกับ $\bar{I}_N \rightarrow I$ และจากทฤษฎีแนวโน้มเข้าสู่ส่วนกลาง (central limit theorem) [17] ค่า $\bar{h}_N$ ที่ลู่เข้าสู่ค่าคาดหวัง $\langle h \rangle_f$ นั้นมีค่าความแปรปรวนเท่ากับ σ^2 เมื่อ

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} [h(x) - \langle h \rangle_f]^2 f(x) dx \quad (2.52)$$

ดังนั้น การประมาณแบบมอนติคาร์โลของ $\langle h \rangle_f$ สามารถเขียนได้ดังสมการ

$$\begin{aligned} \langle h \rangle_f &= \bar{h}_N \pm \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N h(x_i) \pm \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \end{aligned} \quad (2.53)$$

โดยที่ $\sigma/\sqrt{N}$ คือ ค่าความคลาดเคลื่อนของชุดข้อมูล $h(x_i)$ และจากสมการ (2.53) พบว่า เมื่อค่า N มีค่าเพิ่มมากขึ้นค่าความคลาดเคลื่อนจะมีค่าลดลง

2.4.2 การสุ่มตัวอย่างตามความสำคัญ

เนื่องจากการคำนวณด้วยวิธีการมอนติคาร์โลเป็นวิธีการประมาณ ทำให้เกิดความคลาดเคลื่อนในการคำนวณ การลดค่าความคลาดเคลื่อนดังกล่าวนอกจากการเพิ่มจำนวนตัวอย่างแล้ว สามารถลดค่าความคลาดเคลื่อนได้โดย การสุ่มตัวอย่างตามความสำคัญ (importance sampling) ซึ่งเป็นวิธีการเลือกฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น (probability distribution function) แทนด้วยตัวแปร

$\rho(x)$ เพื่อทำการสุ่มตัวอย่างโดยความถี่ของการสุ่มขึ้นอยู่กับระดับความสำคัญ กล่าวคือบริเวณที่มีความสำคัญมากความถี่ในการสุ่มจะมีความถี่มากและบริเวณที่มีความสำคัญน้อยความถี่ในการสุ่มจะมีความถี่น้อย เพื่อให้เข้าใจหลักการพื้นฐานพิจารณาจากการคำนวณหาค่าปริพันธ์

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{f(x)}{\rho(x)} \right) \rho(x) dx = \left\langle \frac{f}{\rho} \right\rangle_{\rho} \quad (2.54)$$

จากสมการ (2.54) ค่าฟังก์ชัน $f(x)/\rho(x)$ เป็นฟังก์ชันที่ต้องการหาค่าคาดหวัง โดยฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น $\rho(x)$ ต้องอยู่ในเงื่อนไขต่อไปนี้

- 1) ความน่าจะเป็นของทุกค่า x ต้องมีค่ามากกว่าหรือเท่ากับศูนย์

$$\rho(x) \geq 0 \quad (2.55)$$

- 2) ผลรวมของความน่าจะเป็นที่ทุกค่า x ต้องมีค่าเท่ากับหนึ่ง

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = 1 \quad (2.56)$$

จากสมการ (2.54) สามารถประมาณแบบมอนติคาร์โลได้ดังนี้

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(x_i)}{\rho(x_i)} \pm \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\left\langle \left(\frac{f}{\rho} \right)^2 \right\rangle_{\rho} - \left\langle \frac{f}{\rho} \right\rangle_{\rho}^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.57)$$

โดยที่ ตัวแปรสุ่ม x , ถูกสุ่มด้วยความน่าจะเป็น $\rho(x)$ และค่าความแปรปรวนมีค่าตามสมการ

$$\begin{aligned} \sigma_{\rho}^2 &= \left\langle \left(\frac{f}{\rho} \right)^2 \right\rangle_{\rho} - \left\langle \frac{f}{\rho} \right\rangle_{\rho}^2 \\ &= \left\langle \left(\frac{f}{\rho} - I \right)^2 \right\rangle_{\rho} \end{aligned} \quad (2.58)$$

จากสมการ (2.58) ถ้าเลือกใช้ค่า $\rho(x) = f(x)/I$ จะทำให้ค่าความคลาดเคลื่อนมีค่าเป็นศูนย์ กล่าวคือ ไม่มีความคลาดเคลื่อน แต่เนื่องจากค่า I เป็นคำตอบของการหาค่าปริพันธ์ ดังนั้น จึงไม่สามารถทำให้ค่าความคลาดเคลื่อนเป็นศูนย์ได้เพราะไม่ทราบคำตอบของสมการ แต่อย่างไรก็ตาม สมการ (2.58) แสดงให้เห็นถึงหลักการเลือกฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น กล่าวคือ ควรเลือกฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น $\rho(x)$ ที่มีรูปร่างการกระจายตัวใกล้เคียงกับ $f(x)$ มากที่สุดเพื่อให้ค่าความคลาดเคลื่อนมีค่าน้อยที่สุด ซึ่งจะทำให้ค่าที่คำนวณได้มีความน่าเชื่อถือและใกล้เคียงกับค่าจริง โดยวิธีการสุ่มดังกล่าวเรียกว่า วิธีการสุ่มตัวอย่างตามความสำคัญ

2.4.3 ระเบียบวิธีของเมโทรโพลิส

ในการสร้างลำดับของตัวอย่าง $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ สำหรับการคำนวณตามสมการ (2.58) มีด้วยกันหลายวิธี แต่วิธีที่ได้รับความนิยมมากที่สุด คือ ระเบียบวิธีของเมโทรโพลิส (Metropolis algorithm) เพื่ออธิบายระเบียบวิธีดังกล่าว จึงกำหนดให้ค่าตัวอย่างสุ่ม x_1 เป็นค่าเริ่มต้น จากนั้นหา x_2 จากการสุ่มตามระเบียบวิธีของเมโทรโพลิส ซึ่งค่าความน่าจะเป็นในการเลือก x_2 สามารถคำนวณได้จากสมการ

$$A(x_1 \rightarrow x_2) = \min \left[1, \frac{\rho(x_2)}{\rho(x_1)} \right] \quad (2.59)$$

เมื่อ $A(x_1 \rightarrow x_2)$ คือ ความน่าจะเป็นของการเปลี่ยนสถานะจากค่า x_1 ไปยังสถานะ x_2 โดย $\rho(x_1)$ และ $\rho(x_2)$ คือ ฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็นของ x_1 และ x_2 ตามลำดับ จากสมการ (2.59) สามารถแยกออกได้เป็น 2 กรณี

- 1) ถ้า $\rho(x_2) \geq \rho(x_1)$, $A(x_1 \rightarrow x_2) = 1$
- 2) ถ้า $\rho(x_2) < \rho(x_1)$, $A(x_1 \rightarrow x_2) = \rho(x_2)/\rho(x_1)$

ในกรณีที่ 1 ค่า x_2 จะถูกยอมรับทันที แต่ในกรณีที่ 2 เพื่อที่จะเลือกว่าเกิดการเปลี่ยนสถานะเป็น x_2 หรือไม่ จำเป็นต้องเปรียบเทียบอัตราส่วนระหว่าง $\rho(x_2)/\rho(x_1)$ กับค่าตัวเลขสุ่ม (random number) แทนด้วย r ซึ่งอยู่ในช่วง 0 ถึง 1 กล่าวคือ ถ้า $A(x_1 \rightarrow x_2) \geq r$ แล้วให้เลือกค่า x_2 แต่ถ้า $A(x_1 \rightarrow x_2) < r$ ให้เลือกค่า x_1 จากนั้นให้ทำการสุ่มค่า x_2 ขึ้นมาใหม่อีกครั้งเพื่อมาเปรียบเทียบตามสมการ (2.59) และทำซ้ำจนกว่าจะได้ชุดของกลุ่มตัวอย่าง x_M ตามที่ต้องการ

2.5 วิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล

ตามทฤษฎีกลศาสตร์ควอนตัมของฟายน์แมน (Feynman's quantum mechanics) [18] ฟังก์ชันแบ่งส่วน (partition function) ของระบบทางควอนตัมใดๆ สามารถเขียนได้ดังสมการ

$$Z(\beta) = \mathcal{N} \oint D\phi e^{-S[\phi(\tau)]} \quad (2.60)$$

โดยสัญลักษณ์ $\oint D\phi \equiv \oint d\phi_{N-1} \dots \oint d\phi_2 \oint d\phi_1$ หมายถึง ผลรวมของทุกเส้นทางปิด กล่าวคือ $\phi(0) = \phi(\beta)$ และ $\beta = (k_B T)^{-1}$ ค่าแอ็กชัน $S[\phi(\tau)]$ หมายถึง แอ็กชันของเส้นทางแบบยูคลิด (Euclidean action) กล่าวคือ แอ็กชันที่เขียนอยู่ในพจน์เวลาจินตภาพ ซึ่งนิยามดังสมการ

$$S[\phi(\tau)] = \int_0^\beta d\tau \left[\frac{m}{2} \dot{\phi}^2(\tau) - V(\phi(\tau)) \right] \quad (2.61)$$

เมื่อ $\phi(\tau)$ หมายถึง เส้นทางของอนุภาคในเวลาจินตภาพ และ $\dot{\phi}(\tau) = d\phi(\tau)/d\tau$ ในกรณีที่ค่าแอ็กชันของระบบเป็นจำนวนจริงบวก ค่าคาดหวังของตัวดำเนินการใดๆ สามารถคำนวณได้ตามสมการ

$$\langle \hat{O} \rangle = \oint D[\phi] \hat{O}[\phi(\tau)] \rho[\phi(\tau)] \quad (2.62)$$

เมื่อตัวดำเนินการ $\hat{O}$ ถูกเขียนให้อยู่ในพจน์ของเส้นทางของอนุภาค และ $\rho(\phi)$ ถูกนิยามตามสมการ

$$\rho[\phi(\tau)] = \frac{1}{Z} e^{-S[\phi(\tau)]} \quad (2.63)$$

โดย $\rho[\phi(\tau)]$ เป็นฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็นของระบบทางควอนตัมและค่า $[\phi(\tau)]$ ต้องเป็นจำนวนจริงบวกเพื่อให้ $\rho[\phi(\tau)]$ มีค่าลู่เข้า

การสุ่มตัวอย่างของเส้นทางจินตภาพ

เส้นทางในเวลาจินตภาพใดๆ สามารถแบ่งออกเป็นช่วงได้ตามภาพประกอบ 2.11



ภาพประกอบ 2.11 ตัวอย่างการแบ่งเส้นทางจินตภาพออกเป็น 10 ช่วงเท่าๆ กัน

ภาพประกอบ 2.11 แสดงตัวอย่างของเส้นทางที่ถูกแบ่งออกเป็น 10 ช่วงเท่าๆ กัน กล่าวคือ $N=10$ จากรูปพบว่า เส้นทางที่ต่อเนื่อง (continuous path) สามารถประมาณด้วยจุดจำนวนมาก คล้ายกับการร้อยลูกปัด ดังนั้น ในการคำนวณสมการ (2.62) สามารถคำนวณได้ตามวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลในหัวข้อ 2.4 กล่าวคือ

$$\langle \hat{O} \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{\substack{j=1 \\ \phi_j \in \mathcal{R}}}^M \hat{O}[\phi_j] \quad (2.64)$$

โดยที่ M คือ จำนวนของเส้นทางสุ่ม (ϕ) และ ϕ_j คือ จำนวนจริงที่ใช้แทนเส้นทางสุ่มของอนุภาคในลำดับที่ j เมื่อ $j=\{1,2,3,\dots,M\}$ ซึ่งเส้นทาง ϕ_j ได้จากการสุ่มโดยใช้ฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น $\rho(\phi_j)$ เส้นทาง ϕ_j จะถูกยอมรับหรือไม่พิจารณาจากความน่าจะเป็นของการเปลี่ยนแปลงสถานะ

จากเส้นทางเริ่มต้น (ϕ_{int}) ไปยังเส้นทางใหม่ (ϕ_{new}) โดยประยุกต์ใช้วิธีการของเมโทรโพลิสได้ดังสมการ [19]

$$A(\phi_{int} \rightarrow \phi_{new}) = \frac{\rho[\phi_{new}]}{\rho[\phi_{int}]} = \frac{e^{-S[\phi_{new}]/Z}}{e^{-S[\phi_{int}]/Z}} = \frac{e^{-S[\phi_{new}]}}{e^{-S[\phi_{int}]}} = e^{-\Delta S} \quad (2.65)$$

จากสมการ (2.65) พบว่า ในการคำนวณค่าความน่าจะเป็นในการเลือกตัวอย่างไม่จำเป็นต้องทราบค่าฟังก์ชันแบ่งส่วน (Z) ซึ่งไม่สามารถคำนวณได้ แต่โดยวิธีของเมโทรโพลิสต้องทราบเพียงผลต่างระหว่างค่าเอ็กซัน ทำให้ขั้นตอนของวิธีเมโทรโพลิสสามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$A(\phi_{int} \rightarrow \phi_{new}) = \min[1, e^{-\Delta S}] \quad (2.66)$$

จากสมการ (2.66) สามารถสร้างเส้นทางใหม่ได้ดังนี้

- 1) เริ่มจากเส้นทางของอนุภาค $\phi[r]$ จากนั้นเปลี่ยนเส้นทางดังกล่าวไปเล็กน้อยและเรียกว่าเส้นทางดังกล่าวว่า เส้นทางเดินใหม่
- 2) คำนวณค่า $\Delta S = S[\phi_{new}] - S[\phi_{int}]$
- 3) ถ้า $\Delta S \leq 0$ เส้นทางใหม่จะถูกยอมรับทันที
- 4) ถ้า $\Delta S > 0$ ให้สร้างตัวเลขสุ่มที่อยู่ในช่วง 0 ถึง 1 ($r \in [0,1]$) ขึ้นมาหนึ่งค่าแล้วนำไปเปรียบเทียบกับค่า $e^{-\Delta S}$ ถ้า $e^{-\Delta S} \geq r$ แล้วเส้นทางใหม่จะถูกยอมรับ แต่ถ้า $e^{-\Delta S} < r$ แล้วเส้นทางเดิม (ϕ_{int}) จะถูกยอมรับ
- 5) จากนั้นทำซ้ำข้อ 1 ถึง 4 จนกว่าจะได้ชุดตัวอย่าง $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_M\}$ ครบตามจำนวนตัวอย่างที่ต้องการ

จากที่กล่าวมาข้างต้นได้แสดงวิธีการสุ่มตัวอย่างด้วยวิธีการควอบตัมมอนติคาร์โล ซึ่งวิธีการดังกล่าวนี้จะถูกนำไปประยุกต์ใช้ในการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล (E_c^*) ของปัมป์อิเล็กตรอนเดี่ยวในบทที่ 4 และคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชัน เพื่อนำไปสู่การคำนวณค่าความนำไฟฟ้าในบทที่ 5

บทที่ 3

แผนภาพเสถียร

แผนภาพเสถียรของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวสามารถแบ่งการพิจารณาได้เป็น 2 กรณี กล่าวคือ ในกรณีที่แรงดันไฟฟ้าของขั้วซอร์สและขั้วเดรนมีค่าเท่ากัน ($V_s = V_D$) ซึ่งกรณีนี้เรียกว่า การส่งผ่านแบบเชิงเส้น (linear transport) และในกรณีที่แรงดันไฟฟ้าของทั้งสองขั้วมีค่าแตกต่างกัน ($V_s \neq V_D$) กรณีนี้เรียกว่า การส่งผ่านแบบไม่เชิงเส้น (nonlinear transport) เนื่องจากในการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันกำหนดให้แรงดันไฟฟ้าที่ขั้วซอร์สกับขั้วเดรนมีค่าเท่ากับศูนย์ เพื่อให้เกิดความสอดคล้องกับการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันในบทที่ 5 ดังนั้น โครงงานนี้จึงได้พิจารณาแผนภาพเสถียรของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวเฉพาะในกรณีการส่งผ่านแบบเชิงเส้น

3.1 แผนภาพเสถียรในระนาบของจำนวนประจุ

ในการสร้างแผนภาพเสถียรของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยว บนระนาบของจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทางซ้ายและขั้วเกตทางขวา (n_{L0}, n_{R0}) กำหนดให้พิจารณาจำนวนประจุที่ร่อยต่อการทะลุผ่านภายในเกาะโลหะทางซ้ายและทางขวา (n_L, n_R) เป็นประจุบวก กล่าวคือ $n_L = Q_L / |e|$ และ $n_R = Q_R / |e|$ โดยขั้นตอนการสร้างแผนภาพเสถียรเริ่มจากการพิจารณาการส่งผ่านของอิเล็กตรอนในกรณีต่างๆ ภายในบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวพบว่า สามารถเกิดขึ้นได้ 6 กรณี กล่าวคือ

กรณีที่ 1 อิเล็กตรอนเคลื่อนที่จากขั้วซอร์สไปยังเกาะโลหะทางซ้าย ในกรณีนี้ จำนวนอิเล็กตรอนในเกาะโลหะทางซ้ายเพิ่มขึ้น 1 ตัว ถูกแทนด้วยสัญลักษณ์ $(n_L, n_R) \rightarrow (n_L + 1, n_R)$

กรณีที่ 2 อิเล็กตรอนเคลื่อนที่จากเกาะโลหะทางซ้ายไปยังขั้วซอร์ส ในกรณีนี้ จำนวนอิเล็กตรอนของเกาะโลหะทางซ้ายลดลง 1 ตัว ถูกแทนด้วยสัญลักษณ์ $(n_L, n_R) \rightarrow (n_L - 1, n_R)$

กรณีที่ 3 อิเล็กตรอนเคลื่อนที่จากขั้วเดรนไปยังเกาะโลหะทางขวา ในกรณีนี้ จำนวนอิเล็กตรอนของเกาะโลหะทางขวาเพิ่มขึ้น 1 ตัว ถูกแทนด้วยสัญลักษณ์ $(n_L, n_R) \rightarrow (n_L, n_R + 1)$

กรณีที่ 4 อิเล็กตรอนเคลื่อนที่จากเกาะโลหะทางขวาไปยังขั้วเดรน ในกรณีนี้ จำนวนอิเล็กตรอนของเกาะโลหะทางขวาลดลง 1 ตัว ถูกแทนด้วยสัญลักษณ์ $(n_L, n_R) \rightarrow (n_L, n_R - 1)$

กรณีที่ 5 อิเล็กตรอนเคลื่อนที่จากเกาะโลหะทางซ้ายไปยังเกาะโลหะทางขวา ในกรณีนี้ จำนวนอิเล็กตรอนบนเกาะโลหะทางซ้ายลดลง 1 ตัว ในขณะที่เกาะโลหะทางขวาจะมีจำนวนอิเล็กตรอนเพิ่มขึ้น 1 ตัว ถูกแทนด้วยสัญลักษณ์ $(n_L, n_R) \rightarrow (n_L - 1, n_R + 1)$

ในสมการ (3.2) และ (3.3) ได้แสดงให้เห็นว่า ประจุมสามารถจัดให้อยู่ในพจน์ U_L และ U_R โดยแทน $U_R = (C_M U_L + n_{R0} e + Q_R) / C_{\Sigma R}$ ลงในสมการ (3.2) และจัดรูปให้อยู่ในพจน์ของศักย์ไฟฟ้าของเกาะโลหะทางซ้ายพบว่า

$$U_L = \frac{Q_L C_{\Sigma R}}{(C_{\Sigma L} C_{\Sigma R} - C_M^2)} + \frac{n_{L0} C_{\Sigma R} e}{(C_{\Sigma L} C_{\Sigma R} - C_M^2)} + \frac{C_M Q_R}{(C_{\Sigma L} C_{\Sigma R} - C_M^2)} + \frac{n_{R0} C_M e}{(C_{\Sigma L} C_{\Sigma R} - C_M^2)} \quad (3.5)$$

จากสมการ (3.5) สามารถเขียนศักย์ไฟฟ้าของเกาะโลหะทางซ้ายเป็น

$$e^2 U_L = 2E_{CL} (Q_L + n_{L0} e) + E_{CM} (Q_R + n_{R0} e) \quad (3.6)$$

ในทำนองเดียวกัน ศักย์ไฟฟ้าของเกาะโลหะทางขวาสามารถเขียนได้ดังสมการ

$$e^2 U_R = 2E_{CR} (Q_R + n_{R0} e) + E_{CM} (Q_L + n_{L0} e) \quad (3.7)$$

โดยค่าคงที่ถุกนิยามดังนี้

$$E_{CL} = \frac{e^2 C_{\Sigma R}}{2(C_{\Sigma L} C_{\Sigma R} - C_M^2)} \quad (3.8a)$$

$$E_{CR} = \frac{e^2 C_{\Sigma L}}{2(C_{\Sigma L} C_{\Sigma R} - C_M^2)} \quad (3.8b)$$

$$E_{CM} = \frac{e^2 C_M}{(C_{\Sigma L} C_{\Sigma R} - C_M^2)} \quad (3.8c)$$

จำนวนประจุในเกาะโลหะ หมายถึง จำนวนประจุสุทธิที่รอยต่อการทะลุผ่านภายในเกาะโลหะ ซึ่งเกิดจากการเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตและการทะลุผ่านรอยต่อการทะลุผ่านมายังเกาะโลหะ นอกจากนั้น จำนวนประจุที่รอยต่อการทะลุผ่านภายในเกาะโลหะทางซ้ายและทางขวา คือ $Q_L = n_L e$ และ $Q_R = n_R e$ ตามลำดับ ดังนั้น ในกรณีที่ 1 เมื่ออิเล็กตรอนเคลื่อนที่จากขั้วซอร์สไปยังเกาะโลหะทางซ้าย ผลต่างพลังงานการเพิ่มประจุสามารถคำนวณได้ดังสมการ

$$\Delta E_{CL}^{n_L \rightarrow n_L - 1, n_R \rightarrow n_R} = \int_{en_L}^{e(n_L - 1)} dQ_L (U_L - V_L) \quad (3.9)$$

จากสมการ (3.6) สามารถจัดให้อยู่ในพจน์ของ U_L และแทนค่าลงในสมการ (3.9) พบว่า

$$\Delta E_{CL}^{n_L \rightarrow n_L - 1, n_R \rightarrow n_R} = \int_{en_L}^{e(n_L - 1)} dQ_L \left(\frac{2E_{CL} (Q_L + n_{L0} e) + E_{CM} (Q_R + n_{R0} e)}{e^2} - V_L \right) \quad (3.10)$$

เมื่อทำการคำนวณค่าปริพันธ์ (การคำนวณโดยละเอียดแสดงไว้ในภาคผนวก) พบว่า

$$\Delta E_{CL}^{n_L \rightarrow n_L - 1, n_R \rightarrow n_R} = 2E_{CL} \left(\frac{1}{2} - n_L - n_{L0} \right) - E_{CM} (n_R + n_{R0}) + eV_L \quad (3.11)$$

ในทำนองเดียวกัน การคำนวณผลต่างพลังงานการเพิ่มประจุ เมื่อเกิดการส่งผ่านอิเล็กตรอนภายในปฏิกิริยาอิเล็กตรอนเดียวในกรณี 2 - 6 สามารถเขียนเป็นสมการของผลต่างพลังงานการเพิ่มประจุในแต่ละกรณีได้ดังต่อไปนี้

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L+1, n_R \rightarrow n_R+1} = 2E_{CL} \left(\frac{1}{2} + n_L + n_{L0} \right) + E_{CM}(n_R + n_{R0}) - eV_L \quad (3.12)$$

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L, n_R \rightarrow n_R-1} = 2E_{CR} \left(\frac{1}{2} - n_R - n_{R0} \right) - E_{CM}(n_L + n_{L0}) + eV_R \quad (3.13)$$

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L, n_R \rightarrow n_R+1} = 2E_{CR} \left(\frac{1}{2} + n_R + n_{R0} \right) + E_{CM}(n_L + n_{L0}) - eV_R \quad (3.14)$$

$$\begin{aligned} \Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L+1, n_R \rightarrow n_R-1} = & \left[(E_{CL}(1 + 2n_L + 2n_{L0})) - \left(E_{CM} \left(\frac{1}{2} + n_L + n_{L0} \right) \right) \right] \\ & + \left[(E_{CR}(1 - 2n_R - 2n_{R0})) - \left(E_{CM} \left(\frac{1}{2} - n_R - n_{R0} \right) \right) \right] \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} \Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L-1, n_R \rightarrow n_R+1} = & \left[(E_{CL}(1 - 2n_L - 2n_{L0})) - \left(E_{CM} \left(\frac{1}{2} - n_L - n_{L0} \right) \right) \right] \\ & + \left[(E_{CR}(1 + 2n_R + 2n_{R0})) - \left(E_{CM} \left(\frac{1}{2} + n_R + n_{R0} \right) \right) \right] \end{aligned} \quad (3.16)$$

การส่งผ่านอิเล็กตรอนจะเกิดขึ้นในสถานะที่ระดับพลังงานของทั้งสองสถานะมีค่าเท่ากัน เช่น กรณีที่ 1 อิเล็กตรอนถูกส่งผ่านจากขั้วซอร์สไปเกาะโลหะทางซ้าย เมื่อระดับพลังงานของเกาะโลหะทางซ้ายเท่ากับระดับพลังงานของขั้วซอร์ส แสดงว่าในสภาวะนี้ไม่มีความแตกต่างของระดับพลังงาน $\Delta E = 0$ ดังนั้น กรณีที่ 1 เมื่อกำหนดให้ $\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L+1, n_R \rightarrow n_R-1} = 0$ แล้วแทนลงในสมการ (3.11) พบว่า

$$0 = 2E_{CL} \left(\frac{1}{2} - n_L - n_{L0} \right) - E_{CM}(n_R + n_{R0}) + eV_L \quad (3.17)$$

จากสมการ (3.17) สามารถเขียนให้อยู่ในรูปของสมการเส้นตรง โดยกำหนดให้จำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกิดทางขวา (n_{R0}) เป็นฟังก์ชันของจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกิดทางซ้าย (n_{L0}), จำนวนประจุที่รอยต่อการทะลุผ่านภายในเกาะโลหะทางซ้าย (n_L) และจำนวนประจุที่รอยต่อการทะลุผ่านภายในเกาะโลหะทางขวา (n_R) กล่าวคือ

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L+1, n_R \rightarrow n_R-1} = 0 ; \quad n_{R0} = -\frac{2E_{CL}}{E_{CM}} n_{L0} + \left(\frac{E_{CL}(1 - 2n_L) - E_{CM} n_R + eV_L}{E_{CM}} \right) \quad (3.18)$$

ในทำนองเดียวกัน สมการ (3.12) - (3.16) เมื่อแทนเงื่อนไข $\Delta E_C = 0$ แล้ว สามารถจัดรูปสมการใหม่ให้อยู่ในรูปสมการเส้นตรงได้ตามลำดับดังต่อไปนี้

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L+1, n_R \rightarrow n_R+1} = 0 ; \quad n_{R0} = -\frac{2E_{CL}}{E_{CM}} n_{L0} - \left(\frac{E_{CL}(2n_L+1) + E_{CM}n_R - eV_L}{E_{CM}} \right) \quad (3.19)$$

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L-1, n_R \rightarrow n_R+1} = 0 ; \quad n_{R0} = -\frac{E_{CM}}{2E_{CR}} n_{L0} + \left(\frac{E_{CR}(1-2n_R) - E_{CM}n_L + eV_R}{2E_{CR}} \right) \quad (3.20)$$

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L+1, n_R \rightarrow n_R-1} = 0 ; \quad n_{R0} = -\frac{E_{CM}}{2E_{CR}} n_{L0} - \left(\frac{E_{CR}(2n_R+1) + E_{CM}n_L - eV_R}{2E_{CR}} \right) \quad (3.21)$$

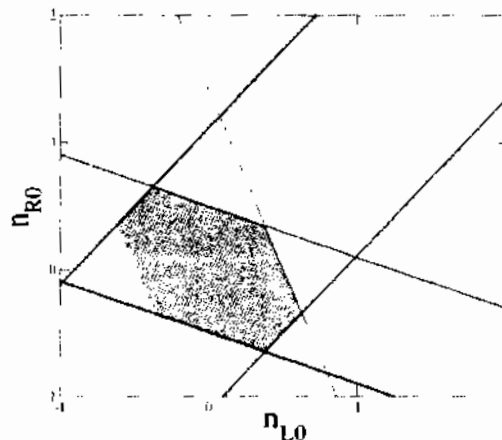
$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L-1, n_R \rightarrow n_R-1} = 0 ;$$

$$n_{R0} = \frac{2E_{CL} - E_{CM}}{2E_{CR} - E_{CM}} n_{L0} + \left(\frac{E_{CL}(1+2n_L) + E_{CL}(1-2n_R) + E_{CM}(n_R - n_L - 1)}{2E_{CR} - E_{CM}} \right) \quad (3.22)$$

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L+1, n_R \rightarrow n_R-1} = 0 ;$$

$$n_{R0} = \frac{E_{CM} - 2E_{CL}}{E_{CM} - 2E_{CR}} n_{L0} + \left(\frac{E_{CL}(1-2n_L) + E_{CR}(2n_R+1) + E_{CM}(n_L - n_R - 1)}{E_{CM} - 2E_{CR}} \right) \quad (3.23)$$

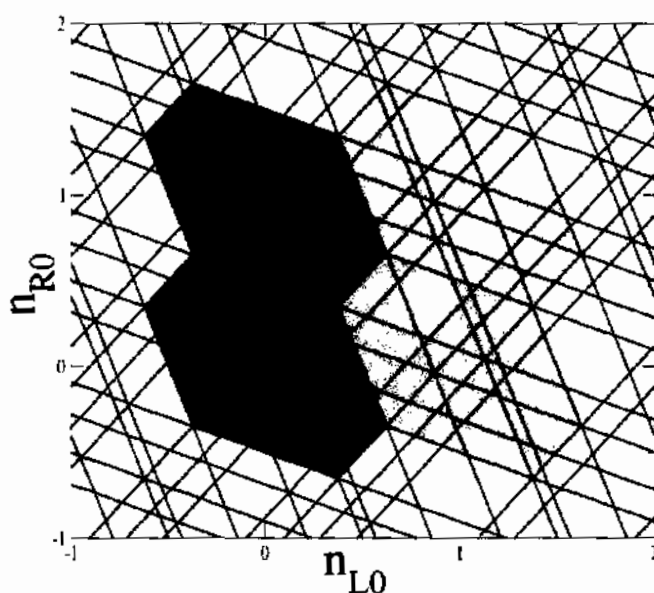
ในสมการ (3.18) - (3.23) ได้แสดงความสัมพันธ์ระหว่างจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทางขวา (n_{R0}) และจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทางซ้าย (n_{L0}) ตัวอย่างแผนภาพเสถียรของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวในกรณีที่เกิดโลหะทางซ้ายและทางขวามีสถานะประจุ $(n_L, n_R) = (0, 0)$ แสดงดังภาพประกอบ 3.2



ภาพประกอบ 3.2 แผนภาพเสถียรของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งเป็นกรณีที่ไม่มีประจุลบเหนี่ยวนำในเกาะโลหะ

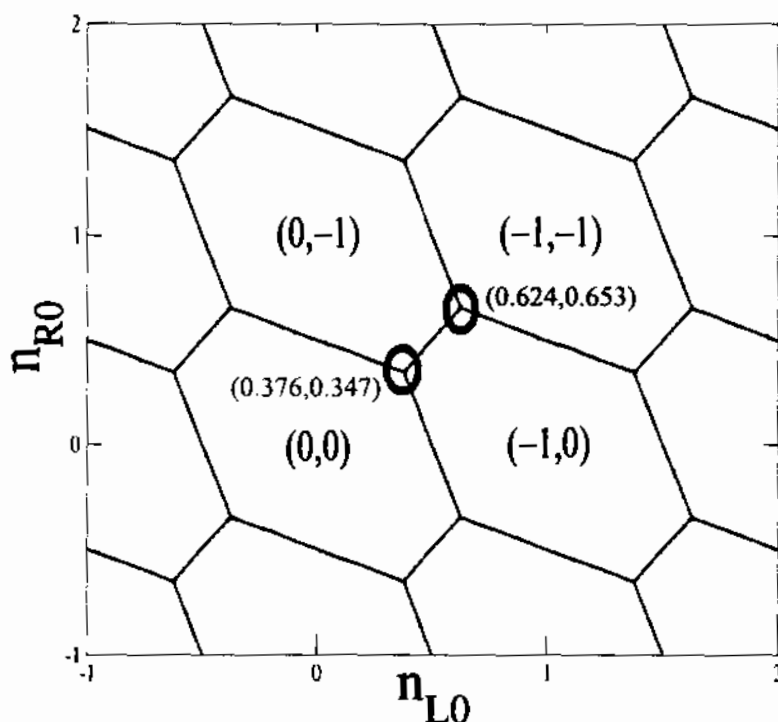
จากภาพประกอบ 3.2 เส้นสีเทา, สีนํ้าเหลือง, สีแดง, สีดำ, สีนํ้าเงินและสีเขียว ได้จากคำนวณสมการ (3.18) - (3.23) และเส้นตรงทั้งหมดตัดกันเป็นรูปหกเหลี่ยมหรือคล้ายกับหนึ่งหน่วยของรังผึ้ง (honeycomb unit) โดยบริเวณสีเทาคือบริเวณที่ค่าแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิดของปั๊มอิเล็กตรอนเดียวมีการเปลี่ยนแปลง แต่อิเล็กตรอนไม่สามารถเคลื่อนที่จากชั่วซอร์สไปในเกาะโลหะทางซ้ายหรือเคลื่อนที่จากชั่วเดรนเข้าไปในเกาะโลหะทางขวารวมทั้งการเคลื่อนย้ายระหว่างเกาะโลหะ ทำให้ปั๊มอิเล็กตรอนเดียวสามารถคงเสถียรภาพของสถานะได้ จากที่กล่าวมาข้างต้น แสดงการสร้างแผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดียวในกรณีที่เกี่ยวข้องกับสถานะประจุ $(n_L, n_R) = (0, 0)$

ในลำดับต่อไปเป็นการแสดงแผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดียวที่เกี่ยวข้องกับสถานะ $(n_L, n_R) \in \{(1, 1), (1, 0), (1, -1), (1, -2), (0, 1), (0, 0), (0, -1), (0, -2), (-1, 1), (-1, 0), (-1, -1), (-1, -2), (-2, 1), (-2, 0), (-2, -1), (-2, -2)\}$ สามารถแสดงดังภาพประกอบ 3.3



ภาพประกอบ 3.3 แผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดียว ซึ่งอยู่ในกรณีที่ประจุลบเหนี่ยวนำในเกาะโลหะมีค่าต่างๆ

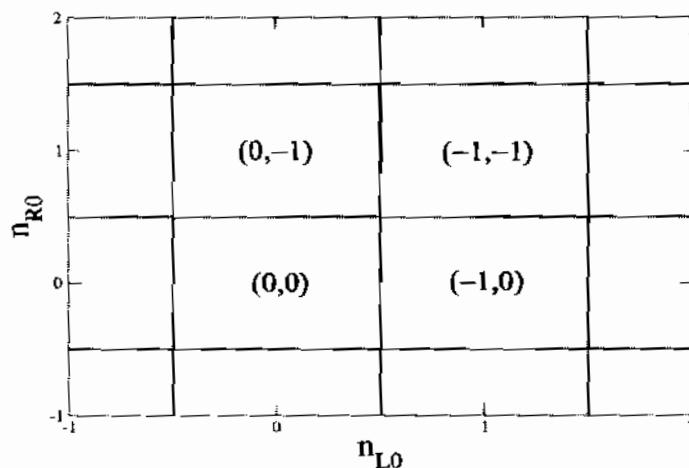
จากภาพประกอบ 3.3 บริเวณพื้นที่สีเทา สีส้ม สีนํ้าเงินและสีชมพู เกิดจากการกำหนดให้จำนวนประจุที่ร่อยต่อการทำงานภายในเกาะโลหะทางซ้ายและทางขวามีค่าเท่ากับ $(n_L, n_R) = (0, 0)$, $(-1, 0)$, $(0, -1)$ และ $(-1, -1)$ ในสมการ (3.20) - (3.25) ตามลำดับ โดยแต่ละพื้นที่ของเซลล์หกเหลี่ยม คือ ขอบเขตของการให้แรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิดเพื่อควบคุมปั๊มอิเล็กตรอนเดียวให้มีเสถียรภาพในแต่ละสถานะ เช่น สถานะ $(n_L, n_R) = (-1, 0)$ (พื้นที่สีส้ม) หมายความว่า ในปั๊มอิเล็กตรอนเดียวมีอิเล็กตรอนอยู่ในเกาะโลหะทางซ้ายหนึ่งตัว ถ้าเปลี่ยนแปลงแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิดภายในบริเวณนี้จะไม่อิเล็กตรอนเข้าหรือออกจากเกาะโลหะ นอกจากนั้น เพื่อให้สามารถสังเกตเห็นจุดหริบเปลวพอที่ได้อย่างชัดเจน ภาพประกอบ 3.3 ถูกแสดงใหม่ดังภาพประกอบ 3.4



ภาพประกอบ 3.4 แผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว

จากภาพประกอบ 3.4 พบว่าภายในวงกลมสีแดง คือ จุดทริปปเปิลพอยท์ซึ่งเป็นเงื่อนไขของการปรับแรงดันไฟฟ้าให้เกิดการส่งผ่านอิเล็กตรอน เมื่อพิจารณาการหมุนทวนเข็มนาฬิการอบจุดดังกล่าว ลำดับการส่งผ่านของอิเล็กตรอนจากขั้วซอร์สไปยังขั้วเดรน คือ $(0,0) \rightarrow (-1,0) \rightarrow (0,-1) \rightarrow (0,0)$ ตามลำดับ ในทางตรงกันข้าม พิจารณาการหมุนตามเข็มนาฬิการอบจุดทริปปเปิลพอยท์ ลำดับของการส่งผ่านของอิเล็กตรอนจะมีทิศทางจากขั้วเดรนไปยังขั้วซอร์ส คือ $(0,0) \rightarrow (0,-1) \rightarrow (-1,0) \rightarrow (0,0)$ จากแผนภาพเสถียรพบว่า จุดทริปปเปิลพอยท์ในวงกลมสีแดงและสีน้ำเงินอยู่ที่ตำแหน่ง $(n_{L0}, n_{R0}) = (0.376, 0.347)$ และ $(n_{L0}, n_{R0}) = (0.623, 0.625)$ ตามลำดับ โดยสามารถทำนายตำแหน่งของค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดที่ค่า $n_x = 0.723$ และ $n_x = 1.277$ ซึ่งสอดคล้องกับผลการทดลองของลิ้มบัชและคณะ [7] จากที่ได้กล่าวมาข้างต้น พบว่า ปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวเป็นอุปกรณ์ที่สามารถควบคุมอิเล็กตรอนให้สามารถเคลื่อนที่จากขั้วซอร์สไปยังขั้วเดรนและสามารถควบคุมให้อิเล็กตรอนเคลื่อนที่จากขั้วเดรนกลับมายังขั้วซอร์สได้ จากคุณสมบัติดังกล่าวอุปกรณ์นี้ถูกเรียกว่า ปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว นอกจากนี้ เมื่อพิจารณาการเปลี่ยนสถานะจาก $(0,0)$ ไปสถานะ $(-1,-1)$ จากแผนภาพเสถียร พบว่า ต้องใช้พลังงานสำหรับการเปลี่ยนสถานะจาก $(0,0)$ ไปสถานะ $(-1,-1)$ โดยต้องผ่านสถานะ $(-1,0)$ หรือสถานะ $(0,-1)$ ซึ่งแสดงลักษณะเฉพาะของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวที่เกิดจากการรบกวนกันของฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอนในเกาะโลหะทั้งสอง กล่าวคือ ในภาพประกอบ 2.10 (b) แสดงแผนภาพระดับพลังงานของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวในกรณีที่ย้ายแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทั้งสองขั้วอย่างเหมาะสม ส่งผลให้ระดับพลังงานของเกาะโลหะลดลงมาอยู่ในระดับที่ใกล้เคียงกับระดับพลังงานที่ขั้ว

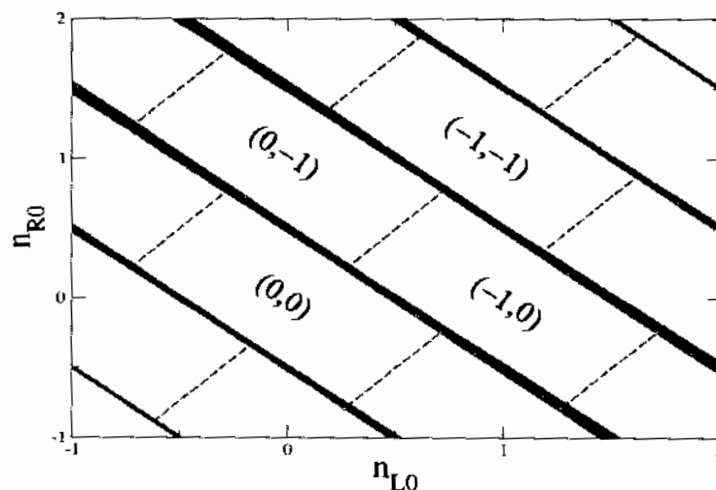
ซอร์สและขั้วเดรน จุดทำงานของบีเอ็มอีเล็กตรอนเดี่ยวในสภาวะนี้ภายในแผนภาพเสถียร คือ จุดทริปปเปิลพอยท์ ในบีเอ็มอีเล็กตรอนเดี่ยวมีระยะห่างระหว่างเกาะโลหะทั้งสองอยู่ในระยะที่อิเล็กตรอนสามารถมีอันตรกิริยาต่อกันได้ ดังนั้น เมื่ออิเล็กตรอนจากขั้วซอร์สเข้าครอบครองสถานะว่างของเกาะโลหะทางซ้าย จะทำให้เกิดการรบกวนระดับพลังงานว่างของเกาะโลหะทางขวา ซึ่งระดับพลังงานดังกล่าวจะเกิดการเปลี่ยนแปลงเพียงเล็กน้อย แต่อิเล็กตรอนจากขั้วเดรนจะยังไม่สามารถเข้าครอบครองสถานะว่างนี้ได้ เนื่องจากอิเล็กตรอนที่อยู่ในเกาะโลหะทางซ้ายจะสามารถแผ่สนามของแรง คูลอมบ์ไปยังบริเวณภายในเกาะโลหะทางขวา จึงทำให้อิเล็กตรอนจากขั้วเดรนถูกผลักไม่ให้เข้ามาครอบครองสถานะว่างของเกาะโลหะทางขวาได้ ทำให้เกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ ถ้าต้องการให้อิเล็กตรอนจากขั้วเดรนเข้ามาในเกาะโลหะทางขวาต้องจ่ายแรงดันไฟฟ้าเพิ่มขึ้นเพื่อชดเชยผลของแรงคูลอมบ์ของอิเล็กตรอนในเกาะโลหะทางซ้าย ซึ่งจะทำให้สามารถจำกัดขอบเขตของสนามที่เกิดขึ้นให้อยู่ภายในเกาะโลหะทางซ้าย ดังนั้น ในสภาวะนี้แรงคูลอมบ์จะไม่สามารถส่งผลถึงเกาะโลหะทางขวาและทำให้อิเล็กตรอนจากขั้วเดรนสามารถทะลุผ่านเข้ามาในเกาะโลหะทางขวาได้ สถานะของบีเอ็มอีเล็กตรอนเดี่ยวภายในแผนภาพเสถียรจะอยู่ที่สถานะ $(-1, -1)$



ภาพประกอบ 3.5 แผนภาพเสถียรของบีเอ็มอีเล็กตรอนเดี่ยว ในกรณี $C_M \approx 0$

จากที่กล่าวมาข้างต้น การสร้างแผนภาพเสถียรของบีเอ็มอีเล็กตรอนเดี่ยวใช้สมการเส้นตรง 6 สมการ ซึ่งมีพจน์ E_{CM} ปรากฏอยู่ในทุกสมการ เมื่อ E_{CM} คือ พลังงานที่เชื่อมโยงระหว่างเกาะโลหะซึ่งเปลี่ยนแปลงตามค่า C_M แสดงว่า เส้นตรงทุกเส้นในแผนภาพเสถียรอาจจะได้รับผลจากการรบกวนกันระหว่างเกาะโลหะทั้งสอง ดังนั้น เพื่อศึกษาผลกระทบของการรบกวนกันระหว่างเกาะโลหะทั้งสองต่อแผนภาพเสถียร จึงได้สร้างแผนภาพเสถียรของบีเอ็มอีเล็กตรอนเดี่ยว โดยการพิจารณาค่า C_M เป็นกรณีต่างๆ ดังนี้ กรณีที่บีเอ็มอีเล็กตรอนเดี่ยวในสภาวะที่ค่า $C_M \approx 0$ ดังภาพประกอบ 3.5 ในกรณีนี้ระบบมีลักษณะคล้ายกับตัวเก็บประจุแบบแผ่นคู่ขนาน (parallel plates) จากความสัมพันธ์ระหว่างค่าความจุไฟฟ้า (C) กับระยะห่างระหว่างแผ่นคู่ขนานของตัวเก็บประจุแทนด้วยพารามิเตอร์ d พบว่า ค่าความ

จุไฟฟ้าแปรผกผันกับระยะห่างของแผ่นคู่ขนาน กล่าวคือ $C \propto d^{-1}$ ดังนั้น ถ้าค่าระยะห่างระหว่างแผ่นคู่ขนานห่างกันมาก $d \rightarrow \infty$ จากความสัมพันธ์จะทำให้ค่า $C_M \approx 0$ ในกรณีนี้สามารถวิเคราะห์ได้ว่า เกาะโลหะทั้งสองแยกออกจากกันจนถึงระยะที่เกาะโลหะทั้งสองไม่เกิดการเชื่อมโยงกัน (decoupled) จากสมการ (3.9) ทำให้ E_{CM} มีค่าประมาณศูนย์ส่งผลให้แผนภาพเสถียรเกิดการเปลี่ยนแปลงจนทำให้จุดทริปเปิลพอยท์ที่อยู่ในวงกลมสีแดงและวงกลมสีน้ำเงินในภาพประกอบ 3.4 รวมกันเป็นจุดเดียวทำให้รูปหกเหลี่ยมกลายเป็นรูปสี่เหลี่ยมดังที่แสดงในภาพประกอบ 3.5 ดังนั้น แผนภาพเสถียรในกรณีนี้สามารถเปลี่ยนจากสถานะ $(0,0)$ เป็นสถานะ $(-1,-1)$ ได้โดยตรงไม่ต้องผ่านสถานะ $(-1,0)$ หรือ $(0,-1)$ เนื่องจากเกาะโลหะทั้งสองถูกแยกออกจากกันจนทำให้อิเล็กตรอนในเกาะโลหะทั้งสองไม่สามารถแผ่สนามคุลอมบ์รบกวนกันได้ อิเล็กตรอนจากขั้วซอร์สที่ทะลุผ่านเข้าไปในเกาะโลหะทางซ้ายจึงไม่สามารถส่งผลกระทบไปถึงเกาะโลหะทางขวาได้ ทำให้อิเล็กตรอนจากขั้วเดรนสามารถทะลุผ่านเข้ามาในเกาะโลหะทางขวาพร้อมกันได้



ภาพประกอบ 3.6 แผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวในกรณีที่ C_M มีค่าเพิ่มขึ้นเป็น 100 เท่า โดยเส้นตรงตัดกันเป็นรูปทรงสี่เหลี่ยมด้านขนาน

เมื่อพิจารณากรณี C_M มีค่าเพิ่มขึ้นเป็น 100 เท่าของ C_M ในภาพประกอบ 3.4 และพิจารณาว่าระบบมีลักษณะคล้ายกับตัวเก็บประจุแบบแผ่นคู่ขนาน ในกรณีที่ C_M มีค่าเพิ่มขึ้น ตามหลักการทางฟิสิกส์เป็นผลจากการสร้างให้ระยะห่างระหว่างเกาะโลหะมีค่าลดลงจนถึงระยะที่ฟังก์ชันคลื่นในเกาะโลหะทางซ้ายสามารถแผ่เข้าไปในเกาะโลหะทางขวาโดยไม่เกิดการลดทอนของฟังก์ชันคลื่น ในกรณีนี้ฟังก์ชันคลื่นในเกาะโลหะทั้งสองจะพิจารณาว่าเหมือนเป็นฟังก์ชันคลื่นเดียวกันและสามารถกล่าวได้ว่าเกาะโลหะทั้งสองเสมือนเป็นเกาะโลหะเดียวกัน เมื่อค่า C_M เพิ่มขึ้นทำให้ E_{CM} มีค่าเพิ่มขึ้นส่งผลให้จุดทริปเปิลพอยท์ที่อยู่ในวงกลมสีแดงและวงกลมสีน้ำเงินในภาพประกอบ 3.4 จะแยกออกจากกันมากขึ้นทำให้บริเวณหกเหลี่ยมในภาพประกอบ 3.4 กลายเป็นบริเวณสี่เหลี่ยมด้านขนานแสดงในภาพประกอบ

3.6 เมื่อพิจารณาการเปลี่ยนสถานะจาก $(0,0)$ เป็นสถานะ $(-1,-1)$ พบว่า ในสภาวะนี้ บีมอิเล็กตรอนเดี่ยวสามารถเปลี่ยนสถานะจาก $(0,0)$ เป็นสถานะ $(-1,-1)$ ได้ แต่ต้องผ่านสถานะ $(-1,0)$ หรือ $(0,-1)$ และบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวในสภาวะนี้ต้องใช้พลังงานอย่างมากในการชดเชยสนามของแรงคูลอมบ์ที่เกิดขึ้นจากอิเล็กตรอนที่เข้าไปอยู่ในเกาะโลหะ ทำให้ระยะห่างระหว่างสถานะ $(0,0)$ และ $(-1,-1)$ มีค่าเพิ่มขึ้น โดยแผนภาพเสถียรของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวในกรณีนี้มีลักษณะคล้ายกับแผนภาพเสถียรของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว [6] จากการพิสูจน์ทั้ง 2 กรณีที่ผ่านมา สามารถสรุปได้ว่า การรบกวนกันของฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอนในเกาะโลหะทั้งสองส่งผลต่อรูปร่างของแผนภาพเสถียรของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยว

3.2 แผนภาพเสถียรในระนาบของแรงดันไฟฟ้า

เพื่อให้สอดคล้องกับการทดลองของลิมบซ์และคณะ [7] ในหัวข้อนี้จึงได้แสดงแผนภาพเสถียรที่สร้างให้อยู่ในระนาบของแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทางซ้าย (V_1) และขั้วเกตทางขวา (V_2) การสร้างแผนภาพเสถียรในกรณีนี้สามารถสร้างได้จากการพิจารณาการส่งผ่านของอิเล็กตรอนทั้ง 6 กรณี ดังที่กล่าวไว้ในหัวข้อ 3.1 เพื่อให้เข้าใจวิธีการคำนวณสมการที่ใช้สร้างแผนภาพเสถียรในระนาบของแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทั้งสอง ได้อย่างวิธีวิธีการคำนวณในกรณีที่ 1 ซึ่งในกรณีดังกล่าว อิเล็กตรอนเคลื่อนที่จากขั้วซอร์สไปยังเกาะโลหะทางซ้ายทำให้สถานะประจุเปลี่ยนจาก $(n_L, n_R) \rightarrow (n_L - 1, n_R)$ จากสมการผลเฉลยกรณีที่ 1 ในสมการ (3.11)

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L - 1, n_R} = 2E_{CL} \left(\frac{1}{2} - n_L - n_{L0} \right) - E_{CM}(n_R + n_{R0}) + eV_L$$

เมื่อแทนเงื่อนไขของการส่งผ่านอิเล็กตรอน $\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L - 1, n_R} = 0$ พบว่า

$$0 = E_{CL}(1 - 2n_L - 2n_{R0}) - E_{CM}(n_R + n_{R0}) + eV_L \quad (3.24)$$

โดยตัวแปร n_{R0} และ n_{L0} ถูกแสดงในรูปของตัวเก็บประจุและแรงดันไฟฟ้าได้ดังสมการ

$$n_{L0} = (C_{L1}V_L + C_{L1}V_1 + C_{2L}V_2) / e \quad (3.25a)$$

$$n_{R0} = (C_{R1}V_R + C_{1R}V_1 + C_{2R}V_2) / e \quad (3.25b)$$

กรณีนี้ กำหนดให้ระบบได้รับแรงดันไฟฟ้าจากภายนอกผ่านขั้วเกตเพียงสองขั้ว (V_1, V_2) เท่านั้น ดังนั้น ค่าแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วซอร์สและขั้วเดรน (V_L, V_R) ถูกกำหนดให้มีค่าเท่ากับศูนย์และ C_{1R} และ C_{2L} เป็นค่าความจุไฟฟ้าที่เกิดขึ้นเอง จากแรงดันดกคร่อมระหว่างขั้วเกตทางซ้ายกับเกาะโลหะทางขวา และขั้วเกตทางขวากับเกาะโลหะทางซ้าย โดยทั่วไป C_{1R} และ C_{2L} มีค่าน้อยมากทำให้สามารถประมาณว่ามีค่าเท่ากับศูนย์ ดังนั้น สมการ (3.25a) และ (3.25b) จึงสามารถลดรูปได้ดังสมการ

$$n_{L0} = \frac{C_{1L}V_1}{e} \quad (3.26)$$

$$n_{R0} = \frac{C_{2R}V_2}{e} \quad (3.27)$$

เมื่อนำสมการ (3.26) และ (3.27) แทนลงในสมการ (3.24) และจัดรูปให้เป็นสมการเส้นตรง โดยกำหนดให้แรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทางขวา (V_2) เป็นฟังก์ชันของแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทางซ้าย (V_1) พบว่า

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L - 1, n_R \rightarrow n_R} = 0 ; \quad V_2 = -\frac{2C_{1L}E_{CL}}{C_{2R}E_{CM}}V_1 + \left(\frac{E_{CL}(1-2n_L) - E_{CM}n_R}{C_{2R}E_{CM}} \right) e \quad (3.28)$$

การคำนวณในทำนองเดียวกัน กรณีที่ 2 - 6 สามารถจัดให้อยู่ในสมการเส้นตรงได้ดังนี้

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L + 1, n_R \rightarrow n_R} = 0 ; \quad V_2 = -\frac{2C_{1L}E_{CL}}{C_{2R}E_{CM}}V_1 - \left(\frac{E_{CL}(1+2n_L) + E_{CM}n_R}{C_{2R}E_{CM}} \right) e \quad (3.29)$$

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L, n_R \rightarrow n_R - 1} = 0 ; \quad V_2 = -\frac{C_{1L}E_{CM}}{2C_{2R}E_{CR}}V_1 + \left(\frac{E_{CR}(1-2n_R) - E_{CM}n_L}{2C_{2R}E_{CR}} \right) e \quad (3.30)$$

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L, n_R \rightarrow n_R + 1} = 0 ; \quad V_2 = -\frac{C_{1L}E_{CM}}{2C_{2R}E_{CR}}V_1 - \left(\frac{E_{CR}(1+2n_R) + E_{CM}n_L}{2C_{2R}E_{CR}} \right) e \quad (3.31)$$

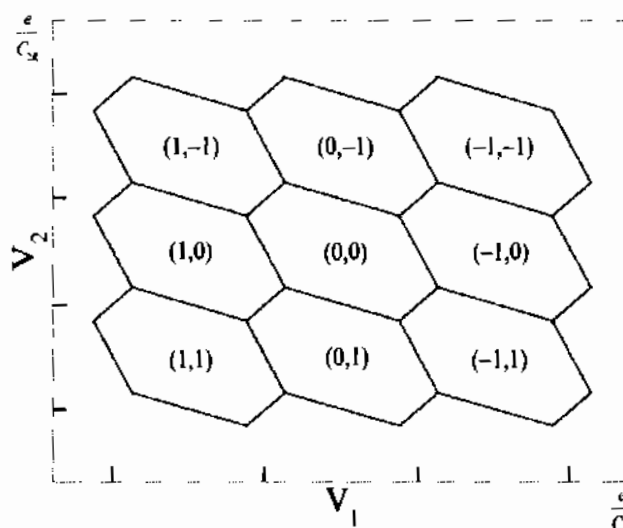
$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L + 1, n_R \rightarrow n_R - 1} = 0 ;$$

$$V_2 = \frac{C_{1L}(2E_{CL} - E_{CM})}{C_{2R}(2E_{CR} - E_{CM})}V_1 + \left(\frac{E_{CL}(1+2n_L) + E_{CR}(1-2n_R) + E_{CM}(n_R - n_L - 1)}{C_{2R}(2E_{CR} - E_{CM})} \right) e \quad (3.32)$$

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L - 1, n_R \rightarrow n_R + 1} = 0 ;$$

$$V_2 = \frac{C_{1L}(E_{CM} - 2E_{CL})}{C_{2R}(E_{CM} - 2E_{CR})}V_1 + \left(\frac{E_{CL}(1-2n_L) + E_{CR}(1+2n_R) + E_{CM}(n_L - n_R - 1)}{C_{2R}(E_{CM} - 2E_{CR})} \right) e \quad (3.33)$$

สมการ (3.28) - (3.33) แสดงความสัมพันธ์ระหว่างแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทางซ้าย (V_1) และ ค่าแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทางขวา (V_2) เมื่อใช้สมการดังกล่าวสร้างแผนภาพเสถียรในระนาบของค่าแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทางซ้ายและทางขวา (V_1, V_2) โดยสามารถสร้างแผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวที่เกี่ยวข้องกับสถานะ $(n_L, n_R) \in \{(1, -1), (1, 0), (1, 1), (0, -1), (0, 0), (0, 1), (-1, -1), (-1, 0), (-1, 1)\}$ ดังแสดงในภาพประกอบ 3.7



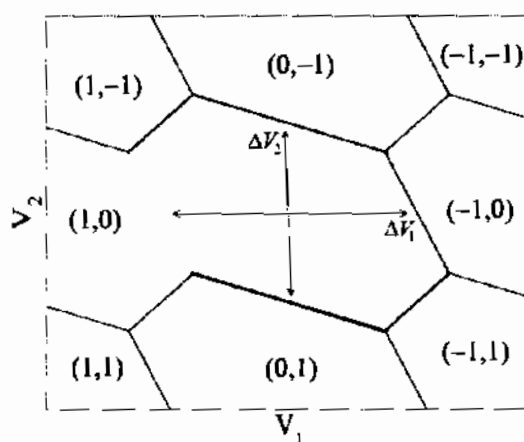
ภาพประกอบ 3.7 แผนภาพเสถียรของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวในระนาบ V_1 และ V_2

ภาพประกอบ 3.7 พบว่า บริเวณภายในพื้นที่หกเหลี่ยมเป็นเงื่อนไขของการให้แรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกิดทางซ้าย V_1 และขั้วเกิดทางขวา V_2 เพื่อควบคุมให้บีมอิเล็กตรอนเดี่ยวมีเสถียรภาพสามารถกักเก็บอิเล็กตรอนในสถานะต่างๆ เช่น สถานะ $(-1, -1)$ เมื่อจ่ายแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกิดทั้งสองขั้วให้มีค่าภายในบริเวณพื้นที่หกเหลี่ยมนี้ บีมอิเล็กตรอนเดี่ยวจะสามารถควบคุมอิเล็กตรอนให้คงอยู่ในเกาะโลหะทั้งสองได้และอิเล็กตรอนจากขั้วซอร์สและขั้วเดรนจะไม่สามารถเข้ามาในเกาะโลหะได้

ในลำดับต่อไปให้พิจารณาถึงขอบเขตของแผนภาพเสถียรของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวสามารถแยกได้ออกเป็นสองกรณี ดังนี้

3.2.1 พิจารณาขอบเขตของแกน V_1

ในการพิจารณาช่วงของแรงดันไฟฟ้าบนแผนภาพเสถียร เพื่อความสะดวกต่อการคำนวณได้พิจารณาในกรณีเซลล์หกเหลี่ยมของสถานะประจุ $(0, 0)$



ภาพประกอบ 3.8 แผนภาพเสถียรของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวกรณีของสถานะประจุ $(0, 0)$

จากภาพประกอบ 3.8 พิจารณาเส้นตรงสีแดง คือ ช่วงการจ่ายแรงดันไฟฟ้าที่ทำให้อิเล็กตรอนสามารถเข้ามาในเกาะโลหะทางซ้ายหนึ่งตัว จากสมการ (3.28)

$$V_2 = -\frac{2C_{1L}E_{CL}}{C_{2R}E_{CM}}V_1 + \left(\frac{(1-2n_L)E_{CL} - E_{CM}n_R}{C_{2R}E_{CM}} \right) e$$

ในกรณี $(n_L, n_R) = (0, 0)$ สามารถจัดให้อยู่ในรูปแบบอย่างง่าย

$$V_2 = -\frac{2C_{1L}E_{CL}}{C_{2R}E_{CM}}V_1 + \frac{E_{CL}}{C_{2R}E_{CM}}e \quad (3.34)$$

เพื่อคำนวณหาจุดตัดแกน V_1 จึงต้องกำหนดให้ $V_2 = 0$ จากนั้นนำไปแทนในสมการ (3.34) พบว่า

$$V_1 = \frac{e}{2C_{1L}} \quad (3.35)$$

ในทำนองเดียวกัน เส้นสีเหลืองซึ่งเป็นช่วงของการให้แรงดันไฟฟ้าที่ทำให้อิเล็กตรอนออกจากเกาะโลหะทางซ้ายหนึ่งตัวซึ่งมาจากสมการ (3.29) สามารถคำนวณหาจุดตัดแกน V_1 ได้ดังนี้

$$V_1 = -\frac{e}{2C_{1L}} \quad (3.36)$$

ดังนั้น จากสมการ (3.35) และ (3.36) จึงสามารถใช้กำหนดช่วงของแรงดันไฟฟ้าจากขั้วเกิดทางซ้ายซึ่งสามารถควบคุมอิเล็กตรอนในเกาะโลหะทางซ้ายให้มีจำนวนคงที่ นั่นคือ

$$-\frac{e}{C_{1L}} < V_1 < \frac{e}{C_{1L}} \quad (3.37)$$

3.2.2 พิจารณาขอบเขตของแกน V_2

จากภาพประกอบ 3.8 พิจารณาเส้นตรงสีน้ำเงิน คือ ช่วงของการให้แรงดันไฟฟ้าจากขั้วเกิดทางขวาเพื่อให้อิเล็กตรอนสามารถเข้ามาในเกาะโลหะทางขวาหนึ่งตัว โดยคำนวณได้จากสมการ (3.30)

$$V_2 = -\frac{C_{1L}E_{CM}}{2C_{2R}E_{CR}}V_1 + \left(\frac{(E_{CR}(1-2n_R) - n_L E_{CM})}{2C_{2R}E_{CR}} \right) e$$

พิจารณาในกรณี $(n_L, n_R) = (0, 0)$ พบว่า

$$V_2 = -\frac{C_{1L}E_{CM}}{2C_{2R}E_{CR}}V_1 + \frac{E_{CR}}{2C_{2R}E_{CR}}e \quad (3.38)$$

เพื่อคำนวณหาจุดตัดแกน V_2 จึงกำหนดให้ $V_1 = 0$ แล้วแทนลงในสมการ (3.38) พบว่า

$$V_2 = \frac{e}{2C_{2R}} \quad (3.39)$$

ในทำนองเดียวกัน เส้นเขียวเป็นช่วงของการให้แรงดันไฟฟ้าที่ทำให้อิเล็กตรอนออกจากเกาะโลหะทางขวาหนึ่งตัวซึ่งได้จากสมการ (3.31) สามารถคำนวณหาจุดตัดแกน V_2 ได้ดังนี้

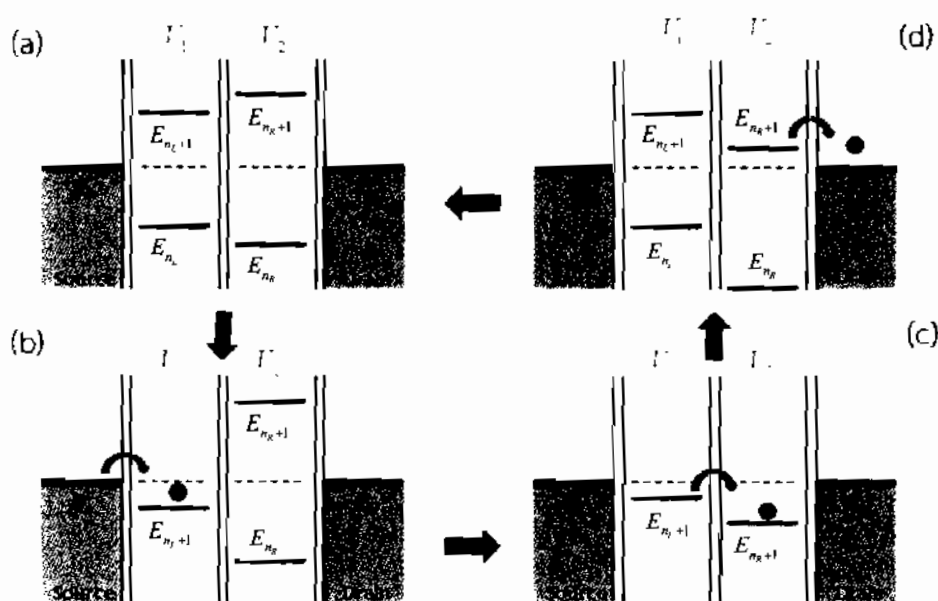
$$V_2 = -\frac{e}{2C_{2R}} \quad (3.40)$$

จากสมการ (3.39) และ (3.40) สามารถคำนวณหาช่วงของแรงดันไฟฟ้าจากขั้วเกิดทางขวาเพื่อควบคุมอิเล็กตรอนในเกาะโลหะทางขวาให้มีจำนวนคงที่ ดังสมการ

$$-\frac{e}{C_{2R}} < V_2 < \frac{e}{C_{2R}} \quad (3.41)$$

3.2.3 แผนภาพการส่งผ่านของอิเล็กตรอนในบีมอิเล็กตรอนเดี่ยว

เพื่อให้เกิดความเข้าใจเกี่ยวกับการส่งผ่านของอิเล็กตรอนมากขึ้น ในลำดับต่อไปจึงได้แสดงแผนภาพการส่งผ่านของอิเล็กตรอนที่ได้จากการวิเคราะห์แผนภาพเสถียรของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งแสดงดังภาพประกอบ 3.9



ภาพประกอบ 3.9 แผนภาพการส่งผ่านอิเล็กตรอนของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวเมื่อมีการเปลี่ยนแปลงแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกิดทางซ้ายและขวา (a) สภาวะที่ไม่จ่ายแรงดันไฟฟ้า ($V_1 = V_2 = 0$) (b) สภาวะที่จ่ายแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกิดทางซ้าย ($V_1 > V_2 = 0$) (c) สภาวะที่จ่ายแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกิดทางขวา และลดแรงดันไฟฟ้าขั้วเกิดทางซ้าย ($V_2 > V_1 > 0$) และ (d) สภาวะที่ลดแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกิดทางขวา และปรับแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกิดทางซ้ายให้กลับไปสภาวะเริ่มต้น ($V_2 > V_1 = 0$) ทำให้เกิดการส่งผ่านของอิเล็กตรอนจากขั้วซอร์สไปยังขั้วเดรน

จากภาพประกอบ 3.9 (a) ซึ่งเป็นกรณีที่ขั้วเกดทั้งสองขั้วไม่ได้รับแรงดันไฟฟ้าจากภายนอก ทำให้ระดับพลังงานที่ว่างภายในเกาะโลหะทั้งสองอยู่สูงกว่าระดับพลังงานของอิเล็กตรอนที่ขั้วซอร์สและขั้วเดรน โอกาสที่อิเล็กตรอนจะทะลุผ่านกำแพงศักย์จึงมีค่าน้อย ดังนั้น อิเล็กตรอนจึงไม่สามารถทะลุเข้าไปในเกาะโลหะได้ จุดทำงานของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวภายในแผนภาพเสถียรจะอยู่ที่สถานะ $(0,0)$ ในขณะที่ภาพประกอบ 3.9 (b) แสดงสภาวะที่ปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวได้รับแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกดทางซ้าย ทำให้ระดับพลังงานว่างของเกาะโลหะทางด้านซ้ายลดต่ำกว่าระดับพลังงานของอิเล็กตรอนที่ขั้วซอร์ส ทำให้อิเล็กตรอนสามารถทะลุผ่านไปยังเกาะโลหะทางซ้ายได้หนึ่งตัว ซึ่งกรณีนี้ ปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวจะอยู่ในสถานะ $(-1,0)$ ภายในแผนภาพเสถียร

เมื่อจ่ายแรงดันไฟฟ้าให้ขั้วเกดทางขวาทำให้ระดับพลังงานว่างของเกาะโลหะทางขวาลดต่ำลง ในขณะเดียวกัน เมื่อลดแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกดซ้ายจะทำให้ระดับพลังงานว่างของเกาะโลหะทางซ้ายสูงขึ้น เมื่อระดับพลังงานว่างของเกาะโลหะทางซ้ายซึ่งมีอิเล็กตรอนอยู่หนึ่งตัวอยู่ต่ำกว่าระดับพลังงานของอิเล็กตรอนที่ขั้วซอร์ส แต่มีค่าสูงกว่าระดับพลังงานว่างของเกาะโลหะทางขวา ในสภาวะนี้ อิเล็กตรอนสามารถเคลื่อนจากเกาะโลหะทางซ้ายไปยังเกาะโลหะทางขวาดังภาพประกอบ 3.9 (c) ปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวในกรณีนี้จะอยู่ที่สถานะ $(0,-1)$

เมื่อลดแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกดทางขวาทำให้ระดับพลังงานว่างของเกาะโลหะทางขวาเพิ่มขึ้นอยู่ในระดับที่สูงกว่าระดับพลังงานของขั้วเดรน ในขณะที่แรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกดทางซ้ายมีค่าเท่ากับ 0 V ดังแสดงในภาพประกอบ 3.9 (d) สภาวะนี้อิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่จากเกาะโลหะทางขวาไปยังขั้วเดรน โดยกำแพงศักย์จากเกาะโลหะทางซ้ายจะป้องกันไม่ให้อิเล็กตรอนไหลย้อนกลับไปยังเกาะโลหะทางซ้าย ในกรณีนี้สถานะของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวในแผนภาพเสถียร คือ $(0,0)$

การพิจารณาการส่งผ่านของอิเล็กตรอนจากขั้วเดรนไปยังขั้วซอร์ส พบว่า มีลักษณะการทำงานของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวคล้ายกับการส่งผ่านจากขั้วซอร์สไปยังขั้วเดรน แต่มีลำดับโนการเปลี่ยนแปลงแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกดทั้งสองย้อนกลับ โดยเริ่มจากการเพิ่มแรงดันไฟฟ้าเข้าไปที่ขั้วเกดทางขวา ดังภาพประกอบ 3.9 (d) จากนั้นย้อนไปภาพประกอบ 3.9 (c) (b) และ (a) ตามลำดับ แม้ว่าแผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวจะอธิบายวัฏจักรการทำงานของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวบนแนวคิดทางฟิสิกส์แบบฉบับ แต่แผนภาพที่ได้สามารถทำนายตำแหน่งของค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดของ ปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งเป็นอุปกรณ์ที่ทำงานด้วยหลักการทางควอนตัมได้ โดยการหาตำแหน่งของค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวจะถูกแสดงรายละเอียดการคำนวณในบทที่ 5

บทที่ 4

พลังงานการเพิ่มประจุยังผลของป้อนอิเล็กตรอนเดี่ยว

จากหัวข้อ 2.1 ที่ได้แสดงให้เห็นว่า พลังงานการเพิ่มประจุยังผลเป็นพารามิเตอร์ที่มีความสำคัญในการแสดงความเด่นชัดของปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคุลอมบ์ โดยได้แสดงตัวอย่างการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว ในบทนี้จะนำเสนอนิยามและวิธีการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของป้อนอิเล็กตรอนเดี่ยวด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ซึ่งอุปกรณ์ดังกล่าวมีความซับซ้อนมากกว่ากล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว โดยในหัวข้อแรกได้ทำการเขียนสมการของค่าแอร์กซ์ให้อยู่ในรูปแบบที่เหมาะสมสำหรับการประมวลผลด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ส่วนในหัวข้อ 4.2 ได้เสนอนิยามและวิธีการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของป้อนอิเล็กตรอนเดี่ยวและในหัวข้อ 4.3 ได้แสดงผลการคำนวณและอภิปรายผล

4.1 แอร์กซ์ยังผลสำหรับการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล

ในการคำนวณพลังงานการเพิ่มประจุยังผลและค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล สามารถทำได้โดยการพิจารณาค่าแอร์กซ์ของป้อนอิเล็กตรอนเดี่ยว [19]

$$S[\Phi(\tau)] = S_c[\Phi(\tau)] + S_{nm}[\Phi(\tau)] \quad (4.1)$$

โดยค่าคุลอมบ์แอร์กซ์เป็นไปตามสมการ

$$S_c[\Phi(\tau)] = \int_0^\beta \frac{1}{4} d\tau (\dot{\Phi} \tilde{E}^{-1} \dot{\Phi}' + i \mathbf{n}_g \Phi^T) \quad (4.2)$$

เมื่อเมทริกซ์ $\Phi(\tau) = (\varphi_L(\tau), \varphi_R(\tau))$ และ $\mathbf{n}_g = (n_{L0}, n_{R0})$ โดยที่

$$n_{i0} = \frac{C_i V_i}{e} + \frac{C_M V_1}{e} + \frac{C_M V_2}{e} \quad ; i \in \{L, R\} \quad (4.3)$$

และเมทริกซ์

$$\tilde{E} = \begin{pmatrix} E_{cL} & E_{cM} \\ E_{cM} & E_{cR} \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

เมื่อค่า E_{cL} , E_{cM} และ E_{cR} ถูกนิยามตามสมการ (2.34) - (2.36) ตามลำดับ และค่าแอร์กซ์ของการทะลุผ่านมีค่าเป็นไปตามสมการ

$$S_{nm}[\Phi(\tau)] = - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \alpha(\tau - \tau') \begin{pmatrix} g_L \cos(\varphi_L(\tau) - \varphi_L(\tau')) + g_R \cos(\varphi_R(\tau) - \varphi_R(\tau')) \\ + g_M \cos(\varphi_L(\tau) - \varphi_R(\tau) - \varphi_L(\tau') + \varphi_R(\tau')) \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

โดยที่

$$\alpha(\tau - \tau') = \left[4\beta^2 \sin^2 \left(\frac{\pi}{\beta} (\tau - \tau') \right) \right]^{-1} \quad (4.6)$$

เพื่อความสะดวกในการประมวลผลด้วยวิธีการคอนตัมมอนติคาร์โล ในโครงงานนี้ได้กำหนดให้ทุกพารามิเตอร์เป็นตัวแปรที่ไม่มีหน่วย (dimensionless unit) โดยกำหนดให้ ค่าพลังงานของระบบถูกเขียนอยู่ในรูปสัดส่วนของพลังงานการเพิ่มประจุ (E_C) กล่าวคือ ค่าพารามิเตอร์ส่วนกลับของอุณหภูมิ (inverse temperature; β) ถูกเขียนใหม่เป็น βE_C . โดยที่พลังงานการเพิ่มประจุของปั๊มอิเล็กตรอนเดียวนิยามตามสมการ [19]

$$E_C = g_0 \left(\frac{E_{CL}}{g_L} + \frac{E_{CM}}{g_M} + \frac{E_{CR}}{g_R} \right) \quad (4.7)$$

เมื่อ $g_0^{-1} = g_L^{-1} + g_M^{-1} + g_R^{-1}$ ดังนั้น จากค่าคู่สมบัพอีกชั้นในสมการ (4.2) สามารถเขียนใหม่ได้ดังนี้

$$\begin{aligned} S_C[\boldsymbol{\varphi}(\tau)] &= \int_0^{\beta E_C} d\tau (\boldsymbol{\dot{\varphi}} \mathbf{E} \boldsymbol{\dot{\varphi}}^T + i \mathbf{n}_g \boldsymbol{\dot{\varphi}}^T) \\ &= S_C^0[\boldsymbol{\varphi}(\tau)] + i \int_0^{\beta E_C} d\tau \mathbf{n}_g \boldsymbol{\dot{\varphi}}^T \end{aligned} \quad (4.8)$$

โดยที่

$$S_C^0[\boldsymbol{\varphi}(\tau)] = \int_0^{\beta E_C} d\tau \boldsymbol{\dot{\varphi}} \mathbf{E} \boldsymbol{\dot{\varphi}}^T \quad (4.9)$$

เมื่อเมทริกซ์

$$\mathbf{E} = \frac{E_C}{2e^2} \begin{pmatrix} C_{\Sigma L} & -C_{\Sigma M} \\ -C_{\Sigma M} & C_{\Sigma R} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} E_L & -E_M \\ -E_M & E_R \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

และค่าอีกชั้นของการทะลุผ่านในสมการ (4.5) สามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$S_{int}[\boldsymbol{\varphi}(\tau)] = - \int_0^{\beta E_C} d\tau \int_0^{\beta E_C} d\tau' \alpha(\tau - \tau') \begin{pmatrix} g_L \cos(\varphi_L(\tau) - \varphi_L(\tau')) + g_R \cos(\varphi_R(\tau) - \varphi_R(\tau')) \\ + g_M \cos(\varphi_L(\tau) - \varphi_R(\tau) - \varphi_L(\tau') + \varphi_R(\tau')) \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

โดยที่

$$\alpha(\tau - \tau') = \left[4(\beta E_C)^2 \sin^2 \left(\frac{\pi}{\beta E_C} (\tau - \tau') \right) \right]^{-1} \quad (4.12)$$

เมื่อนำสมการ (4.8) แทนในสมการ (4.1) ค่าอีกชั้นของปั๊มอิเล็กตรอนเดียวนี้อาจเขียนได้เป็น

$$S[\boldsymbol{\varphi}(\tau)] = S_C^0[\boldsymbol{\varphi}(\tau)] + i \int_0^{\beta E_C} d\tau \mathbf{n}_g \boldsymbol{\dot{\varphi}}^T + S_{int}[\boldsymbol{\varphi}(\tau)] \quad (4.13)$$

ในการสุ่มตัวอย่างด้วยระเบียบวิธีของเมโทรโพลิสตามที่ได้กล่าวในหัวข้อ 2.4.3 ค่าเอ็กซันต้องเป็นจำนวนจริงบวก ดังนั้น ส่วนจินตภาพในสมการ (4.13) จึงถูกแยกออกจากค่าเอ็กซัน เพื่อให้เป็นไปตามเงื่อนไขของเมโทรโพลิส ค่าเอ็กซันของป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวจึงสามารถเขียนใหม่ได้ดังสมการ

$$S[\Phi(\tau)] = S_c^0[\Phi(\tau)] + S_{\text{int}}[\Phi(\tau)] \quad (4.14)$$

และนิยามค่าเอ็กซันในสมการ (4.14) ว่า ค่าเอ็กซันยังผล ดังสมการ

$$S_{\text{eff}}[\Phi(\tau)] = S_c^0[\Phi(\tau)] + S_{\text{int}}[\Phi(\tau)] \quad (4.15)$$

โดยที่ $S_c^0[\Phi(\tau)]$ คือ คูลอมบ์เอ็กซันที่ไม่รวมส่วนจินตภาพ นิยามตามสมการ (4.9) และ $S_{\text{int}}[\Phi(\tau)]$ คือ ค่าเอ็กซันของการทะลุผ่าน นิยามตามสมการ (4.11) สำหรับส่วนจินตภาพ $\left(i \int_0^{\beta E_c} d\tau \mathbf{n}_g \dot{\Phi}^T\right)$ ถูกรวมเข้ากับพจน์ที่ต้องการหาค่าเฉลี่ยซึ่งจะอธิบายในหัวข้อต่อไป

4.1.1 ตัวเลขไว้งัด

ในการนิยามของป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวค่าเฉลี่ยเส้นทางอนุภาค $\langle F[\Phi(\tau)] \rangle$ สามารถคำนวณได้ดังสมการต่อไปนี้ [19]

$$\langle F[\Phi(\tau)] \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{k_L, k_R=-\infty}^{\infty} \int_{\varphi_L(0)}^{\varphi_L(0)+2\pi k_L} D[\varphi_L(\tau)] \int_{\varphi_R(0)}^{\varphi_R(0)+2\pi k_R} D[\varphi_R(\tau)] e^{-S_{\text{eff}}[\Phi(\tau)]} F[\Phi(\tau)] e^{-\int_0^{\beta E_c} d\tau (\mathbf{n}_g \dot{\Phi}^T)} \quad (4.16)$$

โดยที่

$$Z = \sum_{k_L, k_R=-\infty}^{\infty} \int_{\varphi_L(0)}^{\varphi_L(0)+2\pi k_L} D[\varphi_L(\tau)] \int_{\varphi_R(0)}^{\varphi_R(0)+2\pi k_R} D[\varphi_R(\tau)] e^{-S_{\text{eff}}[\Phi(\tau)]} e^{-\int_0^{\beta E_c} d\tau (\mathbf{n}_g \dot{\Phi}^T)} \quad (4.17)$$

จากสมการ (4.16) และ (4.17) พบว่า เงื่อนไขขอบเขตของการหาค่าปริพันธ์มีค่าเพิ่มขึ้นเป็นจำนวนเท่าของ 2π กล่าวคือ $2\pi k_L$ และ $2\pi k_R$ ซึ่งค่า k_L และ k_R ถูกเรียกว่า ค่าตัวเลขไว้งัด (winding numbers) เพื่อความสะดวกในการประมวลผล ขอบเขตของการหาค่าปริพันธ์สามารถเขียนใหม่ได้โดยการเปลี่ยนตัวแปรดังสมการ

$$\xi_L(\tau) = \varphi_L(\tau) - v_{k_L} \tau \quad \text{และ} \quad \xi_R(\tau) = \varphi_R(\tau) - v_{k_R} \tau \quad (4.18)$$

เมื่อ $v_{k_L} = 2\pi k_L / (\beta E_c)$ และ $v_{k_R} = 2\pi k_R / (\beta E_c)$ โดยมีเงื่อนไขขอบเขตเป็น

$$\xi_L(0) = \xi_L(\beta E_c) \quad \text{และ} \quad \xi_R(0) = \xi_R(\beta E_c) \quad (4.19)$$

ดังนั้น สมการ (4.16) และ (4.17) สามารถเขียนใหม่ได้ดังสมการ

$$\langle F[\xi, \mathbf{k}] \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{k_L, k_R=-\infty}^{\infty} \oint D[\xi, \mathbf{k}] e^{-S_{eff}[\xi, \mathbf{k}]} F[\xi, \mathbf{k}] e^{-2\pi i(\mathbf{n}_R \mathbf{k}^T)} \quad (4.20)$$

โดยที่

$$Z = \sum_{k_L, k_R=-\infty}^{\infty} \oint D[\xi, \mathbf{k}] e^{-S_{eff}[\xi, \mathbf{k}]} e^{-2\pi i(\mathbf{n}_R \mathbf{k}^T)} \quad (4.21)$$

เมื่อ เมทริกซ์ $\xi = (\xi_L, \xi_R)$ และตัวแปร ξ_L กับ ξ_R สอดคล้องกับตัวแปร φ_L กับ φ_R ตามลำดับ และเมทริกซ์ $\mathbf{k} = (k_L, k_R)$ เมื่อพิจารณาเส้นทาง $\xi(\tau)$ และเส้นทาง $-\xi(\tau)$ พบว่า แอ็กชันยังผลของบีมอเล็กตรอนเดียวมียุณสมบัติดังต่อไปนี้

$$S_{eff}[\xi] = S_{eff}[-\xi] \quad (4.22)$$

ดังนั้น พจน์ $\exp[-S_{eff}[\xi, \mathbf{k}]]$ จึงเป็นฟังก์ชันคู่ (even function) นอกจากนี้ เมื่อทำการแปลงพจน์ $e^{-2\pi i(\mathbf{n}_R \mathbf{k}^T)}$ ในสมการ (4.21) โดยใช้เอกลักษณ์ของออยเลอร์ (Euler's identity) พบว่า

$$e^{-2\pi i(\mathbf{n}_R \mathbf{k}^T)} = \cos(2\pi \mathbf{n}_R \mathbf{k}^T) - i \sin(2\pi \mathbf{n}_R \mathbf{k}^T) \quad (4.23)$$

เมื่อนำสมการ (4.23) ไปแทนในสมการ (4.21) พบว่า การหาปริพันธ์ในทุกเส้นทางของพจน์ที่เป็นส่วนจินตภาพในสมการ (4.23) ซึ่งเป็นฟังก์ชันคี่ (odd function) มีค่าเป็นศูนย์ คงเหลือเฉพาะพจน์ $\cos 2\pi(k_L n_{0L} + k_R n_{0R})$ ดังนั้น ค่าเฉลี่ยเส้นทางอนุภาค $\langle F[\xi, \mathbf{k}] \rangle$ ในสมการ (4.20) จึงสามารถเขียนใหม่ได้ดังสมการ

$$\langle F[\xi, \mathbf{k}] \rangle = \frac{1}{Z_{eff}} \sum_{k_L, k_R=-\infty}^{\infty} \oint D[\xi, \mathbf{k}] e^{-S_{eff}[\xi, \mathbf{k}]} F[\xi, \mathbf{k}] e^{-2\pi i(\mathbf{n}_R \mathbf{k}^T)} \quad (4.24)$$

เมื่อ

$$Z_{eff} = \sum_{k_L, k_R=-\infty}^{\infty} \oint D[\xi, \mathbf{k}] e^{-S_{eff}[\xi, \mathbf{k}]} \cos(2\pi(k_L n_{0L} + k_R n_{0R})) \quad (4.25)$$

นอกจากนั้น จากการเปลี่ยนตัวแปรในสมการ (4.18) ทำให้ค่าแอ็กชันในสมการ (4.9), (4.11) และ (4.15) สามารถเขียนได้ดังสมการ

$$S_{eff}[\xi, \mathbf{k}] = S_{cl}^0[\xi, \mathbf{k}] + S_{int}[\xi, \mathbf{k}] \quad (4.26)$$

โดยที่

$$S_c^0[\xi, \mathbf{k}] = \frac{4\pi^2}{\beta E_c} \mathbf{k} \mathbf{E} \mathbf{k}^T + \int_0^{\beta E_c} d\tau \dot{\xi} \mathbf{E} \dot{\xi}^T \quad (4.27)$$

และ

$$S_{int}[\xi, \mathbf{k}] = - \int_0^{\beta E_c} d\tau \int_0^{\beta E_c} d\tau' \alpha(\tau - \tau') \begin{pmatrix} g_L \cos(\xi_L(\tau) - \xi_L(\tau') + v_{k_L} k_L) \\ + g_M \cos(\xi_L(\tau) - \xi_R(\tau') - \xi_L(\tau') + \xi_R(\tau') + (v_{k_L} - v_{k_R})(\tau - \tau')) \\ + g_R \cos(\xi_R(\tau) - \xi_R(\tau') + v_{k_R} k_R) \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

4.1.2 ค่าแอกชันในรูปแบบที่ไม่ต่อเนื่อง

ในการคำนวณค่าเฉลี่ยในสมการ (4.24) ด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลของค่าเฉลี่ยเส้นทางอนุภาค $F[\xi, \mathbf{k}]$ ของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวต้องแปลงสมการ (4.24), (4.27) และ (4.28) ให้อยู่ในรูปแบบที่ไม่ต่อเนื่อง โดยการใช้ผลรวมของรีมันน์ (Riemann's sums) ซึ่งสามารถทำได้โดยการแบ่งช่วง βE_c ออกเป็น N ช่วงเท่าๆกัน ซึ่งค่า N เรียกว่า ตัวเลขทรอตเตอร์ (Trotter's number) [20] ทำให้ค่าลูปแอกชันและค่าแอกชันของการทะลุผ่าน สามารถเขียนได้ดังสมการต่อไปนี้

$$\begin{aligned} S_c^0[\xi_L, \xi_R, k_L, k_R] &= \frac{NE_L}{\beta E_c} \sum_{j=1}^N (\xi_{L,j} - \xi_{L,j-1})^2 + \frac{4\pi^2 k_L^2 E_L}{\beta E_c} \\ &+ \frac{NE_R}{\beta E_c} \sum_{j=1}^N (\xi_{R,j} - \xi_{R,j-1})^2 + \frac{4\pi^2 k_R^2 E_R}{\beta E_c} \\ &- \frac{2NE_m}{\beta E_c} \sum_{j=1}^N (\xi_{L,j} - \xi_{L,j-1})(\xi_{R,j} - \xi_{R,j-1}) - \frac{8\pi^2 k_L k_R E_m}{\beta E_c} \end{aligned} \quad (4.29)$$

และ

$$\begin{aligned} S_{int}[\xi_L, \xi_R, k_L, k_R] &= - \sum_{j,j'=1}^N \alpha_{j-j'} g_L \cos \left[\xi_{L,j} - \xi_{L,j'} + \frac{2\pi k_L}{N} (j - j') \right] \\ &+ \sum_{j,j'=1}^N \alpha_{j-j'} g_M \cos \left[(\xi_{R,j} - \xi_{R,j'}) - (\xi_L - \xi_{L,j'}) + \frac{2\pi(k_R - k_L)}{N} (j - j') \right] \\ &- \sum_{j,j'=1}^N \alpha_{j-j'} g_R \cos \left[\xi_{R,j} - \xi_{R,j'} + \frac{2\pi k_R}{N} (j - j') \right] \end{aligned} \quad (4.30)$$

โดยที่เคอร์เนลการทะลุผ่านนิยามตามสมการ

$$\alpha_{j-j'} = \left[4N^2 \sin^2 \left(\frac{\pi(j-j')}{N} \right) \right]^{-1} \quad (4.31)$$

จากการพิจารณาค่าอีกชั้นของการทะลุผ่านในสมการ (4.30) พบว่า มีบางเงื่อนไขที่ค่าอีกชั้นดังกล่าวเกิดการลู่ออก (diverge) จึงแบ่งเงื่อนไขการคำนวณผลรวมออกเป็น 3 กรณี ได้แก่ กรณีที่ค่า $j > j'$ กรณีที่ค่า $j < j'$ และกรณีที่ค่า $j = j'$ ซึ่งในกรณีสุดท้ายเป็นกรณีที่ค่าอีกชั้นของการทะลุผ่านมีค่าลู่ออก ทำให้ไม่สามารถประมวลผลได้โดยตรง เพื่อให้สามารถประมวลผลได้ กำหนดให้

$$\Omega(\tau_j, \tau_{j'}) = \frac{1}{2} \left[\xi(\tau_j) - \xi(\tau_{j'}) + \frac{2\pi k}{\beta E_c} (\tau_j - \tau_{j'}) \right] \quad (4.32)$$

เมื่อแทนค่า $\Omega(\tau_j, \tau_{j'})$ ลงในสมการ (4.30) และใช้เอกลักษณ์ตรีโกณมิติ $\cos(x) = 1 - 2\sin^2(x/2)$ ในการแปลงพจน์แรกทางขวาของสมการ (4.30) จากนั้น พิจารณาพจน์ดังกล่าวในกรณีที่ลิมิตของ j เข้าสู่ j' จะได้

$$\begin{aligned} \lim_{\tau_j \rightarrow \tau_{j'}} 2\alpha(\tau_j - \tau_{j'}) \sin^2[\Omega(\tau_j, \tau_{j'})] &= \lim_{\tau_j \rightarrow \tau_{j'}} \frac{1}{2N^2} \frac{\sin^2[\Omega(\tau_j, \tau_{j'})]}{\sin^2\left[\frac{\pi}{\beta E_c} (\tau_j - \tau_{j'})\right]} \\ &= \frac{(\beta E_c)^2}{8\pi^2 N^2} \dot{\Omega}^2(\tau_j, \tau_{j'}) \\ &= \frac{1}{8\pi^2} [\xi_j - \xi_{j-1}]^2 + \frac{k}{2\pi N} [\xi_j - \xi_{j-1}] + \frac{1}{2N^2} k^2 \quad (4.33) \end{aligned}$$

เมื่อนำสมการ (4.33) ไปแทนในสมการ (4.30) พบว่า ผลรวมของพจน์ที่สองของสมการ (4.33) มีค่าเป็นศูนย์ จึงเหลือเฉพาะพจน์แรก $(1/8\pi^2 [\xi_j - \xi_{j-1}]^2)$ และพจน์สุดท้าย $(k^2/2N^2)$ สำหรับพจน์ที่เหลือสองพจน์ในสมการ (4.30) สามารถแปลงได้โดยใช้เอกลักษณ์ตรีโกณมิติและการพิจารณาค่าลิมิตในลักษณะที่คล้ายกับสมการ (4.33) ซึ่งผลที่ได้ทั้งหมดมีรูปแบบฟังก์ชันคล้ายกับค่าคลอมบ์อีกชั้นในสมการ (4.29) ดังนั้น เพื่อความสะดวก จึงรวมพจน์ที่ได้ทั้งหมดกับค่าคลอมบ์อีกชั้น โดยสามารถจัดพจน์ต่างๆ ได้ดังสมการ

$$S_{CT}^0 = S_C^0 + S_{\text{int}, j=j'} \quad (4.34)$$

$$\begin{aligned} S_{CT}^0[\xi_L, \xi_R, k_L, k_R] &= \varepsilon_L \sum_{j=1}^K (\xi_{L,j} - \xi_{L,j-1})^2 + \kappa_L k_L^2 + \varepsilon_R \sum_{j=1}^N (\xi_{R,j} - \xi_{R,j-1})^2 + \kappa_R k_R^2 \\ &\quad - \varepsilon_M \sum_{j=1}^K (\xi_{L,j} - \xi_{L,j-1})(\xi_{R,j} - \xi_{R,j-1}) + \kappa_M k_L k_R \end{aligned} \quad (4.35)$$

โดยที่

$$\varepsilon_I = \frac{NE_L}{\beta E_c} + \frac{g_I + g_M}{8\pi^2}, \quad \kappa_I = \frac{4\pi^2 E_L}{\beta E_c} + \frac{g_L + g_M}{2N^2} \quad (4.36)$$

$$\varepsilon_R = \frac{NE_R}{\beta E_C} + \frac{g_R + g_M}{8\pi^2}, \quad \kappa_R = \frac{4\pi^2 E_R}{\beta E_C} + \frac{g_R + g_M}{2N^2} \quad (4.37)$$

$$\varepsilon_M = \frac{2NE_M}{\beta E_C} + \frac{g_M}{4\pi^2}, \quad \kappa_M = \frac{8\pi^2 E_M}{\beta E_C} + \frac{g_M}{N^2} \quad (4.38)$$

นอกจากนั้น จากการพิจารณาค่าแฉกซ์ของการทะลุผ่านในกรณีทีค่า $j > j'$ และกรณีทีค่า $j < j'$ พบว่า ทั้งสองกรณีมีคุณสมบัติที่สมมาตรกัน จึงทำให้สามารถเขียนแฉกซ์ของการทะลุผ่านใหม่โดยการเปลี่ยน $\sum_{j,j'}$ เมื่อ $j \neq j'$ เป็น $2\sum_{j>j'}$ ได้ดังสมการ

$$\begin{aligned} S_{\text{tun},j \neq j'}[\xi_L, \xi_R, k_L, k_R] = & -2 \sum_{j>j'} \alpha_{j-j'} g_L \cos \left[\xi_{L,j} - \xi_{L,j'} + \frac{2\pi k_L}{N} (j-j') \right] \\ & + 2 \sum_{j>j'} \alpha_{j-j'} g_M \cos \left[(\xi_{R,j} - \xi_{R,j'}) - (\xi_{L,j} - \xi_{L,j'}) + \frac{2\pi(k_R - k_L)}{N} (j-j') \right] \\ & - 2 \sum_{j>j'} \alpha_{j-j'} g_R \cos \left[\xi_{R,j} - \xi_{R,j'} + \frac{2\pi k_R}{N} (j-j') \right] \end{aligned} \quad (4.39)$$

จากการแปลงค่า S_{CT}^0 ในสมการ (4.35) และค่า $S_{\text{tun},j \neq j'}$ ในสมการ (4.39) จะได้ S_{eff} ดังสมการ [19]

$$S_{\text{eff}} = S_{CT}^0 + S_{\text{tun},j \neq j'} \quad (4.40)$$

ค่า S_{CT}^0 และค่า $S_{\text{tun},j \neq j'}$ ในสมการ (4.35) และ (4.39) สามารถแปลงค่าเฉลี่ยเส้นทางของอนุภาคในสมการ (4.24) ให้อยู่ในรูปแบบสำหรับการประมวลผลด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลได้ดังสมการ

$$\langle F[\xi, \mathbf{k}] \rangle = \frac{\sum_{\xi, \mathbf{k}} F[\xi, \mathbf{k}] \cos(2\pi(k_L n_{0L} + k_R n_{0R}))}{\sum_{\xi, \mathbf{k}} \cos(2\pi(k_L n_{0L} + k_R n_{0R}))} \quad (4.41)$$

โดยที่ $i \in \{L, R\}$ และ $\xi, \mathbf{k}$ เป็นตัวแปรที่ถูกสุ่มด้วยระเบียบวิธีของเมโทรโพลิส โดยใช้ฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น $\rho(\xi, \mathbf{k}) \propto \exp[-S_{\text{eff}}[\xi, \mathbf{k}]]$ ในการสุ่มตัวแปรดังกล่าว

4.2 นิยามและการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว

เมื่อได้ค่าแฉกซ์ของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวในรูปแบบสำหรับการประมวลผลด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลจากหัวข้อ 4.1 ในหัวข้อนี้จะนำค่าแฉกซ์ที่ได้ไปคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว โดยประยุกต์แนวคิดของค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวในสมการ (2.21) ทำให้สามารถนิยามค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวดังสมการ

$$\begin{aligned}\frac{E_C^*}{E_C} &\equiv \nabla_{n0} \left(\langle n_{L,tun} \rangle + \langle n_{R,tun} \rangle \right) \Big|_{n_{L0}, n_{R0}=0} \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial n_{L0}} + \frac{\partial}{\partial n_{R0}} \right) \left((n_{L0} - \langle n_L \rangle) + (n_{R0} - \langle n_R \rangle) \right) \Big|_{n_{L0}, n_{R0}=0}\end{aligned}\quad (4.42)$$

เมื่อ $\langle n_{L,tun} \rangle$ และ $\langle n_{R,tun} \rangle$ คือ จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยที่ทะลุผ่านรอยต่อการทะลุผ่านในเกาะโลหะ

ทางซ้ายและทางขวา ตามลำดับ และ $\nabla_{n0} = \left(\frac{\partial}{\partial n_{L0}} + \frac{\partial}{\partial n_{R0}} \right)$

$$\frac{E_C^*}{E_C} = 2 - \nabla_{n0} \langle n_I \rangle \Big|_{n_{L0}, n_{R0}=0} \quad (4.43)$$

โดยที่ $\langle n_T \rangle$ คือ ผลรวมจำนวนประจุเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านภายในเกาะโลหะทางซ้ายและทางขวา

$$\langle n_T \rangle = \langle n_L \rangle + \langle n_R \rangle \quad (4.44)$$

จำนวนประจุเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านภายในเกาะโลหะทางซ้ายและทางขวา [20] คำนวณได้จาก

$$\langle n_L \rangle = n_{L0} - \frac{E_{CM}}{E_{CL}} (\langle n_R \rangle - n_{R0}) + \frac{1}{2\beta E_{CL}} \frac{\partial \ln Z}{\partial n_{L0}} \quad (4.45)$$

$$\langle n_R \rangle = n_{R0} - \frac{E_{CM}}{E_{CR}} (\langle n_L \rangle - n_{L0}) + \frac{1}{2\beta E_{CR}} \frac{\partial \ln Z}{\partial n_{R0}} \quad (4.46)$$

เนื่องจากบิโมอิเล็กตรอนเดี่ยวประกอบด้วยข้อขัดแย้งสองข้อที่เป็นอิสระต่อกัน จึงทำให้จำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ข้อขัดแย้ง n_{L0} และ n_{R0} เป็นอิสระต่อกัน ดังนั้น เมื่อนำฟังก์ชันแบ่งส่วนในสมการ (4.17) มาแทนในสมการ (4.45) และ (4.46) พบว่า จำนวนประจุเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านภายในเกาะโลหะทางซ้ายและทางขวา เป็นไปตามสมการ

$$\begin{aligned}\langle n_L \rangle &= n_{L0} - \frac{E_{CM}}{E_{CL}} (\langle n_R \rangle - n_{R0}) \\ &+ \frac{1}{2\beta E_{CL}} \sum_{k_l, k_R=-\infty}^{\infty} \frac{1}{Z} \oint D[\xi, \mathbf{k}] e^{-S_{eff}[\xi, \mathbf{k}]} e^{-\int_0^{\beta E_{CL}} d\tau (m_{\xi}(\xi + v_{k_l}))^2} \left(\int_0^{\beta E_{CL}} i d\tau (\xi_l(\tau) + v_{k_l}) \right) \quad (4.47)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle n_R \rangle &= n_{R0} - \frac{E_{CM}}{E_{CR}} (\langle n_L \rangle - n_{L0}) \\ &+ \frac{1}{2\beta E_{CR}} \sum_{k_l, k_R=-\infty}^{\infty} \frac{1}{Z} \oint D[\xi, \mathbf{k}] e^{-S_{eff}[\xi, \mathbf{k}]} e^{-\int_0^{\beta E_{CR}} d\tau (m_{\xi}(\xi + v_{k_R}))^2} \left(\int_0^{\beta E_{CR}} i d\tau (\xi_R(\tau) + v_{k_R}) \right) \quad (4.48)\end{aligned}$$

จากเงื่อนไขขอบเขต $\int_0^{\beta E_C} d\tau \dot{\xi}(\tau) = \xi(\beta E_C) - \xi(0) = 0$ ดังนั้น จำนวนประจุเฉลี่ยที่ร่อยต่อการทะลุผ่านภายในเกาะโลหะทางซ้ายสามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$\langle n_L \rangle = n_{L0} - \frac{E_{CM}}{E_{CL}} (\langle n_R \rangle - n_{R0}) - \frac{i\pi}{\beta E_{CL}} \langle k_L \rangle \quad (4.49)$$

และจำนวนประจุเฉลี่ยที่ร่อยต่อการทะลุผ่านภายในเกาะโลหะทางขวา

$$\langle n_R \rangle = n_{R0} - \frac{E_{CM}}{E_{CR}} (\langle n_L \rangle - n_{L0}) - \frac{i\pi}{\beta E_{CR}} \langle k_R \rangle \quad (4.50)$$

โดยค่าเฉลี่ยของตัวเลขไวน์ดิงในเกาะโลหะทางซ้ายและทางขวานิยามตามสมการ

$$\langle k_i \rangle = \frac{1}{Z} \oint D[\xi, \mathbf{k}] \sum_{k_i=-\infty}^{\infty} k_i e^{-S_{eff}[\xi, \mathbf{k}]} \cos(2\pi(k_L n_{L0} + k_R n_{R0})) \quad (4.51)$$

โดยที่ $i \in \{L, R\}$ เมื่อนำสมการ (4.50) แทนลงในสมการ (4.49) สมการของจำนวนประจุเฉลี่ยที่ร่อยต่อการทะลุผ่านภายในเกาะโลหะทางซ้ายสามารถเขียนได้เป็น

$$\langle n_L \rangle = n_{L0} - \frac{i\pi}{\beta} \left(\frac{E_{CR}}{E_{CL}E_{CR} - E_{CM}^2} \langle k_L \rangle - \frac{E_{CM}}{E_{CL}E_{CR} - E_{CM}^2} \langle k_R \rangle \right) \quad (4.52)$$

ในทำนองเดียวกันเมื่อนำสมการ (4.49) แทนลงในสมการ (4.50) สามารถเขียนสมการของจำนวนประจุเฉลี่ยที่ร่อยต่อการทะลุผ่านภายในเกาะโลหะในเกาะโลหะทางขวาได้เป็น

$$\langle n_R \rangle = n_{R0} - \frac{i\pi}{\beta} \left(\frac{E_{CL}}{E_{CL}E_{CR} - E_{CM}^2} \langle k_R \rangle - \frac{E_{CM}}{E_{CL}E_{CR} - E_{CM}^2} \langle k_L \rangle \right) \quad (4.53)$$

จากค่า E_{CL} , E_{CM} และ E_{CR} ซึ่งนิยามตามสมการ (2.34) (2.35) และ (2.36) ตามลำดับ เมื่อนำมาแทนในสมการ (4.52) และ (4.53) จำนวนประจุเฉลี่ยที่ร่อยต่อการทะลุผ่านภายในเกาะโลหะทางซ้ายและทางขวาสามารถเขียนได้ดังสมการ

$$\langle n_L \rangle = n_{L0} - \frac{4i\pi}{\beta E_C} (E_L \langle k_L \rangle - E_M \langle k_R \rangle) \quad (4.54)$$

$$\langle n_R \rangle = n_{R0} - \frac{4i\pi}{\beta E_C} (E_R \langle k_R \rangle - E_M \langle k_L \rangle) \quad (4.55)$$

โดยที่ $E_L = C_{\Sigma L} E_C / 2e^2$, $E_R = C_{\Sigma R} E_C / 2e^2$ และ $E_M = C_M E_C / 2e^2$ ทำให้ค่าคาดหวังผลรวมของจำนวนประจุเฉลี่ยที่ร่อยต่อการทะลุผ่านภายในเกาะโลหะทางซ้ายและทางขวามีค่าตามสมการ

$$\langle n_T \rangle = \left(n_{L0} - \frac{4i\pi}{\beta E_C} (E_L \langle k_L \rangle - E_M \langle k_R \rangle) \right) + \left(n_{R0} - \frac{4i\pi}{\beta E_C} (E_R \langle k_R \rangle - E_M \langle k_L \rangle) \right) \quad (4.56)$$

ดังนั้น เมื่อนำสมการ (4.56) แทนในสมการ (4.43) พลังงานการเพิ่มประจุยังผลของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวสามารถคำนวณได้ดังสมการ

$$\frac{E_C^*}{E_C} = 2 - \nabla \left[\left(n_{L0} - \frac{4i\pi}{\beta E_C} (E_L \langle k_L \rangle - E_M \langle k_R \rangle) \right) + \left(n_{R0} - \frac{4i\pi}{\beta E_C} (E_R \langle k_R \rangle - E_M \langle k_L \rangle) \right) \right] \bigg|_{n_{L0}, n_{R0}=0} \quad (4.57)$$

จากค่าเฉลี่ยของตัวเลขไว้นัดังในเกาะโลหะทางซ้ายและเกาะโลหะทางขวาในสมการ (4.51) เมื่อนำมาแทนในสมการ (4.57) พบว่า พลังงานการเพิ่มประจุยังผลของปั๊มอิเล็กตรอนเดียวนั้นมีค่าเป็นไปตามสมการ

$$\frac{E_C^*}{E_C} = \frac{8\pi^2}{\beta E_C} \left(\langle k_L^2 \rangle (E_L - E_M) + \langle k_R^2 \rangle (E_R - E_M) + \langle k_L k_R \rangle (E_L + E_R - 2E_M) \right) \bigg|_{n_{L0}, n_{R0}=0} \quad (4.58)$$

โดยที่

$$\langle k_i k_j \rangle = \frac{1}{Z} \oint D[\xi, \mathbf{k}] \sum_{k_i=-\infty}^{\infty} k_i k_j e^{-S_{eff}[\xi, \mathbf{k}]} \cos(2\pi(k_L n_{i0} + k_R n_{R0})) \quad (4.59)$$

เมื่อ $i, j \in \{L, R\}$

เมื่อพิจารณา สมการ (4.59) พบว่า มีรูปแบบสมการคล้ายกับสมการ (4.20) ซึ่งไม่สามารถหาค่าปริพันธ์ได้โดยตรง เนื่องจากอีกชั้นของระบบไม่อยู่ในรูปของเกาส์เซียน (Gaussian's form) ทำให้สมการ (4.20) ถูกแปลงให้อยู่ในรูปที่เหมาะสมสำหรับการประมวลผลด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลได้ดังสมการ (4.41) ในทำนองเดียวกัน ค่าเฉลี่ยของผลคูณตัวเลขไว้นัดังในสมการ (4.59) จึงถูกแปลงได้ดังสมการ

$$\langle k_i k_j \rangle = \frac{\sum_{\xi, \mathbf{k}} k_i k_j \cos(2\pi(k_L n_{i0L} + k_R n_{i0R}))}{\sum_{\xi, \mathbf{k}} \cos(2\pi(k_L n_{i0L} + k_R n_{i0R}))} \quad (4.60)$$

ดังนั้น ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของปั๊มอิเล็กตรอนเดียวในสมการ (4.58) สามารถเขียนใหม่ได้เป็น

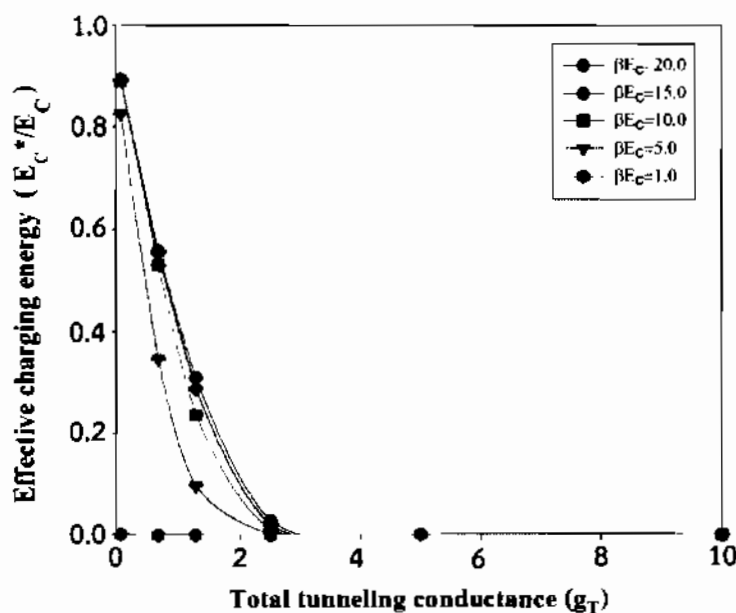
$$\begin{aligned} \frac{E_C^*}{E_C} = & \frac{8\pi^2}{\beta E_C} \frac{\sum_{\xi, \mathbf{k}} k_L^2 \cos(2\pi(k_L n_{0L} + k_R n_{0R}))}{\sum_{\xi, \mathbf{k}} \cos(2\pi(k_L n_{0L} + k_R n_{0R}))} (E_L - E_M) \\ & + \frac{8\pi^2}{\beta E_C} \frac{\sum_{\xi, \mathbf{k}} k_R^2 \cos(2\pi(k_L n_{0L} + k_R n_{0R}))}{\sum_{\xi, \mathbf{k}} \cos(2\pi(k_L n_{0L} + k_R n_{0R}))} (E_R - E_M) \\ & + \frac{8\pi^2}{\beta E_C} \frac{\sum_{\xi, \mathbf{k}} k_L k_R \cos(2\pi(k_L n_{0L} + k_R n_{0R}))}{\sum_{\xi, \mathbf{k}} \cos(2\pi(k_L n_{0L} + k_R n_{0R}))} (E_L + E_R - 2E_M) \end{aligned} \quad (4.61)$$

โดยที่ $\xi, \mathbf{k}$ เป็นตัวแปรที่ถูกสุ่มด้วยระเบียบวิธีของเมโทรโพลิส โดยใช้ฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น $p(\xi, \mathbf{k}) \propto \exp[-S_{eff}[\xi, \mathbf{k}]]$ ในการสุ่มตัวแปรดังกล่าว จากค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลใน

สมการ (4.61) เมื่อนำไปประมวลผลด้วยวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล ผลการคำนวณที่ได้จะกล่าวในหัวข้อต่อไป

4.3 ผลการคำนวณและอภิปรายผล

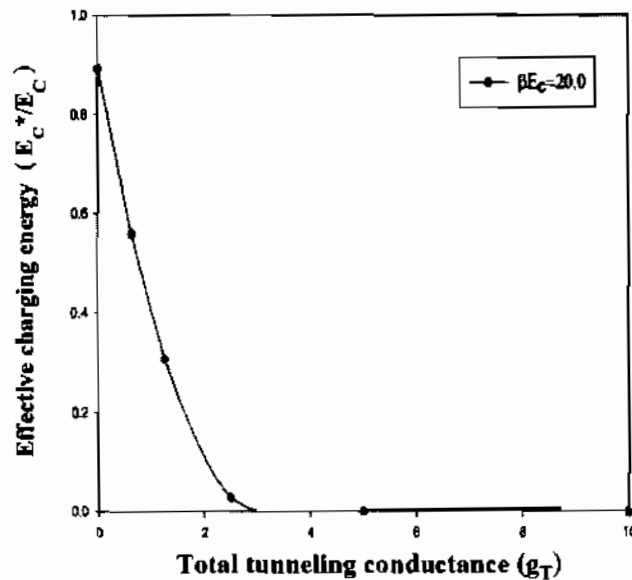
จากที่ได้กล่าวถึงวิธีการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลในหัวข้อ 4.2 เพื่อจำลองการทำงานของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยว ทำให้ได้ผลการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวที่ค่าอัตราส่วนระหว่างพลังงานการเพิ่มประจุต่อพลังงานความร้อนเฉลี่ย (βE_C) อยู่ในช่วง 1 ถึง 20 ดังแสดงในภาพประกอบ 4.1



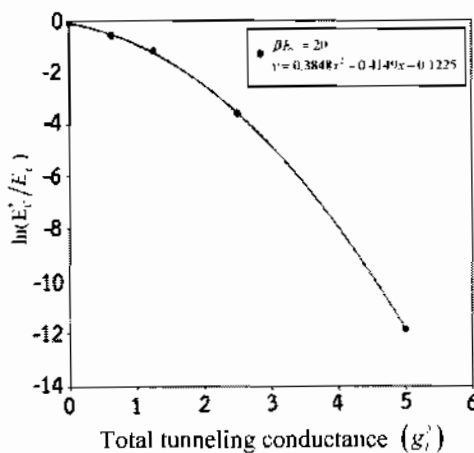
ภาพประกอบ 4.1 ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวที่ได้จากการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลในกรณีที่ค่าอัตราส่วนระหว่างพลังงานการเพิ่มประจุต่อพลังงานความร้อนเฉลี่ย (βE_C) อยู่ในช่วง 1 ถึง 20

จากผลการจำลองในภาพประกอบ 4.1 เมื่อพิจารณาความสัมพันธ์ระหว่างค่าความนำไฟฟ้ารวม (g_T) และค่าสัดส่วนพลังงานการเพิ่มประจุยังผลต่อพลังงานการเพิ่มประจุ (E_C^*/E_C) ในกรณีที่อัตราส่วนระหว่างพลังงานการเพิ่มประจุต่อพลังงานความร้อนเฉลี่ย $\beta E_C = 20$ ในภาพประกอบ 4.2 ซึ่งเป็นกรณีศึกษาที่ยกขึ้นมาเพื่ออธิบายวิธีการสร้างความสัมพันธ์ของกราฟที่ไม่เป็นเชิงเส้น จากภาพประกอบ 4.2 พบว่า เมื่อค่า g_T มีค่าเพิ่มขึ้น ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าลดลงในลักษณะเอกซ์โพเนนเชียล เมื่อพิจารณาการเปลี่ยนแปลงดังกล่าวจากกราฟความสัมพันธ์ระหว่าง $\ln(E_C^*/E_C)$ และ g_T ในภาพประกอบ 4.3 (a) พบว่า กราฟที่ได้มีลักษณะไม่เป็นเชิงเส้น แต่มีลักษณะของฟังก์ชัน

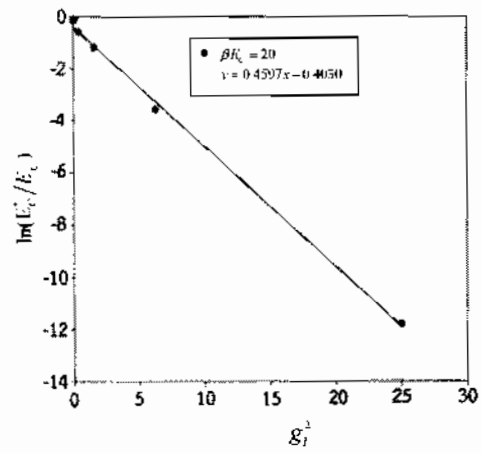
พาราโบลาคว่ำ แสดงให้เห็นว่า ความสัมพันธ์ระหว่าง E_C^* และ g_T ไม่อยู่ในรูปแบบฟังก์ชันเอกซ์โพเนนเชียลมาตรฐาน ดังนั้น เพื่อแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง E_C^* และ g_T ในลักษณะที่เป็นแบบเชิงเส้น จึงได้ปรับเปลี่ยนแกนนอนจากตัวแปร g_T เป็น g_T^2 ทำให้ได้กราฟดังภาพประกอบ 4.3 (b)



ภาพประกอบ 4.2 ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวที่ได้จากการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลในกรณีที่มีค่าอัตราส่วนระหว่างพลังงานการเพิ่มประจุต่อพลังงานความร้อนเฉลี่ย $\beta E_C = 20$



(a)



(b)

ภาพประกอบ 4.3 (a) ความสัมพันธ์ระหว่าง $\ln(E_C^*/E_C)$ กับค่าความนำไฟฟ้ารวม (g_T) ของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวที่ $\beta E_C = 20$ และ (b) ความสัมพันธ์ระหว่าง $\ln(E_C^*/E_C)$ กับค่าความนำไฟฟ้ารวมยกกำลังสอง (g_T^2) ของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวเมื่อ $\beta E_C = 20$

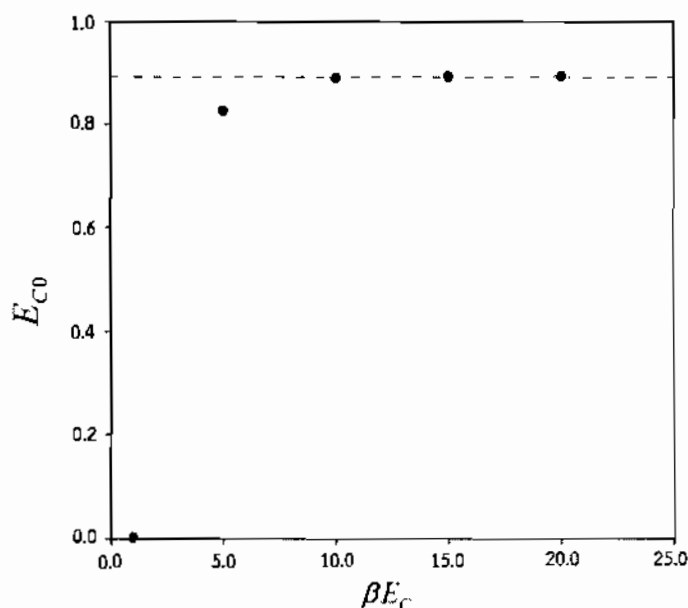
จากภาพประกอบ 4.3 (b) เมื่อนำสมการเส้นตรงที่ได้มาหาความสัมพันธ์ระหว่าง E_C^*/E_C และ g_T^2 จะได้ดังสมการ

$$\frac{E_C^*}{E_C} = E_{C0} e^{-\alpha g_T^2} \quad (4.62)$$

โดยที่ E_{C0} คือ ค่าสัมประสิทธิ์พลังงานที่คำนวณจาก $E_{C0} = e^{-C}$ เมื่อ C คือ จุดตัดแกนในแนวดิ่ง และมีค่าสัมประสิทธิ์พลังงาน E_{C0} ที่อุณหภูมิต่างๆ แสดงในตาราง 4.1 และ α คือ ค่าความชันของกราฟเส้นตรงระหว่าง $\ln(E_C^*/E_C)$ และ g_T^2

ตาราง 4.1 ค่าสัมประสิทธิ์พลังงานในกรณีที่ค่า βE_C อยู่ในช่วง 1 ถึง 20

อัตราส่วนพลังงานการเพิ่มประจุต่อ พลังงานความร้อนเฉลี่ย (βE_C)	อุณหภูมิ $T(mK)$	ค่าสัมประสิทธิ์พลังงาน (E_{C0})
20	106.7	0.89290
15	142.3	0.89290
10	213.4	0.89070
5	426.8	0.82570
1	2133.9	0.00194



ภาพประกอบ 4.4 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัมประสิทธิ์พลังงานกับค่าอัตราส่วนระหว่างพลังงานการเพิ่มประจุต่อพลังงานความร้อนเฉลี่ย (βE_C) ในช่วง 1 ถึง 20 กรณีที่ค่าความนำไฟฟ้ารวมเป็นศูนย์ ($g_I = 0$)

ความสัมพันธ์ระหว่าง E_C^*/E_C และ g_T^2 ในสมการที่ (4.62) มีองค์ประกอบหลัก 2 ส่วน คือ ส่วนที่เป็นค่าสัมประสิทธิ์พลังงาน (E_{C0}) และส่วนที่เป็นฟังก์ชันเอกซ์โพเนนเชียล ($\exp[-\alpha g_T^2]$) เพื่อศึกษาความหมายทางกายภาพขององค์ประกอบเหล่านี้ จึงแยกวิเคราะห์ที่ละองค์ประกอบ ซึ่งทำให้สามารถแสดงความหมายทางกายภาพของพารามิเตอร์แต่ละตัวต่อปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นภายใน บัมอเล็กตรอนเดี่ยวได้อย่างเด่นชัด

4.3.1 การวิเคราะห์ค่าสัมประสิทธิ์พลังงาน E_{C0}

ในการวิเคราะห์องค์ประกอบส่วนที่เป็นค่าสัมประสิทธิ์พลังงาน พิจารณาในกรณีที่ค่าความนำไฟฟ้ารวมมีค่าเป็นศูนย์ ($g_T = 0$) ซึ่งจะส่งผลให้ฟังก์ชันเอกซ์โพเนนเชียลมีค่าเท่ากับหนึ่ง ดังนั้น สมการ (4.62) จึงสามารถเขียนใหม่ได้ดังสมการ

$$E_{C0} = \frac{E_C^*}{E_C} \quad (4.63)$$

จากการศึกษาค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของกล่องอเล็กตรอนเดี่ยวในหัวข้อที่ 2.1 ซึ่งเป็นกรณีที่ค่าความนำไฟฟ้ารวมเท่ากับศูนย์ ($g_T = 0$) ค่า $E_C^* = E_C$ กล่าวคือ ค่าสัมประสิทธิ์พลังงาน $E_{C0} = 1$ ซึ่งแสดงให้เห็นว่า อเล็กตรอนไม่สามารถทะลุผ่านรอยต่อการทะลุผ่านเข้าไปยังเกาะโลหะของ บัมอเล็กตรอนเดี่ยวได้ แต่อย่างไรก็ตาม จากผลการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของ บัมอเล็กตรอนเดี่ยว พบว่า ค่า $E_C^* \approx 0.89E_C$ กล่าวคือ ค่าสัมประสิทธิ์พลังงาน $E_{C0} \approx 0.89$ ซึ่งมีค่าน้อยกว่า 1 อาจเกิดจากการรบกวนกันระหว่างฟังก์ชันคลื่นของอเล็กตรอนในเกาะโลหะทั้งสองเกาะ โดยปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นมีลักษณะคล้ายกับการเกิดพันธะโควาเลนต์ [21] กล่าวคือ เกาะโลหะขนาดเล็กเหล่านี้จะมีลักษณะสมบัติทางพลังงานใกล้เคียงกับอะตอม จึงถูกเรียกว่า อะตอมประดิษฐ์ (artificial atoms) [21] เมื่อเกาะโลหะเหล่านี้อยู่ใกล้กัน จึงเกิดการรวมกันของระดับพลังงานของอเล็กตรอนแล้วเกิดระดับพลังงานใหม่ภายในระบบบัมอเล็กตรอนเดี่ยว ได้แก่ ระดับพลังงานที่ลดต่ำลง ซึ่งเสมือนเป็นระดับพลังงานที่ทำให้เกิดพันธะโควาเลนต์ (covalence-like bonding states) และระดับพลังงานที่สูงขึ้น ซึ่งเสมือนเป็นระดับพลังงานที่ทำให้เกิดการสลายพันธะโควาเลนต์ (covalence-like antibonding states) ในกรณีของบัมอเล็กตรอนเดี่ยว เมื่อเกาะโลหะอยู่ใกล้กันระดับพลังงานมีการเปลี่ยนแปลง ทำให้ระดับพลังงานของสถานะว่างบางสถานะมีค่าต่ำกว่าระดับพลังงานของสถานะว่างภายในเกาะโลหะที่อยู่โดดเดี่ยว ค่าสัมประสิทธิ์พลังงาน E_{C0} จึงมีค่าน้อยกว่า 1

จากข้อมูลที่ได้จากการจำลองการทำงานของบัมอเล็กตรอนเดี่ยวด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ในภาพประกอบ 4.1 สามารถสร้างความสัมพันธ์ตามสมการ (4.63) ที่ค่าอัตราส่วนระหว่างพลังงานการเพิ่มประจุต่อพลังงานความร้อนเฉลี่ย (βE_C) อยู่ในช่วง 1 ถึง 20 ทำให้ได้ค่า

สัมประสิทธิ์พลังงาน (E_{c0}) ดังแสดงในตาราง 4.1 และสามารถเขียนกราฟความสัมพันธ์ได้ดังภาพประกอบ 4.4 ซึ่งพบว่า เมื่อค่า $\beta E_c > 10$ เส้นกราฟของค่าสัมประสิทธิ์พลังงาน (E_{c0}) มีลักษณะขนานกับแกนของอัตราส่วนระหว่างพลังงานการเพิ่มประจุต่อพลังงานความร้อนเฉลี่ย (βE_c) แสดงให้เห็นว่า ค่าสัมประสิทธิ์พลังงานที่อยู่ในช่วงนี้ไม่ขึ้นกับค่าอุณหภูมิ อันเป็นผลจาก ในช่วงอุณหภูมิดังกล่าว พลังงานความร้อนมีค่าต่ำ ($T < 0.25K$ หรือ $\beta E_c > 10$) พลังงานเฉลี่ยของอิเล็กตรอนที่เกิดจากความร้อนมีค่าน้อยจนสามารถละเลยได้เมื่อเทียบกับพลังงานการเพิ่มประจุ ทำให้ค่าสัมประสิทธิ์พลังงาน (E_{c0}) มีค่าประมาณคงที่ที่ 0.89 กล่าวคือ ไม่ขึ้นกับค่าอุณหภูมิ แต่อย่างไรก็ตาม เมื่อค่า $\beta E_c < 10$ พบว่า ค่าสัมประสิทธิ์พลังงาน (E_{c0}) มีค่าลดลงเมื่ออุณหภูมิมีค่าเพิ่มขึ้น ในช่วงนี้อุณหภูมิมีค่าสูง ($T > 0.25K$) ทำให้พลังงานเฉลี่ยของอิเล็กตรอนที่เกิดจากความร้อนมีค่าสูงเพียงพอที่จะทำให้การกีดขวางทางความร้อนส่งผลให้อิเล็กตรอนสามารถทะลุเข้าไปยังเกาะโลหะ ดังนั้น เมื่ออุณหภูมิมีค่าสูงขึ้นจึงทำให้ค่าสัมประสิทธิ์พลังงาน (E_{c0}) ลดลงและเข้าสู่ศูนย์ ($E_c / E_c \rightarrow 0$) นั่นคือ ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล (E_c^*) จะเข้าสู่ศูนย์ และสะท้อนถึงการที่ปรากฏการณ์การขัดขวางแบบโคลอมบ์ถูกทำลายลงด้วยการกีดขวางทางความร้อน

4.3.2 การวิเคราะห์พจน์เอกซ์โพเนนเชียล

ในการวิเคราะห์องค์ประกอบที่เป็นฟังก์ชันเอกซ์โพเนนเชียล ในกรณีนี้พิจารณาให้ค่าสัมประสิทธิ์พลังงาน (E_{c0}) เป็นค่าคงที่ จากสมการ (4.62) พบว่า ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล $E_c^* / E_c \propto \exp[-\alpha g_T^2]$ ซึ่งมีค่าขึ้นกับค่าพารามิเตอร์ g_T และ α โดยที่ค่าความนำไฟฟ้ารวม (g_T) เป็นค่าผลรวมของค่าความนำไฟฟ้าที่รอยต่อการทะลุผ่านทั้งสามรอยต่อภายในปมอิเล็กตรอนเดี่ยว ค่าความนำไฟฟ้าเหล่านี้จะขึ้นกับลักษณะโครงสร้างทางกายภาพของปมอิเล็กตรอนเดี่ยว เช่น ความหนา ขนาดของรอยต่อ และชนิดของออกไซด์ ดังนั้น ค่าพารามิเตอร์ g_T จึงเสมือนเป็นผลรวมอิทธิพลจากโครงสร้างและลักษณะทางกายภาพของปมอิเล็กตรอนเดี่ยว จากผลการคำนวณสามารถแสดงอิทธิพลของค่าพารามิเตอร์ g_T ดังภาพประกอบ 4.2 พบว่า เมื่อค่าความนำไฟฟ้ารวมมีค่าเพิ่มขึ้น ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลจะมีค่าลดลงอย่างรวดเร็ว โดยในช่วงที่ค่าความนำไฟฟ้ารวมมีค่ามากกว่า 3 ($g_T > 3$) กล่าวอีกนัยหนึ่งได้ว่า ค่าความนำไฟฟ้าของการทะลุผ่าน (G_T) มีค่ามากกว่า 3 เท่าของค่าความนำไฟฟ้าทางควอนตัม (G_K) กล่าวคือ $G_T > 3G_K$ จะทำให้โอกาสที่อิเล็กตรอนจะทะลุผ่านรอยต่อการทะลุผ่านมีค่าเพิ่มขึ้น เนื่องจากการเพิ่มค่าความนำไฟฟ้ารวมจะทำให้ความหนาของกำแพงศักย์ที่รอยต่อการทะลุผ่านมีค่าลดลงจนไม่สามารถกั้นอิเล็กตรอนไว้ได้ อิเล็กตรอนจึงสามารถเคลื่อนที่ทะลุผ่านจากขั้วซอร์สไปยังขั้วเดรนได้โดยไม่ต้องใช้พลังงานกระตุ้นจากภายนอก ในกรณีนี้

ระบบไม่สามารถสังเกตพบปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูมอมบี้ได้ ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล E_C^* จึงมีค่าเท่ากับศูนย์ บั้มิอิเล็กตรอนเดี่ยวจึงสูญเสียความสามารถในการควบคุมอิเล็กตรอนที่ละ 1 ตัว

สำหรับค่าพารามิเตอร์ α ซึ่งเป็นค่าความชันของกราฟระหว่าง $\ln(E_C^*/E_C)$ และ g_T^2 มีค่าดังตาราง 4.2

ตาราง 4.2 ความชันของกราฟระหว่าง $\ln(E_C^*/E_C)$ กับค่าความนำไฟฟ้ารวมยกกำลังสอง (g_T^2) ในกรณีที่ βE_C อยู่ในช่วง 1 ถึง 20

อัตราส่วนพลังงานการเพิ่มประจุต่อ พลังงานความร้อนเฉลี่ย (βE_C)	อุณหภูมิ $T(mK)$	ความชันของกราฟ α
20	106.7	0.11
15	142.3	0.11
10	213.4	0.11
5	426.8	0.19
1	2133.9	6.25

จากผลการจำลองในตาราง 4.2 พบว่า ความชันของกราฟ (α) มีลักษณะการเปลี่ยนแปลงตามค่าอุณหภูมิดังตารางที่ 4.2 กล่าวคือ เมื่ออัตราส่วนระหว่างพลังงานการเพิ่มประจุต่อพลังงานเฉลี่ย $\beta E_C > 10$ ค่าพารามิเตอร์ α มีค่าคงที่ที่ 0.11 เนื่องจากค่า α เป็นสัมประสิทธิ์ของพจน์ g_T^2 ในช่วงนี้ อุณหภูมิไม่ส่งผลต่ออิทธิพลของโครงสร้างทางกายภาพของบั้มิอิเล็กตรอนเดี่ยว ในขณะที่เมื่อค่า $\beta E_C < 10$ ค่าความชันของกราฟ α จะมีค่าเพิ่มขึ้นจึงทำให้พจน์ αg_T^2 มีค่าเพิ่มขึ้น ดังนั้น พจน์ฟังก์ชันเอกซ์โพเนนเชียลจึงมีค่าลดลงอย่างรวดเร็ว แสดงให้เห็นว่า ในช่วงนี้ อุณหภูมิได้ส่งผลต่ออิทธิพลเชิงโครงสร้างทางกายภาพของบั้มิอิเล็กตรอนเดี่ยว ดังนั้น ค่า α จึงเป็นพารามิเตอร์ที่กำหนดขนาดของอิทธิพลเชิงโครงสร้างทางกายภาพของบั้มิอิเล็กตรอนเดี่ยวต่อค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล

บทที่ 5

ค่าความนำไฟฟ้าของป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว

ปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ที่เกิดในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวสามารถศึกษาได้จากการเปลี่ยนแปลงแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิดแล้วสังเกตการเปลี่ยนแปลงค่าความนำไฟฟ้าของระบบ ดังที่กล่าวไว้ในบทที่ 2 ดังนั้น เพื่อศึกษาปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ที่เกิดขึ้นในป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ในโครงงานนี้ จึงได้คำนวณค่าความนำไฟฟ้าของป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวเมื่อจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิดทั้ง 2 ขั้ว มีค่าเปลี่ยนแปลงไป โดยการประยุกต์ใช้วิธีการของวอลล์สเซอร์และคณะ [6] ที่ใช้ในการคำนวณค่าความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ซึ่งผลการคำนวณดังกล่าวสามารถอธิบายผลการทดลองได้อย่างถูกต้อง นอกจากนั้น วิธีการคำนวณดังกล่าวยังได้ถูกประยุกต์ใช้ในการคำนวณค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดและต่ำสุดของป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวเพื่อเปรียบเทียบกับผลการทดลองจริง [19] แต่อย่างไรก็ตาม งานวิจัยดังกล่าวได้คำนวณค่าความนำไฟฟ้าเฉพาะจุดสูงสุดและต่ำสุด ทำให้ไม่สามารถแสดงปรากฏการณ์การแกว่งกวัดของคูลอมบ์ได้อย่างชัดเจน ดังนั้น ในโครงงานนี้จึงมีวัตถุประสงค์เพื่อศึกษาปรากฏการณ์การแกว่งกวัดของคูลอมบ์ โดยการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันด้วยวิธีการคอนตัมมอนติคาร์โล จากนั้นนำค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันที่ได้ไปคำนวณค่าความนำไฟฟ้าโดยใช้วิธีซิงกูลาร์แวลูดีคอมโพสิชัน (singular-value decomposition method) [15,19] ซึ่งผลการคำนวณค่าความนำไฟฟ้าจะถูกนำไปอธิบายปรากฏการณ์การแกว่งกวัดของคูลอมบ์โดยการคำนวณทั้งหมดใช้ค่าพารามิเตอร์จากรายงานผลการทดลองป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวของลิมบซ์และคณะ [7]

5.1 พารามิเตอร์

โครงสร้างของป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวสามารถแสดงด้วยวงจรสมมูลดังภาพประกอบ 2.7 แต่ในทางปฏิบัติการควบคุมการสร้างชั้นออกไซด์และชั้นฟิล์มบางทำได้ยากจึงทำให้ไม่สามารถสร้างป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวให้มีโครงสร้างที่สมมาตรได้ ความแปรปรวนที่เกิดขึ้นกับชั้นออกไซด์และชั้นฟิล์มบางของโลหะภายในโครงสร้างของป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวจะส่งผลอย่างมีนัยสำคัญต่อคุณสมบัติทางกายภาพของป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว รวมถึงจะส่งผลต่อค่าความนำไฟฟ้าและความจุไฟฟ้าของระบบ ดังนั้น ในการจำลองการทำงานของอุปกรณ์นี้ที่อุณหภูมิค่าต่างๆ จึงใช้ค่าพารามิเตอร์ที่แสดงไว้ในตาราง 2.1 จากผลการทดลองของลิมบซ์ที่ค่า $g_L = 0.52$ และ $g_R = 0.83$ เมื่อพิจารณาความสัมพันธ์ $g \propto d^{-1}$ โดยที่ d หมายถึง ขนาดความกว้างของรอยต่อการทะลุผ่าน โดยการประมาณว่าพื้นที่หน้าตัดของรอยต่อทั้งสองมีขนาดเท่ากัน ซึ่งแสดงให้เห็นว่า รอยต่อการทะลุผ่านทางซ้ายมีระยะห่างมากกว่ารอยต่อการทะลุผ่านทางขวา นอกจากนี้ ขนาดของตัวเก็บประจุที่รอยต่อทางซ้ายมี

ขนาด $C_L = 181 aF$ และขนาดของตัวเก็บประจุที่รอยต่อทางขวามีขนาด $C_R = 236 aF$ เมื่อพิจารณาว่าระบบเป็นแผ่นตัวนำคู่ขนาน ค่าความจุไฟฟ้าสามารถประมาณได้จากความสัมพันธ์ $C \propto d^{-1}$ ดังนั้น รอยต่อการทะลุผ่าน C_L จึงมีระยะห่างมากกว่ารอยต่อการทะลุผ่าน C_R จากการพิจารณาขนาดของตัวเก็บประจุได้ผลลัพธ์ที่สอดคล้องกับผลการวัดค่าความนำไฟฟ้า แสดงให้เห็นว่า โครงสร้างของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวที่ลิบซ์สร้างขึ้นมีความไม่สมมาตร ดังนั้น ในการคำนวณค่าความนำไฟฟ้าเพื่อเปรียบเทียบกับผลการทดลองของลิบซ์จำเป็นต้องใช้ค่าพารามิเตอร์ของโครงสร้างที่ไม่สมมาตร โดยความไม่สมมาตรดังกล่าวอาจส่งผลต่อค่าความนำไฟฟ้าของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งจะได้ศึกษาผลที่เกิดขึ้นในหัวข้อต่อไป

ในการจำลองการทำงานด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล เพื่อให้สามารถคำนวณค่าความนำไฟฟ้าของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวได้อย่างแม่นยำจึงใช้ค่าพารามิเตอร์ดังต่อไปนี้

1) อุณหภูมิ (T) ของระบบ ในโครงงานนี้พิจารณาที่ $T \in \{0.25, 0.30, 0.40, 2.00\} K$ เพื่อให้สอดคล้องกับการทดลองของลิบซ์และเพื่อความสะดวกในการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลจึงได้แปลงค่าพารามิเตอร์ T ให้เป็นค่าพารามิเตอร์ส่วนกลับของอุณหภูมิ (β) และถูกเขียนใหม่เป็นพารามิเตอร์ βE_c ซึ่ง $\beta E_c \in \{8.535, 7.113, 5.334, 1.066\}$ โดยในโครงงานนี้กำหนดให้พลังงานการเพิ่มประจุ $E_c = 0.184 meV$ [19]

2) ค่าความนำไฟฟ้าของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวที่อุณหภูมิสูงนิยามจาก $G_0^{-1} = \sum_{j \in \{L, M, R\}} G_j^{-1}$ เมื่อกำหนดให้ $G_j = g_j G_K$ และค่าความนำไฟฟ้าทางควอนตัม $G_K = e^2 / h$

3) ค่าแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทางซ้าย (V_{gL}) และทางขวา (V_{gR}) ถูกแปลงให้เป็นจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตเพื่อความสะดวกในการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ที่ไม่มีหน่วยดังสมการ (3.28) เนื่องจากบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวประกอบด้วยขั้วเกต 2 ขั้ว ดังนั้น จึงได้กำหนดพารามิเตอร์จำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตรวม คือ $n_x = n_{l0} + n_{r0}$ และแบ่งการคำนวณเป็น 2 กรณี คือ

กรณีที่ 1 $n_x = [0, 2]$ เมื่อ n_{l0} และ n_{r0} อยู่ในช่วง $[0, 1]$

กรณีที่ 2 $n_x = [0, 1]$ เมื่อ n_{l0} และ n_{r0} อยู่ในช่วง $[0, 0.5]$

โดย n_{l0} และ n_{r0} แต่ละกรณีได้ถูกแบ่งออกเป็น 10 ช่วงเท่าๆ กัน

4) ช่วงเวลาจินตภาพ $\tau \in (0, \beta E_c)$ ถูกแบ่งออกเป็น 128 ส่วนเท่าๆ กัน กล่าวคือ ตัวเลขของทรอตเตอร์ $N = 128$ โดยค่าดังกล่าวถูกกำหนดเพื่อให้สอดคล้องกับการแปลงฟาสฟูเรียร์ (fast Fourier transform) [22]

5) โครงงานนี้ได้ใช้จำนวนตัวอย่างสุ่มในการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล $M = 100,000$ ตัวอย่าง

5.2 การคำนวณค่าคอร์รีเลชันฟังก์ชัน

ในการคำนวณค่าความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวจำเป็นต้องคำนวณค่าคอร์รีเลชันฟังก์ชันเป็นลำดับแรก ดังแสดงไว้ในหัวข้อ 2.2.2 โดยค่าคอร์รีเลชันฟังก์ชันของปั๊มอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวนิยามได้ดังสมการ

$$C_{K,K'}(\tau) = \left\langle e^{2\pi i(\mathbf{n}_g \cdot \mathbf{k}^T)} H_{K\tau, K'\tau'}[\boldsymbol{\varphi}] \right\rangle \quad (5.1)$$

เมื่อกำหนดให้ $\mathbf{n}_g = (n_{L0}, n_{R0})$ และ $\mathbf{k} = (k_L, k_R)$ โดยที่

$$H_{\tau, \tau'}[\boldsymbol{\varphi}] = \mathfrak{I}_\tau[\boldsymbol{\varphi}] \mathfrak{I}_{\tau'}[\boldsymbol{\varphi}] - \mathfrak{I}_{\tau, \tau'}[\boldsymbol{\varphi}] \quad (5.2)$$

เมื่อ

$$\mathfrak{I}_\tau[\boldsymbol{\varphi}] = \sum_{K \in \{L, M, R\}} 2eg_K \int_0^\beta d\tau \alpha(\tau - \tau') \sin[\varphi_K(\tau) - \varphi_K(\tau')] \quad (5.3)$$

และ

$$\mathfrak{I}_{\tau, \tau'}[\boldsymbol{\varphi}] = \sum_{K, K' \in \{L, M, R\}} -2e\delta_{K, K'} g_K \alpha(\tau - \tau') \cos[\varphi_K(\tau) - \varphi_K(\tau')] \quad (5.4)$$

จากสมการ (5.2) พบว่า ค่าคอร์รีเลชันฟังก์ชันของปั๊มอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวประกอบด้วยผลบวกของสองพจน์เพื่อความสะดวกในการอ้างอิง สมการดังกล่าวถูกเขียนใหม่เป็นดังสมการ

$$C(\tau) \equiv C^{1st}(\tau) + C^{2nd}(\tau) \quad (5.5)$$

เมื่อ

$$C^{1st}(\tau - \tau') = \sum_{K \in \{L, M, R\}} \left\langle e^{2\pi i(\mathbf{n}_g \cdot \mathbf{k}^T)} \mathfrak{I}_K[\boldsymbol{\varphi}(\tau)] \mathfrak{I}_K[\boldsymbol{\varphi}(\tau')] \right\rangle \quad (5.6)$$

และ

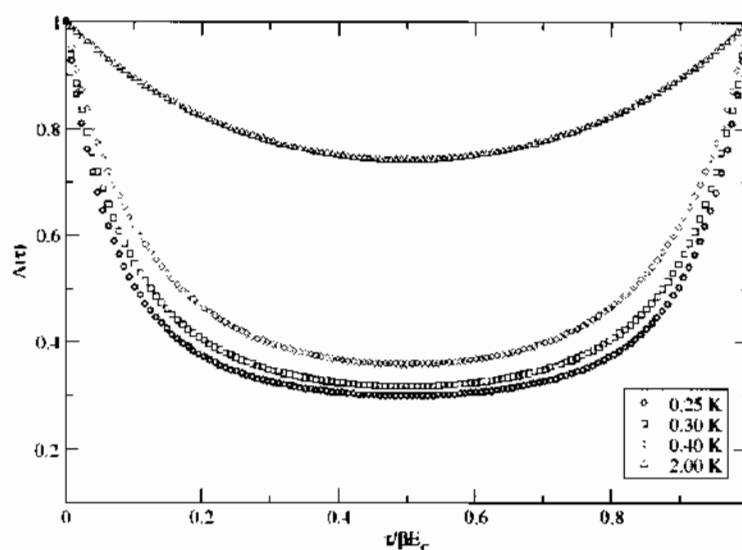
$$\begin{aligned} C^{2nd}(\tau - \tau') &= \sum_{K, K' \in \{L, M, R\}} \left\langle -2e\delta_{K, K'} g_K \alpha(\tau - \tau') \cos[\varphi_K(\tau) - \varphi_K(\tau')] e^{2\pi i(\mathbf{n}_g \cdot \mathbf{k}^T)} \right\rangle \\ &= 4\pi G_0 \alpha(\tau - \tau') A_{\tau, \tau'}[\boldsymbol{\varphi}] \end{aligned} \quad (5.7)$$

เมื่อ

$$\begin{aligned} A_{\tau, \tau'}[\boldsymbol{\varphi}] &= \frac{g_L}{g_I} \langle \cos[\varphi_L(\tau) - \varphi_L(\tau')] \rangle + \frac{g_R}{g_R} \langle \cos[\varphi_R(\tau) - \varphi_R(\tau')] \rangle \\ &\quad + \frac{g_M}{g_M} \langle \cos[\varphi_R(\tau) - \varphi_L(\tau) - \varphi_R(\tau') + \varphi_L(\tau')] \rangle \end{aligned} \quad (5.8)$$

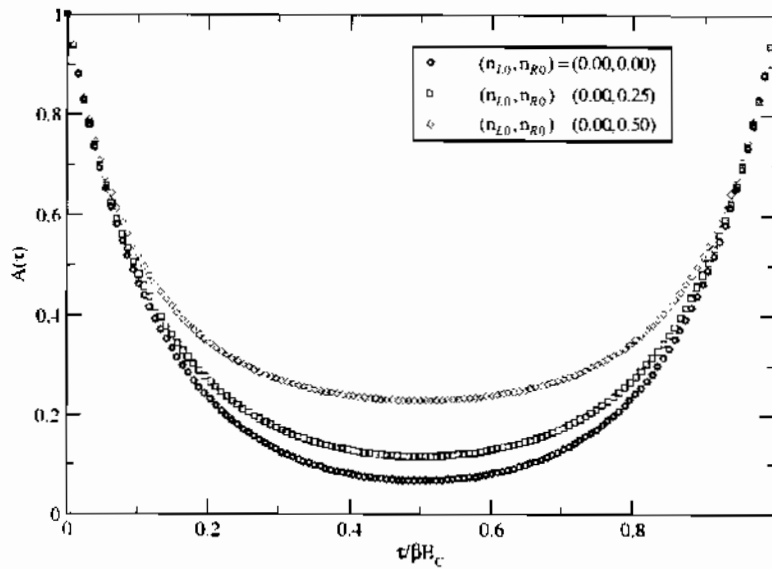
จากงานวิจัยของศรีวิไล [19] พบว่า พจน์ $C^{1st}(\tau)$ มีค่าเป็นศูนย์ทุกค่าอุณหภูมิ ดังนั้น ค่าคอร์รีเลชันฟังก์ชันของปั๊มอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวสามารถคำนวณได้จากพจน์ $C^{2nd}(\tau)$ ของสมการ (5.5) เท่านั้น ดังนั้น โครงงานนี้จึงได้ประยุกต์ใช้วิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลในการคำนวณค่าคาดหวังในสมการ (5.8) ซึ่งใช้โปรแกรมการคำนวณที่ศรีวิไล [19] พัฒนาขึ้นเพื่อใช้คำนวณค่าคอร์รีเลชันฟังก์ชันของปั๊มอิเล็กทรอนิกส์

เดียว โดยในโครงการนี้ ได้คำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันที่ค่า $n_{L0}, n_{R0} = [0, 1]$ เพื่อให้ช่วงการคำนวณสอดคล้องกับการเปลี่ยนแปลงจำนวนประจุที่เกิดขึ้นภายในเกาะโลหะตามการทดลองของลิบบ์ จากการคำนวณพบว่า เมื่อนำข้อมูลที่ได้นำไปคำนวณค่าความนำไฟฟ้า กราฟค่าความนำไฟฟ้ามีความสมมาตร โดยสามารถแบ่งได้ 2 ช่วง คือ $n_x = [0, 1]$ และ $n_x = [1, 2]$ ซึ่งรายละเอียดได้อธิบายไว้ในหัวข้อที่ 5.4 จากผลการคำนวณดังกล่าวทำให้สามารถลดช่วงการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันเป็น $n_{L0}, n_{R0} = [0, 0.5]$ โดยแต่ละค่าได้ถูกแบ่งออกเป็น 10 ช่วงเท่าๆกัน ดังนั้น ผลการคำนวณจึงมีค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันทั้งหมด 121 ค่าในแต่ละอุณหภูมิ โดยโครงการนี้ ทำการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวที่อุณหภูมิค่าต่างๆ ในช่วง $BE_C \in \{8.535, 7.113, 5.334, 1.066\}$ โดยตัวอย่างของค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันแสดงดังภาพประกอบ 5.1



ภาพประกอบ 5.1 ค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวที่อุณหภูมิค่าต่างๆ เมื่อจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิด $n_{L0} = 0.3$ และ $n_{R0} = 0.3$

จากงานวิจัยของบราวและคณะ [23] ได้แสดงให้เห็นว่าค่าความนำไฟฟ้าของอุปกรณ์อิเล็กตรอนเดี่ยวแปรผันตามค่าปริพันธ์ของคอร์ริเลชันฟังก์ชันตลอดช่วง 0 ถึง BE_C กล่าวคือ ถ้าค่าปริพันธ์มีค่ามากจะส่งผลให้ค่าความนำไฟฟ้ามีค่ามาก จากภาพประกอบ 5.1 พบว่า ในกรณีที่อุณหภูมิมีค่าลดลง จะทำให้ค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันมีค่าลดลง ดังนั้น สามารถอนุมานได้ว่า เมื่ออุณหภูมิลดต่ำลง ค่าความนำไฟฟ้าของระบบจะมีค่าลดต่ำลง นอกจากนั้น ในภาพประกอบ 5.2 ได้แสดงตัวอย่างค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันเมื่อจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิดทางขวา (n_{R0}) มีค่าเปลี่ยนแปลงไป 3 ค่า พบว่า เมื่อ n_{R0} มีค่าเพิ่มขึ้นค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันจะมีค่าเพิ่มขึ้น ซึ่งสามารถกล่าวได้ว่า ค่าความนำไฟฟ้ามีค่าเพิ่มขึ้นเมื่อแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิดมีค่าเพิ่มขึ้น แต่อย่างไรก็ตาม จากตัวอย่างของค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันเพียง 3 ค่า ยังไม่สามารถใช้กำหนดเงื่อนไขในการหาค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดได้ ซึ่งการกำหนดเงื่อนไขดังกล่าวจะได้อธิบายในหัวข้อ 5.4



ภาพประกอบ 5.2 ค่าคอร์รีเลชันฟังก์ชันที่อุณหภูมิ $T = 0.3 K$ ในกรณีที่จำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิด $n_{L0} = 0$ และ $n_{R0} \in \{0.00, 0.25, 0.50\}$

5.3 การคำนวณค่าสเปกตรัลฟังก์ชันแบบสมมาตร

จากทฤษฎีการตอบสนองแบบเชิงเส้น (linear response theory) [15] ที่ได้แสดงว่าค่าความนำไฟฟ้าขึ้นกับค่าสเปกตรัลฟังก์ชันซึ่งเป็นค่าฟูเรียร์ทรานฟอร์มของค่าคอร์รีเลชันฟังก์ชันในเวลาจริง (real time) แต่ในโครงงานนี้กรณีที่ค่าคอร์รีเลชันฟังก์ชันเป็นฟังก์ชันของเวลาจินตภาพ ในกรณีนี้ค่าสเปกตรัลฟังก์ชันแบบสมมาตรซึ่งสอดคล้องกับค่าคอร์รีเลชันฟังก์ชันในเวลาจินตภาพสามารถคำนวณได้จากความสัมพันธ์ดังสมการ [19]

$$A(\tau) = \int_0^\infty d\omega \frac{\omega \cosh\left(\left[\frac{1}{2}\beta E_C - \tau\right]\omega\right)}{2\pi \sinh\left(\frac{1}{2}\beta E_C \omega\right)} \tilde{A}^*(\omega) \quad (5.9)$$

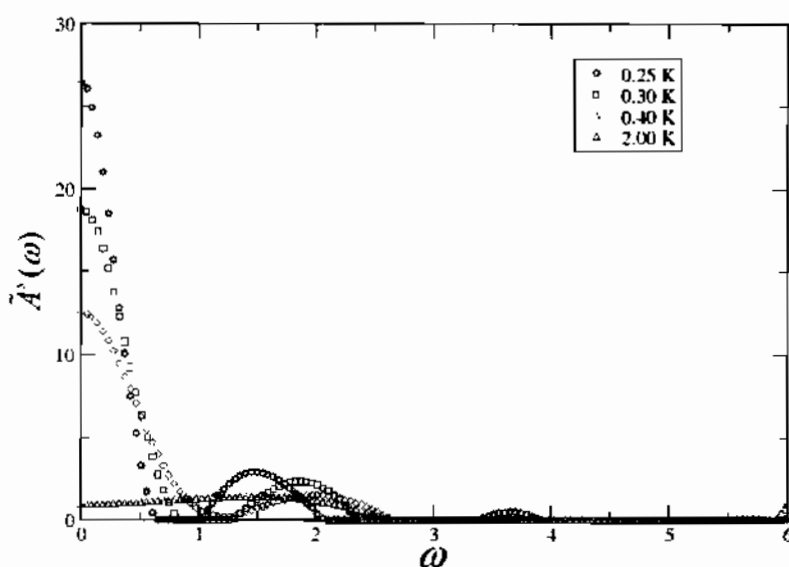
ค่าคอร์รีเลชันฟังก์ชันสามารถคำนวณได้ด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลจากสมการ (5.8) ในขณะที่การคำนวณค่าสเปกตรัลฟังก์ชันแบบสมมาตรในสมการ (5.9) สามารถทำได้ด้วยการแก้ปัญหาแบบผกผัน (inverse problem) โดยเริ่มจากการใช้ผลรวมของรีมันน์แปลงสมการ (5.9) ให้อยู่ในรูปแบบที่ไม่ต่อเนื่อง กล่าวคือ

$$A(\tau_i) = \sum_{j=1}^N K_{ij} \tilde{A}^*(\omega_j) \quad (5.10)$$

เมื่อ

$$K_{ij} = \frac{\omega_j \cosh\left(\left[\frac{1}{2}\beta E_C - \tau_i\right]\omega_j\right)}{2\pi \sinh\left(\frac{1}{2}\beta E_C \omega_j\right)} \quad (5.11)$$

ในการคำนวณค่าสเปกตรัมฟังก์ชันแบบสมมาตรของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวได้ใช้วิธีการซิงกูลาร์ แวลูดีคอมโพสิชัน ซึ่งผลการคำนวณได้แสดงไว้ในภาพประกอบ 5.3 จากภาพค่าสเปกตรัมฟังก์ชันแบบสมมาตรเป็นฟังก์ชันในโดเมนความถี่ ซึ่งแสดงองค์ประกอบของค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันที่ความถี่ต่างๆ ผลการคำนวณที่ได้ แสดงว่า แอมพลิจูด (amplitude) ของค่าสเปกตรัมฟังก์ชันแบบสมมาตรขึ้นกับความถี่ และมีลักษณะคล้ายกับฟังก์ชัน (sinc function) โดยเกิดยอดของสเปกตรัมฟังก์ชันแบบสมมาตรที่ความถี่ต่างๆ แต่อย่างไรก็ตาม ยอดที่เกิดขึ้นจะมีแอมพลิจูดลดลงและมีค่าลู่เข้าใกล้ศูนย์เมื่อความถี่สูงขึ้น ด้วยเหตุนี้ จึงสามารถกำหนดความถี่คัทออฟ (cutoff frequency; $\omega_{\max}$) และใช้ความถี่ดังกล่าวเป็นขอบเขตการคำนวณค่าปริพันธ์ เพื่อคำนวณค่าความนำไฟฟ้าของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวในสมการ (5.9) ซึ่งทำให้สามารถลดความยุ่งยากและปริมาณการคำนวณของโปรแกรม



ภาพประกอบ 5.3 ค่าสเปกตรัมฟังก์ชันแบบสมมาตรที่อุณหภูมิค่าต่างๆ เมื่อจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเหตุการณ์ $n_s = 0$ ซึ่งมีความถี่คัทออฟ $\omega_{\max} = 6$

จากภาพประกอบ 5.3 พบว่า จุดยอดของกราฟสเปกตรัมฟังก์ชันแบบสมมาตรเกิดการลดลงแบบเอกซ์โพเนนเชียล โดยการลดลงดังกล่าวสามารถหาความสัมพันธ์ได้ คือ $A(\omega) = Ke^{-\omega/\tau}$ โดยปกติ จากสมบัติการลดลงแบบเอกซ์โพเนนเชียลจะประมาณขนาดของค่าสเปกตรัมฟังก์ชันแบบสมมาตรมีค่าเป็น 0 เมื่อ $\omega \geq 5\tau$ จากการคำนวณค่าคงที่ของการลดลงแบบเอกซ์โพเนนเชียล (τ) พบว่า มีค่าเฉลี่ยประมาณ 0.92 ดังนั้น องค์ประกอบหลักของสเปกตรัมฟังก์ชันแบบสมมาตรจึงอยู่ในช่วง 0-4.6 อย่างไรก็ตาม การใช้เงื่อนไข $\omega \geq 5\tau$ จะทำให้สูญเสียองค์ประกอบของสเปกตรัมฟังก์ชันแบบสมมาตรที่มีขนาดเล็กกว่า 1% ของ $A(0)$ เพื่อลดความคลาดเคลื่อนจากการจำกัดขอบเขตการคำนวณจึงขยายช่วงของ ω เป็น 0-6 ดังนั้น การคำนวณค่าความนำไฟฟ้าในโครงงานนี้ จึงกำหนดความถี่คัทออฟเท่ากับ 6 ซึ่งทำให้ขอบเขตของค่าสเปกตรัมฟังก์ชันแบบสมมาตรที่ใช้ในการคำนวณในโครงงานนี้เพิ่มเป็น 0.25%-100% ของ $A(0)$

ผลการคำนวณที่อุณหภูมิ 0.25, 0.30 และ 0.40 K รูปร่างของสเปกตรัมฟังก์ชันแบบสมมาตรมีลักษณะเป็นซิงค์ฟังก์ชันในสภาวะที่ระบบเกิดปรากฏการณ์การแกว่งกวัดของคูลอมบ์ แต่ผลการคำนวณที่อุณหภูมิ 2.00 K เส้นกราฟที่คำนวณได้สูญเสียรูปร่างของซิงค์ฟังก์ชัน ซึ่งเป็นอุณหภูมิที่ระบบไม่เกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ ดังนั้น ลักษณะรูปร่างของสเปกตรัมฟังก์ชันแบบสมมาตรอาจมีความสัมพันธ์กับการเกิดปรากฏการณ์การแกว่งกวัดของคูลอมบ์ ทำให้มีความเป็นไปได้ที่จะใช้รูปร่างของกราฟสเปกตรัมฟังก์ชันแบบสมมาตรในการทำนายการเกิดปรากฏการณ์การแกว่งกวัดของคูลอมบ์

5.4 การคำนวณค่าความนำไฟฟ้า

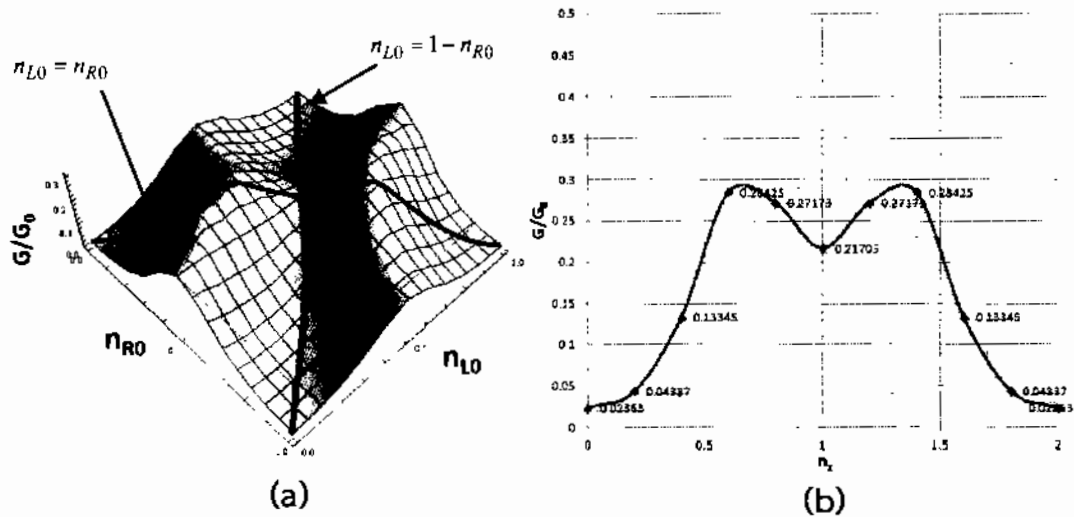
ค่าความนำไฟฟ้าของป๊อมีอิเล็กตรอนเดี่ยวสามารถคำนวณได้จากค่าสเปกตรัมฟังก์ชันแบบสมมาตรตามความสัมพันธ์ของสมการ

$$G = \frac{\beta E_c G_0}{2\pi} \int_0^{\omega_{\max}} d\omega \frac{\omega^2}{\cosh(\beta E_c \omega) - 1} \tilde{A}^2(\omega) \quad (5.12)$$

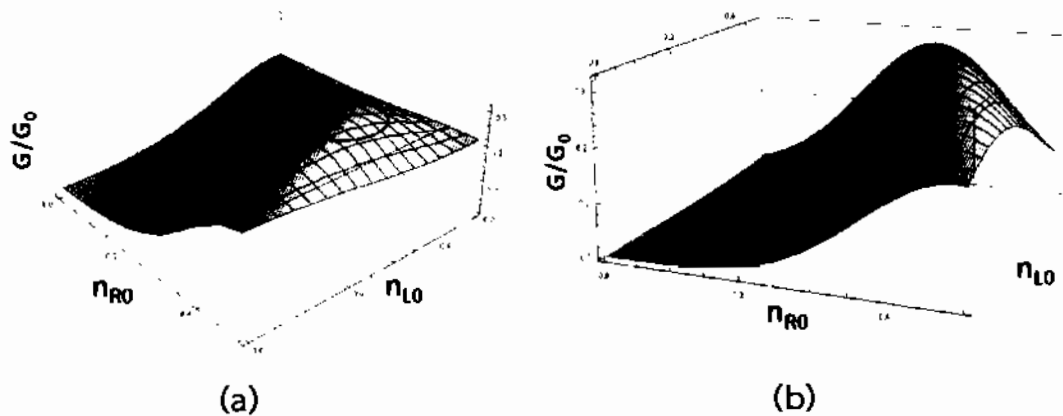
จากสมการ (5.8) ขอบเขตของการคำนวณค่าปริพันธ์มีค่าจาก 0 ถึงอนันต์ ทำให้ไม่สามารถคำนวณได้โดยตรง แต่อย่างไรก็ตาม จากผลการคำนวณค่าสเปกตรัมฟังก์ชันแบบสมมาตรในหัวข้อ 5.3 พบว่า ค่าสเปกตรัมฟังก์ชันแบบสมมาตรมีค่าลดลงอย่างรวดเร็วเมื่อความถี่มีค่าเพิ่มสูงขึ้น ทำให้ขอบเขตของการคำนวณค่าปริพันธ์สามารถกำหนดด้วยความถี่คัทออฟ ในโครงงานนี้ ค่าความนำไฟฟ้าของป๊อมีอิเล็กตรอนเดี่ยวถูกคำนวณด้วยเทคนิคซิงกูลาร์แวลูดีคอมโพสิชัน โดยใช้ความถี่คัทออฟ $\omega_{\max} = 6$ ในการคำนวณค่าปริพันธ์ดังสมการ (5.12) จากลักษณะเชิงโครงสร้างของป๊อมีอิเล็กตรอนเดี่ยวที่มีจำนวนอิเล็กตรอนส่วนเกินอยู่ในช่วง 0 ถึง 2 อิเล็กตรอน จึงใช้ขอบเขตจำนวนอิเล็กตรอนดังกล่าวมากำหนดช่วงของค่าพารามิเตอร์ $n_x = [0, 2]$ ผลการคำนวณเบื้องต้นแสดงในภาพประกอบ 5.4 โดยผลการคำนวณแสดงให้เห็นว่าเกิดจุดสูงสุดของค่าความนำไฟฟ้า 2 จุด ซึ่งกราฟที่เกิดขึ้นลักษณะนี้สอดคล้องกับโครงสร้างของป๊อมีอิเล็กตรอนเดี่ยวที่ประกอบด้วยเกาะโลหะ 2 เกาะ และสอดคล้องกับผลการวัดค่าความนำไฟฟ้าของป๊อมีอิเล็กตรอนเดี่ยวจากการทดลองของลิบบ์ซในภาพประกอบ 2.9

ลักษณะโครงร่าง 3 มิติ ที่เกิดขึ้นในภาพประกอบ 5.4 มีความสมมาตรตามเงื่อนไข $n_{L,0} = n_{R,0}$ และ $n_{L,0} = 1 - n_{R,0}$ แต่อย่างไรก็ตาม ภายใต้เงื่อนไขที่ $n_{L,0} = 1 - n_{R,0}$ จะไม่แสดงปรากฏการณ์การแกว่งกวัดของคูลอมบ์ดังแสดงด้วยแนวเส้นสีดำในภาพประกอบ 5.4 (a) ในโครงงานนี้ จึงศึกษาการเกิดปรากฏการณ์การแกว่งกวัดของคูลอมบ์ภายใต้เงื่อนไข $n_{L,0} = n_{R,0}$ โดยคำนวณค่าความนำไฟฟ้าต่อค่าความนำไฟฟ้าที่อุณหภูมิสูง (G/G_0) ของป๊อมีอิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งกราฟที่ได้มีลักษณะดังภาพประกอบ 5.4 (b) แต่จากข้อจำกัดของระยะเวลาในการดำเนินโครงงานและประสิทธิภาพของคอมพิวเตอร์ ใน

โครงการนี้จึงทำการลดช่วงค่าพารามิเตอร์ n_x จาก $n_x=[0,2]$ เป็น $n_x=[0,1]$ โดยกำหนดให้ $n_{L0}=[0,0.5]$ และ $n_{R0}=[0,0.5]$ ทำให้ผลการคำนวณมีความละเอียดเพิ่มขึ้น และส่งผลให้การคำนวณตำแหน่งของค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดมีค่าใกล้เคียงกับค่าจริงมากยิ่งขึ้น นอกจากนี้ ด้วยลักษณะความสมมาตรที่เกิดขึ้น การลดช่วงของค่าพารามิเตอร์ n_x ดังกล่าวทำให้ภาระงานในการคำนวณถูกลดลง 4 เท่า



ภาพประกอบ 5.4 ค่าความนำไฟฟ้าของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวเมื่อจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตรวมอยู่ในช่วง $n_x=[0,2]$ (a) ค่าความนำไฟฟ้าที่ประกอบด้วยข้อมูล 121 จุด (b) ปรากฏการณ์การแกว่งกวัดของคูลอมบ์ที่อุณหภูมิ $0.3K$ ของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวภายใต้เงื่อนไขที่ $n_{L0}=n_{R0}$

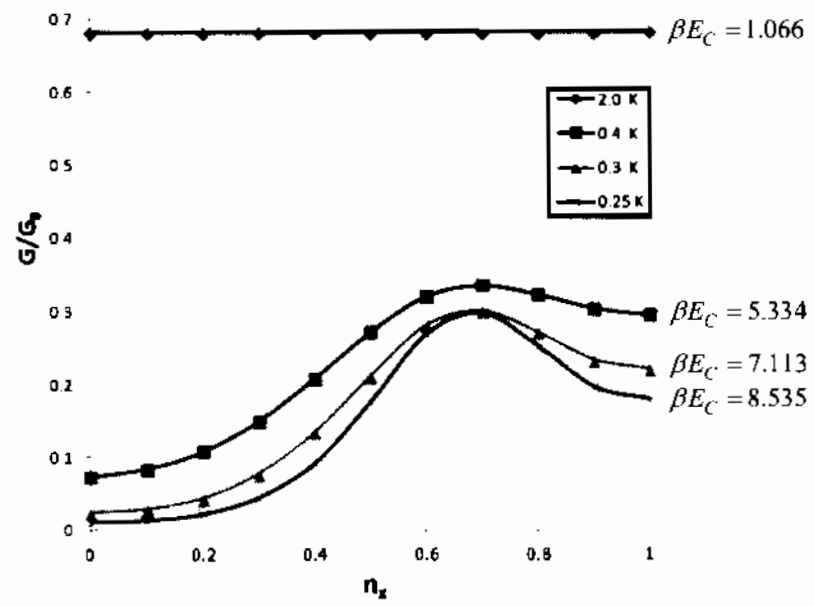


ภาพประกอบ 5.5 ผลการคำนวณค่าความนำไฟฟ้าของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวที่อุณหภูมิ $T=0.3K$ (a) ค่าความนำไฟฟ้าที่สร้างจากคู่อันดับจำนวน 121 คู่อันดับ ในลักษณะ 3 มิติ (b) ค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดที่ได้จากเทคนิคการคำนวณแบบแก๊สเซียนฟิต $G_{max}/G_0=0.316$ เกิดขึ้นที่จุด $(n_{L0}, n_{R0})=(0.371, 0.320)$

โครงการนี้ต้องการคำนวณค่าความนำไฟฟ้าเพื่อแสดงแนวโน้มของการเกิดปรากฏการณ์การแกว่งกวัดของคุลอมป์และทำการวิเคราะห์เปรียบเทียบกับค่าความนำไฟฟ้าของลิบซ์ ซึ่งค่าความนำไฟฟ้าที่คำนวณได้จาก n_x ค่าต่างๆ ถูกนำมาใช้เป็นข้อมูลสำหรับสร้างกราฟค่าความนำไฟฟ้า 3 มิติ โดยบริเวณรอบๆ จุดสูงสุดที่ได้จากการจำลองถูกนำไปใช้ในการคำนวณค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดด้วยเทคนิคการคำนวณแบบเกาส์เซียนฟิต (Gaussian fit) [19] แม้ข้อมูลที่ใช้มีข้อจำกัดในด้านความละเอียดแต่ด้วยเทคนิคการคำนวณแบบเกาส์เซียนฟิตช่วยให้สามารถคำนวณจุดที่เกิดค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดได้ถูกต้องมากยิ่งขึ้น ข้อมูลที่ได้จากการคำนวณจึงสามารถใช้เปรียบเทียบในเชิงคุณภาพกับผลการทดลอง โดยตัวอย่างโครงร่างของค่าความนำไฟฟ้าจากการคำนวณได้แสดงดังภาพประกอบ 5.5 (a) ซึ่งแสดงจุดยอดอยู่ในบริเวณ $0.3 \leq n_{0L} \leq 0.5$ และ $0.2 \leq n_{0R} \leq 0.3$ เมื่อนำค่าความนำไฟฟ้าในบริเวณดังกล่าวไปคำนวณค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดโดยใช้เทคนิคเกาส์เซียนฟิต ผลลัพธ์ที่ได้แสดงดังภาพประกอบ 5.5 (b) โดยค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดที่อุณหภูมิค่าอื่นๆ สามารถคำนวณได้ในลักษณะเดียวกันด้วยวิธีการคำนวณที่ได้กล่าวมาข้างต้น

5.5 ผลการคำนวณค่าความนำไฟฟ้า

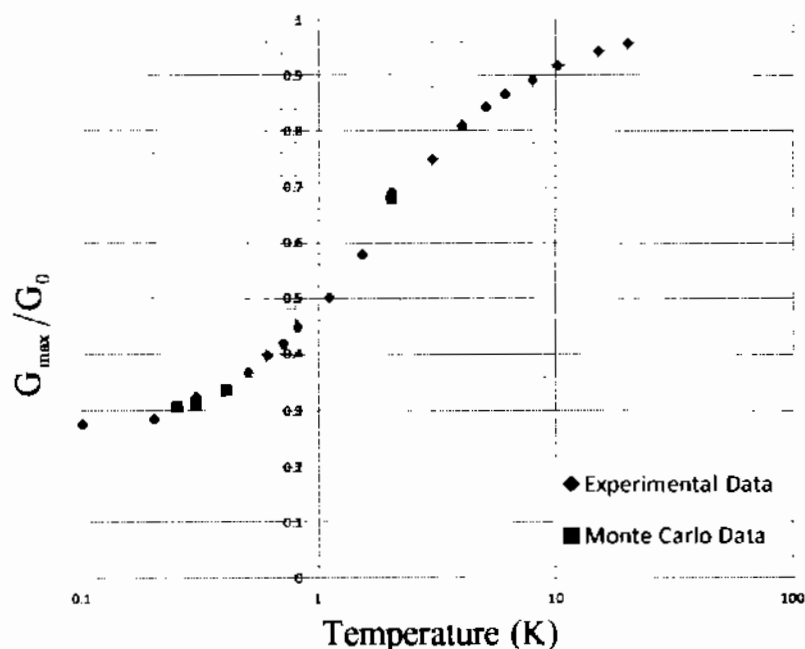
การคำนวณค่าความนำไฟฟ้าของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวที่อุณหภูมิค่าต่างๆ กล่าวคือ $T \in \{2.0, 0.4, 0.3, 0.25\} K$ เมื่อ n_{L0} และ n_{R0} อยู่ในช่วง $[0, 0.5]$ เพื่อใช้สร้างกราฟของค่าความนำไฟฟ้า 3 มิติ ดังภาพประกอบ 5.5 (a) จากนั้น นำข้อมูล 3 มิติ ที่ได้มาสร้างกราฟ 2 มิติ บนระนาบ $n_{L0} = n_{R0}$ เพื่อแสดงแนวโน้มการเกิดปรากฏการณ์การแกว่งกวัดของคุลอมป์ที่อุณหภูมิค่าต่างๆ



ภาพประกอบ 5.6 แนวโน้มการเกิดการแกว่งกวัดของคุลอมป์ของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวที่อุณหภูมิค่าต่างๆ $T \in \{2.0, 0.4, 0.3, 0.25\} K$ โดยที่ n_x อยู่ในช่วง $[0, 1]$

จากภาพประกอบ 5.6 พบว่า ในสภาวะที่บีเอ็มอีเล็กตรอนเดี่ยวทำงานที่อุณหภูมิสูง ($T = 2.0\text{ K}$ และ $\beta E_C = 1.066$) ผลที่ได้สอดคล้องกับผลการทดลองของบีเอ็มอีเล็กตรอนเดี่ยว กล่าวคือ เมื่อ $\beta E_C \leq 2$ ค่าความนำไฟฟ้าจะไม่ขึ้นกับแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกต ทำให้ไม่สามารถควบคุมอิเล็กตรอนที่ทะลุเข้ามาภายในเกาะโลหะด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทั้งสองขั้วได้ ดังนั้น อิเล็กตรอนจึงสามารถเคลื่อนที่ผ่านบีเอ็มอีเล็กตรอนเดี่ยวได้โดยไม่ต้องอาศัยแรงดันไฟฟ้าจากขั้วเกต จากผลดังกล่าวแสดงให้เห็นว่า ปรากฏการณ์การแกว่งกวัดของคูลอมบ์สามารถถูกทำลายด้วยพลังงานความร้อน โดยพลังงานความร้อนจะทำให้พลังงานเฉลี่ยของอิเล็กตรอนภายในระบบบีเอ็มค่าเพิ่มขึ้น ดังนั้น อิเล็กตรอนจึงสามารถทะลุผ่านโครงสร้างของบีเอ็มอีเล็กตรอนเดี่ยวได้โดยอิสระ

ในกรณีที่ระบบมีอุณหภูมิต่ำ ($T \leq 0.4\text{ K}$ หรือ $\beta E_C \geq 5.334$) ปรากฏจุดวกกลับของค่าความนำไฟฟ้าที่ตำแหน่ง $n_x \approx 0.7$ ซึ่งตำแหน่งดังกล่าวมีค่าใกล้เคียงกับค่าที่ได้จากการทำนายตำแหน่งค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดด้วยแผนภาพเสถียรในบทที่ 3 และค่าความนำไฟฟ้าเปลี่ยนแปลงไปตามการเปลี่ยนแปลงจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกต แสดงว่าแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตมีอิทธิพลต่อการควบคุมอิเล็กตรอนในการทะลุผ่านโครงสร้างของบีเอ็มอีเล็กตรอนเดี่ยวในช่วงอุณหภูมิต่ำ โดยกราฟที่ได้มีลักษณะสอดคล้องกับผลการทดลองของลิ้มบซ์ ดังนั้น ในกรณีนี้ค่าความนำไฟฟ้ามีค่าเปลี่ยนแปลงไปเมื่อแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตมีค่าเปลี่ยนแปลง กล่าวคือ ระบบแสดงปรากฏการณ์การแกว่งกวัดของคูลอมบ์ ซึ่งแสดงให้เห็นว่าการเปลี่ยนแปลงดังกล่าวสามารถทำนายได้โดยการคำนวณทางทฤษฎี



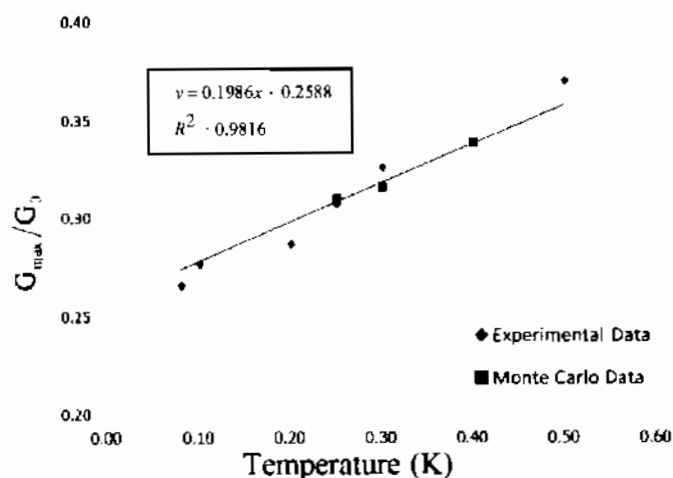
ภาพประกอบ 5.7 การเปรียบเทียบค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดของบีเอ็มอีเล็กตรอนเดี่ยวที่เป็นฟังก์ชันของอุณหภูมิ โดยเปรียบเทียบระหว่างผลการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลกับผลการทดลองของลิ้มบซ์และคณะ [7]

จากการศึกษาปรากฏการณ์การแกว่งกวัดของคุลอมบ์ที่เกิดขึ้นในปัมอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว สามารถทำได้โดยการศึกษาจากผลของแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิดต่อค่าความนำไฟฟ้าของระบบดังที่กล่าวไว้ข้างต้น นอกจากนั้น ในโครงงานนี้ยังได้ศึกษาอิทธิพลของอุณหภูมิต่อค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดของปัมอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว และเปรียบเทียบค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดที่คำนวณได้กับผลการทดลองของลิบซ์ดังภาพประกอบ 5.7 จากเส้นกราฟที่ได้แสดงให้เห็นว่า ผลการคำนวณมีความสอดคล้องกับผลจากการทดลองทั้งในสภาวะที่อุณหภูมิต่ำและในสภาวะที่อุณหภูมิสูง โดยผลการเปรียบเทียบมีค่าความคลาดเคลื่อนดังตาราง 5.1

ตาราง 5.1 ผลการเปรียบเทียบค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดจากการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลกับผลการทดลองของลิบซ์

อุณหภูมิ (K)	ผลการคำนวณ $G_{\max}/G_0$	ผลการทดลอง $G_{\max}/G_0$	ความคลาดเคลื่อน (%)
2.00	0.682	0.693	1.612
0.40	0.339	0.339	0.000
0.30	0.316	0.326	3.164
0.25	0.310	0.307	0.967

จากตาราง 5.1 ค่าความคลาดเคลื่อนอาจเกิดจากข้อจำกัดของความละเอียดในการแบ่งช่วงการคำนวณ ทำให้ข้อมูลที่ได้ไม่เพียงพอสำหรับการคำนวณค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดอย่างแม่นยำ เช่น การแบ่งช่วงค่าพารามิเตอร์ n_x เพื่อคำนวณค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดของปัมอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว เป็นต้น อย่างไรก็ตาม ค่าความคลาดเคลื่อนที่เกิดขึ้นมีค่าน้อยกว่า 5 % แสดงให้เห็นว่า ผลการคำนวณที่ได้สามารถนำมาศึกษาอิทธิพลของปัจจัยต่างๆ ต่อค่าความนำไฟฟ้าของปัมอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว



ภาพประกอบ 5.8 ค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดของปัมอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวที่ได้จากการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลและจากการทดลองของลิบซ์และคณะ [7] ที่อุณหภูมิต่ำ

จากข้อมูลของค่าความนำไฟฟ้าที่คำนวณได้จากวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลสามารถสร้างสมการเส้นตรง เพื่ออธิบายค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดในช่วงอุณหภูมิต่ำกว่า $1K$ ได้ดังภาพประกอบ 5.8 กล่าวคือ

$$\frac{G_{max}}{G_0} = 0.1986T + 0.2588 \quad (5.13)$$

ในทฤษฎีกลศาสตร์แบบฉบับค่าความนำไฟฟ้าของระบบที่อุณหภูมิ $0K$ จะมีค่าเป็น $0\mu S$ เนื่องจากอิเล็กตรอนจะไม่มีพลังงานเฉลี่ยจากความร้อนช่วยให้เกิดโอกาสในการเคลื่อนที่ทะลุผ่านโครงสร้างของบิสมอิเล็กตรอนเดี่ยว ทำให้อิเล็กตรอนไม่สามารถเคลื่อนที่ผ่านบิสมอิเล็กตรอนเดี่ยวได้ แต่ความสัมพันธ์ในสมการ (5.13) ซึ่งได้จากการคำนวณบนพื้นฐานของข้อมูลจากการทดลองจริงได้ทำนายค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดที่อุณหภูมิ $0K$ เป็น $0.2588G_0 \mu S$ ค่าความนำไฟฟ้าที่เกิดขึ้นแสดงให้เห็นว่า ระบบได้รับพลังงานศักย์จากภายนอกผ่านทางซัฟเฟอร์ส ซัฟเตรนและซัฟเกต จึงทำให้อิเล็กตรอนมีโอกาที่จะเคลื่อนที่ผ่านบิสมอิเล็กตรอนเดี่ยวได้ในสภาวะที่อุณหภูมิ $0K$ ซึ่งสอดคล้องกับผลการทดลองของลิ้มบิชที่สามารถวัดค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดได้ในบริเวณ $n_x \approx 0.7$ แสดงว่า บิสมอิเล็กตรอนเดี่ยวได้รับพลังงานศักย์ผ่านซัฟเกตทั้ง 2 ซัฟ ดังนั้น ผลการคำนวณที่ได้สามารถจำลองการทำงานและสะท้อนสถานะการทำงานจริงของบิสมอิเล็กตรอนเดี่ยวได้อย่างสอดคล้องกับปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นจริง

บทที่ 6

สรุปผลและข้อเสนอแนะ

6.1 สรุปผล

จากวัตถุประสงค์ของโครงการที่ต้องการศึกษาป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล จากผลการศึกษาแผนภาพเสถียร พลังงานการเพิ่มประจุยังผลและปรากฏการณ์การแกว่งกวัดของคูลอมป์ สามารถสรุปผลการศึกษาได้ดังต่อไปนี้ ในการศึกษาการสร้างแผนภาพเสถียรของป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว พบว่าแผนภาพดังกล่าวสามารถสร้างจากสมการพลังงานการเพิ่มประจุรวมของป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ซึ่งพลังงานดังกล่าวขึ้นอยู่กับจำนวนประจุที่รอต่อการทะลุผ่านในเกาะโลหะทางซ้ายและทางขวา เมื่อพิจารณาการส่งผ่านของประจุซึ่งเกิดจากการทะลุผ่านของอิเล็กตรอนที่สามารถเกิดขึ้นได้ ในทุกกรณีพบว่า ผลต่างของพลังงานในแต่ละกรณีเป็นสมการเส้นตรง ในสภาวะปกติเส้นตรงที่ได้จะตัดกันเป็นรูปหกเหลี่ยม โดยบริเวณภายในรูปหกเหลี่ยมเป็นบริเวณที่ไม่เกิดการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนผ่านเกาะโลหะทั้งสองของป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว นอกจากนี้แผนภาพเสถียรสามารถแสดงจุดทริปปิลพออยท์ ที่จุดดังกล่าวอิเล็กตรอนสามารถเคลื่อนที่จากขั้วซอร์สไปยังขั้วเดรนหรือจากขั้วเดรนกลับมายังขั้วซอร์สได้ ซึ่งคุณสมบัติดังกล่าวเป็นคุณสมบัติที่สำคัญของป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว นอกจากนี้ จุดทริปปิลพออยท์ที่ได้จากแผนภาพเสถียรสามารถใช้ทำนายตำแหน่งที่เกิดค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดได้อย่างถูกต้อง และสามารถแสดงให้เห็นถึงการรบกวนกันของฟังก์ชันคลื่นของเกาะโลหะทั้งสอง ผ่านการเปลี่ยนแปลงค่าพารามิเตอร์ C_M ซึ่งพบว่า แผนภาพเสถียรจะมีรูปร่างและลักษณะเปลี่ยนแปลงตามค่าพารามิเตอร์ C_M ที่เปลี่ยนไป โดยรูปร่างของแผนภาพเสถียร แต่ละลักษณะจะสามารถสะท้อนถึงความแรงของการรบกวนกันระหว่างฟังก์ชันคลื่นของเกาะโลหะทั้งสองเกาะ ดังนั้นจึงสามารถสรุปได้ว่าตัวแปร C_M เป็นตัวแปรที่แสดงการรบกวนกันของฟังก์ชันคลื่น

ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวเป็นพารามิเตอร์ที่แสดงถึงความเด่นชัดของปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมป์ โดยนิยามจากจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมที่ทะลุผ่านรอต่อการทะลุผ่านของป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวเทียบกับค่าประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกต ซึ่งปริมาณดังกล่าว สามารถคำนวณได้โดยใช้วิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล จากผลการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล พบว่า กรณีที่สามารถสังเกตปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมป์ได้เด่นชัดที่สุดค่า E_C^* / E_C มีค่าน้อยกว่า 1 โดยมีค่าประมาณ 0.89 ซึ่งอาจเกิดจากการรบกวนกันระหว่างฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอนในเกาะโลหะทั้งสอง และจากผลการคำนวณ พบว่า ค่าพลังงานดังกล่าวขึ้นอยู่กับค่าความนำไฟฟ้ารวมของระบบ โดยจะมีค่าลดลงแบบเอกซ์โพเนนเชียล เมื่อค่าความนำไฟฟ้ารวมมีค่าเพิ่มขึ้น รวมทั้งเมื่ออุณหภูมิมีค่าสูงขึ้นค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลจะมีค่าลดลง ซึ่งสามารถสร้างความสัมพันธ์อย่างง่ายได้เป็น $E_C^* / E_C = E_{C0} e^{-\alpha \sigma}$ จากผลการจำลองการทำงานของป้อนอิเล็กทรอนิกส์

เดียว แสดงให้เห็นว่า ปรากฏการณ์ขัดขวางแบบโคลอมป์สามารถเกิดขึ้นได้ เมื่อค่าความนำไฟฟ้าของระบบมีค่าน้อยกว่าค่าความนำไฟฟ้าทางควอนตัมอย่างน้อย 3 เท่า ($G_T \leq 3G_K$) ซึ่งเป็นสถานะที่ระบบสามารถกักเก็บอิเล็กตรอนได้ โดยเงื่อนไขที่สำคัญดังที่กล่าวมาข้างต้น สามารถนำไปใช้ในการออกแบบและประยุกต์ใช้งานป้อนอิเล็กตรอนเดียวได้

จากการคำนวณค่าความนำไฟฟ้าของป้อนอิเล็กตรอนเดียวด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ในช่วง $n_x = [0, 2]$ กราฟค่าความนำไฟฟ้าแบบ 3 มิติ เกิดความสมมาตรภายใต้เงื่อนไข $n_{L0} = n_{K0}$ ทำให้สามารถแสดงปรากฏการณ์การแกว่งกวัดแบบโคลอมป์ได้โดยการสร้างกราฟ 2 มิติ ด้วยเงื่อนไขดังกล่าว ดังนั้น เพื่อลดทรัพยากรในการคำนวณจึงลดขอบเขตการคำนวณจาก $n_x = [0, 2]$ เป็น $n_x = [0, 1]$ และใช้จุดการคำนวณเป็น 121 จุด เพื่อให้ได้จุดคำนวณค่าความนำไฟฟ้าที่ละเอียด จากนั้นนำผลการจำลองค่าความนำไฟฟ้าไปกำหนดตำแหน่งค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดโดยใช้วิธีการปรับเส้นโค้งด้วยฟังก์ชันเกาส์เซียน ซึ่งตำแหน่งนี้ในแผนภาพเสถียรเรียกว่า จุดทริปปิลพอยท์ โดยจุดดังกล่าวเป็นจุดการทำงานของป้อนอิเล็กตรอนเดียวที่อิเล็กตรอนสามารถเคลื่อนที่ผ่านเกาะโลหะทั้งสองไปยังขั้วไฟฟ้าอีกด้านหนึ่งได้สูงสุด

ในกรณีอุณหภูมิต่ำ ($BE_C > 2$) ค่าความนำไฟฟ้าของป้อนอิเล็กตรอนเดียวจะขึ้นอยู่กับค่าจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกต โดยผลการคำนวณได้แสดงบริเวณที่เกิดค่าความนำไฟฟ้าสูงสุด ดังนั้น จึงกล่าวได้ว่า ในกรณีที่พลังงานการเพิ่มประจุมีค่ามากกว่าพลังงานเฉลี่ยของอิเล็กตรอน การเปลี่ยนแปลงค่าแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตอย่างเหมาะสม จะทำให้สามารถควบคุมการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนที่ละหนึ่งตัวผ่านป้อนอิเล็กตรอนเดียวได้ แต่ในสถานะอุณหภูมิต่ำ ($BE_C \leq 2$) ระบบจะไม่สามารถแสดงปรากฏการณ์การแกว่งกวัดของโคลอมป์ โดยไม่สามารถสังเกตพบจุดที่เกิดค่าความนำไฟฟ้าสูงสุด ประกอบกับค่าความนำไฟฟ้าของป้อนอิเล็กตรอนเดียวไม่ขึ้นอยู่กับค่าจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกต จากผลการคำนวณทั้งที่สถานะอุณหภูมิต่ำและที่สถานะอุณหภูมิต่ำ เมื่อนำค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองของลิบบ์ พบว่า ผลการคำนวณสอดคล้องกับผลการทดลอง โดยมีค่าความคลาดเคลื่อนน้อยกว่า 5 %

6.2 ข้อเสนอแนะ

1. จากการศึกษการสร้างแผนภาพเสถียรของป้อนอิเล็กตรอนเดียวในบทที่ 3 เป็นการศึกษาเฉพาะในกรณีที่ให้แรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตเพียงสองขั้วเท่านั้นและกำหนดให้แรงดันไฟฟ้าที่ขั้วซอร์สและขั้วเดรนมีค่าประมาณศูนย์ โดยแผนภาพเสถียรในกรณีนี้ไม่สามารถอธิบายการส่งผ่านของอิเล็กตรอนได้อย่างสมบูรณ์ ดังนั้น ในการศึกษาแผนภาพเสถียรควรศึกษาในกรณีที่เพิ่มค่าแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วซอร์สและขั้วเดรนไม่เท่ากับศูนย์ เพื่อให้สามารถอธิบายการส่งผ่านของอิเล็กตรอนได้อย่างครอบคลุมทุกเงื่อนไข

2. ในการศึกษาตำแหน่งของค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดจากปรากฏการณ์การแกว่งกวัดแบบโคลอมป์ พบว่า ค่าความนำไฟฟ้าเป็นฟังก์ชันของ n_x แต่แผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กทรอนิกส์เดียวในกรณีนี้สร้างให้อยู่ในระนาบ n_{L0} และ n_{R0} ดังนั้น ในการศึกษาแผนภาพเสถียรควรสร้างให้อยู่ในระนาบ n_x และ n_y เมื่อ n_x และ n_y ถูกนิยามดังสมการที่ (2.40) และ (2.41) ตามลำดับ เพื่อให้สามารถระบุตำแหน่งของค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดได้อย่างถูกต้องแม่นยำ

3. ในการศึกษาอิทธิพลของอุณหภูมิที่มีผลต่อค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของปั๊มอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ควรแบ่งช่วงของอุณหภูมิออกเป็นสองช่วง คือ ช่วงที่อุณหภูมิต่ำ ($BE_c \geq 2$) และช่วงที่อุณหภูมิสูง ($BE_c < 2$) เนื่องจากปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นในช่วงอุณหภูมิทั้งสองมีความแตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญ นอกจากนั้น จะทำให้สามารถอธิบายปรากฏการณ์การขัดขวางแบบโคลอมป์ได้ดียิ่งขึ้น และควรศึกษาจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในปั๊มอิเล็กทรอนิกส์เดียวทั้งที่อยู่ในเกาะโลหะทางซ้ายและเกาะโลหะทางขวา

4. ในโครงงานนี้ได้แบ่งช่วงของจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิดแต่ละชั่วถูกออกเป็น 10 ช่วงเท่าๆ กัน ซึ่งอาจจะทำให้การคำนวณตำแหน่งค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดคลาดเคลื่อนได้ ดังนั้น จึงควรแบ่งช่วงการคำนวณที่ละเอียดมากขึ้น โดยศึกษาถึงแนวโน้มของจำนวนจุดที่แบ่งในการคำนวณต่อความคลาดเคลื่อนที่เกิดขึ้น ซึ่งอาจจะทำให้สามารถกำหนดจำนวนจุดในการคำนวณที่ต่ำที่สุด ที่ยังคงทำให้ผลการคำนวณแม่นยำที่สุด อย่างไรก็ตาม เพื่อให้การคำนวณค่าความนำไฟฟ้ามีความถูกต้องมากยิ่งขึ้น ช่วงของค่าประจุเหนี่ยวนำควรถูกแบ่งให้ละเอียดมากขึ้น

5. ในโครงงานนี้ใช้เงื่อนไข $n_{L0} = n_{R0}$ ในการสร้างกราฟการแกว่งกวัดของโคลอมป์ ซึ่งเส้นกราฟดังกล่าวอาจไม่ผ่านจุดที่ค่าความนำไฟฟ้ามีค่าสูงสุด เพื่อให้สามารถสร้างกราฟที่ผ่านจุดหริบเปิลพอยท์ควรกำหนดค่า n_{L0} ให้มีค่าคงที่ กล่าวคือ ใช้ n_{L0} ที่ได้จากตำแหน่งหริบเปิลพอยท์ในแผนภาพเสถียรแล้วเปลี่ยนแปลงค่า n_{R0} จนกว่ากราฟจะผ่านจุดที่มีค่าความนำไฟฟ้าสูงสุด

บรรณานุกรม



บรรณานุกรม

- [1] Kastner MA. "The single-electron transistor". *Reviews of modern physics* 1992; 64[3]: 849-858.
- [2] Tinkham M. "Coulomb blockade and electron in a mesoscopic box". *American journal of physics* 1996; 64: 343-347.
- [3] Fulton TA, Dolan GJ. "Observation of single-electron charging effects in small tunnel junctions". *Physical review letters* 1987; 59[1]: 109-112.
- [4] Lafarge P, Pothier H, Williams ER, Esteve D, Urbina C, Devoret MH. "Direct observation of macroscopic charge quantization". *Zeitschrift für physik B condensed matter* 1991; 85[3]: 327-332.
- [5] Devoret MH, Esteve D, Urbina C. "Single-electron transfer in metallic nanostructures". *Nature* 1992; 360[6404]: 547-553.
- [6] Wallisser C, Limbach B, Vom Stein P, Schäfer R, Theis C, Göppert G, Grabert H. "Conductance of the single-electron transistor: A comparison of experimental data with Monte Carlo calculations". *Physical review B* 2002; 66[12]: 125314.
- [7] Limbach B, Stein PV, Wallisser C, Schäfer R. "Coulomb blockade in two-island systems with highly conductive junctions". *Physical review B* 2005; 72[4]: 045319.
- [8] Wang X. "Charge fluctuations on ultrasmall metallic islands". [Ph.D. thesis]. Freiburg: Albert Ludwigs University Freiburg; 1996.
- [9] Göppert G, Grabert H. "Charge fluctuations in the single-electron box". *Physical review B* 2001; 63[12], 125307.
- [10] Wang X, Egger R, Grabert H. "Coulomb charging energy for arbitrary tunneling strength". *EPL (Europhysics letters)*; 38[7]: 545-548.
- [11] Panyukov SV, Zaikin AD. "Coulomb blockade and nonperturbative ground-state properties of ultrasmall tunnel junctions". *Physical review letters* 1991; 67[22]: 3168-3171.
- [12] Grabert H. "Rounding of the Coulomb staircase by the tunneling conductance". *Physica B* 1994; 194: 1011-1012.
- [13] Göppert G, Grabert H, Prokof'ev NV, Svistunov BV. "Effect of tunneling conductance on the coulomb staircase". *Physical review letters* 1998; 81[11]: 2324-2327.

- [14] Falci G, Schön G, Zimanyi GT. "Unified scaling theory of the electron box for arbitrary tunneling strength". *Physical review letters* 1995; 74[16]: 3257-3260.
- [15] Theis C. "Conductance of single electron devices from imaginary-time path integrals" [Ph.D. thesis]. Freiburg: Universitätsbibliothek Freiburg; 2004.
- [16] Metropolis N, Ulam S. "The Monte Carlo method". *Journal of the American statistical association* 1949; 44[247]: 335-341.
- [17] Murthy KPN. "An introduction to Monte Carlo simulation of statistical physics problem". School of physics: University of Hyderabad; 2001.
- [18] Feynman RP, Hibbs AR. "Quantum mechanics and path integrals". Emended edition. Courier dover publications; 2012
- [19] Srivilai P. "Quantum Monte Carlo study of the metallic single electron pump". [Ph.D. thesis]. Freiburg: Albert Ludwigs University Freiburg; 2012.
- [20] Göppert G. "Single electron tunneling at large conductance". [Ph.D. thesis]. Freiburg: Universitätsbibliothek Freiburg; 2000.
- [21] Van Der Wiel WG, De Franceschi S, Elzerman JM, Fujisawa T, Tarucha S, Kouwenhoven LP. "Electron transport through double quantum dots". *Reviews of modern physics* 2002; 75[1]: 1-22.
- [22] Press WH, Teukolsky SA, Vetterling WT, Flannery BP. "Numerical recipes in C - the art of scientific computing". Cambridge: Cambridge University Press; 1992: 994.
- [23] Brown R, Simanek E. "Transition to Ohmic conduction in microscopic tunnel junctions at low temperatures". *Physical Review B* 1992; 45: 6069-6073.

ภาคผนวก



การคำนวณผลต่างพลังงานการเพิ่มประจุรวมของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยว

การคำนวณผลต่างพลังงานการเพิ่มประจุรวมของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวในบทที่ 3 สำหรับใช้สร้างแผนภาพเสถียรของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยว จำนวนประจุสุทธิในเกาะโลหะนิยามจากจำนวนประจุบวก ดังนั้น เมื่ออิเล็กตรอนทะลุผ่านจากเกาะโลหะทางซ้ายไปยังเกาะโลหะทางขวา จะทำให้จำนวนประจุในเกาะโลหะทางซ้ายเพิ่มขึ้นจาก $n_L \rightarrow n_L + 1$ ในขณะที่ จำนวนประจุในเกาะโลหะทางขวาลดลงจาก $n_R \rightarrow n_R - 1$ ในกรณีของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวสามารถแยกเหตุการณ์การทะลุผ่านของอิเล็กตรอนภายในบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวได้เป็นกรณีต่างๆ ดังนี้

กรณีที่ 1 $(n_L, n_R) \rightarrow (n_L - 1, n_R)$

กรณีที่ 2 $(n_L, n_R) \rightarrow (n_L + 1, n_R)$

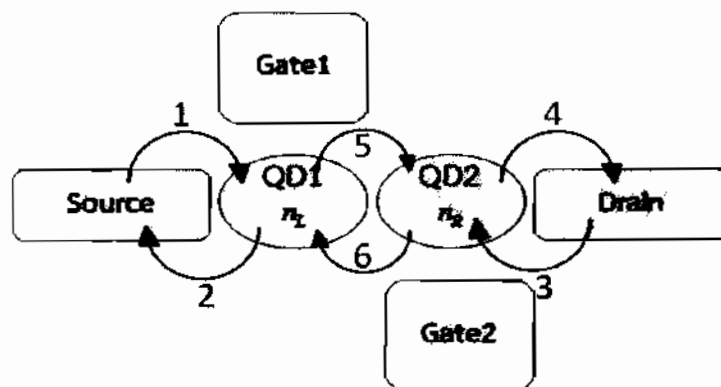
กรณีที่ 3 $(n_L, n_R) \rightarrow (n_L, n_R - 1)$

กรณีที่ 4 $(n_L, n_R) \rightarrow (n_L, n_R + 1)$

กรณีที่ 5 $(n_L, n_R) \rightarrow (n_L + 1, n_R - 1)$

กรณีที่ 6 $(n_L, n_R) \rightarrow (n_L - 1, n_R + 1)$

โดยลักษณะการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนทั้ง 6 กรณี แสดงดังภาพประกอบ ผ.1



ภาพประกอบ ผ.1 ลักษณะการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนทั้ง 6 กรณี

เหตุการณ์การทะลุผ่านทั้ง 6 กรณีที่เกิดขึ้นในบีมอิเล็กตรอนเดี่ยว สามารถแบ่งเงื่อนไขในการพิจารณาการเปลี่ยนแปลงประจุของระบบ (ΔQ_{sys}) ออกเป็นสองเงื่อนไข ได้แก่ เงื่อนไขที่ระบบไม่เกิดการอนุรักษ์จำนวนประจุ ($\Delta Q_{sys} \neq 0$) และเงื่อนไขที่ระบบเกิดการอนุรักษ์จำนวนประจุ ($\Delta Q_{sys} = 0$)

เงื่อนไขที่ 1 ระบบไม่เกิดการอนุรักษ์จำนวนประจุ ($\Delta Q_{sys} \neq 0$) ได้แก่ กรณีที่ 1 ถึง 4 ซึ่งเป็นเงื่อนไขที่เกิดการเปลี่ยนแปลงของจำนวนประจุสุทธิภายในระบบบีมอิเล็กตรอนเดี่ยว โดยเกิดจากการถ่ายเทประจุระหว่างเกาะโลหะกับขั้วโลหะภายนอก การถ่ายเทประจุดังกล่าวเกิดจากการเพิ่มหรือลด

ของอิเล็กตรอน 1 ตัว จึงประมาณว่าจำนวนประจุที่ผิวโลหะภายนอกมีค่าคงที่ แต่อย่างไรก็ตาม การเปลี่ยนแปลงจำนวนอิเล็กตรอน 1 ตัว ภายในเกาะโลหะซึ่งมีจำนวนอะตอมจำกัด จะส่งผลให้เกิดการเปลี่ยนแปลงจำนวนประจุสุทธิภายในเกาะโลหะอย่างมีนัยสำคัญ จึงทำให้ศักย์ไฟฟ้าที่เกาะโลหะเกิดการเปลี่ยนแปลง ดังนั้น การคำนวณผลต่างของพลังงานการเพิ่มประจุจึงใช้ประจุสุทธิของเกาะโลหะที่เกี่ยวข้องกับการถ่ายเทประจุในแต่ละกรณี ได้แก่ $Q_L = en_L$ หรือ $Q_R = en_R$ ซึ่งเป็นประจุสุทธิของเกาะโลหะทางซ้ายและทางขวา ตามลำดับ

เงื่อนไขที่ 2 ระบบเกิดการอนุรักษ์จำนวนประจุ ($\Delta Q_{sys} = 0$) ได้แก่ กรณีที่ 5 และ 6 ซึ่งเป็นเงื่อนไขที่การเปลี่ยนแปลงประจุของเกาะโลหะเกิดจากการถ่ายเทประจุระหว่างเกาะโลหะทั้งสองเกาะ โดยไม่เกิดการถ่ายเทประจุระหว่างระบบปั๊มอิเล็กตรอนเดียวกับสิ่งแวดล้อมภายนอก การถ่ายเทประจุดังกล่าวเกิดจากการเพิ่มหรือลดของอิเล็กตรอน 1 ตัวระหว่างเกาะโลหะทั้งสองภายในปั๊มอิเล็กตรอนเดียวซึ่งมีจำนวนอะตอมจำกัด จึงส่งผลให้เกิดการเปลี่ยนแปลงจำนวนประจุสุทธิอย่างมีนัยสำคัญทั้งภายในเกาะโลหะทางซ้ายและทางขวา ประกอบกับเกาะภายในปั๊มอิเล็กตรอนเดียวถูกสร้างขึ้นจากโลหะ อิเล็กตรอนสามารถเคลื่อนที่ได้อย่างอิสระ จึงทำให้ไม่เกิดการสะสมพาหะในสภาวะปกติ จำนวนประจุสุทธิในเกาะโลหะทั้งสองในสภาวะก่อนการถ่ายเทประจุระหว่างเกาะจึงมีค่าเป็นศูนย์ ซึ่งทำให้ศักย์ไฟฟ้าที่เกาะโลหะทั้งทางซ้ายและทางขวาที่สภาวะเริ่มต้นมีค่าเป็นศูนย์ ($U_L = 0$ และ $U_R = 0$) เมื่อนำศักย์ไฟฟ้างดลงตามสมการ (3.2) และ (3.3) ทำให้ได้ประจุสุทธิของเกาะโลหะทางซ้ายและทางขวาเป็นดังสมการ (ผ.1) และ (ผ.2) ตามลำดับ

$$Q_L = C_\Sigma U_L - en_{L,0} - U_R C_M \quad (ผ.1)$$

$$= -en_{L,0}$$

$$Q_R = C_\Sigma U_R - en_{R,0} - U_L C_M \quad (ผ.2)$$

$$= -en_{R,0}$$

ดังนั้น สำหรับการคำนวณสมการผลต่างของพลังงานการเพิ่มประจุรวมของปั๊มอิเล็กตรอนเดียวในกรณีที่อยู่ภายใต้เงื่อนไขนี้จึงใช้ประจุสุทธิของเกาะโลหะทางซ้ายและทางขวาในสมการ (ผ.1) และ (ผ.2)

ตัวอย่างการคำนวณสมการผลต่างพลังงานการเพิ่มประจุรวมของปั๊มอิเล็กตรอนเดียวในกรณีที่ 1

เพื่อให้เข้าใจวิธีการคำนวณสมการผลต่างพลังงานการเพิ่มประจุรวมของปั๊มอิเล็กตรอนเดียวในเงื่อนไขที่ $\Delta Q_{sys} \neq 0$ ในหัวข้อนี้ได้ยกตัวอย่างวิธีการคำนวณดังกล่าวในกรณีที่ 1 ซึ่งเป็นกรณีที่อิเล็กตรอนเคลื่อนที่จากขั้วซอร์สไปยังเกาะโลหะทางซ้าย จะทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงของพลังงานศักย์ไฟฟ้าสถิตที่เกาะทางซ้าย ส่งผลให้สมการผลต่างพลังงานการเพิ่มประจุรวมของปั๊มอิเล็กตรอนเดียวเป็นดังสมการ

$$\begin{aligned}
\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L-1} &= \int_{en_L}^{e(n_L-1)} (U_L - V_L) dQ_L \\
&= \int_{en_L}^{e(n_L-1)} \left(\frac{2E_{CL}(Q_L + n_{L0}e) + E_{CM}(Q_R + n_{R0}e)}{e^2} - V_L \right) dQ_L \\
&= \frac{2E_{CL}}{e^2} \left(Q_L^2 / 2 \Big|_{en_L}^{e(n_L-1)} + n_{L0}e Q_L \Big|_{en_L}^{e(n_L-1)} \right) \\
&\quad + \frac{E_{CM}}{e^2} \left(Q_R Q_L \Big|_{en_L}^{e(n_L-1)} + n_{L0}e Q_L \Big|_{en_L}^{e(n_L-1)} \right) \\
&\quad - V_L Q_L \Big|_{en_L}^{e(n_L-1)}
\end{aligned} \tag{ผ.3}$$

เมื่อแทนค่าขอบเขตของปริพันธ์ลงในสมการ (ผ.1) พบว่า

$$\begin{aligned}
\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L-1} &= \frac{2E_{CL}}{e^2} \left(\frac{1}{2} (e^2(n_L^2 - 2n_L + 1) + n_L e^2) - n_{L0}e^2 \right) \\
&\quad + \frac{E_{CM}}{e^2} \left(Q_R (e(n_L - 1) - en_L) + n_{L0}e (e(n_L - 1) - en_L) \right) \\
&\quad - V_L (e(n_L - 1) - en_L)
\end{aligned} \tag{ผ.4}$$

เนื่องจากกรณีนี้อยู่ภายใต้เงื่อนไขที่ระบบไม่เกิดการอนุรักษ์จำนวนประจุ จึงได้แทนจำนวนประจุสุทธิของเกาะโลหะทางขวา $Q_R = en_R$ ลงในสมการ (ผ.4) ทำให้ได้สมการผลต่างพลังงานการเพิ่มประจุรวมของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวดังสมการ

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L-1} = E_{CL}(1 - 2n_L - 2n_{L0}) - E_{CM}(n_R + n_{R0}) + eV_L \tag{ผ.5}$$

ในการสร้างสมการสำหรับกำหนดขอบเขตเสถียรภาพของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวภายในแผนภาพเสถียร จะได้จากการแทนเงื่อนไข $\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L-1} = 0$ ลงในสมการ (ผ.5) พบว่า

$$0 = E_{CL}(1 - 2n_L - 2n_{L0}) - E_{CM}(n_R + n_{R0}) + eV_L \tag{ผ.6}$$

จากนั้น จัดสมการ (ผ.6) ให้อยู่ในรูปของสมการเส้นตรงได้ดังสมการ

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L-1} : \quad n_{R0} = -\frac{2E_{CL}}{E_{CM}} n_{L0} + \left(\frac{E_{CL}(1 - 2n_L) + E_{CM}n_R + eV_L}{E_{CM}} \right) \tag{ผ.7}$$

สมการ (ผ.7) เป็นสมการที่ใช้กำหนดเงื่อนไขเสถียรภาพของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวในสถานะประจุต่างๆ สำหรับกรณีที่ 2 - 4 สามารถคำนวณสมการผลต่างพลังงานการเพิ่มประจุรวมของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวได้ด้วยขั้นตอนดังตัวอย่างการคำนวณในกรณีที่ 1

ตัวอย่างการคำนวณสมการผลต่างพลังงานการเพิ่มประจุรวมของป้อนอิเล็กตรอนเดี่ยวในกรณี 5

เพื่ออธิบายวิธีการคำนวณสมการผลต่างพลังงานการเพิ่มประจุรวมของป้อนอิเล็กตรอนเดี่ยวภายใต้เงื่อนไขที่ $\Delta Q_{sys} = 0$ ในหัวข้อนี้ได้ยกตัวอย่างวิธีการคำนวณดังกล่าวในกรณีที่ 5 กล่าวคือ กรณีที่อิเล็กตรอนเคลื่อนที่จากเกาะโลหะทางซ้ายไปยังเกาะโลหะทางขวา ซึ่งการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนในลักษณะนี้ทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงจำนวนประจุสุทธิภายในเกาะโลหะจึงส่งผลให้พลังงานศักย์ไฟฟ้าสถิตของเกาะโลหะทั้งสองเกิดการเปลี่ยนแปลง ดังนั้น การเปลี่ยนแปลงของพลังงานการเพิ่มประจุรวมของป้อนอิเล็กตรอนเดี่ยวจึงสามารถคำนวณได้จากผลรวมระหว่างการเปลี่ยนแปลงพลังงานของเกาะโลหะทางซ้ายและทางขวาดังสมการ

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L+1, n_R \rightarrow n_R-1} = \int_{en_L}^{e(n_L+1)} (U_L - U_R) dQ_L + \int_{en_R}^{e(n_R-1)} (U_R - U_L) dQ_R \quad (ผ.8)$$

เมื่อนำศักย์ไฟฟ้าของเกาะโลหะทางซ้ายและขวา U_L และ U_R ในสมการ (3.6) และ (3.7) แทนลงในสมการ (ผ.8) จะได้

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L+1, n_R \rightarrow n_R-1} = \left[\int_{en_L}^{e(n_L+1)} \left(\frac{2E_{CL}}{e^2} (Q_L + en_{L0}) + \frac{E_{CM}}{e^2} (Q_R + en_{R0}) \right) dQ_L \right] - \left[\int_{en_L}^{e(n_L+1)} \left(\frac{2E_{CR}}{e^2} (Q_R + en_{R0}) + \frac{E_{CM}}{e^2} (Q_L + en_{L0}) \right) dQ_L \right] + \left[\int_{en_R}^{e(n_R-1)} \left(\frac{2E_{CR}}{e^2} (Q_R + en_{R0}) + \frac{E_{CM}}{e^2} (Q_L + en_{L0}) \right) dQ_R \right] - \left[\int_{en_R}^{e(n_R-1)} \left(\frac{2E_{CL}}{e^2} (Q_L + en_{L0}) + \frac{E_{CM}}{e^2} (Q_R + en_{R0}) \right) dQ_R \right] \quad (ผ.9)$$

เนื่องจากกรณีนี้อยู่ภายใต้เงื่อนไขที่ระบบเกิดการอนุรักษ์จำนวนประจุ โดย Q_R เป็นเสมือนค่าคงที่ในพจน์แรกทางขวาของสมการ (ผ.9) จากสมการ (ผ.1) จะสามารถแทนค่าประจุสุทธิของเกาะโลหะทางขวา $Q_R = -en_{R0}$ ลงในพจน์ดังกล่าว ในขณะที่ Q_L เป็นเสมือนค่าคงที่ในพจน์ที่สองทางขวามือของสมการ (ผ.9) โดยแทนค่าประจุสุทธิของเกาะโลหะทางซ้าย $Q_L = -en_{L0}$ จากสมการ (ผ.2) ลงในพจน์ดังกล่าวทำให้สามารถจัดรูปได้ดังสมการ

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L+1, n_R \rightarrow n_R-1} = \left[\int_{en_L}^{e(n_L+1)} \frac{2E_{CL}}{e^2} (Q_L + en_{L0}) dQ_L - \int_{en_L}^{e(n_L+1)} \frac{E_{CM}}{e^2} (Q_L + en_{L0}) dQ_L \right] + \left[\int_{en_R}^{e(n_R-1)} \frac{2E_{CR}}{e^2} (Q_R + en_{R0}) dQ_R - \int_{en_R}^{e(n_R-1)} \frac{E_{CM}}{e^2} (Q_R + en_{R0}) dQ_R \right] \quad (\text{ผ.10})$$

จากการหาค่าปริพันธ์ ทำให้ได้ค่าผลต่างพลังงานการเพิ่มประจุรวมของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวดังสมการ

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L+1, n_R \rightarrow n_R-1} = \left[\frac{2E_{CL}}{e^2} \left(Q_L^2 / 2 \Big|_{en_L}^{e(n_L+1)} + en_{L0} Q_L \Big|_{en_L}^{e(n_L+1)} \right) - \frac{E_{CM}}{e^2} \left(Q_L^2 / 2 \Big|_{en_L}^{e(n_L+1)} + en_{L0} Q_L \Big|_{en_L}^{e(n_L+1)} \right) \right] + \left[\frac{2E_{CR}}{e^2} \left(Q_R^2 / 2 \Big|_{en_R}^{e(n_R-1)} + en_{R0} Q_R \Big|_{en_R}^{e(n_R-1)} \right) - \frac{E_{CM}}{e^2} \left(Q_R^2 / 2 \Big|_{en_R}^{e(n_R-1)} + en_{R0} Q_R \Big|_{en_R}^{e(n_R-1)} \right) \right] \quad (\text{ผ.11})$$

เมื่อแทนขอบเขตของปริพันธ์ พบว่า

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L+1, n_R \rightarrow n_R-1} = E_{CL} (1 + 2n_L + 2n_{L0}) - E_{CM} (1/2 + n_L + n_{L0}) + E_{CR} (1 - 2n_R - 2n_{R0}) - E_{CM} (1/2 - n_R - n_{R0}) \quad (\text{ผ.12})$$

ในการสร้างสมการสำหรับกำหนดขอบเขตเสถียรภาพของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวภายในแผนภาพเสถียร จะ

ได้จากการแทนเงื่อนไข $\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L+1, n_R \rightarrow n_R-1} = 0$ ลงในสมการ (ผ.12) จะได้

$$0 = E_{CL} (1 + 2n_L + 2n_{L0}) - E_{CM} (1/2 + n_L + n_{L0}) + E_{CR} (1 - 2n_R - 2n_{R0}) - E_{CM} (1/2 - n_R - n_{R0}) \quad (\text{ผ.13})$$

จากนั้น จัดสมการ (ผ.13) ให้อยู่ในรูปของสมการเส้นตรงดังสมการ

$$\Delta E_C^{n_L \rightarrow n_L+1, n_R \rightarrow n_R-1}; \quad n_{R0} = \frac{(2E_{CL} - E_{CM})}{(2E_{CR} - E_{CM})} n_{L0} + \left(\frac{E_{CL}(1 + 2n_L) + E_{CR}(1 - 2n_R) + E_{CM}(n_R - n_L - 1)}{(2E_{CR} - E_{CM})} \right) \quad (\text{ผ.14})$$

สมการ (ผ.14) เป็นสมการที่ใช้กำหนดเงื่อนไขเสถียรภาพของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวในสถานะประจุต่างๆ สำหรับกรณีที่ 6 สามารถคำนวณสมการผลต่างพลังงานการเพิ่มประจุรวมของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวได้ด้วยขั้นตอนดังตัวอย่างการคำนวณในกรณีที่ 5 เมื่อรวมเงื่อนไขเสถียรภาพของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวในสถานะประจุต่างๆ ทั้ง 6 กรณี จะสามารถสร้างแผนภาพเสถียรได้ตามรายละเอียดในบทที่ 3

ประวัติย่อผู้ทำโครงการ



ประวัติย่อผู้ทำโครงการ

ชื่อ นามสกุล

วัน เดือน ปีเกิด

จังหวัด และประเทศที่เกิด

ประวัติการศึกษา

นาย ปราโมทย์ รังศรี

วันที่ 18 ตุลาคม 2534

อำเภอศรีสงคราม จังหวัดนครพนม ประเทศไทย

พ.ศ. 2549 สำเร็จการศึกษาระดับมัธยมศึกษา

โรงเรียนนาคำราษฎร์รังสรรค์ ตำบลนาคำ อำเภอศรีสงคราม

จังหวัดนครพนม

พ.ศ. 2553 สำเร็จการศึกษาระดับมัธยมศึกษา

โรงเรียนนาคำราษฎร์รังสรรค์ ตำบลนาคำ อำเภอศรีสงคราม

จังหวัดนครพนม

พ.ศ. 2557 สำเร็จการศึกษาระดับปริญญาตรี วท.บ. ฟิสิกส์

คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหาสารคาม ตำบลขามเรียง

อำเภอกันทรวิชัย จังหวัดมหาสารคาม

ที่อยู่ที่สามารถติดต่อได้

บ้านเลขที่ 42 หมู่ 1 ตำบลนาคำ อำเภอศรีสงคราม จังหวัดนครพนม

48150 เบอร์โทรศัพท์ 087-217-1608

E-mail: pramote.rungsri@gmail.com



ชื่อ นามสกุล

วัน เดือน ปีเกิด

จังหวัด และประเทศที่เกิด

ประวัติการศึกษา

นาย วรวิทย์ บุญศรี

วันที่ 20 สิงหาคม 2534

อำเภอสามชัย จังหวัดกาฬสินธุ์ ประเทศไทย

พ.ศ. 2549 สำเร็จการศึกษาระดับมัธยมศึกษาตอนต้นจากโรงเรียนสามชัย

ตำบลสำราญ อำเภอสามชัย จังหวัดกาฬสินธุ์

พ.ศ. 2553 สำเร็จการศึกษาระดับมัธยมศึกษาตอนปลายจากโรงเรียนสามชัย

ตำบลสำราญ อำเภอสามชัย จังหวัดกาฬสินธุ์

พ.ศ. 2557 สำเร็จการศึกษาระดับปริญญาตรี วท.บ. ฟิสิกส์

คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหาสารคาม ตำบลขามเรียง

อำเภอกันทรวิชัย จังหวัดมหาสารคาม

ที่อยู่ที่สามารถติดต่อได้

บ้านเลขที่ 72 หมู่ 3 ตำบลหนองช้าง อำเภอสามชัย จังหวัดกาฬสินธุ์

46180 เบอร์โทรศัพท์ 082-124-2562

E-mail: w.boonruesi@gmail.com



ชื่อ นามสกุล
วัน เดือน ปีเกิด
จังหวัด และประเทศที่เกิด
ประวัติการศึกษา

นาย สุธีร์ สัมพันธ์ภัย
วันที่ 17 ตุลาคม 2534
อำเภอประโคนชัย จังหวัดบุรีรัมย์ ประเทศไทย
พ.ศ. 2549 สำเร็จการศึกษาระดับมัธยมศึกษา
โรงเรียนประโคนชัยพิทยาคม ตำบลประโคนชัย อำเภอประโคนชัย
จังหวัดบุรีรัมย์
พ.ศ. 2553 สำเร็จการศึกษาระดับมัธยมศึกษา
โรงเรียนประโคนชัยพิทยาคม ตำบลประโคนชัย อำเภอประโคนชัย
จังหวัดบุรีรัมย์
พ.ศ. 2557 สำเร็จการศึกษาระดับปริญญาตรี วท.บ. ฟิสิกส์
คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหาสารคาม ตำบลขามเรียง
อำเภอกันทรวิชัย จังหวัดมหาสารคาม
ที่อยู่ที่สามารถติดต่อได้ บ้านเลขที่ 36/1 หมู่ 1 ตำบลประโคนชัย อำเภอประโคนชัย
จังหวัดบุรีรัมย์ 31140 เบอร์โทรศัพท์ 084-471-4712
E-mail: sampanapai.s@gmail.com

