

พลังงานการเพิ่มประจุย้งผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวชนิดโลหะ

ศุภากร พวงยอด
สุรียา ลาวัลย์

เสนอต่อมหาวิทยาลัยมหาสารคาม เพื่อเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร
ปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์
เมษายน 2557
ลิขสิทธิ์เป็นของมหาวิทยาลัยมหาสารคาม

EFFECTIVE CHARGING ENERGY OF THE METALLIC SINGLE-ELECTRON
TRANSISTOR

SUPAKORN PHOUNGYOD
SURIYA LAWAN

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

APRIL 2014

ALL RIGHTS RESERVED BY MAHASARAKHAM UNIVERSITY



พลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวชนิดโลหะ

ศุภากร พวงยอด

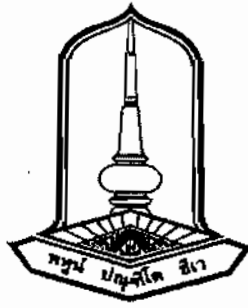
สุรียา ลาวัลย์

เสนอต่อมหาวิทยาลัยมหาสารคาม เพื่อเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร

ปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์

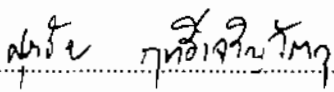
เมษายน 2557

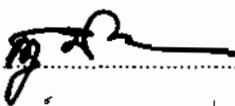
ลิขสิทธิ์เป็นของมหาวิทยาลัยมหาสารคาม

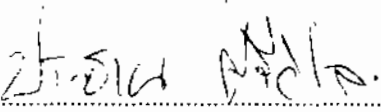


คณะกรรมการสอบปริญญาโท ได้พิจารณาปริญญาโทของนางสาวศุภากร พวงยอด และนายสุรียา ลาวัลย์ แล้วเห็นสมควรรับเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์ ของมหาวิทยาลัยมหาสารคาม

คณะกรรมการสอบปริญญาโท


..... ประธานกรรมการ
(อาจารย์ ดร. ศุภชัย จิตฺจิวิจิตฺต) (อาจารย์ ดร. ศุภชัย จิตฺจิวิจิตฺต)


..... กรรมการ
(อาจารย์ ดร. กฤษกร ปาสาโน) (อาจารย์ ดร. กฤษกร ปาสาโน)


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

.....
(อาจารย์ ดร. ปวีณา เหลากุล)
ประธานหลักสูตรสาขา ฟิสิกส์

.....
(อาจารย์ ดร. นิตติศักดิ์ ปาสาจะ)
หัวหน้าภาควิชาฟิสิกส์
วันที่ 22 เดือน เมษายน พ.ศ. 2557

กิตติกรรมประกาศ

ปริญญาานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จสมบูรณ์ได้ด้วยความกรุณาและความช่วยเหลืออย่างสูงยิ่งจาก อาจารย์ ดร. ประธาน ศรีวิไล อาจารย์ที่ปรึกษา อาจารย์ ดร. ศุภชัย ฤทธิ์เจริญวัตถุ ประธาน กรรมการสอบ และอาจารย์ ดร. กฤษกร ปาสาโน กรรมการสอบ ที่ได้คำปรึกษาและตรวจสอบ ข้อผิดพลาดพร้อมทั้งชี้แนะ และภาคีวิชาฟิสิกส์ที่สนับสนุนงบประมาณในปริญญาานิพนธ์นี้

ขอขอบพระคุณบิดา มารดา ผู้ให้กำเนิดที่ให้การอบรมเลี้ยงดูและสนับสนุนด้านต่างๆ โดยเฉพาะด้านการศึกษา รวมทั้งเป็นกำลังใจที่ดีเสมอมา

ขอขอบพระคุณคณาจารย์เจ้าหน้าที่ประจำภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัย มหาสารคามทุกท่าน ที่ได้ให้คำปรึกษาชี้แนะและช่วยเหลืออำนวยความสะดวกทั้งในด้านความรู้และ อุปกรณ์ต่างๆ สำหรับปริญญาานิพนธ์นี้

ขอขอบพระคุณ นายตะวัน ทองสุข นางสาวรุ่งนภา เจริญบุญ นางสาวจิรภา ยศปัญญา และนางสาวณัฐกฤดา นาก้อนทอง ผู้ที่คอยให้คำแนะนำและอำนวยความสะดวกในการทำโครงการนี้

ขอขอบใจพี่ๆ เพื่อนๆ น้องๆ ทุกคนที่มีส่วนเกี่ยวข้องให้ความช่วยเหลือและให้คำปรึกษา รวมไปถึงกำลังใจจากทุกคนที่ทำให้ปริญญาานิพนธ์นี้สำเร็จลงได้

ศุภากร พวงยอด

สุรียา ลาวัลย์

ชื่อเรื่อง	พลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวชนิดโลหะ	
ผู้ทำโครงการ	นางสาวศุภากร พวงยอด นายสุรียา ลาวัลย์	
ปริญญา	วิทยาศาสตรบัณฑิต (วท.บ.)	สาขาวิชา ฟิสิกส์
อาจารย์ที่ปรึกษา	อาจารย์ ดร.ประธาน ศรีวิไล	
มหาวิทยาลัย	มหาวิทยาลัยมหาสารคาม	ปีที่พิมพ์ 2557

บทคัดย่อ

ในโครงการนี้ได้คำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวชนิดโลหะ ด้วยวิธีการฟูเรียร์คอนตัมมอนติคาร์โล ในกรณีที่แรงดันไฟฟ้าจากภายนอกมีค่าเป็นศูนย์ จากผลการคำนวณ พบว่า ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลที่ถูกนิยามขึ้นสามารถอธิบายการเกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ได้ กล่าวคือ ในกรณีที่ระบบเกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์อย่างเด่นชัด ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าเท่ากับหนึ่ง และค่าพลังงานดังกล่าวจะมีค่าลดลงแบบเอกซ์โพเนนเชียล เมื่อค่าความนำไฟฟ้าและอุณหภูมิของระบบมีค่าเพิ่มสูงขึ้น และมีค่าเป็นศูนย์ในกรณีที่ระบบไม่สามารถแสดงปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์

คำสำคัญ : พลังงานการเพิ่มประจุยังผล; ปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์

TITLE Effective charging energy of the metallic single-electron transistor
AUTHORS Miss Supakorn Phoungyod
Mr. Suriya Lawan
DEGREE Bachelor of Science **MAJOR** Physics
ADVISOR Dr. Prathan Srivilai
UNIVERSITY Mahasarakham University **DATE** 2014

ABSTRACT

This study focused on the calculation of the effective charging energy of the metallic single-electron transistor using the quantum Monte Carlo method in the case of the zero external voltage. The result can represent the strength of the Coulomb blockade effect. In Coulomb blockade regime, the effective charging energy is unity. Moreover, the result shows the exponential relation between the effective charging energy and the conductance at the tunneling junction. On contrary, the absence of the effective charging energy leads to the absolute suppression of the Coulomb blockade phenomenon.

Keywords : Effective charging energy; Coulomb blockade phenomenon

สารบัญ

	หน้า
กิตติกรรมประกาศ	ก
บทคัดย่อภาษาไทย	ข
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ	ค
สารบัญ	ง
สารบัญตาราง	ฉ
สารบัญภาพประกอบ	ช
บทที่ 1 บทนำ	1
1.1 ที่มาและความสำคัญ	1
1.2 วัตถุประสงค์ของการทำโครงการ	3
1.3 ขอบเขตของโครงการ	3
1.4 สถานที่ทำโครงการ	3
1.5 ประโยชน์ที่ได้รับ	3
บทที่ 2 ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	4
2.1 กล้องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว	4
2.2 ทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว	8
2.3 จำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว	15
2.4 วิธีการมอดิเคอร์โล	20
2.4.1 การหาปริพันธ์ในหลายมิติ	20
2.4.2 การสุ่มตัวอย่างตามความสำคัญ	21
2.5 การคำนวณค่าคาดหวังด้วยวิธีการควอนตัมมอดิเคอร์โล	24
บทที่ 3 การพัฒนาระเบียบวิธีควอนตัมมอดิเคอร์โล	28
3.1 การคำนวณค่าคอรีเลชันฟังก์ชัน	28
3.2 ระบบวิธีซิงค์เกิลไซด์แอฟเดท	30
3.3 ระบบวิธีฟูเรียร์แอฟเดท	31
3.3.1 แอ็กชันของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว	33
3.3.2 การตรวจสอบการจัดพจน์แอ็กชัน	37
3.3.3 ค่าคอรีเลชันฟังก์ชันของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว	39
3.4 การคำนวณค่าคอรีเลชันฟังก์ชันด้วยระบบวิธีฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์ม	40

สารบัญ (ต่อ)

	หน้า
บทที่ 4 ผลการคำนวณและอภิปรายผล	43
4.1 หลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว	43
4.2 การคำนวณค่าหลังงานการเพิ่มประจุยังผลด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล	44
4.3 ผลการคำนวณค่าหลังงานการเพิ่มประจุยังผล	45
บทที่ 5 สรุปผลและข้อเสนอแนะ	55
5.1 สรุปผลการคำนวณ	55
5.2 ข้อเสนอแนะ	56
บรรณานุกรม	57
ประวัติย่อผู้ทำโครงการ	60

สารบัญตาราง

	หน้า
ตาราง 2.1 พารามิเตอร์ของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวชนิดโลหะที่ได้จากการทดลองของวอลลิเชอร์และคณะ โดยที่ G_{cl} คือ ค่าความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวที่อุณหภูมิสูง เมื่อ $g = G_T / G_K = (G_s + G_d) / G_K$ โดยที่ $G_s = G_{s1} + G_{s2}$ และ $G_d = G_{d1} + G_{d2}$	9
ตาราง 3.1 ผลการเปรียบเทียบแอมพลิจูดของคลออมบ์ที่เป็นฟังก์ชันของตัวแปรเฟสและสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส โดยใช้โปรแกรมภาษาซีในการสุ่มตัวอย่าง ซึ่งมีค่าอยู่ในช่วง $[0, 2\pi]$ และกำหนดให้ตัวเลขไวน์ดิง (w) มีค่าเท่ากับศูนย์	37
ตาราง 3.2 ผลการเปรียบเทียบแอมพลิจูดของการทะลุผ่านที่เป็นฟังก์ชันของตัวแปรเฟสและสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส โดยใช้โปรแกรมภาษาซีในการสุ่มตัวอย่าง ซึ่งมีค่าอยู่ในช่วง $[0, 2\pi]$ และกำหนดให้ตัวเลขไวน์ดิง (w) มีค่าเท่ากับศูนย์	38
ตาราง 3.3 ผลการเปรียบเทียบแอมพลิจูดที่เป็นฟังก์ชันของตัวแปรเฟสและสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส โดยที่ตัวเลขทรอดเตอร์ (N) คือ 32	38
ตาราง 4.1 ผลการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ในช่วงอุณหภูมิ $\beta E_c = [1, 21]$	45

สารบัญภาพประกอบ

	หน้า
ภาพประกอบ 1.1	2
ภาพประกอบ 2.1	4
ภาพประกอบ 2.2	6
ภาพประกอบ 2.3	7
ภาพประกอบ 2.4	8
ภาพประกอบ 2.5	9
ภาพประกอบ 2.6	11

สารบัญภาพประกอบ (ต่อ)

	หน้า
ภาพประกอบ 2.7 ความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว เมื่อแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกิดและอุณหภูมิมีค่าเปลี่ยนแปลงไป โดยผลการทดลองของวอลลิเชอร์และคณะ แทนด้วยสัญลักษณ์จุดวงกลม (○) และผลการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลของกราเบิร์ต แทนด้วยสัญลักษณ์เส้นตรง (—)	13
ภาพประกอบ 2.8 ผลการคำนวณจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านในทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว โดยข้อมูลสีดำ (●) และข้อมูลสีแดง (●) เป็นผลที่คำนวณได้จากทฤษฎีแบบฉบับตามสมการ (2.18) และวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ตามสมการ (2.28) ตามลำดับ	18
ภาพประกอบ 2.9 ความสัมพันธ์ระหว่างแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกิดและจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่าน	19
ภาพประกอบ 3.1 ค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวที่ค่า $g = 4.75$ จำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกิด $n_g = 0.0$ และค่า βE_c อยู่ในช่วง 0.5 ถึง 21.0	29
ภาพประกอบ 3.2 แผนผังการทำงานของโปรแกรมที่ใช้ในการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันโดยระเบียบวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล	30
ภาพประกอบ 3.3 แผนผังขั้นตอนการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันในส่วนของวงรอบการวัดในกรณีของระเบียบวิธีซิงค์เกิลไซด์ออฟเดท	32
ภาพประกอบ 3.4 แผนผังขั้นตอนการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันโดยใช้ระเบียบวิธีฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์ม โดยทำการสุ่มตัวอย่างตัวแปรเฟส $\{\xi_j\}$	40
ภาพประกอบ 3.5 ผลการเปรียบเทียบค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันที่เป็นฟังก์ชันของตัวแปรเฟส และค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันที่เป็นฟังก์ชันของสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส	41
ภาพประกอบ 3.6 ผลการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชัน โดยคำนวณจากระเบียบวิธีซิงค์เกิลไซด์ออฟเดท ระเบียบวิธีฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มและระเบียบวิธีไซน์ทรานส์ฟอร์ม	42
ภาพประกอบ 4.1 ผลการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว	48

สารบัญภาพประกอบ (ต่อ)

	หน้า
ภาพประกอบ 4.2 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล (E_C^*/E_C) กับค่าความนำไฟฟ้ารวม (g_T) กรณี $\beta E_C = 21.0$	49
ภาพประกอบ 4.3 (ก) ความสัมพันธ์ระหว่าง $\ln(E_C^*/E_C)$ กับค่าความนำไฟฟ้ารวม (g_T) กรณี $\beta E_C = 21.0$ (ข) ความสัมพันธ์ระหว่าง $\ln(E_C^*/E_C)$ กับค่าความนำไฟฟ้ารวมยกกำลังสอง (g_T^2) กรณี $\beta E_C = 21.0$	49
ภาพประกอบ 4.4 พลังงานการเพิ่มประจุยังผลเมื่ออุณหภูมิเปลี่ยนแปลง $\beta E_C = [1, 21]$ และค่า $g_T = [0, 30]$	50
ภาพประกอบ 4.5 การเปลี่ยนแปลงของจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านเมื่ออุณหภูมิเปลี่ยนแปลง ในช่วงค่าความนำไฟฟ้ารวม $g_T = [0, 30]$	52

บทที่ 1

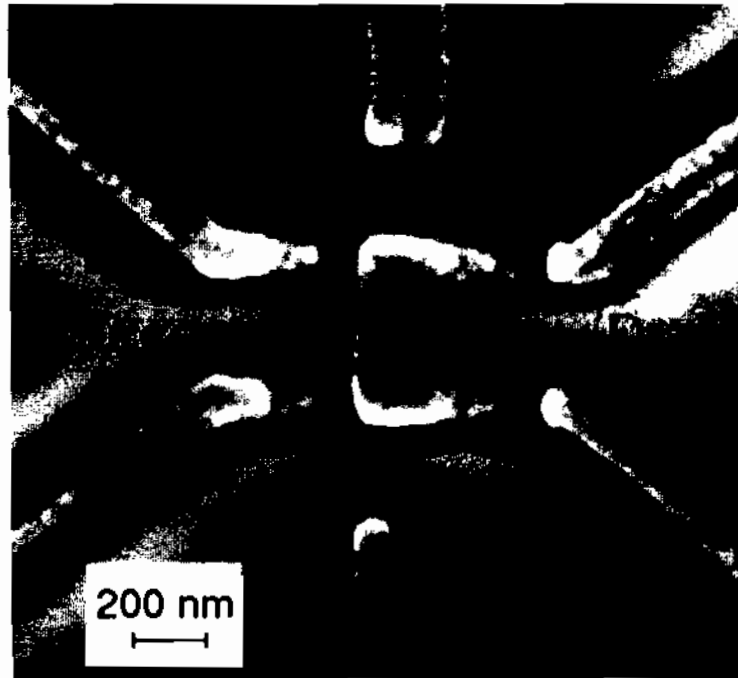
บทนำ

1.1 ที่มาและความสำคัญ

ในปัจจุบันการวิจัยระบบเมโสโคปิค (Mesoscopic system) กำลังได้รับความสนใจเป็นอย่างมาก เนื่องจากคุณสมบัติเฉพาะของระบบนี้ กล่าวคือ ระบบสามารถแสดงพฤติกรรมทางไฟฟ้าทั้งควอนตัมและแบบฉบับ (Quantum and classical behaviors) ปรากฏการณ์ที่สำคัญอย่างหนึ่งที่เกิดขึ้น คือ ปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ (Coulomb blockade effect) ผลของปรากฏการณ์ดังกล่าวทำให้สามารถควบคุมอิเล็กตรอนให้เคลื่อนที่ผ่านระบบได้ที่ละหนึ่งตัว ซึ่งระบบดังกล่าวถูกเรียกว่า อุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว (Single-electron devices) [1]

ปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์เป็นปรากฏการณ์ที่กระแสการทะลุผ่าน (Tunneling current) มีค่าลดต่ำลง เนื่องจากผลของอันตรกิริยาของแรงคูลอมบ์ โดยปรากฏการณ์ดังกล่าวได้ถูกศึกษาครั้งแรก ในอุปกรณ์กล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว (Single-electron boxes; SEB) [2] ซึ่งเป็นอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวแบบที่ง่ายที่สุด กล่าวคือ ประกอบด้วยควอนตัมดอท (Quantum dot) หนึ่งควอนตัมดอท รอยต่อตัวเก็บประจุและรอยต่อการทะลุผ่าน (Tunneling junction) อย่างละหนึ่งรอยต่อ ต่อมาในปี ค.ศ. 2002 วอลลิเซอร์และคณะ (Walliser et al) ได้ทำการทดลองเพื่อศึกษาปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ โดยการวัดค่าความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว (Single-electron transistors; SET) [3] นอกจากนั้น วอลลิเซอร์และคณะได้ใช้วิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล (Quantum Monte Carlo method) คำนวณค่าความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว เพื่อเปรียบเทียบกับผลการทดลอง พบว่า ค่าความนำไฟฟ้าของระบบขึ้นกับแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกต โดยที่ค่าความนำไฟฟ้ามีค่าสูงสุดเมื่อศักย์ไฟฟ้าที่ขั้วเกตมีค่าสอดคล้องกับพลังงานการเพิ่มประจุ (Charging energy) ซึ่งเป็นผลที่เกิดจากปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ โดยปรากฏการณ์ดังกล่าวเกิดขึ้นเฉพาะที่อุณหภูมิต่ำ ซึ่งพลังงานรวมของอิเล็กตรอนมีค่าน้อยกว่าพลังงานการเพิ่มประจุ

ทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวประกอบไปด้วยควอนตัมดอทหนึ่งควอนตัมดอท รอยต่อ การทะลุผ่านสองรอยต่อ และมีขั้วเกต (Gate electrode) ซึ่งทำหน้าที่ควบคุมจำนวนอิเล็กตรอนในควอนตัมดอท เมื่อพิจารณาด้วยทฤษฎีแบบฉบับ อิเล็กตรอนจะสามารถเคลื่อนที่ผ่านระบบจากขั้วไฟฟ้าด้านหนึ่งไปยังควอนตัมดอทได้ เมื่ออิเล็กตรอนมีพลังงานเฉลี่ยมากกว่าพลังงานการเพิ่มประจุ ซึ่งเป็นพลังงานน้อยที่สุดที่ใช้ในการเพิ่มอิเล็กตรอนหนึ่งตัวเข้าไปในระบบ



ภาพประกอบ 1.1 ภาพถ่ายของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวชนิดโลหะด้วยกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนแบบส่องกราด (Scanning-electron microscopy; SEM) [3]

จากการศึกษาค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล (Effective charging energy) ของอุปกรณ์กล้องอิเล็กตรอนเดี่ยว [3-4] พบว่า มีค่าขึ้นอยู่กับอุณหภูมิและค่าความนำไฟฟ้าของกล้องอิเล็กตรอนเดี่ยว แต่อย่างไรก็ตาม โนกรณิของระบบที่มีความซับซ้อนมากยิ่งขึ้น เช่น ทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ไม่มีงานวิจัยที่แสดงความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานการเพิ่มประจุยังผลกับค่าความนำไฟฟ้าและอุณหภูมิ

ในโครงการนี้มีวัตถุประสงค์ เพื่อคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว เมื่ออุณหภูมิและค่าความนำไฟฟ้ามีค่าเปลี่ยนแปลง และเพื่อพัฒนาระเบียบวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล ให้มีประสิทธิภาพสูงขึ้น โดยในโครงการนี้ถูกแบ่งออกเป็นห้าบทที่สำคัญดังนี้ บทแรกกล่าวถึงที่มาและความสำคัญของโครงการ บทที่สองแสดงให้เห็นถึงความสำคัญของค่าพลังงานการเพิ่มประจุในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวและวิธีการมอนติคาร์โลที่ใช้ในโครงการนี้ บทที่สามเป็นการพัฒนาระเบียบวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล เพื่อใช้ในการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว สำหรับบทที่สี่ได้กล่าวถึงรายละเอียดของการคำนวณพลังงานการเพิ่มประจุยังผล รวมถึงผลของการคำนวณและการอภิปรายผล และในบทสุดท้ายได้กล่าวถึงข้อสรุปและข้อเสนอแนะสำหรับผู้สนใจศึกษาค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวที่มีโครงสร้างซับซ้อนมากขึ้น

1.2 วัตถุประสงค์ของการทำโครงการ

1. เพื่อพัฒนาระเบียงวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล เพื่อใช้ในการคำนวณค่าคาดหวังใดๆ ของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว
2. เพื่อคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว

1.3 ขอบเขตของโครงการ

คำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ในกรณีที่มีอุณหภูมิต่างๆ กล่าวคือ $\beta E_C \in \{1, 5, 10, 15, 21\}$ และค่าความนำไฟฟ้ารวมของระบบ $g_T \in \{0.0, 5.0, 10.0, 15.0, 20.0, 25.0, 30.0\}$

1.4 สถานที่ทำโครงการ

หน่วยวิจัยฟิสิกส์ทฤษฎีสสารควบแน่น ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหาสารคาม

1.5 ประโยชน์ที่ได้รับ

1. ได้องค์ความรู้สำหรับประยุกต์ใช้ในการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล ในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวที่มีความซับซ้อนมากยิ่งขึ้น
2. ได้เผยแพร่ตีพิมพ์ผลงานในวารสารระดับประเทศหรือระดับนานาชาติ

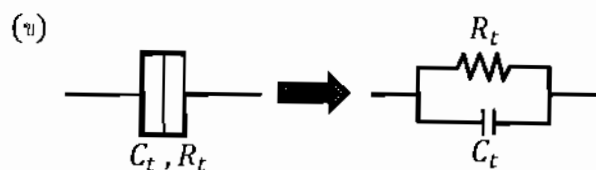
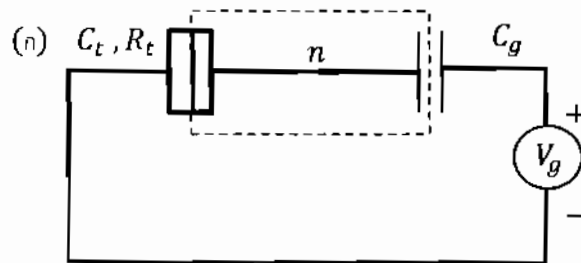
บทที่ 2

ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

ในบทนี้ได้กล่าวถึงทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ซึ่งเป็นอุปกรณ์ที่สามารถควบคุมให้อิเล็กตรอนเคลื่อนที่ได้ทีละหนึ่งตัว โดยหัวข้อ 2.1 ได้แสดงรายละเอียดของอุปกรณ์กล่องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ซึ่งเป็นระบบพื้นฐานในการศึกษาปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ หัวข้อ 2.2 ได้กล่าวถึงทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ซึ่งเป็นระบบที่ต้องการศึกษาค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล ในหัวข้อ 2.3 ได้แสดงการคำนวณจำนวนประจุเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว เพื่อนำไปสู่การคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล ส่วนในหัวข้อ 2.4 ได้นำเสนอวิธีการมอนติคาร์โล และหัวข้อสุดท้ายอธิบายการคำนวณหาค่าคาดหวังด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล เพื่อใช้หาค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ดังรายละเอียดต่อไปนี้

2.1 กล่องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว

เพื่อให้เข้าใจถึงปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ในหัวข้อนี้ได้กล่าวถึงอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวที่มีโครงสร้างแบบพื้นฐานที่สุด ซึ่งเรียกว่า กล่องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว โดยมีวงจรสมมูลแสดงดังภาพประกอบ 2.1 (ก)



ภาพประกอบ 2.1 (ก) วงจรสมมูลของกล่องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวโดยบริเวณเส้นประเป็นบริเวณกล่องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ซึ่งประกอบด้วยควอนตัมดอท (ข) สัญลักษณ์ของรอยต่อการทะลุผ่านที่มีคุณสมบัติเหมือนตัวเก็บประจุและตัวต้านทานที่ต่อขนานกัน

โดยทั่วไปกล่องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวประกอบด้วยควอนตัมดอทหนึ่งควอนตัมดอทและรอยต่อ การทะลุผ่านเพียงหนึ่งรอยต่อ โดยที่รอยตอดังกล่าวมีคุณสมบัติทางไฟฟ้าเสมือนเป็นตัวเก็บประจุ (Capacitor) และตัวต้านทาน (Resistor) ต่อขนานกัน แทนด้วยสัญลักษณ์ดังภาพประกอบ 2.1 (ข) ซึ่งค่าความจุไฟฟ้าและความต้านทานมีค่าเท่ากับ C , และ R , ตามลำดับ นอกจากนี้ ระหว่างรอยต่อการทะลุผ่านและขั้วเกต (Gate electrode) ถูกคั่นด้วยตัวเก็บประจุ C_g โดยที่ขั้วเกตถูกเชื่อมต่อกับแหล่งจ่ายแรงดันไฟฟ้าภายนอก เพื่อให้สามารถทำหน้าที่ควบคุมจำนวนประจุ ในกล่องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวได้

ในการเพิ่มอิเล็กทรอนิกส์ n ตัวเข้าไปในกล่องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวสามารถควบคุมได้โดยการให้ สนามไฟฟ้าที่ขั้วเกต กล่าวคือ เมื่อเปลี่ยนแปลงสนามไฟฟ้าจะทำให้พลังงานศักย์ไฟฟ้าสถิต (Electrostatic potential) ที่ควอนตัมดอทมีการเปลี่ยนแปลง นอกจากนั้น บริเวณรอยต่อระหว่างขั้วเกตกับควอนตัมดอทถูกสร้างให้มีความหนาเพียงพอที่จะป้องกันไม่ให้อิเล็กตรอนทะลุผ่านไปยังขั้วเกตได้ อิเล็กตรอนจึงสามารถทะลุผ่านได้เฉพาะที่รอยต่อการทะลุผ่านเท่านั้น

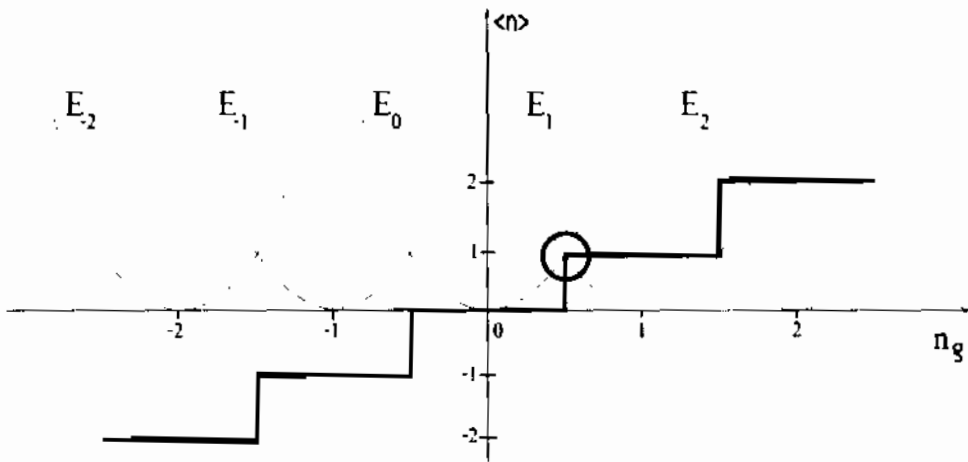
การศึกษาอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ค่าพลังงานการเพิ่มประจุเป็นพารามิเตอร์ที่สำคัญ เพราะพลังงานการเพิ่มประจุเป็นพลังงานต่ำสุดที่ใช้ในการเพิ่มอิเล็กทรอนิกส์ 1 ตัวเข้าไปในควอนตัมดอท ดังนั้น ในการเพิ่มอิเล็กทรอนิกส์ n ตัวเข้าไปในระบบต้องใช้พลังงาน ซึ่งนิยามได้ตามสมการ [4]

$$E_C(n, n_g) = E_C(n - n_g)^2 \quad (2.1)$$

เมื่อ $E_C = e^2 / 2C_\Sigma$ และ $C_\Sigma = C_t + C_g$ ซึ่งเป็นผลรวมของตัวเก็บประจุทั้งสองตัวที่ต่อขนานกันเมื่อมองจากควอนตัมดอท โดยแรงดันไฟฟ้าที่ให้กับขั้วเกตสามารถเขียนให้อยู่ในรูปตัวแปร n_g โดยมีความสัมพันธ์ดังสมการ

$$n_g = \frac{C_g V_g}{e} \quad (2.2)$$

เมื่อ V_g คือ แรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกต ดังนั้น จากสมการ 2.2 และวงจรมุมูลในภาพประกอบ 2.1 พบว่า n_g เป็นตัวแปรที่แสดงถึงจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกต จากภาพประกอบ 2.2 จุดที่อยู่ในวงกลมสีแดงเป็นจุดที่มีสถานะต่างกันแต่มีค่าพลังงานเท่ากัน เรียกว่า จุดดีเจนเนอเรซี (Degeneracy point) ซึ่งจุดดังกล่าว จำนวนของอิเล็กทรอนิกส์ในควอนตัมดอทสามารถเพิ่มขึ้นจาก n เป็น $n+1$ หรือ ลดลงจาก $n+1$ เป็น n กล่าวคือ บริเวณที่ $(n-1/2) < n_g < (n+1/2)$ จำนวนอิเล็กทรอนิกส์ในควอนตัมดอทจะไม่มี การเปลี่ยนแปลงจนกว่าจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตจะมีค่าเป็น $n_g = n \pm 1/2$ ซึ่งทำให้มีการเปลี่ยนแปลงจำนวนอิเล็กทรอนิกส์ n ในระบบ โดยมีลักษณะเป็นฟังก์ชันขั้นบันได



ภาพประกอบ 2.2 ความสัมพันธ์ระหว่างจำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิดกับพลังงานการเพิ่มประจุของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว [2]

ปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นในกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวถูกเรียกว่า ปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ ซึ่งเป็นปรากฏการณ์ที่อิเล็กตรอนไม่สามารถเคลื่อนที่ทะลุผ่านเข้าไปยังควอนตัมดอทได้ จนกว่าจะได้รับพลังงานอย่างน้อยที่สุดเท่ากับพลังงานการเพิ่มประจุ ในการเกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์จะอยู่ภายใต้เงื่อนไขที่สำคัญสองเงื่อนไข กล่าวคือ พลังงานเฉลี่ยของอิเล็กตรอนต้องค่าน้อยกว่าพลังงานการเพิ่มประจุ ($k_B T \ll E_C$) และความต้านทานที่รอยต่อการทะลุผ่าน (Tunneling resistance) ต้องมีค่ามากกว่าความต้านทานทางควอนตัม (Quantum resistance) กล่าวคือ $R_T \gg R_K$ โดยที่ R_K มีค่าเท่ากับ $h/e^2 \approx 25.8 \text{ k}\Omega$ ซึ่งทั้งสองเงื่อนไขนี้ทำให้ระบบสามารถกักอิเล็กตรอนให้อยู่ในควอนตัมดอทได้

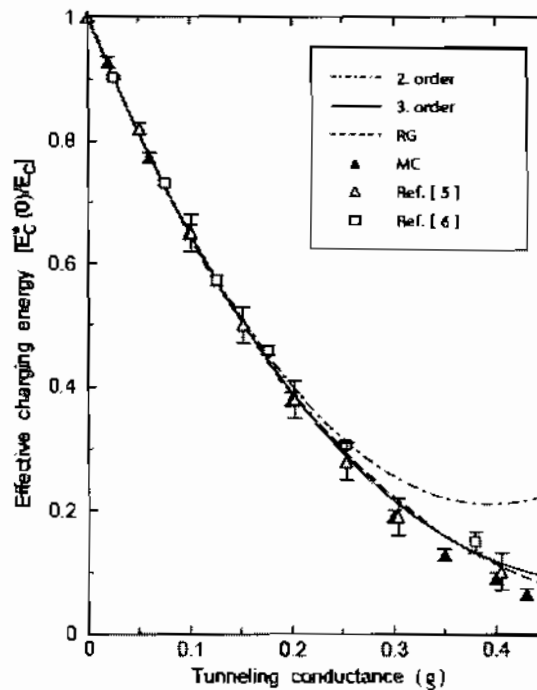
นอกจากนี้ปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์จะอธิบายได้ โดยใช้พารามิเตอร์ที่เรียกว่า พลังงานการเพิ่มประจุยังผล (Effective charging energy; E_C^*) [5-8] ซึ่งพารามิเตอร์นี้แสดงถึงความเด่นชัดของปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ โดยสามารถนิยามได้ดังสมการ

$$\frac{E_C^*}{E_C} = 1 - \left. \frac{\partial \langle n \rangle}{\partial n_g} \right|_{n_g=0} = 1 - \frac{C^*(T)}{C} \quad (2.3)$$

เมื่อ $\langle n \rangle$ คือ จำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่าน และ C คือ ค่าความจุไฟฟ้าของระบบ และ $C^*(T)$ คือ ค่าความจุไฟฟ้ายังผล (Effective capacitance) ซึ่งเป็นฟังก์ชันของอุณหภูมิ นิยามได้จาก $C^*(T) = e \langle n \rangle / V_g$ จากสมการ (2.3) พบว่า ในกรณีที่ไม่มีเกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ จำนวนประจุเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านจะแปรผันตรงกับแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิด กล่าวคือ $\partial \langle n \rangle / \partial n_g \rightarrow 1$ ทำให้ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าลู่เข้าสู่ศูนย์ ($E_C^* / E_C \rightarrow 0$) แต่

ในกรณีนี้ระบบสามารถแสดงปรากฏการณ์การขัดขวางแบบโคลอมป์ได้ พบว่า ค่า $\partial\langle n \rangle / \partial n_g \rightarrow 0$ โดย $n_g \approx 0$ ซึ่งทำให้ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าลู่เข้าสู่หนึ่ง ($E_C^*/E_C \rightarrow 1$)

จากสมการ 2.3 พิจารณาในกรณีของค่าความจุไฟฟ้ายังผล พบว่า เมื่อ $C^*(T)$ มีค่าลู่เข้าสู่ค่า C เป็นกรณีที่ไม่เกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบโคลอมป์ ซึ่งจะทำให้ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าเท่ากับศูนย์ แต่เมื่อเกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบโคลอมป์ขึ้น ค่า $C^*(T)$ มีค่าเข้าใกล้ศูนย์ และทำให้ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าเป็นหนึ่ง ดังนั้นค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลจึงสามารถใช้เป็นพารามิเตอร์ในการแสดงความเด่นชัดของปรากฏการณ์การขัดขวางแบบโคลอมป์ กล่าวคือ ในกรณีที่ปรากฏการณ์การขัดขวางแบบโคลอมป์สามารถเกิดขึ้นอย่างเด่นชัด ค่าความจุไฟฟ้ายังผลมีค่าลู่เข้าสู่ศูนย์ทำให้ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าสูงสุดประมาณหนึ่ง ($E_C^*/E_C \approx 1$) อย่างไรก็ตาม ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวได้ถูกศึกษาอย่างกว้างขวาง ดังตัวอย่างการศึกษาค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว ด้วยวิธีการคำนวณต่างๆ แสดงดังภาพประกอบ 2.3



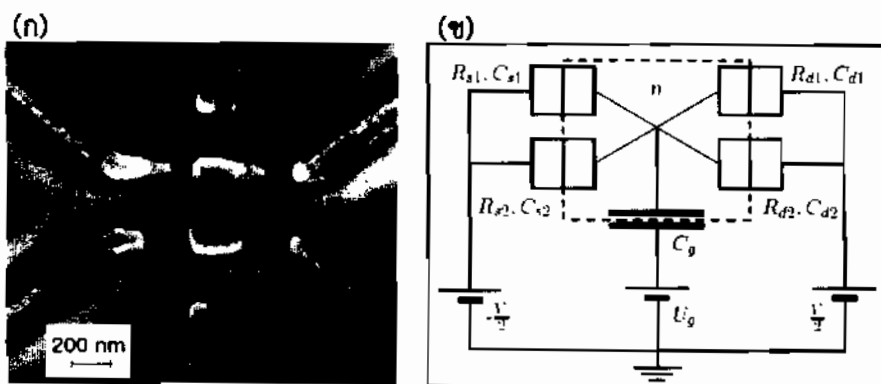
ภาพประกอบ 2.3 ความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวที่อุณหภูมิค่า $E_C^*(0)$ กับค่าความนำไฟฟ้าในช่วง $0 \leq g \leq 0.4$ [7]

จากภาพประกอบ 2.3 แสดงการเปรียบเทียบค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลโดยใช้การคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ทฤษฎีเพอร์เทอเบชัน (Perturbation theory) และผลของวิธีการรีนอร์มอลไลซ์กรุป (Renormalization group method) [7,8] จากภาพประกอบ

พบว่า เมื่อค่าความนำไฟฟ้าของรอยต่อการทะลุผ่านมีค่ามากขึ้นทำให้ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าเข้าสู่ศูนย์ ($E_C^* / E_C \rightarrow 0$) กล่าวคือ ไม่เกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ จากผลการคำนวณด้วยวิธีการรีนอร์มอลไลซ์กรุป มีความสอดคล้องกับผลของวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลอย่างดีแต่ทฤษฎีเฟอร์เทอเบชันอันดับสองสอดคล้องกับทั้งสองวิธีในช่วงที่ $0 \leq g \leq 0.2$ ในขณะที่ทฤษฎีเฟอร์เทอเบชันอันดับสามมีความสอดคล้องในช่วง $0 \leq g \leq 0.4$ แต่อย่างไรก็ตาม ทฤษฎีเฟอร์เทอเบชัน ไม่สามารถอธิบายค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลในช่วงที่ค่าความนำไฟฟ้ามีค่าสูงได้

2.2 ทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว

ทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวเป็นอุปกรณ์ที่สำคัญ ซึ่งถูกนำไปประยุกต์ใช้ในการศึกษาปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ โดยทั่วไปทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวประกอบด้วยควอนตัมดอทหนึ่งควอนตัมดอทและรอยต่อการทะลุผ่านสองรอยต่อ นอกจากนี้ระบบประกอบด้วยขั้วเกต ซึ่งทำหน้าที่ควบคุมจำนวนประจุในควอนตัมดอท โดยรอยต่อระหว่างขั้วเกตกับควอนตัมดอทถูกสร้างให้มีความหนาเพียงพอที่อิเล็กตรอนจะไม่สามารถเกิดการทะลุผ่านระหว่างขั้วเกตและควอนตัมดอท ดังนั้น รอยต่อนี้จึงทำหน้าที่เป็นเสมือนตัวเก็บประจุ ในปี ค.ศ. 2002 วอลลิเชอร์และคณะ [3] ได้สร้างทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวจากโลหะอลูมิเนียม โดยใช้กระบวนการลิโทกราฟีแบบลำอิเล็กตรอน (Electron-beam lithography) ดังแสดงในภาพประกอบ 2.4 (ก) โดยทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวประกอบด้วยควอนตัมดอทหนึ่งควอนตัมดอทและรอยต่อการทะลุผ่านสี่รอยต่อ โดยสร้างรอยต่อทะลุผ่านระหว่างขั้วซอร์สกับควอนตัมดอทและควอนตัมดอทกับขั้วเดรนอย่างละสองรอยต่อ ในการออกแบบทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวให้มีสี่รอยต่อนี้มีวัตถุประสงค์เพื่อให้สามารถวัดค่าความนำไฟฟ้า (หรือค่าความต้านทาน) ได้ทุกรอยต่อ ดังผลที่แสดงในตาราง 2.1

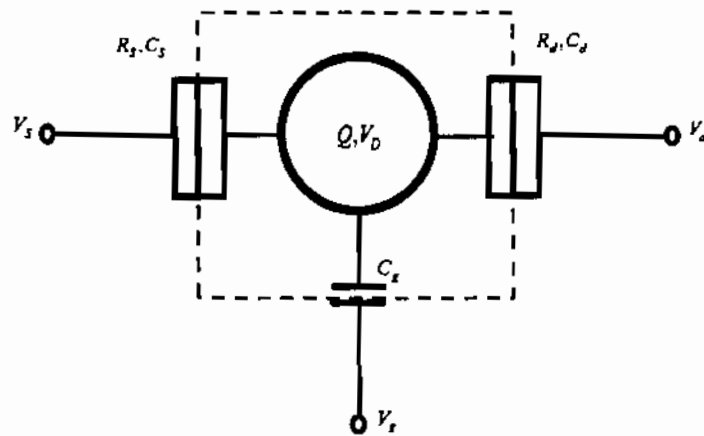


ภาพประกอบ 2.4 (ก) ภาพถ่ายของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวด้วยกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนแบบส่องกราด (ข) วงจรสมมูลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว โดยมีรอยต่อการทะลุผ่านสี่รอยต่อ [3]

ตาราง 2.1 พารามิเตอร์ของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์ชนิดโลหะที่ได้จากการทดลองของวอลลิเชอร์และคณะ โดยที่ G_d คือ ค่าความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์ที่อุณหภูมิสูง [3] เมื่อ $g = G_T / G_K = (G_s + G_d) / G_K$ โดยที่ $G_s = G_{s1} + G_{s2}$ และ $G_d = G_{d1} + G_{d2}$

G_d^{-1} (k Ω)	C_Σ (aF)	C_g (aF)	G_{s1}^{-1} (k Ω)	G_{s2}^{-1} (k Ω)	G_{d1}^{-1} (k Ω)	G_{d2}^{-1} (k Ω)	βE_c	g
23.0	49.7	19.0	20.3	16.4	31.7	23.8	1.87	4.75

แต่อย่างไรก็ตาม ในการศึกษาปรากฏการณ์การขีดขวางแบบคูลอมบ์ ต้องทำการรวมขั้วซอร์สทั้งสองขั้วและขั้วเดรนทั้งสองขั้วเข้าด้วยกัน โดยวงจรสมมูลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวจากภาพประกอบ 2.4 (ข) สามารถเขียนแผนภาพวงจรสมมูลใหม่ ดังภาพประกอบ 2.5



ภาพประกอบ 2.5 วงจรสมมูลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ประกอบด้วยรอยต่อ การทะลุผ่านสองรอยต่อ โดยที่ $C_s = C_{s1} + C_{s2}$, $R_s^{-1} = R_{s1}^{-1} + R_{s2}^{-1}$ และ $C_d = C_{d1} + C_{d2}$, $R_d^{-1} = R_{d1}^{-1} + R_{d2}^{-1}$

ในการศึกษาอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวจำเป็นต้องคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุของระบบ กรณีของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวสามารถแสดงการคำนวณพลังงานรวมของระบบได้จากภาพประกอบ 2.5 ดังนั้น จำนวนประจุสุทธิที่อยู่ในควอนตัมดอทสามารถเขียนสมการได้เป็น

$$Q = Q_s + Q_d + Q_g \quad (2.4)$$

จากนิยามของตัวเก็บประจุ $C=Q/V$ สมการ (2.4) สามารถเขียนได้เป็น

$$Q = C_s(V_D - V_s) + C_d(V_D - V_d) + C_g(V_D - V_g) \quad (2.5)$$

หรือ
$$Q = C_\Sigma V_D - C_s V_s - C_d V_d - C_g V_g \quad (2.6)$$

โดยที่ $C_\Sigma = C_s + C_d + C_g$ และศักย์ไฟฟ้าภายในควอนตัมดอทสามารถเขียนได้ดังสมการ

$$V_D = \frac{1}{C_\Sigma} (Q + C_s V_s + C_d V_d + C_g V_g) \quad (2.7)$$

ดังนั้น พลังงานรวมของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวสามารถคำนวณได้จากสมการ

$$E_{sys} = \int_0^{-ne} V_D dQ \quad (2.8)$$

เมื่อกำหนดให้ที่เวลาเริ่มต้นระบบมีประจุสุทธิเป็น 0 และ $-ne$ หมายถึง จำนวนประจุอิเล็กทรอนิกส์ในควอนตัมดอทเนื่องจากการทะลุผ่าน เมื่อแทนสมการ (2.7) ลงในสมการ (2.8) พลังงานไฟฟ้าสถิตที่สะสมอยู่ในระบบสามารถคำนวณได้เป็น

$$\begin{aligned} E_{sys} &= \int_0^{-ne} \frac{1}{C_\Sigma} (Q + C_s V_s + C_d V_d + C_g V_g) dQ \\ &= \frac{Q^2}{2C_\Sigma} \Big|_0^{-ne} + \frac{Q}{C_\Sigma} (C_s V_s + C_d V_d + C_g V_g) \Big|_0^{-ne} \\ &= \frac{n^2 e^2}{2C_\Sigma} - \frac{ne}{C_\Sigma} (C_s V_s + C_d V_d + C_g V_g) \\ &= \frac{n^2 e^2}{2C_\Sigma} - \frac{ne^2 n_g}{C_\Sigma} \end{aligned} \quad (2.9)$$

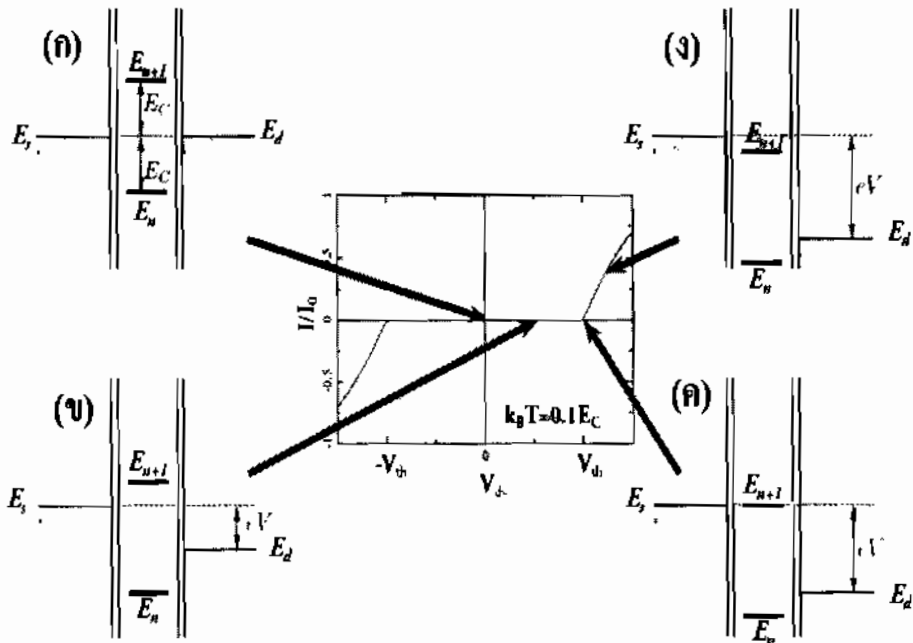
กำหนดให้ V_s, V_d และ V_g เป็นศักย์ไฟฟ้าภายนอกที่ให้กับระบบ ซึ่งไม่ขึ้นกับจำนวนประจุสุทธิ Q และกำหนดให้ $n_g = (C_s V_s + C_d V_d + C_g V_g) / |e|$ เมื่อ e คือ ขนาดประจุอิเล็กทรอนิกส์ ($e = |e| = +1.602 \times 10^{-19} C$) ดังนั้น สมการ (2.9) สามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$\begin{aligned} E_{sys} &= \frac{e^2}{2C_\Sigma} (n - n_g)^2 - \frac{e^2 n_g}{2C_\Sigma} \\ &= E_C(n, n_g) - W \end{aligned} \quad (2.10)$$

โดยที่ $E_C(n, n_g)$ หมายถึง พลังงานศักย์ไฟฟ้าสถิตในการเพิ่มอิเล็กตรอน n ตัว เข้าไปในระบบ และ W หมายถึง งานของระบบเนื่องจากแหล่งจ่ายแรงดันไฟฟ้าจากภายนอก ดังนั้น พลังงานที่ใช้ในการเพิ่มอิเล็กตรอน 1 ตัวเข้าไปในระบบสามารถคำนวณได้ดังสมการ

$$\mu(n) = E_C(n, n_g) - E_C(n-1, n_g) = \frac{e^2}{C_\Sigma} \left[\left(n - \frac{1}{2} \right) - n_g \right] \quad (2.11)$$

เมื่อ $\mu(n)$ คือ ศักย์เคมี (Chemical potential) ของควอนตัมดอท ในการอธิบายการทำงานของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวสามารถแบ่งช่วงการทำงานออกเป็น 4 ช่วง [9] โดยสามารถเขียนแผนภาพของแถบพลังงาน (Band diagram) ได้ดังภาพประกอบ 2.6



ภาพประกอบ 2.6 แผนภาพการควบคุมอิเล็กตรอนของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว เมื่อมีการปรับค่าแรงดันไฟฟ้าที่ตกคร่อมระหว่างขั้วซอร์สและขั้วเดรน (ก) สภาวะที่ยังไม่มีการปรับแรงดันไฟฟ้า ($V_s = V_d = V_g = 0$) (ข) สภาวะที่มีการปรับแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเดรนและขั้วซอร์ส ($0 < V_{ds} < V_{th}$) (ค) สภาวะที่มีการปรับแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเดรนและขั้วซอร์สเท่ากับแรงดันไฟฟ้าขีดเริ่ม ($V_{ds} = V_{th}$) (ง) สภาวะที่มีการปรับแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเดรนและขั้วซอร์สมากกว่าแรงดันไฟฟ้าขีดเริ่ม ($V_{ds} > V_{th}$) ซึ่งทำให้เกิดกระแสไหลผ่านทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว และภาพตรงกลางเป็นความสัมพันธ์ระหว่างแรงดันไฟฟ้ากับกระแสที่มีความสอดคล้องกับแถบพลังงาน [9,10]

จากภาพประกอบ 2.6 แม้ว่าระบบจะประกอบด้วยรอยต่อการทะลุผ่านทั้ง 2 รอยต่อระหว่างขั้วซอร์สและขั้วเดรน โดยรอยต่อทั้งสองไม่สามารถยับยั้งการทะลุผ่านของอิเล็กตรอนได้ แต่โครงสร้างที่มีควอนตัมดอทคั่นกลางระหว่างขั้วทั้งสองจะทำให้อิเล็กตรอนไม่สามารถทะลุผ่านรอยต่อได้โดยตรง แต่อย่างไรก็ตาม ในสภาวะที่แรงดันไฟฟ้าทั้ง 3 ขั้ว มีค่าเท่ากัน ($V_s = V_d = V_g = 0$) ไม่มีระดับพลังงานว่างภายในควอนตัมดอทที่อิเล็กตรอนจากภายนอกจะสามารถครอบครองได้ เพราะระดับพลังงานว่าง E_{n+1} ภายในควอนตัมดอทมีพลังงานสูงกว่าอิเล็กตรอนที่อยู่นอกควอนตัมดอทประมาณ E_C ดังนั้น อิเล็กตรอนภายนอกควอนตัมดอทจึงมีพลังงานไม่เพียงพอที่จะทะลุผ่านรอยต่อไปยังควอนตัมดอททำให้ไม่เกิดกระแสไหลในระบบ ดังภาพประกอบ 2.6 (ก)

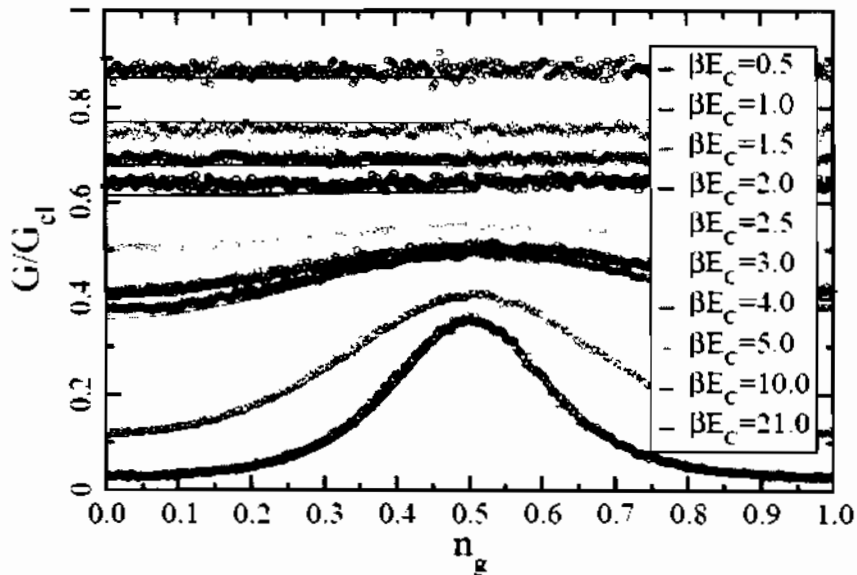
ในสภาวะที่สอง ดังแผนภาพในภาพประกอบ 2.6 (ข) แรงดันไฟฟ้าที่ตกคร่อมขั้วเดรนและขั้วซอร์สเพิ่มขึ้นแต่น้อยกว่าแรงดันไฟฟ้าขีดเริ่ม (Threshold voltage) ($0 < V_{ds} < V_{th}$) ทำให้ระดับพลังงานของอิเล็กตรอนที่ขั้วซอร์สคงที่ ในขณะที่ พลังงานของอิเล็กตรอนที่ขั้วเดรนลดลง แต่อย่างไรก็ตาม อิเล็กตรอนที่ขั้วซอร์สมีพลังงานรวมน้อยกว่าระดับพลังงานว่างภายในควอนตัมดอท ($E_s < E_{n+1}$) เนื่องจากพลังงานที่ให้แก่อิเล็กตรอนที่ขั้วซอร์สน้อยกว่าพลังงานที่ต้องใช้ในการเพิ่มประจุ E_C อิเล็กตรอนที่ขั้วซอร์สจึงมีพลังงานรวมไม่เพียงพอที่จะทะลุผ่านไปยังควอนตัมดอทได้ ซึ่งในช่วงการทำงานนี้กระแสจะไม่สามารถไหลผ่านทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวได้ ($I/I_0 = 0$)

ในสภาวะที่สาม ดังภาพประกอบ 2.6 (ค) แรงดันไฟฟ้าที่ตกคร่อมขั้วเดรนและขั้วซอร์สเท่ากับแรงดันไฟฟ้าขีดเริ่ม ($V_{ds} = V_{th}$) จะทำให้พลังงานของอิเล็กตรอนที่ขั้วซอร์สมีพลังงานเท่ากับระดับพลังงานว่างของควอนตัมดอท ($E_s = E_{n+1}$) ในสภาวะนี้ อิเล็กตรอนที่ขั้วซอร์สจะสามารถทะลุผ่านรอยต่อไปครอบครองระดับพลังงานว่างในควอนตัมดอทได้ อย่างไรก็ตาม แม้ว่าระดับพลังงานของอิเล็กตรอนที่ขั้วเดรนต่ำกว่าที่ขั้วซอร์สและควอนตัมดอท แต่การจ่ายแรงดันไฟฟาลักษณะนี้จะทำให้อิเล็กตรอนจากควอนตัมดอทจะยังไม่สามารถทะลุมายังขั้วเดรนได้ เนื่องจากเมื่ออิเล็กตรอนเข้าไปยังควอนตัมดอท จะทำให้ระดับพลังงานที่ขั้วซอร์สคงที่ ในขณะเดียวกันระดับพลังงานควอนตัมดอทมีพลังงานเพิ่มขึ้น อิเล็กตรอนดังกล่าวจึงไม่สามารถเคลื่อนที่ผ่านไปยังรอยต่อ การทะลุผ่านระหว่างควอนตัมดอทกับขั้วเดรนได้แต่จะทะลุกลับไปมาระหว่างขั้วซอร์สกับควอนตัมดอท ดังนั้น การจ่ายแรงดันไฟฟ้าในลักษณะนี้จะทำให้กระแสไฟฟ้าเฉลี่ยของอิเล็กตรอนที่ไหลผ่านทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวประมาณเท่ากับศูนย์

ในสภาวะสุดท้าย ดังภาพประกอบ 2.6 (ง) แรงดันไฟฟ้าที่ตกคร่อมขั้วเดรนและขั้วซอร์สมากกว่าแรงดันไฟฟ้าขีดเริ่ม ($V_{ds} > V_{th}$) อิเล็กตรอนที่ขั้วซอร์สจะมีพลังงานมากกว่าระดับพลังงานว่างภายในควอนตัมดอท ($E_s > E_{n+1}$) จึงทำให้อิเล็กตรอนสามารถทะลุผ่านรอยต่อจากขั้วซอร์สไปยัง

ควอนตัมคอตและจากควอนตัมคอตทะลุไปยังขั้วเดรนได้ ทำให้เกิดกระแสไหลผ่านทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวได้ ($I/I_0 \neq 0$) ซึ่งกระแสที่เกิดขึ้นเป็นผลจากปรากฏการณ์การทะลุผ่าน ประกอบกับภายในควอนตัมคอตมีระดับพลังงานว่างที่สามารถให้อิเล็กตรอนจากภายนอกเข้าไปครอบครองได้เพียง 1 ตัวเท่านั้น ทำให้การไหลของกระแสในทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวนี้เป็นกระแสของอิเล็กตรอนเพียง 1 ตัว เมื่ออิเล็กตรอนตัวที่ 1 เข้าไปในควอนตัมคอต อิเล็กตรอนตัวที่ 2 จะยังไม่สามารถเข้าไปภายในควอนตัมคอตได้จนกว่าอิเล็กตรอนตัวที่ 1 จะทะลุผ่านไปยังขั้วเดรน อิเล็กตรอนตัวที่ 2 จึงจะสามารถเข้าไปภายในควอนตัมคอตได้ ซึ่งเป็นผลจากปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ ลักษณะการทำงานดังกล่าวทำให้ทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวสามารถควบคุมการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนภายในระบบได้ที่ละ 1 ตัว

การศึกษาปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ [10] สามารถทำได้โดยการวัดค่าความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว เมื่อแรงดันไฟฟ้ามีค่าเปลี่ยนแปลงไปดังภาพประกอบ 2.7 พบว่า ที่สภาวะอุณหภูมิสูง เช่น $\beta E_C = 0.5$ ค่าความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวไม่ขึ้นกับแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกต เนื่องจาก ไม่เกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ แต่บริเวณที่อุณหภูมิต่ำ เช่น $\beta E_C = 21$ สามารถสังเกตเห็นปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ได้อย่างเด่นชัด และพบว่าผลของการคำนวณค่าความนำไฟฟ้าด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลสามารถอธิบายผลของการทดลองได้ทุกช่วงอุณหภูมิ



ภาพประกอบ 2.7 ความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว เมื่อแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตและอุณหภูมิมี่ค่าเปลี่ยนแปลงไป โดยผลการทดลองของวอลลิเชอร์และคณะ [3,10] แทนด้วยสัญลักษณ์จุดวงกลม (°) และผลการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลของกราเบิร์ต [3] แทนด้วยสัญลักษณ์เส้นตรง (—)

ในการคำนวณค่าความนำไฟฟ้าจำเป็นต้องคำนวณค่าโคไซน์คอร์ริเลชันฟังก์ชัน (Cosine correlation function) ของระบบ ซึ่งสามารถนิยามได้ดังสมการ [10]

$$A(\tau) = \frac{1}{Z} \sum_{\varphi \in \mathbb{R}} \int_{\varphi(0)=0}^{\varphi(\beta)+2\pi\varphi} D\varphi \cos(\varphi(\tau) - \varphi(0)) e^{-S[\varphi]} \quad (2.12)$$

เมื่อ $S[\varphi] = S_C[\varphi] + S_T[\varphi]$ โดยที่ค่าแอกชันของคูลอมบ์ (Coulomb action) แสดงได้ดังสมการ [10]

$$S_C[\varphi] = \int_0^{\beta E_C} d\tau \left[\frac{\dot{\varphi}^2}{4} + in_g \varphi(\tau) \right] \quad (2.13)$$

และค่าแอกชันของการทะลุผ่าน (Tunneling action) เป็นไปตามสมการ [10]

$$S_T[\varphi] = -g \int_0^{\beta E_C} d\tau \int_0^{\beta E_C} d\tau' \alpha(\tau - \tau') \cos(\varphi(\tau) - \varphi(\tau')) \quad (2.14)$$

เมื่อ
$$\alpha(\tau - \tau') = \frac{1}{4(\beta E_C)^2 \sin^2\left(\frac{\pi}{\beta E_C}(\tau - \tau')\right)} \quad (2.15)$$

เมื่อสามารถคำนวณค่าโคไซน์คอร์ริเลชันฟังก์ชันได้ จะทำให้คำนวณค่าสเปกตรัลฟังก์ชันแบบสมมาตร $A^s(\omega)$ ได้โดยใช้วิธีการแก้ปัญหแบบผกผัน (inverse problem) โดยรายละเอียดได้แสดงไว้ในเอกสารอ้างอิงที่ [10] ค่าสเปกตรัลฟังก์ชันสามารถคำนวณได้จากสมการ

$$A(\tau) = (KA^s)(\tau) = \int_0^\infty d\omega \frac{\omega \cosh\left(\left[\frac{\beta E_C}{2} - \tau\right]\omega\right)}{2\pi \sinh\left(\frac{\beta E_C}{2}\omega\right)} A^s(\omega) \quad (2.16)$$

จากนั้น นำค่าสเปกตรัลฟังก์ชันไปคำนวณค่าความนำไฟฟ้าได้ ดังสมการ [10]

$$G = \frac{\beta E_C G_c}{2\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^2}{\cosh(\beta E_C \omega) - 1} A^s(\omega) \quad (2.17)$$

2.3 จำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว

ในการศึกษาปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคุลอมป์สามารถแสดงได้ด้วยการคำนวณจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านของอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว เช่น กล่องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว [2] พบว่า จำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่าน แสดงถึงปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคุลอมป์ได้ ดังภาพประกอบ 2.2 เมื่อแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกิดมีค่าเป็นศูนย์ จำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านจะมีค่าเป็นศูนย์ และจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านจะมีการเปลี่ยนแปลงเมื่อแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกิดมีค่าเท่ากับแรงดันไฟฟ้าขีดเริ่ม โดยจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่าน สามารถคำนวณได้ตามสมการ [11]

$$\langle n \rangle = \frac{\sum_{n \in \mathbb{R}} n e^{-\beta E_C (n-n_g)^2}}{\sum_{n \in \mathbb{R}} e^{-\beta E_C (n-n_g)^2}} = \frac{1}{Z} \sum_{n \in \mathbb{R}} n e^{-\beta E_C (n-n_g)^2} \quad (2.18)$$

เมื่อ Z หมายถึง ค่าพาร์ทิชันฟังก์ชัน (Partition function) กล่าวคือ $\sum_{n \in \mathbb{R}} \exp[-\beta E_C (n-n_g)^2]$ เพื่อความสะดวกในการคำนวณจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านจากสมการ (2.18) ด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ให้พิจารณาสมการ (2.19)

$$\begin{aligned} \sum_{n \in \mathbb{R}} \frac{\partial}{\partial n_g} e^{-\beta E_C (n-n_g)^2} &= \sum_{n \in \mathbb{R}} e^{-\beta E_C (n-n_g)^2} \frac{\partial}{\partial n_g} \left(-\beta E_C (n-n_g)^2 \right) \\ &= \sum_{n \in \mathbb{R}} (-\beta E_C) e^{-\beta E_C (n-n_g)^2} (-2n + 2n_g) \\ &= \sum_{n \in \mathbb{R}} 2\beta E_C (n-n_g) e^{-\beta E_C (n-n_g)^2} \\ &= \sum_{n \in \mathbb{R}} 2\beta E_C n e^{-\beta E_C (n-n_g)^2} - \sum_{n \in \mathbb{R}} 2\beta E_C n_g e^{-\beta E_C (n-n_g)^2} \end{aligned} \quad (2.19)$$

ดังนั้น เมื่อนำ $2\beta E_C$ ทหารตลอดทั้งสองข้าง จะได้

$$\sum_{n \in \mathbb{R}} \frac{1}{2\beta E_C} \frac{\partial}{\partial n_g} e^{-\beta E_C (n-n_g)^2} = \sum_{n \in \mathbb{R}} n e^{-\beta E_C (n-n_g)^2} - \sum_{n \in \mathbb{R}} n_g e^{-\beta E_C (n-n_g)^2} \quad (2.20)$$

จัดพจน์สมการ (2.20) เพื่อให้สอดคล้องกับสมการ (2.18) จะได้

$$\sum_{n \in \mathbb{R}} n e^{-\beta E_C (n-n_g)^2} = \sum_{n \in \mathbb{R}} n_g e^{-\beta E_C (n-n_g)^2} + \sum_{n \in \mathbb{R}} \frac{1}{2\beta E_C} \frac{\partial}{\partial n_g} e^{-\beta E_C (n-n_g)^2} \quad (2.21)$$

ดังนั้น เมื่อนำค่าพาร์ทิชันฟังก์ชันหารตลอดทั้งสมการ (2.21) จำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อ การทะลุผ่านของระบบในสมการ (2.18) สามารถเขียนใหม่ได้เป็น [11]

$$\langle n \rangle = n_g + \frac{1}{2\beta E_C} \frac{\partial \ln Z}{\partial n_g} \quad (2.22)$$

นอกจากนั้น พาร์ทิชันฟังก์ชันของระบบ สามารถเขียนให้อยู่ในรูปการปริพันธ์ตามวิถีได้ ดังสมการ (2.23)

$$Z = \sum_{w \in \mathbb{R}} \int_{\varphi(0)}^{\varphi(\beta)+2\pi w} D\varphi e^{-S[\varphi]} \quad (2.23)$$

เมื่อ $S[\varphi] = S_C[\varphi] + S_T[\varphi]$ โดยที่ $S_C[\varphi]$ และ $S_T[\varphi]$ เป็นไปตามสมการ (2.13) และ (2.14) ตามลำดับ ซึ่งจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อของการทะลุผ่านของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวสามารถ พิจารณาได้จากสมการ (2.22)

$$\begin{aligned} \langle n \rangle &= n_g + \frac{1}{2\beta E_C} \frac{\partial \ln Z}{\partial n_g} \\ &= n_g + \frac{1}{2\beta E_C} \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial n_g} \\ &= n_g + \frac{1}{2\beta E_C} \frac{1}{Z} \sum_{w \in \mathbb{R}} \int_{\varphi(0)}^{\varphi(\beta)+2\pi w} D\varphi \frac{\partial}{\partial n_g} e^{-S[\varphi]} \\ &= n_g - \frac{1}{2\beta E_C} \frac{1}{Z} \sum_{w \in \mathbb{R}} \int_{\varphi(0)}^{\varphi(\beta)+2\pi w} D\varphi e^{-S[\varphi]} \frac{\partial}{\partial n_g} (S_C[\varphi]) \end{aligned} \quad (2.24)$$

จากสมการ (2.24) พบว่า แอ็กชันของคูลอมบ์เท่านั้นที่ขึ้นกับ n_g ดังนั้น จำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่ รอยต่อของการทะลุผ่านของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวเป็นไปตามสมการ

$$\langle n \rangle = n_g - \frac{i}{2\beta E_C} \sum_{w \in \mathbb{R}} \int_{\varphi(0)}^{\varphi(\beta)+2\pi w} D\varphi e^{-S[\varphi]} \left[\int_0^{\beta E_C} d\tau \dot{\varphi}(\tau) \right] \quad (2.25)$$

จากสมการ (2.25) พบว่า เงื่อนไขขอบเขตของการหาค่าปริพันธ์มีค่าขึ้นกับจำนวนเต็ม w ซึ่งแสดงถึงจำนวนรอบของการหาปริพันธ์ โดย w ถูกเรียกว่า ค่าตัวเลขไว้งัด (Winding numbers) เพื่อความสะดวกในการประมวลผล ขอบเขตของการหาค่าปริพันธ์สามารถเขียนใหม่ได้โดย การเปลี่ยนตัวแปรดังสมการ

$$\varphi(\tau) = \xi(\tau) + v_w \tau \quad \text{เมื่อ} \quad v_w = \frac{2\pi w}{\beta E_C} \quad (2.26)$$

ดังนั้น

$$\langle n \rangle = n_g - \frac{i}{2\beta E_C} \frac{1}{Z} \sum_{w \in \mathbb{R}} \int_{\xi(0)}^{\xi(\beta E_C)} D\xi e^{-S[\xi]} \left[\int_0^{\beta E_C} d\tau (\xi(\tau) + v_w) \right] \quad (2.27)$$

จากเงื่อนไขขอบเขต $\xi(\beta E_C) = \xi(0) = 0$ ดังนั้น จำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวสามารถเขียนใหม่ได้ตามสมการ [11]

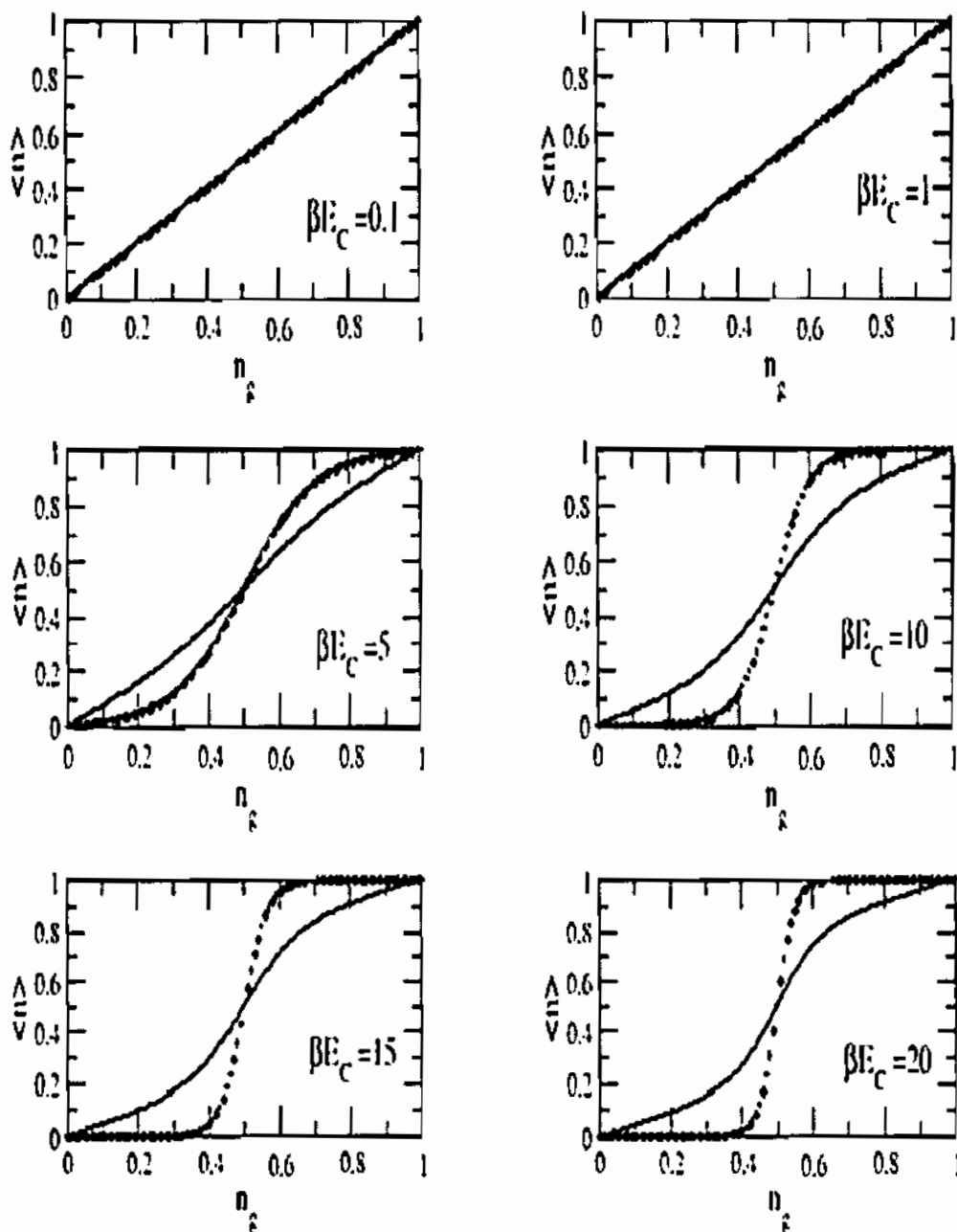
$$\langle n \rangle = n_g - \frac{i\pi \langle w \rangle}{\beta E_C} \quad (2.28)$$

โดยที่ ค่าเฉลี่ยของ w เป็นไปตามสมการ [10]

$$\langle w \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{w \in \mathbb{R}} \int_{\xi(0)}^{\xi(\beta E_C)} D\xi w e^{-S[\xi, w]} \quad (2.29)$$

เนื่องจากแก่นของคูมอมบ์ของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวมีค่าจำนวนเชิงซ้อน ดังสมการ (2.13) ทำให้ $\langle w \rangle$ มีค่าเป็นจำนวนจินตภาพ (Complex number) และจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่าน ในจากสมการ (2.28) เป็นจำนวนจริง ซึ่งรายละเอียดการคำนวณได้แสดงไว้ในหัวข้อ 4.2 จากสมการ (2.28) จำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่าน สามารถคำนวณได้โดยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล โดยที่ผลการคำนวณแสดงดังภาพประกอบ 2.8 [11] จากภาพประกอบ 2.8 พบว่า กรณีที่ $\beta E_C = 0.1$ และ $\beta E_C = 1$ ซึ่งเป็นกรณีที่อุณหภูมิสูง ($\beta E_C \leq 1$) พลังงานเฉลี่ยของอิเล็กตรอนที่ขั้วซอร์สมีค่ามากเพียงพอทำให้อิเล็กตรอนสามารถทะลุผ่านไปยังควอนตัมดอทได้ ดังนั้น ในกรณีนี้จึงไม่เกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูมอมบ์ โดยสังเกตได้จากเมื่อแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตมีค่าเพิ่มขึ้นทำให้จำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านมีค่าเพิ่มขึ้น หรือกล่าวได้ว่าจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านแปรผันตรงกับค่า n_g โดยผลการคำนวณทั้งสองวิธีมีความสอดคล้องกัน แต่ในกรณีที่ $\beta E_C \geq 5$ พลังงานจลน์ของอิเล็กตรอนมีค่าน้อยกว่าพลังงานการเพิ่มประจุ ซึ่งเป็นกรณีที่สามารถแสดงปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูมอมบ์ โดยสังเกตได้ว่าเมื่อ n_g มีค่าประมาณ 0.5 อิเล็กตรอนสามารถทะลุผ่านไปยังควอนตัมดอทได้ จากภาพประกอบ 2.8 พบว่า ผลการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลและวิธีแบบฉบับมีความแตกต่างกันอย่างชัดเจน กล่าวคือ วิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลมีความถูกต้องแม่นยำ จากที่กล่าวมาข้างต้น ปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูมอมบ์

สามารถอธิบายโดยศึกษาการเปลี่ยนแปลงค่าความนำไฟฟ้าและจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อ การทะลุผ่านเมื่อแรงดันไฟฟ้ามีค่าเพิ่มขึ้น

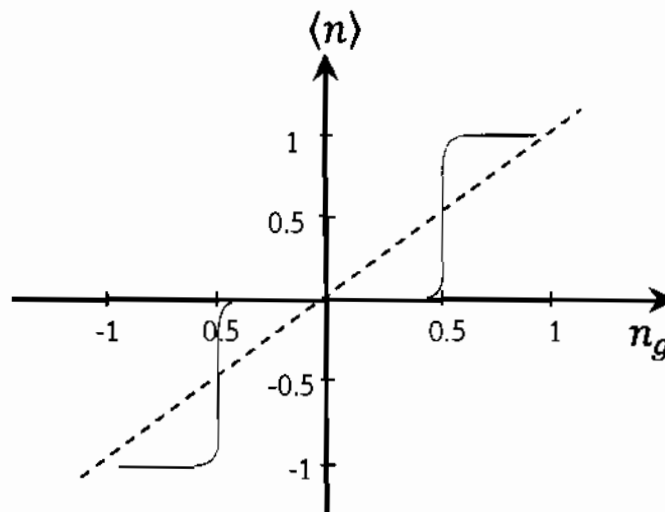


ภาพประกอบ 2.8 ผลการคำนวณจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อ การทะลุผ่าน ในทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว โดยข้อมูลสีดำ (●) และข้อมูลสีแดง (●) เป็นผลที่คำนวณได้จาก ทฤษฎีแบบฉบับตามสมการ (2.18) และวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ตามสมการ (2.28) ตามลำดับ [11]

นอกจากนั้น ปรากฏการณ์ดังกล่าวยังสามารถอธิบายได้ด้วยพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว โดยค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลเป็นพารามิเตอร์ที่แสดงถึงความเด่นชัดของปรากฏการณ์การขีดขวางแบบคูลอมบ์ นิยามได้ดังสมการ [4]

$$\frac{E_c^*}{E_c} = \frac{\partial \langle Q_i \rangle}{\partial Q_g} = 1 - \left. \frac{\partial \langle n \rangle}{\partial n_g} \right|_{n_g=0} \quad (2.30)$$

เมื่อ $\langle n \rangle = n_g - \langle Q_i \rangle / e$ โดยที่ $\langle n \rangle$ หมายถึง จำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่าน และ $\langle Q_i \rangle / e$ หมายถึง จำนวนประจุอิเล็กทรอนิกส์เฉลี่ยเนื่องจากการทะลุผ่าน ซึ่งสมการ (2.30) ประยุกต์มาจากนิยามของค่า E_c^* / E_c ของกล่องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ค่าดังกล่าวขึ้นอยู่กับจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่าน ดังนั้น ในการคำนวณค่า E_c^* / E_c ของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว จึงถูกนิยามในลักษณะเดียวกัน เพื่อให้สอดคล้องกับนิยามของกล่องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว จากสมการ (2.30) สามารถอธิบายในเชิงคุณภาพได้โดยอาศัยภาพประกอบ 2.9



ภาพประกอบ 2.9 ความสัมพันธ์ระหว่างแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตและจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่าน

จากภาพประกอบ 2.9 พบว่า ในกรณีของเส้นประ ซึ่งเป็นกรณีที่ไม่เกิดปรากฏการณ์การขีดขวางแบบคูลอมบ์ของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว กล่าวคือ มีค่าความชันลู่เข้าสู่หนึ่ง ($\partial \langle n \rangle / \partial n_g \rightarrow 1$) ในบริเวณที่ $n_g \approx 0$ ซึ่งทำให้ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าเท่ากับศูนย์ ($E_c^* / E_c = 0$) แต่กรณีที่ให้แรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกต จำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านไม่มีการเปลี่ยนแปลง ($\partial \langle n \rangle / \partial n_g = 0$) เป็นกรณีที่แสดงปรากฏการณ์การขีดขวางแบบคูลอมบ์ได้อย่างเด่นชัด จากสมการ (2.30) ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลจึงมีค่าเท่ากับหนึ่ง ($E_c^* / E_c = 1$)

แต่อย่างไรก็ตาม ในกรณีของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวไม่พบรายงานการคำนวณค่าพลังงาน การเพิ่มประจุยังผลในเชิงปริมาณ ดังนั้น ในงานวิจัยนี้มีวัตถุประสงค์เพื่อคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวที่ใช้ในการอธิบายปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ โดยรายละเอียดได้แสดงไว้ในบทที่ 4

2.4 วิธีการมอนติคาร์โล

ในหัวข้อนี้ได้กล่าวถึงวิธีการมอนติคาร์โล (Monte Carlo method) [10] เพื่อเป็นพื้นฐานในการนำไปประยุกต์ใช้ในการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชัน (Correlation function) และค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล ซึ่งถูกนิยามตามรูปแบบของการคำนวณปริพันธ์ตามวิถี โดยเริ่มต้นจากการอธิบายแนวคิดพื้นฐานของวิธีการมอนติคาร์โล การสุ่มตัวอย่างตามความสำคัญ (Important sampling) กระบวนการมาร์คอฟ (Markov process) และระเบียบวิธีเมโทรโพลิส (Metropolis algorithm) ตามลำดับ

2.4.1 การหาปริพันธ์ในหลายมิติ

เพื่ออธิบายวิธีการและคุณสมบัติเฉพาะของวิธีการมอนติคาร์โล ในหัวข้อนี้ได้ยกตัวอย่างการแก้ปัญหาปริพันธ์ในหลายมิติ (High-dimensional integrals) ซึ่งการคำนวณปริพันธ์ดังกล่าวสามารถคำนวณได้หลายวิธี เช่น สูตรนิวตัน-โคสต์ (Newton-Cotes formula) [12] ผลที่ได้จากการคำนวณโดยวิธีดังกล่าว ค่าความคลาดเคลื่อนเพิ่มขึ้นตามจำนวนตัวแปรของการหาค่าปริพันธ์ แต่ในกรณีของวิธีการมอนติคาร์โล ค่าความคลาดเคลื่อนของการปริพันธ์จะไม่ขึ้นกับจำนวนของตัวแปรของการหาค่าปริพันธ์ ดังนั้น วิธีการมอนติคาร์โลจึงเหมาะสมกับการคำนวณปริพันธ์ในหลายมิติเพื่ออธิบายวิธีการดังกล่าว ให้พิจารณาการคำนวณปริพันธ์ตามสมการ [10]

$$\begin{aligned} I &= \int dx_1 \int dx_2 \dots \int dx_d f(x_1, x_2, \dots, x_d) \rho(x_1, x_2, \dots, x_d) \\ &\equiv \int d^d \bar{x} f(\bar{x}) \rho(\bar{x}) \\ &= \langle f \rangle_\rho \end{aligned} \quad (2.31)$$

สมการนี้เป็นรูปแบบทั่วไปที่ใช้สำหรับการหาค่าคาดหวัง (Expectation value) ในกลศาสตร์เชิงสถิติแบบฉบับและแบบควอนตัม โดย $\rho(\bar{x})$ เป็นฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น (Probability distribution function) ซึ่งมีคุณสมบัติดังต่อไปนี้ [10]

- 1) ความน่าจะเป็นของทุกค่า \bar{x} ต้องมีค่ามากกว่าหรือเท่ากับศูนย์ กล่าวคือ

$$\rho(\bar{x}) \geq 0 \quad (2.32)$$

2) ผลรวมของความน่าจะเป็นที่ทุกค่า \bar{x} ต้องเป็นไปตามสมการ

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^d \bar{x} \rho(\bar{x}) = 1 \quad (2.33)$$

จากสมการ (2.31) สามารถประมาณด้วยวิธีการมอนติคาร์โล ดังสมการ [10]

$$I \approx \bar{f} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M f(\bar{x}_i) \quad (2.34)$$

โดยที่ ตัวแปรสุ่ม \bar{x}_i ถูกสุ่มด้วยความน่าจะเป็น $\rho(\bar{x}_i)$ จากฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น $\rho(\bar{x})$ ในการคำนวณค่าเฉลี่ยของตัวอย่างจำนวน M ตัว ค่าคาดหวังถูกนิยามได้ดังสมการ (2.31) เป็นกรณีที่มีจำนวนตัวอย่าง M มีค่าลู่เข้าสู่อนันต์ กล่าวคือ [10]

$$\langle f \rangle_{\rho} \equiv \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M f(\bar{x}_i) \quad (2.35)$$

แต่อย่างไรก็ตาม ในกรณี จำนวนตัวอย่าง M เป็นค่าจำกัด ซึ่งทฤษฎีขีดจำกัดกลาง (Central-limit theorem) แสดงให้เห็นว่าจะทำให้เกิดค่าความคลาดเคลื่อนขึ้นจากการคำนวณ โดยค่าความแปรปรวนของการคำนวณด้วยวิธีการมอนติคาร์โล สามารถเขียนได้ตามสมการ [10]

$$\sigma_f^2 = \frac{1}{M} \left\langle \left(f - \langle f \rangle_{\rho} \right)^2 \right\rangle_{\rho} = \frac{1}{M} \left(\langle f^2 \rangle_{\rho} - \langle f \rangle_{\rho}^2 \right) \quad (2.36)$$

จากสมการนี้ พบว่า ค่าความแปรปรวน (σ_f^2) แปรผันตรงกับ M^{-1} ซึ่งแสดงให้เห็นว่าการคำนวณปริพันธ์ด้วยวิธีการมอนติคาร์โลนั้น ค่าความคลาดเคลื่อนไม่ขึ้นกับจำนวนตัวแปรของการปริพันธ์ แต่ขึ้นอยู่กับจำนวนของตัวอย่างสุ่ม ดังนั้น ในโครงการนี้จึงได้ประยุกต์ใช้วิธีการมอนติคาร์โลในการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันและค่าพลังงานการเพิ่มประจุยั้งผล เนื่องจากปริมาณดังกล่าวถูกนิยามอยู่ในรูปของการปริพันธ์ในหลายมิติ

2.4.2 การสุ่มตัวอย่างตามความสำคัญ

จากหัวข้อ 2.41 ได้แสดงให้เห็นว่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานที่ได้จากการคำนวณโดยวิธีการมอนติคาร์โลแปรผันตรงกับค่า $M^{-1/2}$ กล่าวคือ เมื่อต้องการลดค่าความคลาดเคลื่อนของการคำนวณจำเป็นต้องเพิ่มจำนวนของตัวอย่างให้มากขึ้น แต่อย่างไรก็ตาม สามารถลดค่าความคลาดเคลื่อนด้วยวิธีการที่เรียกว่า การสุ่มตัวอย่างตามความสำคัญ เมื่อพิจารณาการคำนวณปริพันธ์ในหลายมิติตามสมการ (2.31) เมื่อ $f(\bar{x})$ คือฟังก์ชันที่ต้องการคำนวณและ $\rho(\bar{x})$ เป็นฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น โดยทั่วไปสามารถเลือก $\rho(\bar{x})$ เป็นฟังก์ชันใดๆ โดยต้องสอดคล้องตามเงื่อนไข

ในสมการ (2.32) และ (2.33) แต่ถ้าใช้วิธีการสุ่มตัวอย่างตามความสำคัญ ซึ่งกล่าวถึงการเลือกค่า $\rho(\bar{x})$ ที่มีลักษณะพิเศษ จะทำให้การคำนวณค่าปริพันธ์ลู่เข้าสู่คำตอบได้อย่างมีประสิทธิภาพ โดยการพิจารณาปริพันธ์ตามสมการ [10]

$$I' = \int d^d \bar{x} g(\bar{x}) = \int d^d \bar{x} \frac{g(\bar{x})}{\rho(\bar{x})} \rho(\bar{x}) = \left\langle \frac{g}{\rho} \right\rangle_{\rho} \quad (2.37)$$

จากสมการ พบว่า ฟังก์ชัน $\langle g(x)/\rho(x) \rangle$ เป็นฟังก์ชันที่ถูกคำนวณค่าคาดหวัง ด้วยวิธีการมอนติคาร์โล ค่าดังกล่าวสามารถคำนวณได้ตามสมการ [10]

$$\left\langle \frac{g}{\rho} \right\rangle_{\rho} \approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \frac{g(\bar{x}_i)}{\rho(\bar{x}_i)} \pm \frac{\sigma_{(g/\rho)_\rho}}{\sqrt{M}} \quad (2.38)$$

จากสมการ พบว่า ค่าความแปรปรวนที่ได้จากการคำนวณปริพันธ์โดยวิธีการมอนติคาร์โลสามารถเขียนได้ดังสมการ [10]

$$\sigma_{(g/\rho)_\rho}^2 = \left\langle \left(\frac{g(\bar{x})}{\rho(\bar{x})} - I' \right)^2 \right\rangle_{\rho} = \left\langle \left(\frac{g(\bar{x})}{\rho(\bar{x})} \right)^2 \right\rangle_{\rho} - \left\langle \frac{g(\bar{x})}{\rho(\bar{x})} \right\rangle_{\rho}^2 \quad (2.39)$$

จากสมการ (2.39) ถ้าเลือกฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็นเท่ากับ $\rho(\bar{x}) = g(\bar{x})/I'$ ค่าความคลาดเคลื่อนจะมีค่าเป็นศูนย์ แต่เนื่องจาก I' เป็นตัวแปรที่ไม่ทราบค่า ซึ่งเป็นคำตอบที่ได้จากการคำนวณปริพันธ์ จึงไม่สามารถเลือกค่า $\rho(\bar{x})$ ตามเงื่อนไขดังกล่าวได้ แต่อย่างไรก็ตาม สมการ (2.39) แสดงให้เห็นถึงหลักการเลือกฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น กล่าวคือ ควรเลือกฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น $\rho(\bar{x})$ ที่มีรูปร่างคล้ายคลึงหรือใกล้เคียงกับ $g(\bar{x})$ ให้มากที่สุด เพื่อให้ค่าความคลาดเคลื่อนมีค่าน้อยที่สุด กล่าวคือ การคำนวณจะลู่เข้าสู่คำตอบที่ถูกต้องได้รวดเร็วมากขึ้น

กระบวนการสร้างกลุ่มตัวอย่าง

ในหัวข้อที่ผ่านมา ได้อธิบายแนวคิดพื้นฐานของวิธีการมอนติคาร์โลในการแก้ปัญหาปริพันธ์ในหลายมิติ โดยการสุ่มตัวอย่างจากฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น นอกจากนั้น การเลือกฟังก์ชัน $\rho(\bar{x})$ ให้มีลักษณะคล้ายกับฟังก์ชันที่ต้องการคำนวณค่าคาดหวังเพื่อให้ผลลัพธ์ที่ได้ลู่เข้าสู่คำตอบอย่างถูกต้องแม่นยำ แต่อย่างไรก็ตาม ในการคำนวณสมการ (2.34) จำเป็นต้องมีเซตของกลุ่มตัวอย่าง กล่าวคือ $\{\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_M\}$ ซึ่งทุกตัวอย่างต้องถูกเลือกด้วยความน่าจะเป็น $\rho(\bar{x})$ จากฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น $\rho(\bar{x})$ ในกรณีที่กำหนดฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น เซตของกลุ่มตัวอย่างสามารถสร้างขึ้นโดยอาศัยวิธีการที่เรียกว่า

กระบวนการมาร์คอฟ ในการสร้างเซตของตัวอย่าง $\{\bar{x}_i\}$ เพื่อนำไปใช้ในการคำนวณด้วยวิธีการมอนติคาร์โลตามสมการ (2.34) ตัวอย่างที่ถูกสร้างขึ้นอยู่ในรูปแบบของห่วงโซ่มาร์คอฟ (Markov chain) $\{\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_M\}$ สมาชิกแต่ละตัวจะถูกเลือกโดยการพิจารณาความน่าจะเป็นของการเปลี่ยนสถานะจากสถานะใดๆ ไปสู่สถานะใหม่ $T(\bar{x}_i \rightarrow \bar{x}_{i+1})$ เซตตัวอย่าง $\{\bar{x}_i\}$ ที่ถูกสร้างด้วยกระบวนการของมาร์คอฟ ซึ่งทุกค่าของ (\bar{x}_i) มีความน่าจะเป็น $\rho(\bar{x}_i)$ เป็นสมาชิกของฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น $\rho(\bar{x})$ [10,13]

สำหรับเงื่อนไขที่ทำให้สมาชิกแต่ละตัวในเซตกลุ่มตัวอย่าง $\{\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_M\}$ ที่มีค่าความน่าจะเป็น $\rho(\bar{x}_i)$ มีรูปแบบของห่วงโซ่มาร์คอฟมี 2 เงื่อนไข คือ เออร์годิกซิตี (Ergodicity) และ ดีเทลด์บาร์ลันค์ (Detailed balance)

เออร์годิกซิตี: เป็นเงื่อนไขที่กำหนดว่าความน่าจะเป็นของการเปลี่ยนตำแหน่งจาก \bar{x}_i ไปยังตำแหน่ง \bar{x}_{i+1} ต้องมีค่ามากกว่าศูนย์ ซึ่งเขียนได้ตามสมการ [10]

$$T(\bar{x}_i \rightarrow \bar{x}_{i+1}) > 0 \quad (2.40)$$

เมื่อ $T(\bar{x}_i \rightarrow \bar{x}_{i+1})$ คือความน่าจะเป็นของการเปลี่ยนสถานะจาก \bar{x}_i ไปยัง \bar{x}_{i+1}

ดีเทลด์บาร์ลันค์: เป็นเงื่อนไขที่แสดงว่าการเปลี่ยนสถานะจากสถานะ x ไปยังสถานะ y ขึ้นอยู่กับผลคูณของความน่าจะเป็นที่สถานะ x กับความน่าจะเป็นของการเปลี่ยนสถานะจากสถานะ x ไปยังสถานะ y (Transition probability) $\rho(x)T(x \rightarrow y)$ และในทางกลับกัน ความน่าจะเป็นของการเปลี่ยนสถานะจากสถานะ y กลับมายังสถานะ x คือ $\rho(y)T(y \rightarrow x)$ ต้องมีค่าเท่ากันเสมอซึ่งเขียนได้ดังสมการ [10]

$$\rho(x)T(x \rightarrow y) = \rho(y)T(y \rightarrow x) \quad (2.41)$$

ระเบียบวิธีที่เป็นไปตามเงื่อนไขดังกล่าวนี้ ตัวอย่างที่ถูกสร้างขึ้นจะมี $\rho(x_i)$ เป็นสมาชิกของฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น $\rho(x)$ อย่างไรก็ตาม การสร้างชุดตัวอย่างสุ่มตามกระบวนการของมาร์คอฟสำหรับการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลมีหลายวิธี แต่ในโครงการนี้ได้เลือกใช้ระเบียบวิธีเมโทรโพลิส ซึ่งได้อธิบายในหัวข้อต่อไป

ระเบียบวิธีของเมโทรโพลิส

ในการสร้างลำดับเซตของตัวอย่าง $\{\bar{x}_i\}$ เพื่อนำไปใช้ในการคำนวณด้วยวิธีการมอนติคาร์โลตามสมการ (2.34) เมื่อสถานะ \bar{x}_1 เป็นสถานะเริ่มต้น ในการคำนวณค่าสถานะ \bar{x}_2 สามารถคำนวณได้ตามระเบียบวิธีเมโทรโพลิส ซึ่งค่าความน่าจะเป็นในการเลือก \bar{x}_2 เป็นดังสมการ [13]

$$A(\bar{x}_1 \rightarrow \bar{x}_2) = \min \left[1, \frac{\rho(\bar{x}_2)}{\rho(\bar{x}_1)} \right] \quad (2.42)$$

โดยที่ $A(\bar{x}_1 \rightarrow \bar{x}_2)$ คือความน่าจะเป็นในการเปลี่ยนสถานะ \bar{x}_1 ไปยัง \bar{x}_2 จากสมการ (2.42) สามารถพิจารณาได้เป็น 2 กรณี คือ

1) ถ้า $\rho(\bar{x}_2) \geq \rho(\bar{x}_1)$ แล้ว $A(\bar{x}_1 \rightarrow \bar{x}_2) = 1$

2) ถ้า $\rho(\bar{x}_2) < \rho(\bar{x}_1)$ แล้ว $A(\bar{x}_1 \rightarrow \bar{x}_2) = \frac{\rho(\bar{x}_2)}{\rho(\bar{x}_1)}$

ในกรณีที่ 1 สถานะ \bar{x}_2 จะถูกยอมรับทันที เพราะ 1 เป็นค่าที่ต่ำที่สุดที่อยู่ในสมการ (2.42) แต่ในกรณีที่ 2 ค่า $\rho(\bar{x}_2)/\rho(\bar{x}_1)$ มีค่าน้อยกว่า 1 ดังนั้น เพื่อที่จะเลือกว่าเกิดการเปลี่ยนสถานะเป็น \bar{x}_2 หรือไม่ จำเป็นต้องเปรียบเทียบอัตราส่วนระหว่าง $\rho(\bar{x}_2)/\rho(\bar{x}_1)$ กับค่าตัวเลขสุ่ม (Random number; R) ซึ่งอยู่ในช่วง $(0,1)$ กล่าวคือถ้า $A(\bar{x}_1 \rightarrow \bar{x}_2) \geq R$ แล้วให้เลือกสถานะ \bar{x}_2 แต่ถ้า $A(\bar{x}_1 \rightarrow \bar{x}_2) < R$ ให้เลือกสถานะ \bar{x}_1 และทำการสุ่มค่า \bar{x}_2 ขึ้นมาใหม่อีกครั้งเพื่อนำมาเปรียบเทียบตามสมการ (2.42) และทำซ้ำจนกว่าจะได้จำนวนตัวอย่างตามต้องการ

2.5 การคำนวณค่าคาดหวังด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล

ในหัวข้อนี้กล่าวถึงการคำนวณค่าคาดหวังของปริมาณใดๆ โดยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล เพื่อความสะดวกในการประมวลผล พลังงานทั้งหมดถูกเขียนให้อยู่ในหน่วยของพลังงานการเพิ่มประจุ (E_C) ซึ่งแก็กซ์ของระบบนิยามได้ตามสมการ (2.43) [10]

$$S[\varphi] = S_C[\varphi] + S_T[\varphi] \quad (2.43)$$

โดยที่

$$S_C[\varphi] = \int_0^{\beta E_C} d\tau \left[\frac{\dot{\varphi}^2(\tau)}{4} + in_g \dot{\varphi}(\tau) \right] \quad (2.44)$$

$$S_T[\varphi] = -g \int_0^{\beta E_C} d\tau \int_0^{\beta E_C} d\tau' \alpha(\tau - \tau') \cos(\varphi(\tau) - \varphi(\tau'))$$

เมื่อ

$$\alpha(\tau - \tau') = \frac{1}{4(\beta E_C)^2 \sin^2 \left(\frac{\pi}{\beta E_C} (\tau - \tau') \right)} \quad (2.45)$$

เพื่อความสะดวกในการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล เงื่อนไขขอบเขตของการหาค่าปริพันธ์ในสมการ (2.44) ถูกเปลี่ยนตัวแปรใหม่ คือ

$$\varphi(\tau) = \xi(\tau) + v_w \tau \quad (2.46)$$

เมื่อ

$$v_w = \frac{2\pi w}{\beta E_C} \quad (2.47)$$

โดยที่ w คือ ตัวเลขไวน์ดิง ดังนั้น ค่าแอกชันจึงขึ้นกับตัวแปร $\xi(\tau)$ กล่าวคือ แอกชันของคูลอมบ์สามารถเขียนได้ตามสมการ [10]

$$\begin{aligned} S_C[\xi, w] &= \int_0^{\beta E_C} d\tau \left[\frac{1}{4} (\dot{\xi}^2(\tau) + 2v_w \dot{\xi}(\tau) + v_w^2) + in_g (\xi(\tau) + v_w) \right] \\ &= \int_0^{\beta E_C} d\tau \left[\frac{1}{4} (\dot{\xi}^2(\tau) + v_w^2) + in_g v_w \right] \end{aligned} \quad (2.48)$$

โดยใช้เงื่อนไขขอบเขต $\int d\tau \dot{\xi}(\tau) = \xi(\beta E_C) - \xi(0) = 0$ แอกชันของการทะลุผ่าน สามารถเขียนใหม่ได้เป็น [10]

$$S_T[\xi, w] = -g \int_0^{\beta E_C} d\tau \int_0^{\beta E_C} d\tau' \alpha(\tau - \tau') \cos(\xi(\tau) - \xi(\tau') + v_w(\tau - \tau')) \quad (2.49)$$

ซึ่งในการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวต้องอาศัยการคำนวณค่าคาดหวังของตัวเลขไวน์ดิง ดังนั้น จากสมการ (2.29) สามารถเขียนค่าคาดหวังของตัวเลขไวน์ดิงเฉลี่ยของจำนวนรอบการปริพันธ์ใหม่ได้เป็น

$$\langle w \rangle_0 = \frac{\langle e^{-2\pi in_g w} \rangle_0}{\langle e^{-2\pi in_x w} \rangle_0} \quad (2.50)$$

โดยที่สัญลักษณ์ $\langle w \rangle_0$ หมายถึง ค่าคาดหวังของตัวเลขไวน์ดิง โดยนิยามได้ตามสมการ

$$\langle w \rangle_0 = \frac{1}{Z} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{\xi(0)=0}^{\xi(\beta E_C)=0} D\xi w e^{-S_n[\xi, w]} \quad (2.51)$$

โดยที่

$$S_0[\xi, w] = \int_0^{\beta E_C} d\tau \frac{1}{4} (\dot{\xi}^2(\tau) + v_w^2) - g \int_0^{\beta E_C} d\tau \int_0^{\beta E_C} d\tau' \alpha(\tau - \tau') \cos(\xi(\tau) - \xi(\tau') + v_w(\tau - \tau')) \quad (2.52)$$

ซึ่งเป็นแอมพลิจูดที่เป็นจำนวนจริงบวก เนื่องจากการคำนวณตามวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลด้วยระเบียบวิธีเมโทรโพลิส ต้องใช้แอมพลิจูดที่เป็นจำนวนจริงบวก

แอมพลิจูดในรูปแบบที่ไม่ต่อเนื่อง

ในการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลต้องจัดสมการให้อยู่ในรูปแบบของฟังก์ชันที่ไม่ต่อเนื่อง โดยการแบ่งช่วงเวลาจินตภาพ $[0, \beta E_c]$ ออกเป็น N ช่วง ที่มีความกว้าง $\Delta\tau$ และกำหนดให้ $\xi_j = \xi(\tau_j)$ โดยที่ $\tau_j = j\Delta\tau$ ดังนั้น แอมพลิจูดที่เป็นบวก (S_0) ถูกทำให้อยู่ในรูปแบบฟังก์ชันที่ไม่ต่อเนื่องโดยใช้ผลบวกของรีมาน (Rieman's sum) [10] กล่าวคือ

$$S_0[\xi, w] \approx \sum_{j=1}^N \frac{\Delta\tau}{4} \left(\frac{\xi_j - \xi_{j-1}}{\Delta\tau} \right)^2 + \frac{\beta E_c}{4} v_w - \sum_{j,j'=1}^N \frac{\Delta\tau^2 g \cos(\xi_j - \xi_{j'} + v_w \Delta\tau (j - j'))}{4(\beta E_c)^2 \sin^2\left(\frac{\pi \Delta\tau}{\beta E_c} (j - j')\right)} \quad (2.53)$$

$$= \sum_{j=1}^N \frac{N(\xi_j - \xi_{j-1})^2}{4\beta E_c} + \frac{\pi^2 w^2}{\beta E_c} - g \sum_{j,j'=1}^N \alpha_{j-j'} \cos\left(\xi_j - \xi_{j'} + \frac{2\pi w}{N} (j - j')\right)$$

โดยที่

$$\alpha_{j-j'} = \frac{1}{4N^2 \sin^2\left(\frac{\pi}{N} (j - j')\right)} \quad (2.54)$$

ในกรณีที่ $j = j'$ พจน์แอมพลิจูดของการทะลุผ่าน (2.53) มีค่าลู่ออก ดังนั้น เพื่อการแก้ปัญหาดังกล่าวให้พิจารณาแอมพลิจูดที่ลิมิตของ j ลู่เข้าสู่ j' และใช้เอกลักษณ์ตรีโกณมิติ $\cos(x) = 1 - 2\sin^2(x/2)$ โดยกำหนดให้ [10]

$$\Omega(\tau, \tau') = \frac{1}{2} \left(\xi(\tau) - \xi(\tau') + \frac{2\pi w}{\beta E_c} (\tau - \tau') \right) \quad (2.55)$$

เมื่อ $\lim_{\tau_i \rightarrow \tau_j} \Omega(\tau_i, \tau_j)$ สามารถคำนวณได้ดังนี้ [10]

$$\begin{aligned} \lim_{\tau_i \rightarrow \tau_j} \alpha_{j-j'} \sin^2 \left[\frac{1}{2} \left(\xi(\tau_i) - \xi(\tau_j) + \frac{2\pi w}{\beta E_c} (\tau_i - \tau_j) \right) \right] &= \lim_{\tau \rightarrow \tau'} \frac{1}{2N^2} \frac{\sin^2[\xi(\tau)]}{\sin^2\left[\frac{\pi}{\beta E_c} (\tau - \tau')\right]} \\ &= \frac{(\beta E_c)^2}{2\pi^2 N^2} \xi^2(\tau) \\ &= \frac{1}{8\pi^2} [\xi_j - \xi_{j-1}]^2 + \frac{w}{2\pi N} [\xi_j - \xi_{j-1}] + \frac{1}{2N^2} w^2 \end{aligned} \quad (2.56)$$

เมื่อแทนสมการ (2.56) ลงในสมการ (2.53) พบว่า ผลรวมของพจน์ที่สองของสมการ (2.56) มีค่าเป็นศูนย์ จึงเหลือเฉพาะพจน์แรกกับพจน์สุดท้ายของสมการ (2.56) นอกจากนั้น จากการพิจารณา แอ็กชันของการทะลุผ่านในกรณีที่มีค่า $j > j'$ และกรณีที่มีค่า $j < j'$ พบว่าทั้งสองกรณีมีคุณสมบัติสมมาตรกัน จึงทำให้สามารถเขียนแอ็กชันของการทะลุผ่านใหม่โดยการเปลี่ยน $\sum_{j,j'}$ เมื่อ $j \neq j'$ เป็น $2 \sum_{j > j'}$ ได้ดังตามสมการ [10]

$$S_0[\xi, w] = c_\xi \sum_{j=1}^N [\xi_j - \xi_{j-1}]^2 + c_w w^2 - 2g \sum_{j,j'=1}^N \alpha_{j-j'} \cos\left(\xi_j - \xi_{j-1} + \frac{2\pi w}{N}(j-j')\right) \quad (2.57)$$

เมื่อ

$$c_\xi = \frac{N}{4\beta E_C} + \frac{g}{8\pi^2} \quad c_w = \frac{\pi^2}{\beta E_C} + \frac{g}{2N} \quad \text{และ} \quad \alpha_{j-j'} = \frac{1}{4N^2 \sin^2\left(\frac{\pi}{N}(j-j')\right)} \quad (2.58)$$

จากการพิจารณาในกรณีที่ $j \rightarrow j'$ พบว่า ค่าลิมิตลู่เข้าสู่ค่าคงที่ค่าหนึ่ง ซึ่งผลดังกล่าวทำให้สามารถแก้ปัญหาการลู่ออกได้ ดังนั้น ในการหาค่าคาดหวังของปริมาณใดๆ ของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว สามารถประมาณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลได้ตามสมการ [10]

$$\langle A(\xi, w) \rangle = \frac{\sum_{\xi, w} A(\xi, w) \cos(2\pi w n_g)}{\sum_{\xi, w} \cos(2\pi w n_g)} \quad (2.59)$$

การคำนวณด้วยสมการ (2.59) เป็นวิธีการที่ถูกนำมาประยุกต์ในการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันและค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวในโครงงานนี้

การพัฒนาระเบียบวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล

ในบทนี้กล่าวถึงรายละเอียดในการพัฒนาระเบียบวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล เพื่อนำไปใช้คำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว และเปรียบเทียบประสิทธิภาพกับระเบียบวิธีซิงค์เกิลไซต์อ็อปเดทและระเบียบวิธีไฮนทรานส์ฟอร์ม โดยในหัวข้อ 3.1 ได้กล่าวถึงการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชัน ส่วนรายละเอียดและขั้นตอนการคำนวณของระเบียบวิธีซิงค์เกิลไซต์อ็อปเดทถูกอธิบายในหัวข้อ 3.2 สำหรับหัวข้อ 3.3 กล่าวถึงระเบียบวิธีฟูเรียร์อ็อปเดท ส่วนในหัวข้อ 3.4 ได้แสดงผลการเปรียบเทียบประสิทธิภาพระหว่างระเบียบวิธีซิงค์เกิลไซต์อ็อปเดทและระเบียบวิธีฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์ม

3.1 การคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชัน

ในการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ซึ่งค่าดังกล่าวสามารถนำไปคำนวณค่าความนำไฟฟ้าได้ โดยค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันนิยามได้ตามสมการ [10]

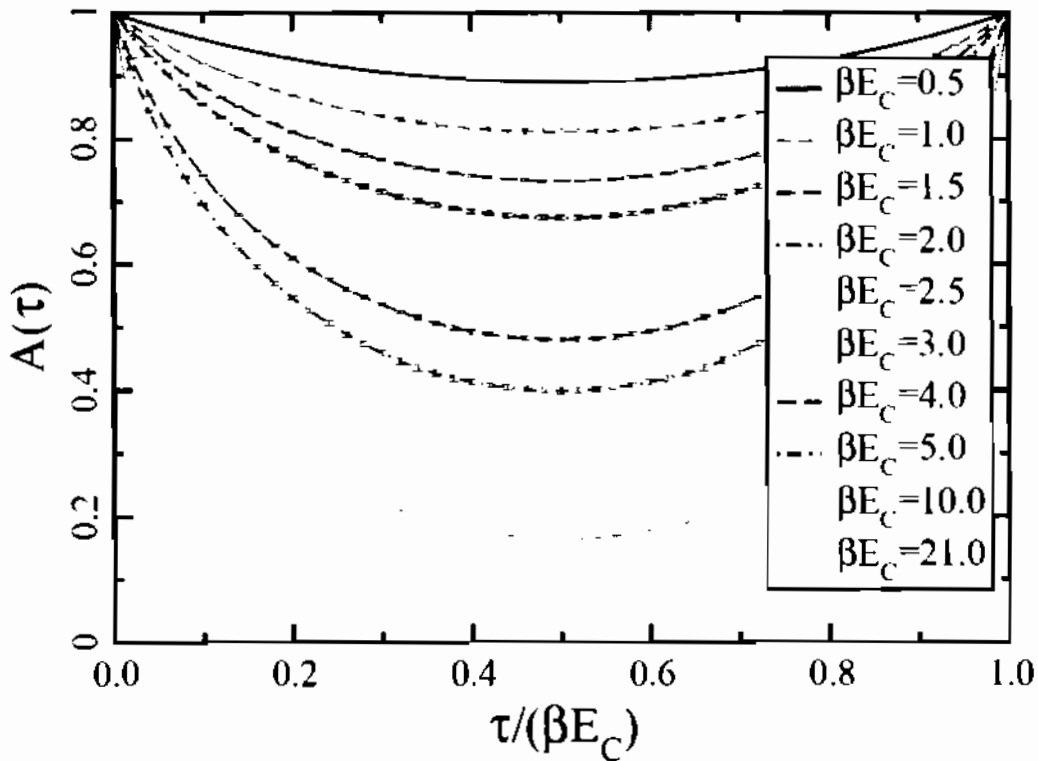
$$A(\tau) = \frac{\langle \cos(2\pi w n_g) \cos(\xi(\tau) + v_w(\tau)) \rangle_0}{\langle \cos(2\pi w n_g) \rangle_0} \tag{3.1}$$

เมื่อสัญลักษณ์ $\langle X \rangle_0$ หมายถึง ค่าคาดหวังของปริมาณ X ใดๆ นิยามตามสมการ

$$\langle X \rangle_0 = \frac{1}{Z} \sum_{n \in \mathbb{R}} \int_{\xi(0)=0}^{\xi(\beta/\hbar)=0} D\xi X e^{-S_0[\xi, w]} \tag{3.2}$$

จากสมการ (3.2) พบว่า ในการนำไปคำนวณด้วยวิธีการมอนติคาร์โลจำเป็นต้องใช้แอกชันที่เป็นจำนวนจริงบวก ดังนั้น จึงนิยามแอกชันสำหรับการประมวลผลตามเงื่อนไขของระเบียบวิธีเมโทรโพลิไลต์ตามสมการ (2.52)

จากวัตถุประสงค์ของโครงการนี้ที่ต้องการพัฒนาระเบียบวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล และนำไปทดสอบโดยการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว เพื่อเปรียบเทียบประสิทธิภาพกับระเบียบวิธีซิงค์เกิลไซต์อ็อปเดท ซึ่งภาพประกอบ 3.1 เป็นตัวอย่างผลการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว [10] โดยใช้ระเบียบวิธีซิงค์เกิลไซต์อ็อปเดท



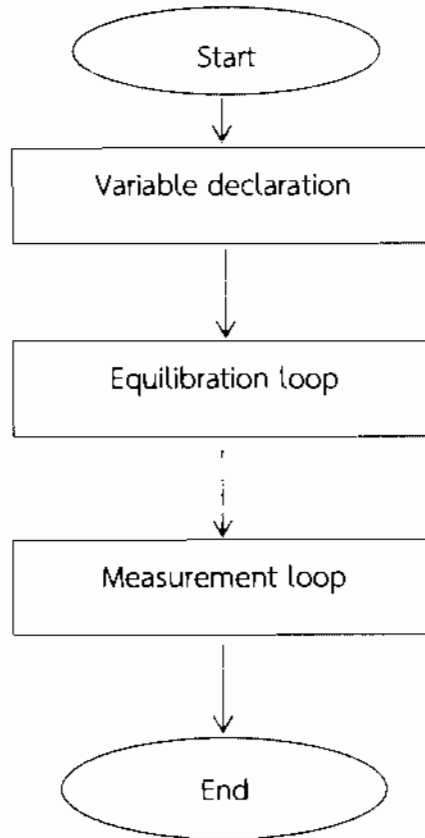
ภาพประกอบ 3.1 ค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว [10] ที่ค่า $g=4.75$ จำนวนประจุลบที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิดเป็น $n_x=0.0$ และค่า βE_C อยู่ในช่วง 0.5 ถึง 21.0

ขั้นตอนของระเบียบวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล

ในการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันด้วยระเบียบวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล โดยใช้ระเบียบวิธีฟูเรียร์อ็อปเททและระเบียบวิธีซิงค์เกิลไซด์อ็อปเททมีขั้นตอนหลักในการคำนวณ ดังแสดงไว้ในภาพประกอบ 3.2 โดยที่ระเบียบวิธีทั้งสองแตกต่างกันเฉพาะในส่วนของวงรอบการวัด (Measurement loop) ซึ่งวงรอบการวัดจะถูกกล่าวถึงรายละเอียดต่อไป

ในโครงการนี้ได้เขียนโปรแกรมคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันด้วยภาษาซี (C language) ดังนั้น ในลำดับแรกจึงต้องทำการกำหนดตัวแปรและกำหนดค่าเริ่มต้นที่ใช้ในการคำนวณ โดยเรียกส่วนนี้ว่าส่วนประกาศตัวแปร (Variable declaration) จากนั้นเพื่อให้ได้ฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็นตามที่กำหนด ต้องคำนวณในส่วนที่เรียกว่า การเข้าสู่สถานะสมดุล (Equilibration loop) โดยกำหนดตัวอย่างเริ่มต้น (x_0) เป็นค่าเริ่มต้นใดๆ จากนั้นใช้ระเบียบวิธีเมโทรโพลิสในการสุ่มค่า ($x_1, x_2, x_3, \dots, x_c$) เพื่อให้ตัวอย่างสุ่มตามกระบวนการมาร์คอฟมีค่าความน่าจะเป็นภายใต้ $\rho(x_i)$ เป็นสมาชิกของฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น $\rho(x)$ โดยการสุ่มตัวอย่าง e

ตัวอย่างแรกเป็นกระบวนการทดสอบระบบให้เข้าสู่สภาวะสมดุล ก่อนการสุ่มตัวอย่างจริงสำหรับใช้ในการคำนวณ โดยเซตของตัวอย่างสุ่ม $\{x_{e+1}, x_{e+2}, x_{e+3}, \dots, x_{e+M}\}$ เป็นกลุ่มตัวอย่างที่สุ่ม จำนวน M ตัวอย่าง เพื่อใช้ในการคำนวณจริง โดยมีค่าความน่าจะเป็น $\rho(x_{e+i})$ ได้



ภาพประกอบ 3.2 แผนผังการทำงานของโปรแกรมที่ใช้ในการคำนวณค่าคอรีเลชันฟังก์ชัน โดยระเบียบวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล

3.2 ระเบียบวิธีซิงค์เกิลไซด์อัฟเทค

การประยุกต์ใช้ระเบียบวิธีซิงค์เกิลไซด์อัฟเทคในการคำนวณค่าคอรีเลชันฟังก์ชันของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวมีขั้นตอน คือ เริ่มจากการเขียนแอกชันของระบบให้อยู่ในรูปแบบที่ไม่ต่อเนื่อง โดยแบ่งช่วงเวลาจินตภาพออกเป็น N ส่วนเท่าๆกัน [10] กล่าวคือ $\Delta\tau = \beta E_C / N$ โดยใช้สัญลักษณ์ $\xi_j = \xi(\tau_j)$ และ $\tau_j = j\Delta\tau$ ในการคำนวณค่าคอรีเลชันฟังก์ชันโดยระเบียบวิธีซิงค์เกิลไซด์อัฟเทค ค่าคอรีเลชันฟังก์ชันจะถูกเขียนให้อยู่ในรูปแบบที่ไม่ต่อเนื่อง โดยที่ $A(\tau_j) = A_j$ ซึ่งสามารถนิยามได้ตามสมการ [13]

$$A_j = \frac{\sum_{\xi, w} \cos(\xi_j + \frac{2\pi w j}{N}) \cos(2\pi w n_g)}{\sum_{\xi, w} \cos(2\pi w n_g)} \quad (3.3)$$

เมื่อตัวแปรสุ่ม ξ, w ได้จากการเลือกสุ่มตัวอย่างตัวแปรเฟส ξ และตัวเลขไว้นัด w

ในลำดับต่อไปได้แสดงการทำงานของโปรแกรมของระเบียบวิธีซิงค์เกิลไซด์ออฟเดท โดยในที่นี้จะแสดงเฉพาะในส่วนที่ 3 ของภาพประกอบ 3.2 คือ วงรอบการวัด เนื่องจากในส่วนที่ 2 กับ 3 มีลักษณะเหมือนกัน แต่ส่วนที่ 2 ไม่มีส่วนที่เป็นผลรวม (Accumulation result) ดังแสดงในภาพประกอบ 3.3

3.3 ระเบียบวิธีฟูเรียร์ออฟเดท

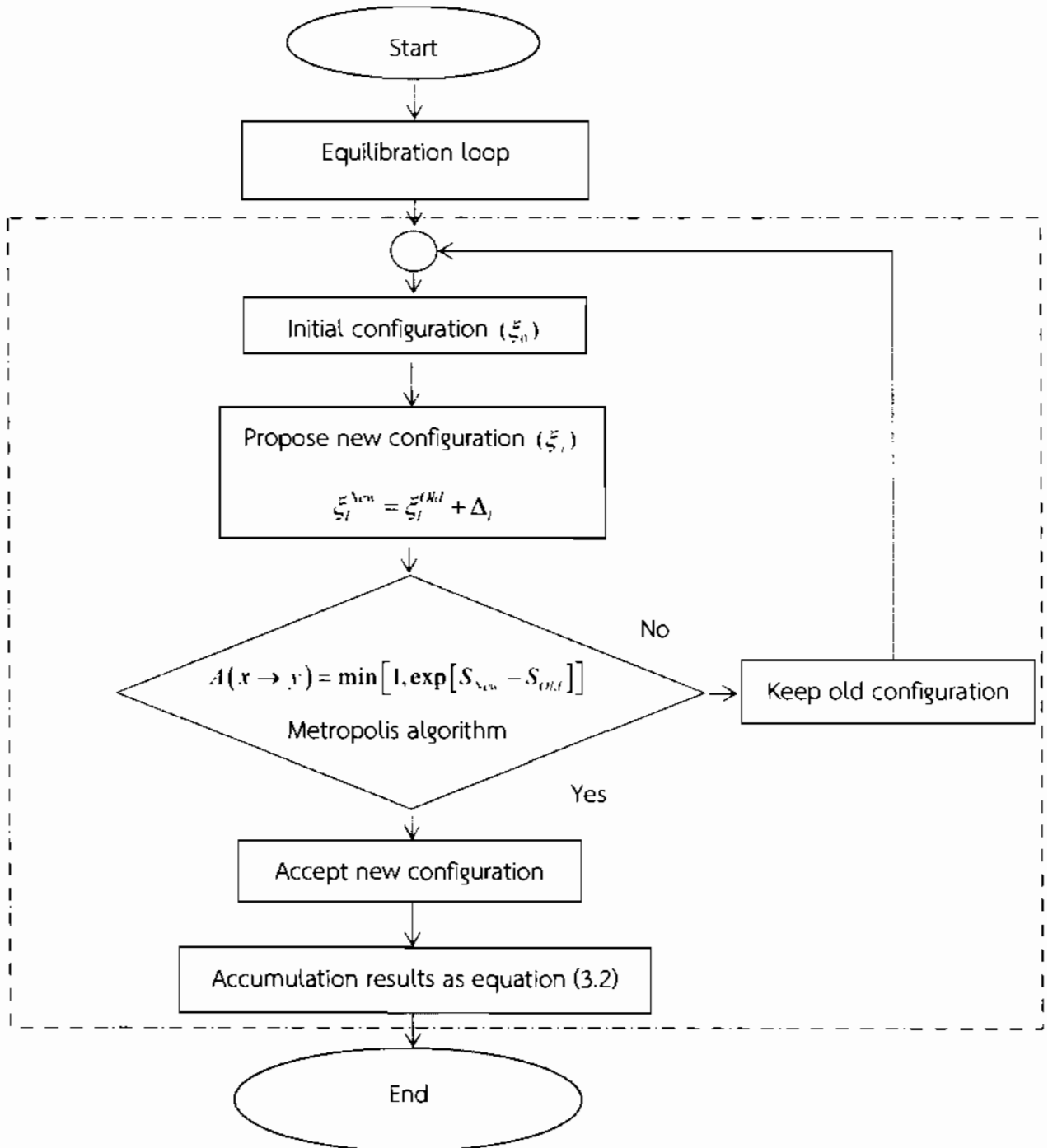
จากหัวข้อที่ผ่านมาได้กล่าวถึงระเบียบวิธีซิงค์เกิลไซด์ออฟเดท ซึ่งเป็นการสร้างตัวอย่างโดยการเปลี่ยนแปลงตัวอย่างเดิมไปเล็กน้อย ดังนั้น ในการสุ่มตัวอย่างเพื่อให้ครอบคลุมสถานะทางควอนตัมที่เป็นไปได้ทั้งหมด จึงต้องใช้ตัวอย่างเป็นจำนวนมาก การคำนวณโดยวิธีนี้ใช้เวลาในการประมวลผลมาก ในหัวข้อนี้ได้พัฒนาระเบียบวิธีฟูเรียร์ออฟเดท ซึ่งกลุ่มตัวอย่างสุ่มถูกสร้างจากสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ที่ได้จากการแปลงฟังก์ชันของตัวแปรเฟส จากข้อเสนอแนะของเอกสารอ้างอิงที่ [13] ถ้าสามารถจัดพจน์แอกชันของการทะลุผ่านให้อยู่ในรูปที่เป็นฟังก์ชันของสัมประสิทธิ์ของฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟสได้ จะสามารถลดระยะเวลาในการประมวลผลได้ ซึ่งในงานวิจัยดังกล่าวได้จัดพจน์แอกชันโดยใช้การแปลงฟูเรียร์ไซน์ แต่ไม่สามารถจัดพจน์แอกชันของการทะลุผ่านได้ จากงานวิจัยของเวอร์เนอร์และโทรเยอร์ (Werner and Troyer) [4] ได้ประสบความสำเร็จในการจัดพจน์แอกชันของกล่องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ซึ่งในงานวิจัยของเวอร์เนอร์และโทรเยอร์ [4] ได้ใช้การแปลงฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส ดังนั้น ในโครงการนี้จึงเลือกใช้วิธีการของเวอร์เนอร์และโทรเยอร์ เพื่อทำการจัดพจน์แอกชันของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว โดยเริ่มจากการจัดพจน์แอกชันที่เป็นฟังก์ชันของตัวแปรเฟส $S[\xi(r)]$ ให้อยู่ในพจน์สัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส $S[a_k]$ โดยใช้ความสัมพันธ์ของสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟสที่ได้จากการแปลงฟังก์ชันของตัวแปรเฟส $e^{i\xi}$ นิยามได้ตามสมการ [12]

$$a_k = \sum_{j=0}^{N-1} e^{\frac{i2\pi jk}{N}} e^{i\xi_j} \quad (3.4)$$

และ

$$e^{i\xi_j} = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} a_k e^{\frac{-i2\pi jk}{N}} \quad (3.5)$$

จากสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟสและตัวแปรเฟสจากสมการ (3.4) และ (3.5) ถูกใช้ในการจัดพจน์แอกชันของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ซึ่งจะได้กล่าวถึงรายละเอียดในลำดับต่อไป



ภาพประกอบ 3.3 แผนผังขั้นตอนการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันในส่วนของวงรอบการวัดในกรณีของระเบียบวิธีซิงค์เกิลไซต์อัปเดต

3.3.1 แอ็กชันของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว

การจัดพจน์แอ็กชันของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวที่เป็นฟังก์ชันของตัวแปรเฟสให้อยู่ในสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส ในโครงงานนี้จึงเลือกใช้การแปลงฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟสตามสมการ (3.5) เพื่อทำการจัดพจน์แอ็กชันของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวที่เขียนอยู่ในรูปของตัวแปรเฟส ซึ่งประกอบด้วย แอ็กชันของคูโลมบ์ นิยามได้ดังสมการ [10]

$$S_C[\xi, w] = c_\xi \sum_{j=1}^N [\xi_j - \xi_{j-1}]^2 + c_w w^2 \quad (3.6)$$

เมื่อ c_ξ และ c_w นิยามได้ตามสมการ [10]

$$c_\xi = \frac{N}{4\beta E_C} + \frac{g}{8\pi^2} \quad c_w = \frac{\pi^2}{\beta E_C} + \frac{g}{2N} \quad (3.7)$$

และแอ็กชันของการทะลุผ่านนิยามได้ดังสมการ [10]

$$S_T[\xi, w] = -2g \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N \alpha_{j-j'} \cos\left(\xi_j - \xi_{j'} + \frac{2\pi w}{N}(j-j')\right) \quad (3.8)$$

เมื่อ $\alpha_{j-j'}$ ถูกนิยามได้ตามสมการ [10]

$$\alpha_{j-j'} = \frac{1}{4N^2 \sin^2\left(\frac{\pi}{N}j-j'\right)} \quad (3.9)$$

ในการจัดพจน์แอ็กชันให้อยู่ในรูปของสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส $S[\alpha_k]$ โดยอาศัยความสัมพันธ์ของตัวแปรเฟสและสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟสตามสมการ (3.4) และ (3.5) แอ็กชันดังกล่าวสามารถจัดพจน์ได้ดังรายละเอียดต่อไปนี้

การจัดพจน์แอ็กชันของคูโลมบ์

ในการจัดพจน์แอ็กชันของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวให้อยู่ในรูปของสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส ทำการจัดพจน์เฉพาะพจน์ที่ขึ้นอยู่กับตัวแปรเฟส เพื่อความสะดวกได้แยกพิจารณาในแต่ละแอ็กชันคือ แอ็กชันของคูโลมบ์และแอ็กชันของการทะลุผ่าน โดยเริ่มจากแอ็กชันของคูโลมบ์ สามารถทำได้โดยการประมาณให้อยู่ในรูปของไซน์ จากการประมาณฟังก์ชันไซน์ คือ $\sin(A) \approx A$ เมื่อ A มีค่าเข้าสู่ศูนย์ สามารถเขียนได้ดังต่อไปนี้

$$c_\xi \sum_{j=1}^N [\xi_j - \xi_{j-1}]^2 \approx 4c_\xi \sum_{j=1}^N \sin^2\left(\frac{\xi_j - \xi_{j-1}}{2}\right) \quad (3.10)$$

โดยอาศัยเอกลักษณ์ของตรีโกณมิติ $\sin^2(A) = (1 - \cos(2A))/2$ สมการ (3.10) สามารถเขียนใหม่ได้ดังนี้

$$\begin{aligned} c_\xi \sum_{j=1}^N [\xi_j - \xi_{j-1}]^2 &\approx 4c_\xi \left(\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N 1 - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \cos(\xi_j - \xi_{j-1}) \right) \\ &\approx 4c_\xi \left(\frac{N}{2} - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \cos(\xi_j - \xi_{j-1}) \right) \end{aligned} \quad (3.11)$$

จากการประมาณแอกชันของคูลอมบ์ตามสมการ (3.11) ในการประมวลผลด้วยระเบียบวิธีควอนตัมมอนติคาร์โลนั้นต้องคำนวณเพียงผลต่างของแอกชันเท่านั้น ดังนั้น พจน์ของค่าคงที่ในสมการ (3.11) จึงถูกหักล้างและไม่นำมาพิจารณา และในขณะเดียวกันพจน์ที่สองทางขวาของสมการ (3.11) สามารถเขียนให้อยู่ในรูปของเอกซ์โพเนนเชียล ได้ดังสมการ

$$S_C^{eff}[\xi] = \text{Re} \left[-2c_\xi \sum_{j=1}^N e^{i(\xi_j - \xi_{j-1})} \right] \quad (3.12)$$

เมื่อ $S_C^{eff}[\xi]$ คือ แอกชันยังผล (Effective action) ของแอกชันของคูลอมบ์ เนื่องจากแอกชันของคูลอมบ์ตามสมการ (3.6) พิจารณาเฉพาะพจน์ที่ขึ้นกับตัวแปรเฟสและจากการประมาณตามสมการ (3.11) พจน์ของค่าคงที่ไม่ถูกนำมาพิจารณาด้วย จากสมการ (3.12) สามารถเขียนสมการใหม่โดยใช้สัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟสตามสมการ (3.5) ได้ดังสมการ

$$\begin{aligned} S_C^{eff}[a_k] &= \text{Re} \left[-2c_\xi \sum_{j=1}^N \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} a_k e^{\frac{i2\pi k j}{N}} \frac{1}{N} \sum_{k'=0}^{N-1} a_{k'} e^{\frac{-i2\pi k'(j-1)}{N}} \right] \\ &= \text{Re} \left[\frac{-2c_\xi}{N^2} \sum_{j=1}^N \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{k'=0}^{N-1} a_k a_{k'} e^{\frac{i2\pi j(k-k')}{N}} e^{\frac{i2\pi k'}{N}} \right] \end{aligned} \quad (3.13)$$

เมื่อ a_k คือ สัมประสิทธิ์ของ a_k จากนั้น โดยอาศัยคุณสมบัติของเดลต้าฟังก์ชัน (Delta function) ผลบวกของ k จะมีค่าเฉพาะที่ $k = k'$ คือ $\delta(k - k')$ เท่านั้น ส่วนค่าอื่นมีค่าเป็นศูนย์ เมื่อนำมาคูณกับผลบวกของ j เขียนได้ดังนี้ $N\delta(k - k')$ จากคุณสมบัติดังกล่าวสมการ (3.13) สามารถเขียนใหม่ได้ดังนี้

$$S_C^{eff}[a_k] = \text{Re} \left[\frac{-2c_\xi}{N} \sum_{k=0}^{N-1} a_k a_k e^{\frac{i2\pi k}{N}} \right] \quad (3.14)$$

เมื่อพิจารณาผลบวกของ k' ที่ $k' = k$ สมการ (3.14) สามารถเขียนใหม่ได้ดังนี้

$$S_C^{eff} [a_k] = \text{Re} \left[\frac{-2c_\xi}{N} \sum_{k=0}^{N-1} |a_k|^2 e^{\frac{i2\pi k}{N}} \right] \quad (3.15)$$

จากสมการ (3.15) เมื่อแปลงสมการกลับไปสู่ฟังก์ชันตรีโกณมิติโดยอาศัยสูตรของออยเลอร์ สามารถเขียนได้ดังสมการ

$$S_C^{eff} [a_k] = \frac{-2c_\xi}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos\left(\frac{2\pi k}{N}\right) |a_k|^2 \quad (3.16)$$

เมื่อ c_ξ นิยามตามสมการ (3.7)

การจัดพจน์แฉีกชั้นของการทะลุผ่าน

ส่วนแฉีกชั้นของการทะลุผ่านซึ่งถูกนิยามตามสมการ (3.8) สามารถเขียนใหม่ในรูปฟังก์ชันเอกซ์โพเนนเชียล ได้ดังสมการ

$$S_T [\xi] = -2g \text{Re} \left[\sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N \alpha_{j-j'} e^{i(\xi_j - \xi_{j'} + \frac{2\pi w}{N}(j-j'))} \right] \quad (3.17)$$

โดยที่ $\alpha_{j-j'}$ นิยามได้ตามสมการ (3.9) จากสมการ (3.17) โดยใช้สัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟสตามสมการ (3.5) สามารถเขียนใหม่ได้ดังสมการ

$$\begin{aligned} S_T [a_k] &= -2g \text{Re} \left[\sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N \alpha_{j-j'} \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} a_k e^{\frac{i2\pi kj}{N}} \frac{1}{N} \sum_{k'=0}^{N-1} a_{k'} e^{\frac{-i2\pi k'j'}{N}} e^{\frac{i2\pi w}{N}(j-j')} \right] \\ &= -2g \text{Re} \left[\frac{1}{N^2} \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{k'=0}^{N-1} \alpha_{j-j'} a_k a_{k'} e^{\frac{i2\pi(kj-k'j')}{N}} e^{\frac{i2\pi w}{N}(j-j')} \right] \end{aligned} \quad (3.18)$$

เพื่อให้ง่ายต่อการคำนวณต้องลดจำนวนของผลบวกในสมการ (3.18) โดยในโครงการงานนี้ได้ทำการแปลงดัชนีของผลบวก j และ j' กล่าวคือ $P = j - j'$ ดังนั้น

$$\begin{array}{c|c|c} N & N & N-1 \\ j & -j' & = P \\ 1 & 1 & 1-N \end{array}$$

เมื่อแทนค่า $j' = j - P$ สมการ (3.18) สามารถเขียนใหม่ได้ดังนี้

$$S_T [a_k] = -2g \text{Re} \left[\frac{1}{N^2} \sum_{j=1}^N \sum_{P=1-N}^{N-1} \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{k'=0}^{N-1} \alpha_P a_k a_{k'} e^{\frac{i2\pi(kj-k'(j-P))}{N}} e^{\frac{i2\pi w}{N}P} \right]$$

$$= -2g \operatorname{Re} \left[\frac{1}{N^2} \sum_{j=1}^N \sum_{p=1-N}^{N-1} \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{k'=0}^{N-1} \alpha_p a_k a_{k'} e^{\frac{i2\pi j(k-k')}{N}} e^{\frac{i2\pi k'p}{N}} e^{\frac{i2\pi w p}{N}} \right] \quad (3.19)$$

โดยที่ α_p นิยามใหม่ได้ดังสมการ

$$\alpha_p = \frac{1}{4N^2 \sin^2 \left(\frac{\pi}{N} P \right)} \quad (3.20)$$

เมื่อ a_k คือ สัญกรณ์ของ a_k จากนั้น โดยอาศัยคุณสมบัติของเดลต้าฟังก์ชันผลบวกของ k จะมีค่าเฉพาะที่ $k = k'$ คือ $\delta(k-k')$ เท่านั้น ส่วนค่าอื่นมีค่าเป็นศูนย์ เมื่อนำมาคูณกับผลบวกของ j เขียนได้ดังนี้ $N\delta(k-k')$ จากคุณสมบัติดังกล่าวสมการ (3.19) สามารถเขียนใหม่ได้ดังนี้

$$S_T [a_k] = -2g \operatorname{Re} \left[\frac{1}{N} \sum_{p=1-N}^{N-1} \sum_{k=0}^{N-1} \alpha_p a_k a_k e^{\frac{i2\pi k'p}{N}} e^{\frac{i2\pi w p}{N}} \right] \quad (3.21)$$

เมื่อพิจารณาผลบวกของ k' ที่ $k' = k$ สมการ (3.21) สามารถเขียนใหม่ได้ดังนี้

$$S_T [a_k] = -2g \operatorname{Re} \left[\frac{1}{N} \sum_{p=1-N}^{N-1} \sum_{k=0}^{N-1} \alpha_p |a_k|^2 e^{\left(\frac{2\pi k'p}{N} + \frac{2\pi w p}{N} \right)} \right] \quad (3.22)$$

จากสมการ (3.22) เมื่อแปลงสมการกลับไปสู่ฟังก์ชันตรีโกณมิติโดยอาศัยสูตรของออยเลอร์ สามารถเขียนได้ดังสมการ

$$S_T [a_k] = \frac{-2g}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{p=1-N}^{N-1} \alpha_p \cos \left(\frac{2\pi P(k+w)}{N} \right) |a_k|^2 \quad (3.23)$$

โดยที่ α_p นิยามได้ตามสมการ (3.20) จากแอมพลิจูดของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์ที่อยู่ในรูปของสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส สามารถนิยามใหม่ได้ดังนี้

$$S^{c|j} = \sum_{k=0}^{N-1} (C_c + T_r) |a_k|^2 \quad (3.24)$$

เมื่อ C_c และ T_r นิยามได้ดังสมการ

$$C_c = \frac{-2c_\xi}{N} \cos \left(\frac{2\pi k}{N} \right) \quad (3.25)$$

และ

$$T_r = \frac{-2g}{N} \sum_{p=1-N}^{N-1} \alpha_p \cos \left(\frac{2\pi P(k+w)}{N} \right) \quad (3.26)$$

เมื่อ α_p นิยามได้ตามสมการ (3.20)

จากแอมพลิจูดของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวที่จัดพจน์จากตัวแปรเฟสให้อยู่ในรูปสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส กล่าวคือ $S[\xi_j] \rightarrow S[\alpha_k]$ ทำให้สามารถใช้ในการสุ่มตัวอย่างระเบียบวิธีเมโทรโพลิสในการสุ่มตัวอย่างจากเซตของสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส $\{\alpha_k\}$ แทนการสุ่มตัวอย่างจาก $\{\xi_j\}$ ดังที่ได้กล่าวไว้ในหัวข้อที่ผ่านมา เพื่อทำการทดสอบแอมพลิจูดที่เป็นฟังก์ชันของสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟสและตัวแปรเฟส ในโครงการนี้ได้เลือกใช้โปรแกรมที่เขียนขึ้นด้วยภาษาซี ซึ่งจะได้ออกถึงรายละเอียดและผลของการทดสอบในหัวข้อต่อไป

3.3.2 การตรวจสอบการจัดพจน์แอมพลิจูด

จากผลของการจัดพจน์แอมพลิจูดของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวที่เป็นฟังก์ชันของตัวแปรเฟส $S[\xi_j]$ ตามสมการ (3.6) และ (3.8) ให้อยู่ในรูปสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส $S[\alpha_k]$ ตามสมการ (3.16) และ (3.23) เพื่อทำการทดสอบผลการแปลงแอมพลิจูดดังกล่าว ได้ใช้โปรแกรมที่เขียนด้วยภาษาซี สำหรับสร้างกลุ่มตัวอย่างของตัวแปรเฟส โดยที่ $|\xi_j| \in [0, 2\pi]$ เพื่อใช้ในการคำนวณแอมพลิจูดที่เป็นฟังก์ชันของตัวแปรเฟส ในขณะเดียวกันเพื่อคำนวณแอมพลิจูดที่เป็นฟังก์ชันของสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส ตัวแปรเฟสดังกล่าวต้องถูกแปลงให้อยู่ในรูปสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส โดยอาศัยความสัมพันธ์ตามสมการ (3.4) ซึ่งในโครงการนี้ได้เลือกใช้ระเบียบวิธีการแปลงฟูเรียร์อย่างรวดเร็ว (Fast Fourier transform; FFT) [12] ในการแปลงตัวแปรเฟสดังกล่าวให้อยู่ในรูปสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส ต่อไปเป็นผลการทดสอบแอมพลิจูดที่เป็นฟังก์ชันของตัวแปรเฟสและสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส ที่ได้จากการจัดพจน์

ตาราง 3.1 ผลการเปรียบเทียบแอมพลิจูดของคูลอมบ์ที่เป็นฟังก์ชันของตัวแปรเฟสและสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส โดยใช้โปรแกรมภาษาซีในการสุ่มตัวอย่าง ซึ่งมีค่าอยู่ในช่วง $[0, 2\pi]$ และกำหนดให้ตัวเลขไวน์ดิง (w) มีค่าเท่ากับศูนย์

ตัวเลขทรานซิสเตอร์ (N)	แอมพลิจูดของคูลอมบ์		ค่าความคลาดเคลื่อน
	$S_c^{eff}[\xi_j]$	$S_c^{eff}[\alpha_k]$	
8	-2.361361×10^1	-2.361361×10^1	0.00
16	-1.052767×10^1	-1.052767×10^1	0.00
32	-3.897455×10^1	-3.897455×10^1	0.00
64	-2.089694×10^2	-2.089695×10^2	0.00
128	-7.880357×10^2	-7.880357×10^2	0.00
256	-3.183085×10^3	-3.183085×10^3	0.00

ตาราง 3.2 ผลการเปรียบเทียบแฉีกชั้นของการทะลุผ่านที่เป็นฟังก์ชันของตัวแปรเฟสและสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส โดยใช้โปรแกรมภาษาซีในการสุ่มตัวอย่าง ซึ่งมีค่าอยู่ในช่วง $[0, 2\pi]$ และกำหนดให้ตัวเลขไวน์ดิง (w) มีค่าเท่ากับศูนย์

จำนวนตัวอย่าง	แฉีกชั้นของ $S[\xi_r]$	แฉีกชั้นของ $S[\alpha_r]$	ตัวเลขไวน์ดิง
8	-1.539701	-1.539701	0.00
16	-4.004423	-4.004423	0.00
32	-8.458059	-8.458059	0.00
64	-2.484693×10^1	-2.484694×10^1	0.00
128	-4.507749×10^1	-4.507749×10^1	0.00
256	-9.305648×10^1	-9.305648×10^1	0.00

ตาราง 3.3 ผลการเปรียบเทียบแฉีกชั้นที่เป็นฟังก์ชันของตัวแปรเฟสและสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส โดยที่ตัวเลขทรอดเตอร์ (N) คือ 32

ชุดตัวเลขสุ่มยัด (Random seed)	แฉีกชั้นของ $S[\xi_r]$		แฉีกชั้นของการทะลุผ่าน		ตัวเลขไวน์ดิง (w)
	$S[\xi_r]$	$S[\alpha_r]$	$S[\xi_r]$	$S[\alpha_r]$	
1073535650	-2.109657×10^1	-2.109657×10^1	-3.187610	-3.187610	5
1073535651	-2.167204×10^1	-2.167204×10^1	-3.116580	-3.116580	4
1073535652	-1.616751×10^1	-1.616751×10^1	-3.669445	-3.669445	3
1073535653	-1.965132×10^1	-1.965132×10^1	-5.390786	-5.390786	2
1073535654	-2.074683×10^1	-2.074683×10^1	-6.079826	-6.079826	1
1073535655	-2.319785×10^1	-2.319785×10^1	-8.084769	-8.084769	-1
1073535656	-1.857711×10^1	-1.857711×10^1	-5.648781	-5.648781	-2
1073535657	-2.724593×10^1	-2.724593×10^1	-5.782871	-5.782871	-3
1073535658	-2.815387×10^1	-2.815387×10^1	-4.139156	-4.139156	-4
1073535659	-2.175591×10^1	-2.175591×10^1	-1.630792	-1.630792	-5

จากข้อมูลในตาราง 3.1 และ 3.2 เป็นผลการเปรียบเทียบแฉีกชั้นที่เป็นฟังก์ชันของสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟสและแฉีกชั้นที่เป็นฟังก์ชันของตัวแปรเฟส ในกรณีที่ตัวเลขไวน์ดิงมีค่าเท่ากับศูนย์ผลการคำนวณแสดงให้เห็นว่าแฉีกชั้นทั้งสองรูปแบบมีค่าเท่ากัน นอกจากนั้น เมื่อตัวเลขทรอดเตอร์มีค่าลดลง ค่าความคลาดเคลื่อนของการคำนวณควรจะมีค่าเพิ่มขึ้น

แต่ผลการคำนวณในตาราง 3.1 และ 3.2 พบว่า ผลต่างระหว่างค่าแอมพลิจูดทั้งสองรูปแบบยังคงมีค่าเท่ากับศูนย์ นั่นแสดงว่า แอมพลิจูดทั้งสองรูปแบบมีค่าเท่ากัน แม้ว่าการประมาณมีความละเอียดลดลง สำหรับข้อมูลในตาราง 3.3 เป็นผลการเปรียบเทียบแอมพลิจูดที่เป็นฟังก์ชันของของตัวแปรเฟสและแอมพลิจูดที่เป็นฟังก์ชันสัมพันธ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส ในกรณีที่เซตของตัวแปรเฟสและค่าตัวเลขไว้นัดมีค่าเปลี่ยนแปลงไป ผลการคำนวณได้แสดงให้เห็นว่าค่าแอมพลิจูดทั้งสองรูปแบบมีค่าเท่ากันทุกประการ

3.3.3 ค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว

จากหัวข้อที่ผ่านมาได้กล่าวถึงการจัดพจน์แอมพลิจูดของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวให้เป็นฟังก์ชันของสัมพันธ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส สำหรับหัวข้อนี้กล่าวถึงการจัดพจน์ค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันที่เป็นฟังก์ชันของตัวแปรเฟสให้เป็นฟังก์ชันของสัมพันธ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส จากค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชัน ซึ่งนิยามตามสมการ (3.1) ในการจัดพจน์ค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันดังกล่าวต้องการจัดพจน์เฉพาะพจน์ที่เป็นฟังก์ชันของตัวแปรเฟส กล่าวคือ

$$\cos(\xi(\tau) + \nu_w(\tau)) = \operatorname{Re} \left[e^{j(\xi(\tau) + \nu_w(\tau))} \right] \quad (3.27)$$

จากสมการดังกล่าวโดยอาศัยความสัมพันธ์ของสัมพันธ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟสตามสมการ (3.5) สามารถเขียนใหม่ได้ดังสมการ

$$\operatorname{Re} \left[\frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} a_k e^{-\frac{j2\pi jk}{N}} e^{j\nu_k(\tau)} \right] = \operatorname{Re} \left[\frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} (x_k + jy_k) e^{-j\left(\frac{2\pi jk}{N} - \nu_k(\tau)\right)} \right] \quad (3.28)$$

โดยที่ สัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ $a_k = x_k + jy_k$ ส่วนพจน์เอกซ์โพเนนเชียลถูกแปลงกลับไปสู่ฟังก์ชันตรีโกณมิติโดยอาศัยสูตรของออยเลอร์ สามารถเขียนใหม่ได้ดังนี้

$$\operatorname{Re} \left[\frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} (x_k + jy_k) \left[\cos\left(\frac{2\pi jk}{N} - \nu_k(\tau)\right) + j \sin\left(\frac{2\pi jk}{N} - \nu_k(\tau)\right) \right] \right] \quad (3.29)$$

ดังนั้น

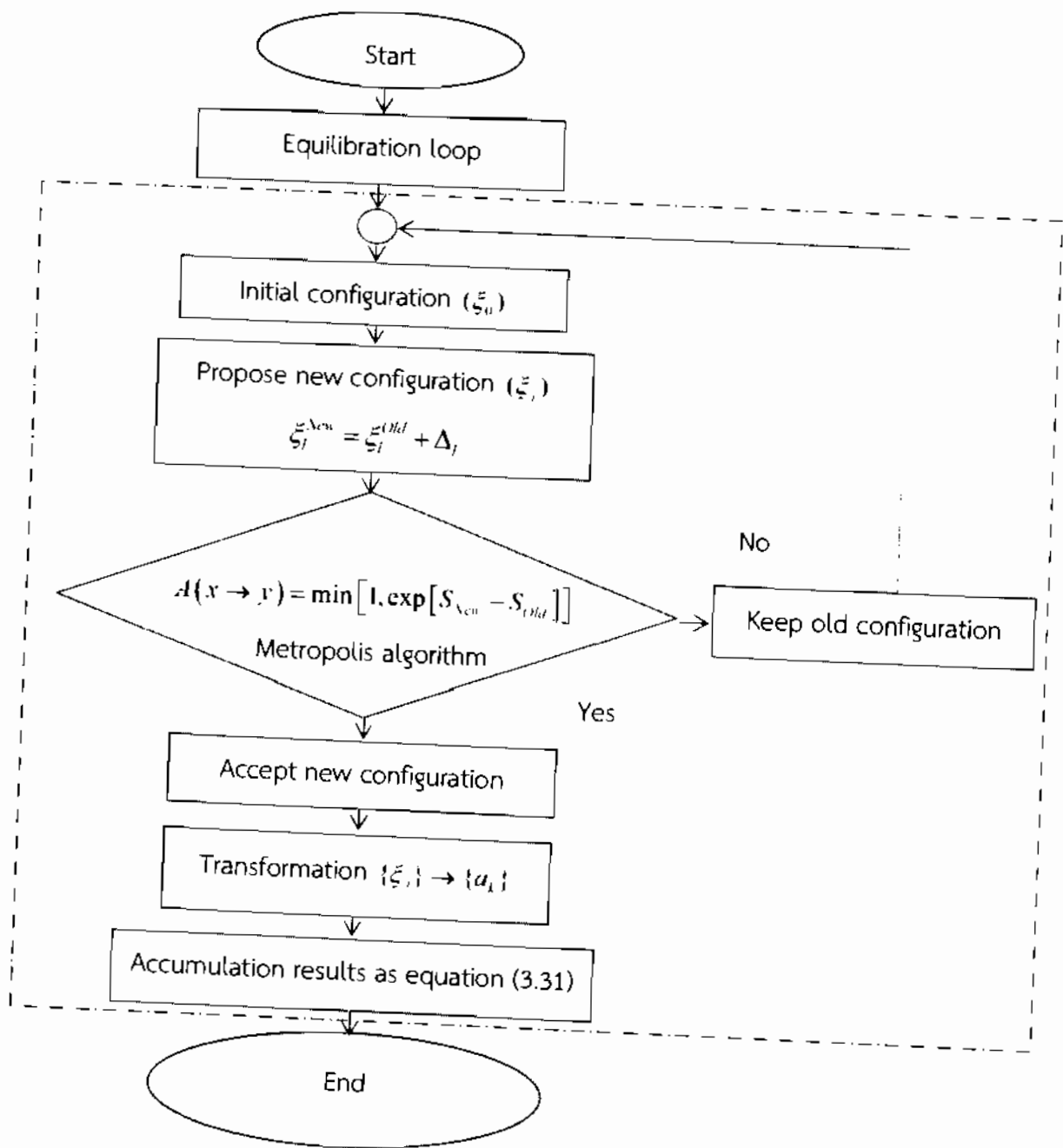
$$\cos(\xi(\tau) + \nu_w(\tau)) = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \left[x_k \cos\left(\frac{2\pi jk}{N} - \nu_k(\tau)\right) - y_k \sin\left(\frac{2\pi jk}{N} - \nu_k(\tau)\right) \right] \quad (3.30)$$

ค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันในสมการ (3.1) สามารถเขียนใหม่ได้ดังนี้

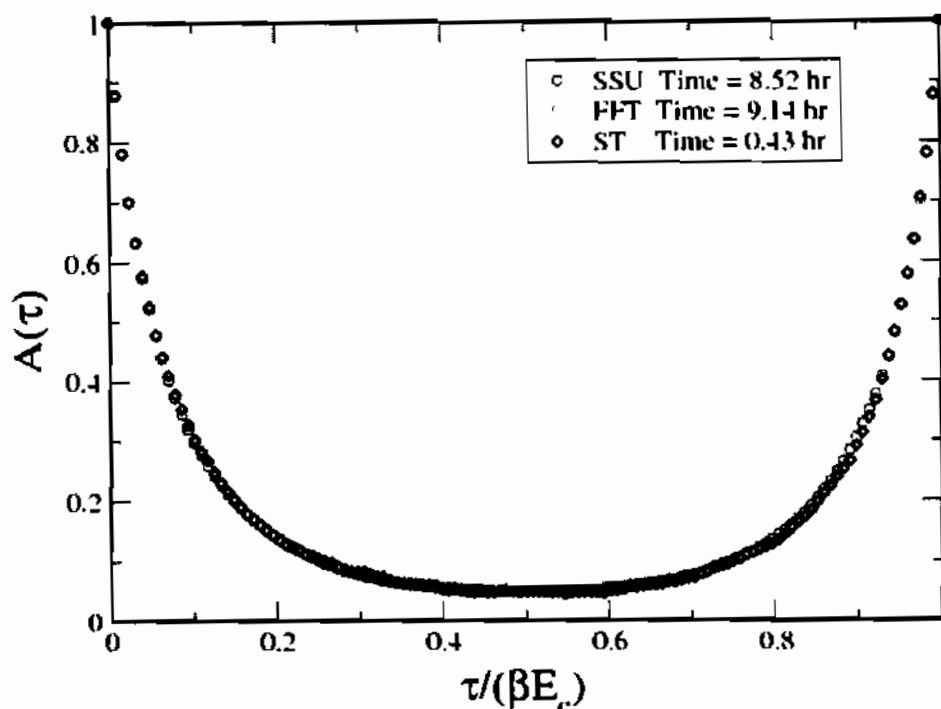
$$A(a_k) = \frac{\left\langle \cos(2\pi w n_g) \cdot \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \left[x_k \cos\left(\frac{2\pi jk}{N} - \nu_k(\tau)\right) - y_k \sin\left(\frac{2\pi jk}{N} - \nu_k(\tau)\right) \right] \right\rangle_0}{\left\langle \cos(2\pi w n_g) \right\rangle_0} \quad (3.31)$$

จากค่าคอร์รีเลชันฟังก์ชันตามสมการ (3.31) สามารถคำนวณได้โดยระเบียบวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล ซึ่งจะกล่าวถึงรายละเอียดในหัวข้อต่อไป

3.4 การคำนวณค่าคอร์รีเลชันฟังก์ชันด้วยระเบียบวิธีฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์ม



ภาพประกอบ 3.4 แผนผังขั้นตอนการคำนวณค่าคอร์รีเลชันฟังก์ชันโดยใช้ระเบียบวิธีฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์ม โดยทำการสุ่มตัวอย่างโดยใช้ตัวแปรเฟส $\{\xi_i\}$



ภาพประกอบ 3.6 ผลการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชัน โดยคำนวณจากระเบียบวิธีซิงค์เกิลไซด์อัปเดต ระบบวิธีฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มและระเบียบวิธีไซน์ทรานส์ฟอร์ม

จากภาพประกอบ 3.6 พบว่า ผลการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันของทั้งสามระเบียบวิธีกล่าวคือ ระบบวิธีซิงค์เกิลไซด์อัปเดต ระบบวิธีฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มที่ถูกพัฒนาขึ้นในโครงการนี้ โดยการแทนค่าตัวแปรที่อยู่ในรูปของการแปลงฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟสและระเบียบวิธีไซน์ทรานส์ฟอร์ม [11] ซึ่งไม่สามารถแปลงแอ็กชันของการทะลุผ่านได้ จากผลการคำนวณ พบว่า ทั้งสามวิธีให้ผลการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันที่ใกล้เคียงกัน แต่เวลาที่ใช้ในการประมวลผลแตกต่างกัน ในกรณีของระเบียบวิธีซิงค์เกิลไซด์อัปเดต ใช้เวลาในการประมวลผลเฉลี่ย 8.52 ชั่วโมง และในกรณีของระเบียบวิธีฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มใช้เวลาในการประมวลผลเฉลี่ย 9.14 ชั่วโมง ส่วนระเบียบวิธีไซน์ทรานส์ฟอร์ม ใช้เวลาในการประมวลผลเฉลี่ย 0.43 ชั่วโมง จากผลการเปรียบเทียบระเบียบวิธีไซน์ทรานส์ฟอร์มเป็นวิธีที่มีประสิทธิภาพสูงสุดในการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุจึงเลือกใช้ระเบียบวิธีไซน์ทรานส์ฟอร์ม

บทที่ 4

ผลการคำนวณและอภิปรายผล

จากหัวข้อ 2.2 ได้แสดงให้เห็นว่าค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลสามารถแสดงความเด่นชัดของปรากฏการณ์การขัดขวางแบบโคลอมบ์ที่เกิดขึ้นในกล่องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ในบทนี้ กล่าวถึงวิธีการคำนวณและผลการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล โดยในหัวข้อ 4.1 ได้กล่าวถึงนิยามค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลในรูปของการหาปริพันธ์ตามวิถี ส่วนวิธีการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลและผลการคำนวณได้แสดงไว้ในหัวข้อ 4.2 และ 4.3 ตามลำดับ

4.1 พลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว

จากนิยามของค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวในสมการ (2.30) พบว่า ค่าดังกล่าวขึ้นกับจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านดังสมการ [4]

$$\frac{E_C^*}{E_C} = 1 - \left. \frac{\partial \langle n \rangle}{\partial n_g} \right|_{n_g=0} \quad (4.1)$$

เมื่อนำจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่าน $\langle n \rangle$ จากสมการ (2.28) แทนในสมการ (4.1) พบว่า ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลขึ้นกับค่าเฉลี่ยของตัวเลขไวน์ดิง w ซึ่งนิยามดังสมการ [10]

$$\langle w \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{w \in \mathbb{R}} \int_{\xi(0)}^{\xi(\beta E_C)} D\xi w e^{-S_0[\xi, w]} \quad (4.2)$$

เมื่อแอกชันของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวที่มีค่าเป็นจำนวนจริงบวก $S_0[\xi, w]$ นิยามตามสมการ (4.3) [10]

$$S_0[\xi, w] = \int_0^{\beta E_C} d\tau \frac{1}{4} (\dot{\xi}^2(\tau) + v_w^2) - g \int_0^{\beta E_C} d\tau \int_0^{\beta E_C} d\tau' \alpha(\tau - \tau') \cos(\xi(\tau) - \xi(\tau') + v_w(\tau - \tau')) \quad (4.3)$$

โดยที่

$$\alpha(\tau - \tau') = \frac{1}{4(\beta E_C)^2 \sin^2\left(\frac{\pi}{\beta E_C}(\tau - \tau')\right)} \quad (4.4)$$

ดังนั้น พบว่า พลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวสามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$\begin{aligned} \frac{E_C^*}{E_C} &= \frac{2\pi^2}{\beta E_C} \frac{1}{Z} \sum_{w \in \mathbb{R}} \int_{\xi(0)}^{\xi(\beta E_C)} D\xi w^2 e^{-S_0[\xi, w]} \\ &= \frac{2\pi^2}{\beta E_C} \langle w^2 \rangle_0 \end{aligned} \quad (4.5)$$

โดยที่

$$\langle w^2 \rangle_0 = \frac{1}{Z} \sum_{w \in \mathbb{R}} \int_{\xi(0)}^{\xi(\beta E_C)} D\xi w^2 e^{-S_0[\xi, w]} \quad (4.6)$$

จากสมการ (4.5) ได้แสดงให้เห็นว่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ขึ้นกับค่าคาดหวังของตัวเลขไวน์ดิงยกกำลังสอง ดังสมการ (4.6) ซึ่งปริมาณดังกล่าวไม่สามารถคำนวณได้โดยตรง เนื่องจากค่าแอมพลิจูดของระบบไม่อยู่ในรูปแบบของเกาส์เซียน (Gaussian form) ดังนั้น เพื่อให้สามารถคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของระบบได้ ในโครงงานนี้จึงได้ประยุกต์ใช้วิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ในการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว

4.2 การคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล

ในการคำนวณสมการ (4.6) ด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ซึ่งได้แสดงรายละเอียดไว้ในบทที่ 2 จากการประยุกต์ใช้วิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล แอมพลิจูดของระบบต้องมีค่าเป็นบวกเท่านั้น เพื่อให้สามารถใช้ฟังก์ชันเอกซ์โพเนนเชียลของค่าแอมพลิจูดเป็นฟังก์ชันของความน่าจะเป็นได้ ดังนั้น จากสมการ (4.6) สามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$\langle w^2 \rangle = \frac{\langle e^{-2\pi i n_x w} w^2 \rangle_0}{\langle e^{-2\pi i n_x w} \rangle_0} \quad (4.7)$$

โดยที่ สัญลักษณ์ $\langle w^2 \rangle_0$ หมายถึง ค่าคาดหวังของปริมาณตัวเลขไวน์ดิงยกกำลังสอง จากสมการ (4.7) ค่าคาดหวังของ $i \langle w^2 \sin(2\pi w n_x) \rangle$ มีค่าเป็นศูนย์ตามสมบัติของฟังก์ชันคี่ (Odd function) ดังนั้น พลังงานการเพิ่มประจุยังผลสามารถเขียนใหม่ได้ดังสมการ

$$\frac{E_C^*}{E_C} = \frac{2\pi^2}{\beta E_C} \frac{\langle w^2 \cos(2\pi w n_x) \rangle_0}{\langle \cos(2\pi w n_x) \rangle_0} \quad (4.8)$$

จากการประยุกต์ใช้วิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล พบว่า ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลในสมการ (4.8) สามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$\frac{E_C^*}{E_C} = \frac{2\pi^2}{\beta E_C} \frac{\sum_{\xi, w} w^2 \cos(2\pi w n_g)}{\sum_{\xi, w} \cos(2\pi w n_g)} \quad (4.9)$$

เมื่อ ξ, w คือ ตัวอย่างจากการสุ่มตัวแปรเฟส ($\xi_i \in \{\xi\}$) และตัวเลขไวน์ดิง ($w \in \{w\}$) จากฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น $\rho[\xi, w] \propto \exp(-S_0[\xi, w])$ ค่าอีกชั้นเป็นไปตามสมการ (4.3) โดยผลการคำนวณและการอภิปรายผลได้แสดงไว้ในหัวข้อถัดไป

4.3 ผลการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล

จากการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล ตามสมการ (4.9) ด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ในช่วงอุณหภูมิ $\beta E_C = [1, 21]$ โดยผลของการคำนวณได้แสดงไว้ในตารางที่ 4.1

ตาราง 4.1 ผลการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ในช่วงอุณหภูมิ $\beta E_C = [1, 21]$

βE_C	เงื่อนไข		$\bar{E} = E_C^* / E_C$	$\varepsilon = \sigma / \sqrt{N}$
	βE_C	g_r		
1		0	0.0020	0.0002
		5	0.0003	0.0001
		10	0.0000	0.0000
		15	0.0000	0.0000
		20	0.0000	0.0000
		25	0.0000	0.0000
		30	0.0000	0.0000
5		0	0.8678	0.0030
		5	0.2617	0.0009
		10	0.0514	0.0005
		15	0.0083	0.0004
		20	0.0013	0.0001
		25	0.0001	0.0001
		30	0.0000	0.0000

ตาราง 4.1 (ต่อ)

N	k	$\bar{X} = E^* / E_c$	σ^2
10	0	0.9953	0.0013
	5	0.4811	0.0016
	10	0.1391	0.0012
	15	0.0258	0.0002
	20	0.0040	0.0001
	25	0.0005	0.0001
	30	0.0001	0.0000
15	0	1.0000	0.0021
	5	0.5419	0.0007
	10	0.1937	0.0005
	15	0.0408	0.0005
	20	0.0063	0.0001
	25	0.0008	0.0001
	30	0.0002	0.0001
21	0	0.9997	0.0020
	5	0.5652	0.0010
	10	0.2276	0.0009
	15	0.0536	0.0009
	20	0.0090	0.0005
	25	0.0010	0.0001
	30	0.0001	0.0001

จากตาราง 4.1 แสดงผลการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล และค่าความคลาดเคลื่อนของข้อมูล ซึ่งนิยามตามสมการ

$$\varepsilon^2 = (N(N-1))^{-1} \sum_{i=1}^N \left(\left\langle (E_c^* / E_c)_i \right\rangle^2 - \left\langle E_c^* / E_c \right\rangle_i^2 \right) \quad (4.10)$$

จากผลการคำนวณ พบว่า ค่าความคลาดเคลื่อนของการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล มีค่าน้อย ซึ่งในการคำนวณค่าความคลาดเคลื่อน ได้ใช้ข้อมูลที่เป็นอิสระต่อกัน 5 ชุด เรียกว่า X_i โดยที่ $i \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$ แล้วทำการคำนวณค่าเฉลี่ยและความคลาดเคลื่อนของพลังงาน การเพิ่มประจุยังผลตามสมการ [11]

$$\bar{X} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i \quad (4.11)$$

และค่าความแปรปรวนสามารถคำนวณได้จากสมการ [11]

$$\sigma^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X})^2 \quad (4.12)$$

โดยค่าความคลาดเคลื่อนจากการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล สามารถคำนวณได้จากค่า ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน ดังสมการ [11]

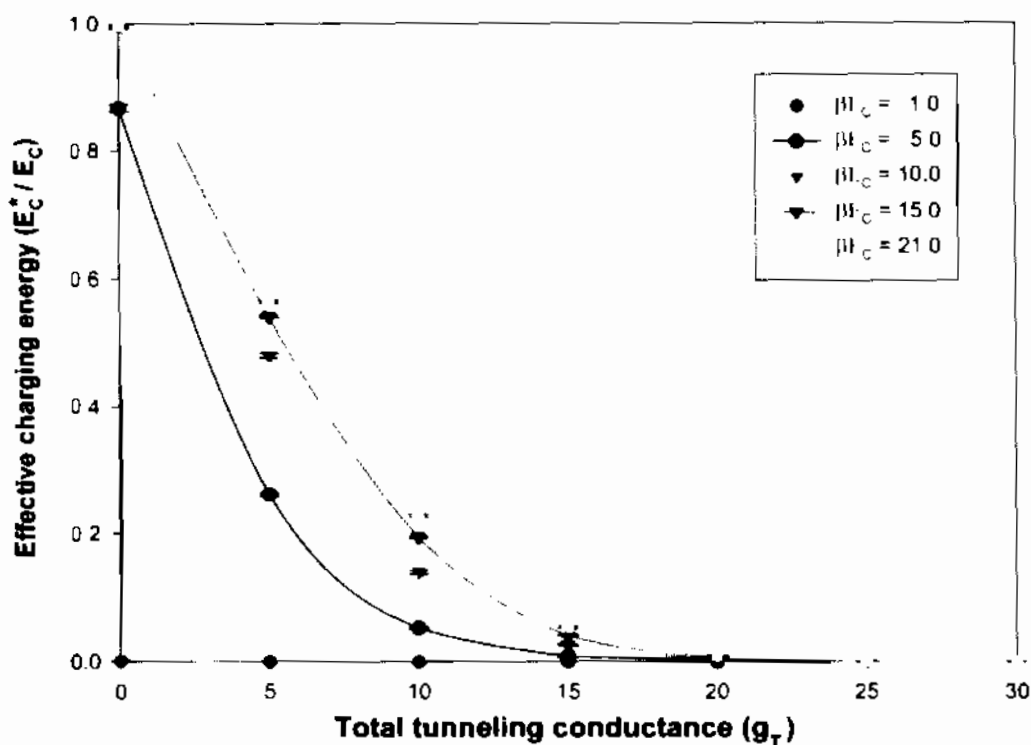
$$\varepsilon = \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \quad (4.13)$$

จากตาราง 4.1 ข้อมูลที่ได้จากการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล สามารถแสดงความสัมพันธ์ของค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลกับค่าความนำไฟฟ้ารวมได้ ดังภาพประกอบ 4.1 จากภาพประกอบ 4.1 พบว่า ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลในกรณี $\beta E_C = 1.0$ (เส้นสีแดง) ซึ่งเป็นกรณีที่พลังงานเฉลี่ยของอิเล็กตรอนมีค่าเท่ากับพลังงานการเพิ่มประจุ ในกรณีนี้ ไม่เกิดปรากฏการณ์ การขัดขวางแบบคูลอมบ์ เพราะการเกิดปรากฏการณ์ดังกล่าวต้องเป็นไปตามเงื่อนไขที่อิเล็กตรอน ต้องมีพลังงานเฉลี่ยน้อยกว่าพลังงานการเพิ่มประจุ ($k_B T \ll E_C$) ดังนั้น พลังงานการเพิ่มประจุ ยังผลในกรณีนี้จึงมีค่าเท่ากับศูนย์ ($E_C^* / E_C = 0$) ซึ่งเป็นไปตามสมการ (4.1) และสอดคล้องกับผลการคำนวณในภาพประกอบ 4.1

ในกรณี $\beta E_C = 5.0$ (เส้นสีน้ำเงิน) ซึ่งเป็นกรณีที่เกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ ที่ไม่เด่นชัด เนื่องจากพลังงานเฉลี่ยของอิเล็กตรอนมีค่าน้อยกว่าพลังงานการเพิ่มประจุไม่มาก กล่าวคือ มีค่าน้อยกว่า 5 เท่า เมื่อค่า $g_T = 0$ พบว่า พลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าไม่เท่ากับหนึ่ง ซึ่งเป็นผลเนื่องจากอิเล็กตรอนมีโอกาสเคลื่อนที่ทะลุผ่านรอยต่อการทะลุผ่านไปยังควอนตัมดอทได้ กล่าวคือ $0 < \partial \langle n \rangle / \partial n_g < 1$ ที่บริเวณ $n_g = 0$ ดังนั้น ในกรณีนี้ $E_C^* / E_C \sim 0.87$ เป็นไปตาม

ผลการ (4.1) จึงทำให้พลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าไม่เท่ากับหนึ่งเหมือนในกรณีที่เกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ที่เด่นชัด ซึ่งกรณีนี้อิเล็กตรอนได้รับพลังงานจากความร้อนประมาณหนึ่งจึงต้องการพลังงานน้อยกว่า E_C ในการทะลุผ่านเข้าไปยังควอนตัมดอท

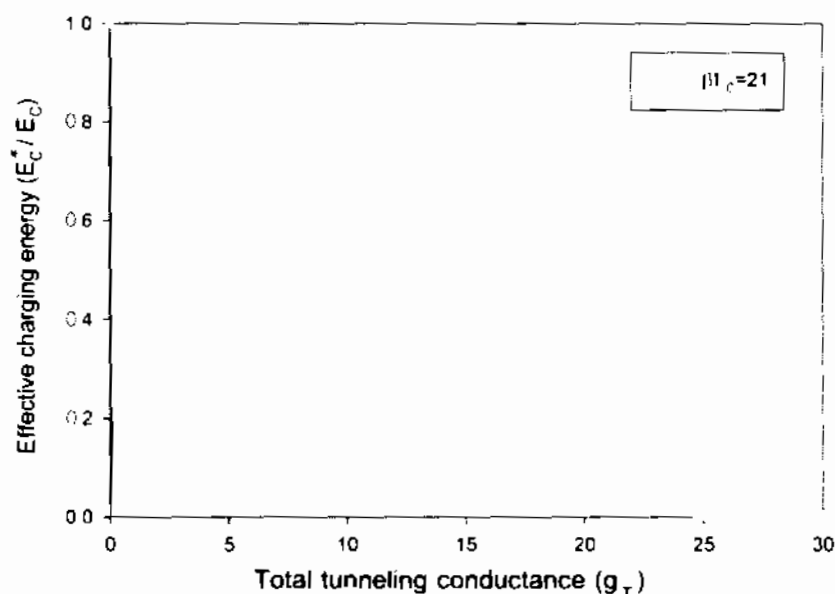
ในกรณีที่ $\beta E_C = 10.0$, $\beta E_C = 15.0$ และ $\beta E_C = 21.0$ (เส้นสีชมพู สีเขียว และสีส้มตามลำดับ) เป็นกรณีที่เกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ขึ้นอย่างเด่นชัด กล่าวคือ บริเวณที่ $n_g \rightarrow 0$ อิเล็กตรอนไม่สามารถเคลื่อนที่เข้าไปในควอนตัมดอทได้จนกว่าจะได้รับพลังงานอย่างน้อยที่สุดเท่ากับพลังงานการเพิ่มประจุ ดังนั้น จำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านจึงมีค่าประมาณเท่ากับศูนย์ กล่าวคือ $\partial \langle n \rangle / \partial n_g = 0$ ทำให้ค่าพลังงานการเพิ่มประจุมีค่าเป็นหนึ่ง ($E_C^* / E_C = 1$) ในกรณีนี้ประมาณได้ว่าอิเล็กตรอนไม่ได้รับพลังงานความร้อน ดังนั้น ในการทะลุผ่านเข้าไปในควอนตัมดอทจึงต้องใช้พลังงานเท่ากับ E_C



ภาพประกอบ 4.1 ผลการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว

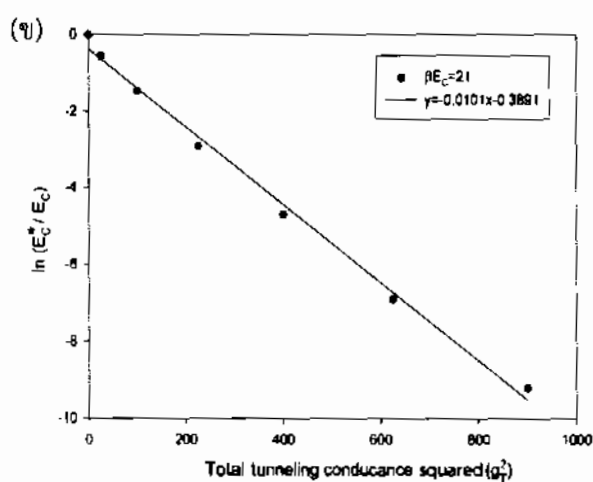
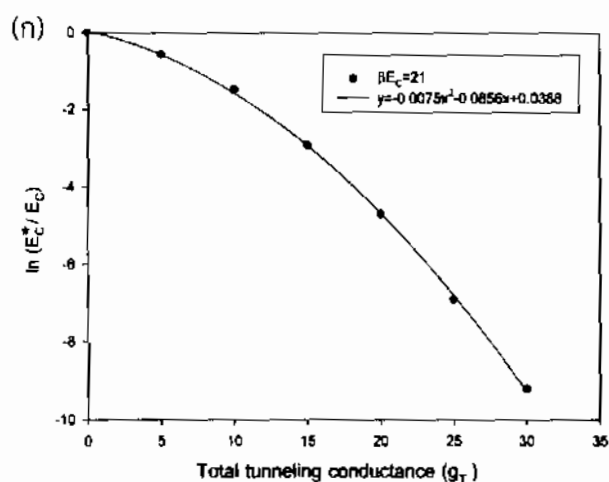
จากภาพประกอบ 4.1 พบว่า เมื่อค่าความนำไฟฟ้ารวม (g_T) มีค่าเพิ่มมากขึ้น ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีการลดลงอย่างรวดเร็ว เพื่อแสดงฟังก์ชันการลดลงของค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล ได้อย่างกรณี $\beta E_C = 21.0$ ดังภาพประกอบ 4.2 จากนั้นหาความสัมพันธ์

ระหว่าง g_T กับค่า E_C^*/E_C โดยการเขียนกราฟระหว่าง $\ln(E_C^*/E_C)$ กับ g_T ดังภาพประกอบ 4.3 (ก) ซึ่งจะเห็นได้ว่าลักษณะของกราฟไม่เป็นฟังก์ชันแบบเชิงเส้น แต่มีลักษณะเป็นฟังก์ชันพาราโบลาคว่ำ ดังนั้น เพื่อแสดงความสัมพันธ์เป็นระหว่าง $\ln(E_C^*/E_C)$ กับ g_T^2 พบว่า กราฟมีลักษณะที่เป็นแบบฟังก์ชันเชิงเส้น ดังภาพประกอบ 4.3 (ข)



ภาพประกอบ 4.2 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล (E_C^*/E_C)

กับค่าความนำไฟฟ้ารวม (g_T) กรณี $\beta E_C = 21.0$

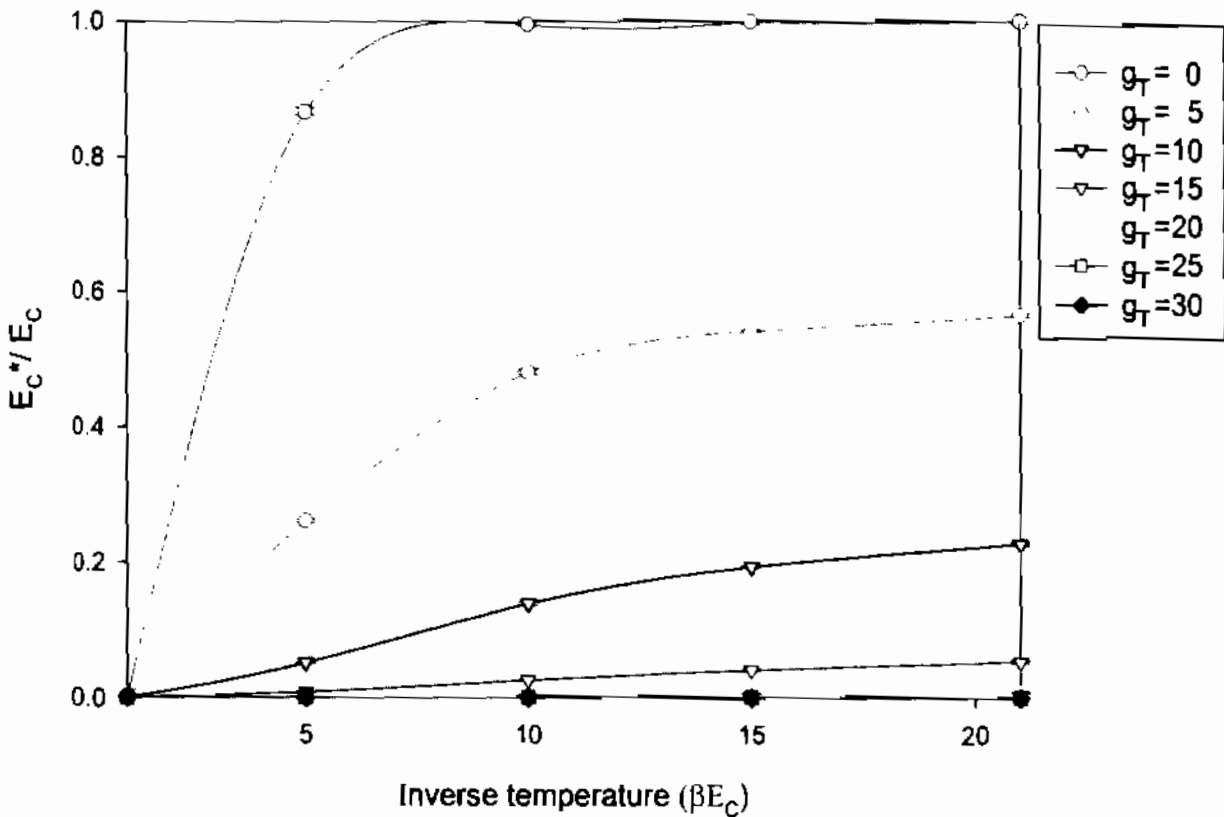


ภาพประกอบ 4.3 (ก) ความสัมพันธ์ระหว่าง $\ln(E_C^*/E_C)$ กับค่าความนำไฟฟ้ารวม (g_T) กรณี $\beta E_C = 21.0$ (ข) ความสัมพันธ์ระหว่าง $\ln(E_C^*/E_C)$ กับค่าความนำไฟฟ้ารวมยกกำลังสอง (g_T^2) กรณี $\beta E_C = 21.0$

เมื่อนำสมการเส้นตรงจากภาพประกอบ 4.3 (ข) ซึ่งมีรูปแบบสมการทั่วไปเป็น $y = \alpha x + c$ มาสร้างความสัมพันธ์ระหว่างค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล (E_C^*/E_C) กับค่าความนำไฟฟ้ารวม (g_T) จะได้

$$\frac{E_C^*}{E_C} = E_{C0} e^{-\alpha x^2} \quad (4.14)$$

เมื่อ $E_{C0} = e^{-c}$ โดยที่ c หมายถึง จุดตัดในแนวแกนตั้ง และ α หมายถึง ค่าความชันของกราฟระหว่าง $\ln(E_C^*/E_C)$ และ (g_T^2) จากสมการ (4.14) พบว่า ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าลดลงแบบฟังก์ชันเอกซโพเนนเชียล โดยจะขึ้นอยู่กับค่าความนำไฟฟ้ารวมยกกำลังสอง (g_T^2) นอกจากนี้ ในโครงงานนี้แสดงความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานการเพิ่มประจุยังผลกับอุณหภูมิ ดังแสดงในภาพประกอบ 4.4



ภาพประกอบ 4.4 พลังงานการเพิ่มประจุยังผลเมื่ออุณหภูมิเปลี่ยนแปลง $\beta E_C = [1, 21]$ และค่า $g_T = [0, 30]$

จากภาพประกอบ 4.4 กรณีที่ $g_T = 0$ (เส้นสีแดง) ที่ช่วงอุณหภูมิต่ำ กล่าวคือ $\beta E_C = [10, 21]$ ระบบไม่เกิดการถ่ายเทประจุ เนื่องจากพลังงานเฉลี่ยของอิเล็กตรอนมีค่าน้อยกว่าพลังงานการเพิ่มประจุ จึงเกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ ดังนั้น พลังงานการเพิ่มประจุยังผลจึงมีค่าประมาณหนึ่ง ($E_C^* / E_C \sim 1$) เมื่ออุณหภูมิมีค่าเพิ่มมากขึ้น กล่าวคือเมื่อ $\beta E_C = [1, 5]$ ระบบไม่สามารถกักอิเล็กตรอนให้อยู่ในควอนตัมดอทได้ ดังนั้น จึงไม่เกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ขึ้น ($E_C^* / E_C \sim 0$)

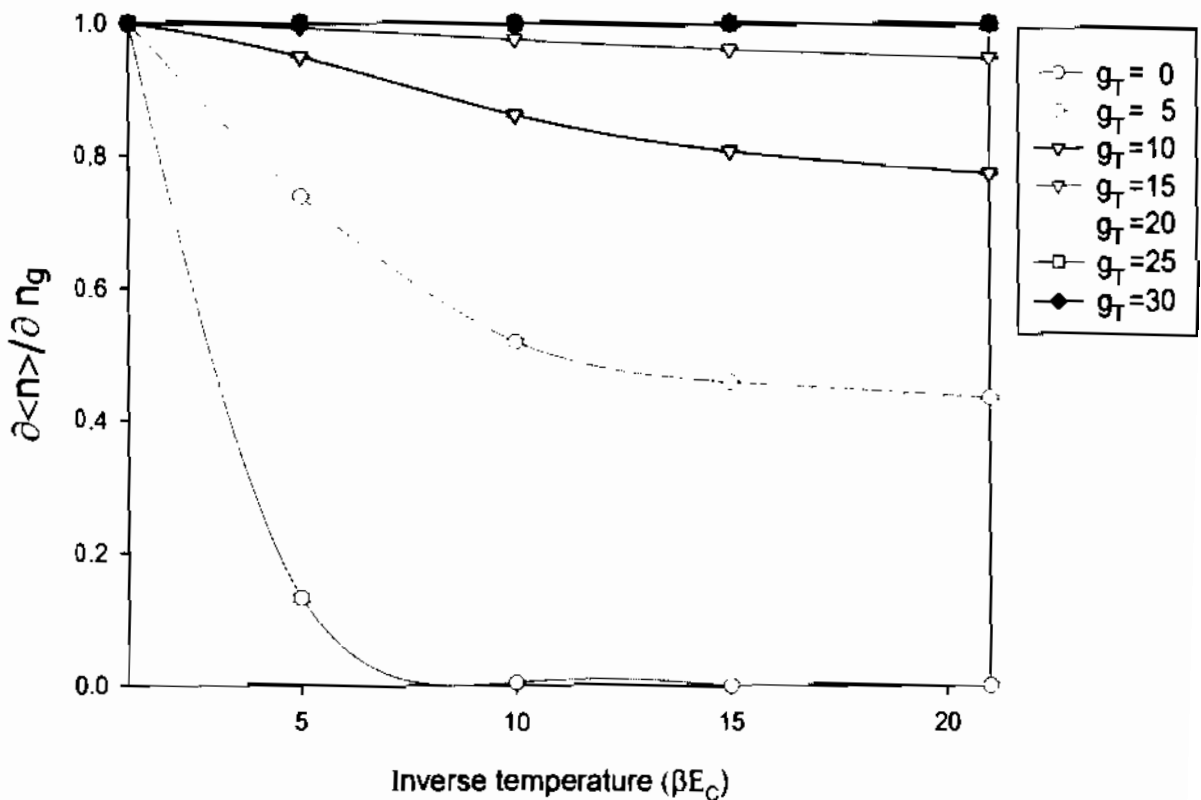
ในกรณีที่ $g_T = 5$ (เส้นสีชมพู) ที่ช่วงอุณหภูมิต่ำ กล่าวคือ $\beta E_C = [10, 21]$ อิเล็กตรอนมีโอกาสเคลื่อนที่ผ่านเข้าไปยังควอนตัมดอทได้ พลังงานการเพิ่มประจุยังผลจึงมีค่าน้อยกว่าหนึ่ง กล่าวคือ $E_C^* / E_C \sim 0.5$ ดังนั้น ในกรณีนี้จึงเกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์แต่ไม่เด่นชัดเมื่ออุณหภูมิมีค่าเพิ่มมากขึ้น กล่าวคือ ในช่วง $\beta E_C = [1, 5]$ ระบบไม่สามารถกักอิเล็กตรอนให้อยู่ในควอนตัมดอทได้ ดังนั้น จึงไม่เกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ขึ้น

ในกรณีที่ $g_T = 10$ และ $g_T = 15$ (เส้นสีน้ำเงินและเส้นสีเขียว) ในช่วงอุณหภูมิสูง อิเล็กตรอนมีพลังงานเฉลี่ยเพียงพอที่สามารถเคลื่อนที่ผ่านไปยังควอนตัมดอทได้ ดังนั้น จึงไม่เกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ แต่อย่างไรก็ตาม ในช่วงอุณหภูมิต่ำ ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าน้อย กล่าวคือ E_C^* / E_C อยู่ในช่วง 0.1 ถึง 0.2 ซึ่งระบบสามารถแสดงปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ขึ้นแต่น้อยมาก เนื่องจากค่าความนำไฟฟ้ารวมมีค่าสูงจึงทำให้อิเล็กตรอนสามารถทะลุผ่านเข้าไปยังควอนตัมดอทได้

ในกรณีที่ $g_T = [20, 30]$ (เส้นสีส้ม สีม่วง และสีดำ ตามลำดับ) ทั้งช่วงที่อุณหภูมิต่ำและอุณหภูมิสูง ทั้งสองกรณีไม่เกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ เนื่องจากค่าความนำไฟฟ้ารวมมีค่ามาก ซึ่งไม่สอดคล้องกับเงื่อนไขของการเกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ ซึ่งค่าความต้านทานของการทะลุผ่านต้องมีค่ามากกว่าค่าความต้านทานทางควอนตัม ($R_T \gg R_K$) กล่าวคือ $G_T < 20G_K$ ดังนั้น พลังงานการเพิ่มประจุยังผลในกรณีนี้จึงมีค่าประมาณศูนย์ กล่าวคือ $E_C^* / E_C \sim 0$

ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลนอกจากจะขึ้นกับค่าความนำไฟฟ้ารวมและอุณหภูมิยังสามารถอธิบายได้ด้วยการเปลี่ยนแปลงของจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่าน ดังนั้น ในโครงการนี้จึงได้แสดงกราฟความสัมพันธ์ระหว่างการเปลี่ยนแปลงของจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ย

ที่รอยต่อการทะลุผ่านกับอุณหภูมิ เพื่ออธิบายเกี่ยวกับค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลที่แสดงถึงปรากฏการณ์การขีดขวางแบบโคลอมบ์ ดังแสดงในภาพประกอบ 4.5



ภาพประกอบ 4.5 การเปลี่ยนแปลงของจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านเมื่ออุณหภูมิเปลี่ยนแปลง ในช่วงค่าความนำไฟฟ้ารวม $g_T = [0, 30]$

จากภาพประกอบ 4.5 พบว่า การเปลี่ยนแปลงของจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านในกรณี $g_T = 0$ (เส้นสีแดง) พบว่า ที่อุณหภูมิสูง การเปลี่ยนแปลงของจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านมีค่าสูงสุด กล่าวคือ $\partial \langle n \rangle / \partial n_g = 1$ ดังนั้น ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าเท่ากับศูนย์ ($E_C^* / E_C = 0$) จึงทำให้ไม่เกิดปรากฏการณ์การขีดขวางแบบโคลอมบ์ เมื่ออุณหภูมิต่ำ การเปลี่ยนแปลงของจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านมีค่าต่ำสุด กล่าวคือ $\partial \langle n \rangle / \partial n_g \sim 0$ ดังนั้น จึงเกิดปรากฏการณ์การขีดขวางแบบโคลอมบ์ขึ้น ซึ่งสอดคล้องกับสมการ (4.1) ทำให้ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าเท่ากับหนึ่ง ($E_C^* / E_C = 1$)

ในกรณีที่ $g_T = 5$ (เส้นสีชมพู) พบว่า เมื่ออุณหภูมิสูง การเปลี่ยนแปลงของจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านมีค่าสูงสุดเช่นเดียวกับกรณีที่ $g_T = 0$ ดังนั้น จึงไม่เกิด

ปรากฏการณ์การขีดขวางแบบคูลอมบ์ แต่เมื่ออุณหภูมิต่ำ พบว่า การเปลี่ยนแปลงของจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านมีค่าไม่เท่ากับศูนย์ ดังจากภาพประกอบ 4.5 กล่าวคือ $\partial\langle n \rangle / \partial n_g \sim 0.5$ จากสมการ (4.1) จึงทำให้ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าน้อยกว่าหนึ่ง ($E_c^* / E_c < 1$) ดังนั้น กรณีนี้จึงเกิดปรากฏการณ์การขีดขวางแบบคูลอมบ์ขึ้นแต่ไม่เด่นชัด

ในกรณี $g_T = [10, 30]$ (เส้นสีน้ำเงิน สีเขียว สีส้ม สีม่วง และสีดำ ตามลำดับ) ทั้งในช่วงที่อุณหภูมิสูงและช่วงอุณหภูมิต่ำ สังเกตเห็นได้ว่าการเปลี่ยนแปลงของจำนวนประจุสุทธิเฉลี่ยที่รอยต่อการทะลุผ่านมีค่าประมาณหนึ่ง ($\partial\langle n \rangle / \partial n_g \approx 1$) จากสมการ (4.1) ทำให้ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าเท่ากับศูนย์ ($E_c^* / E_c = 0$) ดังนั้น ในช่วงค่าความนำไฟฟ้ารวมที่มีค่ามาก จึงไม่เกิดปรากฏการณ์การขีดขวางแบบคูลอมบ์ขึ้น

สรุปผลและข้อเสนอแนะ

5.1 สรุปผลการคำนวณ

จากวัตถุประสงค์ของโครงการที่ต้องการพัฒนาระเบียบวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล เพื่อนำไปประยุกต์ใช้ในการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันและค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ซึ่งระเบียบวิธีนี้ถูกเรียกว่า ระเบียบวิธีฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์ม โดยเริ่มจากการสุ่มตัวอย่างในตัวแปรเฟส แล้วทำการคำนวณค่าคอร์ริเลชันฟังก์ชันจากสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส จากผลการเปรียบเทียบกับระเบียบวิธีซิงค์เกิลไซต์อ็อปเดท และระเบียบวิธีไซน์ทรานส์ฟอร์ม พบว่า ระเบียบวิธีฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มไม่สามารถเพิ่มประสิทธิภาพในการคำนวณได้ กล่าวคือ เวลาที่ใช้ในการคำนวณเพิ่มมากขึ้น เมื่อเปรียบเทียบกับทั้งสองระเบียบวิธี แต่ค่าความคลาดเคลื่อนเท่ากับกรณีของระเบียบวิธีซิงค์เกิลไซต์อ็อปเดท ดังนั้น ในการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล จึงเลือกใช้ระเบียบวิธีไซน์ทรานส์ฟอร์ม ซึ่งเป็นระเบียบวิธีที่มีประสิทธิภาพดีที่สุด

ในการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล ด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ซึ่งทำการคำนวณผลในขอบเขตของอุณหภูมิและค่าความนำไฟฟ้ารวมที่มีการเปลี่ยนแปลงไป กล่าวคือ $\beta E_c \in \{1, 5, 10, 15, 21\}$ และ $g_T \in \{0, 5, 10, 15, 20, 25, 30\}$ โดยที่แรงดันไฟฟ้าภายนอกเป็นศูนย์ ซึ่งค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลสามารถนำไปใช้ในการอธิบายปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ที่เกิดขึ้นในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว กล่าวคือ สามารถแสดงถึงความเด่นของปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ได้ จากผลการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว พบว่า กรณีที่อุณหภูมิต่ำ กล่าวคือ พลังงานเฉลี่ยของอิเล็กตรอนมีค่ามากกว่าพลังงานการเพิ่มประจุ ($k_B T \gg E_c$) ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าเป็นศูนย์ ดังนั้น ในกรณีนี้ไม่เกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ แต่ในกรณีที่อุณหภูมิต่ำ กล่าวคือ พลังงานเฉลี่ยของอิเล็กตรอนมีค่าน้อยกว่าพลังงานการเพิ่มประจุ ($k_B T \ll E_c$) ซึ่งเป็นกรณีที่เกิดปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์ ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าเท่ากับหนึ่ง

นอกจากนี้ ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลขึ้นกับค่าความนำไฟฟ้ารวม เมื่อค่าความนำไฟฟ้ารวมมีค่าน้อย ($g_T \rightarrow 0$) ทำให้ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าลู่เข้าสู่หนึ่ง กล่าวคือ $E_c^* / E_c \rightarrow 1$ เป็นกรณีที่เกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ ซึ่งสอดคล้องกับเงื่อนไขที่ค่าความต้านทานของการทะลุผ่านต้องมีค่ามากกว่าค่าความต้านทานทางควอนตัม ($R_T \gg R_K$) แต่อย่างไรก็ตาม เมื่อค่าความนำไฟฟ้ารวมมีค่ามาก กล่าวคือ $g_T \rightarrow \infty$ ซึ่งในกรณีนี้พบว่า ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าลู่เข้าสู่ศูนย์ ($E_c^* / E_c \rightarrow 0$) แสดงให้เห็นว่าระบบ

ไม่สามารถแสดงการเกิดปรากฏการณ์การขีดขวางแบบคูลอมบ์ได้ และจากผลการคำนวณ พบว่า ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวมีค่าลดลงแบบฟังก์ชันเอกซิโพเนนเชียลเมื่อค่าความนำไฟฟ้ารวมมีค่าเพิ่มขึ้น

จากการศึกษาค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผล ได้ข้อสรุปว่าระบบสามารถแสดงการเกิดปรากฏการณ์การขีดขวางแบบคูลอมบ์ได้ เมื่อค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าเท่ากับหนึ่ง ซึ่งทำได้โดยการกำหนดให้ค่าความต้านทานการทะลุผ่านมีค่ามากกว่าค่าความต้านทานทางควอนตัม ($R_T \gg R_x$) กล่าวคือ $G_T < 20G_x$ และอุณหภูมิต้องมีค่าสูง กล่าวคือ $\beta E_c \geq 10$

5.2 ข้อเสนอแนะ

จากการศึกษาค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว โดยใช้วิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ซึ่งมีข้อเสนอแนะสำหรับผู้สนใจศึกษาในเรื่องนี้ ดังต่อไปนี้

1. ในการพัฒนาระเบียบวิธีฟูเรียร์ฮัพเดท ควรทำการสุ่มตัวอย่างสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟส แล้วคำนวณค่าคาดหวังโดยใช้ตัวแปรเฟส เพื่อให้สอดคล้องกับวิธีการไซน์ทรานส์ฟอร์ม แต่วิธีการนี้ต้องใช้แอมป์เป็นฟังก์ชันของสัมประสิทธิ์ฟูเรียร์ของฟังก์ชันตัวแปรเฟสตามที่ได้นำเสนอไว้ในโครงการนี้

2. เพื่อให้ค่าความคลาดเคลื่อนของผลการคำนวณมีค่าลดน้อยลง ในการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลในระบบอื่น ควรเพิ่มตัวเลขทรอดเตอร์ (N) เนื่องจากในโครงการนี้ได้ใช้ค่า $N=128$ ซึ่งในการศึกษาต่อไปอาจจะใช้ค่า N เป็น 256 หรือ 512

3. เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพในการคำนวณค่าคาดหวังของระบบ ควรเลือกใช้ระเบียบวิธีคลัสเตอร์ฮัพเดท (Cluster update) ในการประมวลผล ซึ่งเป็นวิธีการที่เวอร์เนอร์ (Werner) ได้ประสบความสำเร็จในการคำนวณค่าคาดหวังของกล่องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว [14]

บรรณานุกรม



บรรณานุกรม

- [1] Garbert H, Devoret M.H. "Single charge tunneling of Coulomb blockade phenomena in nanostructures". Plenum Press, New York, vol. 294 of NATO ASI series B: Physics; 1992.
- [2] Lafarge P, Pothier H, Williams E.R, Esteve D, Urbina C, Devoret M.H. "Direct observation of macroscopic charge quantization". *Zeitschrift für physik B Condensed Matter* 1991; 85[3]: 327-332.
- [3] Wallisser C, Limbach B, Stein P.V, Schafer R, Theis C, Goppert 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.
- [4] Werner P, Troyer M. "Effective charging energy of the single-electron box" *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*; 2005.
- [5] Hofstetter W. "Single-electron box and the helicity modulus of an inverse square XY model" . *Physical Review Letters* 1997; 78: 3737.
- [6] Wang X, Egger R, Grabert H. "Coulomb charging energy for arbitrary tunneling strength" . (*Europhysics letters*) *EPL* 1997. 38[7]: 545-548.
- [7] Carlos P, Herrero H, Schon G, Zaikin D. "Strong charge fluctuation in the single-electron box: A Quantum Monte Carlo analysis". *Physical Review B* 1998; 53[11]: 1-11.
- [8] Konig J, Schoeller H. "Strong tunneling in the single-electron box" . *Physical Review Letters*. 1997; 78: 4482.
- [9] Sampan-a-pai S, Ritjareonwattu S. "Single electron transistor and applications". *Srinakharinwirot science journal*; 2014.
- [10] Theis C. "Conductance of single electron devices from imaginary-time path integrals" [Ph.D. thesis]. Freiburg: Albert Ludwigs University Freiburg; 2004.
- [11] Thongsuk T. "Calculation of average electron numbers on the metallic single electron transistor by Quantum Monte Carlo method". Mahasarakham University; 2013.
- [12] William H, Saul A, William T, Brian P. "Numerical recipes in C". Cambridge University Press; 1992.

บรรณานุกรม (ต่อ)

- [13] Soowandaung P. "Fourier quantum Monte Carlo study". Mahasarakham University; 2012.
- [14] Werner P. "Dissipative quantum phase transitions". [Ph.D. thesis]. Swiss Federal Institute of Technology Zurich; 2005.

ต้นฉบับไม่ปรากฏข้อมูล

ประวัติย่อผู้ทำโครงการ

ประวัติย่อผู้ทำโครงการงาน

ชื่อ นามสกุล	นางสาวศุภากร พวงยอด
วัน เดือน ปีเกิด	วันที่ 5 กรกฎาคม 2534
จังหวัด และประเทศที่เกิด	อำเภอสว่างแดนดิน จังหวัดสกลนคร
ประวัติการศึกษา	พ.ศ. 2549 สำเร็จการศึกษาระดับมัธยมศึกษาตอนต้น โรงเรียนสว่างแดนดิน จ.สกลนคร พ.ศ. 2553 สำเร็จการศึกษาระดับมัธยมศึกษาตอนปลาย โรงเรียนเตรียมอุดมศึกษา ภาคตะวันออกเฉียงเหนือ จ.สกลนคร พ.ศ. 2557 สำเร็จการศึกษาระดับปริญญาตรี วท.บ.ฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหาสารคาม
ที่อยู่ที่สามารถติดต่อได้	229 หมู่ 4 ตำบลค้อใต้ อำเภอสว่างแดนดิน จังหวัดสกลนคร โทรศัพท์ 094-5364751 E-mail : phoungyod53010213027@gmail.com

ประวัติย่อผู้ทำโครงการ

ชื่อ นามสกุล	นายสุรียา ลาวัลย์
วัน เดือน ปีเกิด	วันที่ 3 มีนาคม 2534
จังหวัด และประเทศที่เกิด	อำเภอจตุรพักตรพิมาน จังหวัดร้อยเอ็ด
ประวัติการศึกษา	พ.ศ. 2549 สำเร็จการศึกษาระดับมัธยมศึกษาตอนต้น โรงเรียนประชาพัฒนา จ.มหาสารคาม พ.ศ. 2553 สำเร็จการศึกษาระดับมัธยมศึกษาตอนปลาย โรงเรียนประชาพัฒนา จ.มหาสารคาม พ.ศ. 2557 สำเร็จการศึกษาระดับปริญญาตรี วท.บ.ฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหาสารคาม
ที่อยู่ที่สามารถติดต่อได้	46 หมู่ 17 ตำบลเมืองหงส์ อำเภอจตุรพักตรพิมาน จังหวัดร้อยเอ็ด โทรศัพท์ 086-2365103 E-mail : fantasy_cs91@hotmail.com