

國立交通大學

電子物理學系

碩士論文

在寬-窄-寬量子元件之時變性傳輸



Time-dependent Transport in Wide-
Narrow-Wide Quantum Devices

研究生：陳力瑋

指導教授：鄭舜仁 教授

唐志雄 教授

中華民國一〇一年一月

在寬-窄-寬量子元件之時變性傳輸

Time-dependent Transport in Wide-Narrow-Wide Quantum
Devices

研究生：陳力瑋

Student : Le-Wei Chen

指導教授：鄭舜仁 教授

Advisor : Prof. Shun-Jen Chen

唐志雄 教授

Advisor : Prof. Chi-Shung Tang

國立交通大學
電子物理學系
碩士論文



Submitted to Department of Electrophysics
College of Science
National Chiao Tung University
in partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of
Master
in

Electrophysics

September 2011

Hsihu, Taiwan, Republic of China

中華民國一〇一年一月

在寬-窄-寬量子元件之時變性傳輸


學生：陳力璋

指導教授：鄭舜仁 教授

唐志雄 教授

國立交通大學電子物理研究所碩士班

摘要



我們考慮一偏壓跨接在源極和汲極間被分離閘極定義的準一維量子通道。有限偏壓和有限溫度效應將被納入考慮。為了研究時變傳輸的特性，我們考慮分離閘極上外加一頂閘極，用以提供具週期性時變的位能。在導引和窄通道間的非緩變模態混合特性將被討論。

在這個工作裡，我們分析模態混合效應造成的子帶間躍遷和週期性時變位能造成的邊帶間躍遷。光輔助和光壓抑的特性都可以在電導對入射電子能量的函數中發現。除此之外，我們考慮了有限溫度和偏壓效應，用以研究非線性量子傳輸和熱擴張性質。

Time-dependent Transport in Wide-Narrow-Wide Quantum Devices

Student : Le-Wei Chen

**Advisor : Prof. Shun-Jen Cheng
Prof. Chi-Shung Tang**

**Department of Electrophysics
National Chiao Tung University**

ABSTRACT

We consider a semiconductor quantum device that is transversely confined by a pair of split-gate forming a quasi-one-dimensional narrow channel and is biased by the source and drain electrodes. Both the finite-bias and the finite-temperature effects are explicitly included in our calculation. In order to investigate the time-dependent transport behavior, we consider a top-gate in front of the split-gate for generating time-periodic potential. The nonadiabatic mode-mixing features between the narrow channel and the leads are included in the calculation.

In this work, we have analyzed the quantum transport properties involving the inter-subband transitions due to the mode-mixing effects and the inter-sideband transitions due to the time-periodic potential. Both the photon-assisted and the photon-suppressed features can be found in conductance as a function of the incident electron energy. Moreover, we explicitly include the finite-bias and finite-temperature effects to investigate the nonlinear quantum transport and thermal broadening properties.

致謝

回想碩班這兩年半來的生活，要感謝的人太多。每個星期五的實驗室 meeting，鄭舜仁老師總會指出我報告的重點缺失，用嚴謹且專業的角度，從旁協助我瞭解工作的重點。唐志雄老師每個禮拜不辭辛勞的到交大指導我，更讓我感激。感謝百忙之中抽空前來的口試委員，趙良君老師、陳煜璋老師以及簡紋濱老師在口試時的寶貴意見。

除了兩位老師的耐心指導，學長們更是在研究上提供了重要的幫忙。不管是程式部分的技術指導，或是物理觀念的重點釐清，對我來說都是莫大的幫助。在這裡感謝盧書楷大學長、陳彥廷學長、趙虔震學長、陳勇達學長、尤文廷學長、廖禹淮學長、徐燁學長、許克銘學長、曾浚鈞學長。修課與研究都在一起奮鬥的同學們，林以理、張書瑜、鄭丞偉、古志豪、廖建智、張語宸。感謝你們這兩年多來的陪伴，課業上的學習，研究上的討論，這些都使我的碩班生活不孤單。還有學弟妹們國榮、佩儀、家祥、智瑋、書睿。真的很開心有機會在這個固態物理研究室完成我的碩班工作。

最後感謝我的朋友和家人，在受挫時有你們的陪伴是我持續前進的最大動力。

目錄：

中文摘要.....	ii
英文摘要.....	iv
致謝.....	v
目錄.....	vi
表目錄.....	viii
圖目錄.....	viii

第一章 緒論 - 1 -

1.1 量子元件簡介..... - 1 -

1.2 研究動機..... - 9 -

第二章 一維與準一維系統的量子傳輸 - 11 -

2.1 一維系統..... - 12 -

2.1.1 模態匹配法 (Mode-matching method)..... - 12 -

2.1.2 轉移矩陣法 (Transfer matrix method)..... - 15 -

2.1.3 矩形位勢模型 (Square potential model) - 21 -

2.1.4 高斯位勢模型 (Gaussian potential model)..... - 26 -

2.2 準一維系統..... - 30 -

2.2.1 準一維量子通道 - 31 -

2.3 溫度與偏壓效應..... - 35 -

2.3.1 溫度與偏壓的一般理論 - 36 -



2.3.2	有限溫度與極小偏壓	- 41 -
2.3.3	零溫度與有限偏壓	- 42 -
2.3.4	零溫度與極小偏壓	- 45 -
2.3.5	源極和汲極的偏壓效應	- 45 -
2.3.6	共振穿隧效應 (resonance tunneling effect)	- 66 -
2.3.7	準一維奈米線考慮有限偏壓效應	- 69 -
2.3.8	準一維奈米線考慮有限溫度與偏壓的效應	- 76 -
第三章	寬-窄-寬量子元件的靜態量子傳輸	- 80 -
3.1	理論模型與方法	- 80 -
3.2	數值結果與分析	- 88 -
第四章	寬-窄-寬元件的動態量子傳輸	- 95 -
4.1	理論模型與方法	- 96 -
4.1.1	量子通道的理論模型	- 97 -
4.1.2	寬-窄-寬元件的理論模型	- 106 -
4.2	量子通道的動態傳輸	- 117 -
4.2.1	邊帶的收斂性討論	- 117 -
4.2.2	量子通道的準束縛態結構	- 120 -
4.2.3	量子通道的 Fano 結構	- 127 -



4.3 寬-窄-寬元件的動態傳輸	- 131 -
4.3.1 光電耦合效應	- 133 -
第五章 總結與未來工作	- 145 -
參考文獻：	- 147 -



表目錄：

表 1.1 不同長度對映的物理量 [4]。.....	- 3 -
表 1.2 在 AlGaAs-GaAs 或 Si 反轉層 (inversion layer) 的二維電子氣中電子特性[4]。.....	- 8 -
表 2.1 無因次化的物理量及其 SI 單位下 AlGaAs-GaAs 二維電子氣為基準的值。.....	- 12 -
表 4.1 討論邊帶收斂性的參數。.....	- 118 -
表 4.2 寬窄比相同，改變交流電壓位能強度 V_0 之寬窄寬時變系統物理參數。黑體字為固定參數。藍體字為主要討論的參數。.....	- 120 -
表 4.3 寬窄比相同，改變 ω 之寬窄寬時變系統物理參數。黑體字為固定參數。藍體字為主要討論的參數。.....	- 124 -
表 4.4 寬窄比相同，改變 L 之寬窄寬時變系統物理參數。黑體字為固定參數。藍體字為主要討論的參數。.....	- 125 -
表 4.5 寬窄比相同，改變直流電壓位能 V_B 之寬窄寬時變系統物理參數。黑體字為固定參數。藍體字為主要討論的參數。.....	- 126 -
表 4.6 改變寬窄比之寬窄寬時變系統物理參數。黑體字為固定參數。藍體字為主要討論的參數。.....	- 132 -
表 4.7 寬窄比為 2 時，改變直流電壓位能 V_B 之寬窄寬時變系統物理參數。黑體字為固定參數。藍體字為主要討論的參數。.....	- 133 -
表 4.8 寬窄比為 2 時，改變窄通道長度 L 之寬窄比和交流電壓位能強度頻率比 V_0/ω 為 2 時，改變交流電壓位能頻率 ω 之寬窄寬時變系統物理參數。黑體字為固定參數。藍體字為主要討論的參數。.....	- 137 -
表 4.9 寬窄比為 2 時，改變 ω 之寬窄寬時變系統物理參數。黑體字為固定參數。藍體字為主要討論的參數。.....	- 138 -
表 4.10 寬窄比為 2 時，改變交流電壓位能強度 V_0 之寬窄寬時變系統物理參數。黑體字為固定參數。藍體字為主要討論的參數。.....	- 139 -
表 4.11 寬窄比為 2 時，改變 L 之寬窄寬時變系統物理參數。黑體字為固定參數。藍體字為主要討論的參數。.....	- 143 -

圖目錄：

圖 1.1 (a) 電阻和電壓的關係。(b) 電導和電壓的關係。來源取自 B.J.van Wees et al., Phys. Rev. Lett. 60, 848(1988)。	- 2 -
圖 1.2 不同傳輸區域對映的電子軌跡[4]。擴散傳輸， $l_e < W, L$ 。彈道傳輸， $W, L < l_e$ 。	- 6 -
圖 2.1 delta 位能在 $x = x_j$ 位置時，左右兩側波函數的關係。 V_j 為第 j 個 delta 位能強度。	- 17 -
圖 2.2 用 N 個 delta 位能建構一個任意散射位能示意圖。上圖中，黑色曲線代表任意散射位能 $V_{sc}(x)$ ，藍色虛線矩形代表每個切片的矩形位能，其中 N 代表用中點法的切片總數。下圖中，藍色虛線代表每個矩形位能切片，其中 Δx 代表矩形位能切片的寬度， $V_{sc}(x_j)$ 代表矩形位能切片的高度。紅色箭頭代表第 j 片 delta 散射位能 $V_j \delta(x)$ 。	- 19 -
圖 2.3 矩形位勢模型示意圖。矩形位能強度為 V_{s0} ，寬為 L 。在這一小節的討論中，我們假設矩形位能分佈為 $x=0$ 至 $x=L$ 。	- 22 -
圖 2.4 矩形位能之穿透係數和入射電子能量關係。其中矩形位能強度 $V_{s0} = 1$ 和寬度 $L = 10$ 。此為用 mathematica 畫的解析結果。	- 25 -
圖 2.5 矩形位能之穿透係數和入射電子能量關係。其中矩形位能強度 $V_{s0} = 1$ 和寬度 $L = 10$ 。此為用 Fortran 語言所寫程式的轉移矩陣畫出數值結果。	- 25 -
圖 2.6 高斯位能示意圖。藍色曲線代表高斯位能 $V(x)$ 。 V_G 為高斯位能強度。 σ 為高斯分佈的標準差。	- 26 -
圖 2.7 此為一個高斯位能在 $\beta = 0.05$ 時，改變不同高斯位能強度 V_G 的電導。	- 27 -
圖 2.8 此為一個高斯位能在強度 $V_G = 3$ 時，改變不同 β 的電導。	- 28 -
圖 2.9 兩個高斯位能示意圖。藍色曲線代表兩個高斯位能 $V(x)$ 。 V_G 為高斯位能強度。 x_{G1} 和 x_{G2} 分別為第一個和第二個高斯分佈的位置。	- 29 -
圖 2.10 此為一個高斯位能在 $\beta = 0.05$ 時，改變不同高斯位能強度 V_G 的電導。	- 30 -
圖 2.11 簡單的準一維通道實驗系統圖。紅色圓圈為準一維彈道傳輸的區域。通道寬度為 W 。通道中間上方加入指狀閘極。	- 31 -
圖 2.12 簡化後的準一維通道系統圖。 V_{d0} 為 delta 散射位能強度。通道的座標位置如圖所示。	- 31 -
圖 2.13 delta 位能強度為 $V_{d0} = 0\epsilon_1$ 、 $V_{d0} = 1\epsilon_1$ 、 $V_{d0} = 2\epsilon_1$ 和 $V_{d0} = 3\epsilon_1$ 時，電導對入射電子能量作圖。	- 35 -
圖 2.14 此為簡單的一維系統外加偏壓示意圖。藍色線表示電位能分佈，紅色線表示電位分佈。左端代表源極，右端代表汲極。 $U_{sd} = U_s - U_d$ 為源極與汲極的電位能差。 $V_{ds} = V_d - V_s$ 為汲極與源極的電位差。	- 36 -
圖 2.15 源極端和汲極端的費米能量示意圖。源極端費米能量為 μ_l 。汲極端的費米能量為 μ_r 。外加偏壓能量大小為 U_{sd} 。	- 39 -
圖 2.16 源極端和汲極端的費米能量以及偏壓位能分佈的示意圖。源極端費米能量為 μ_l 。汲極端的費米能量為 μ_r 。外加偏壓能量大小為 U_{sd} 。 $U_{bias}(x, V_{sd})$ 為偏壓位能在量子元件中的分佈情形。	- 40 -
圖 2.17 偏壓位能 $U_{sd} < \mu$ 時，源極端和汲極端的費米能量以及偏壓位能分佈的示意圖。源極端費	

- 米能量為 $\mu_l = \mu + U_{sd}$ 汲極端的費米能量為 $\mu_r = \mu$ 。外加偏壓能量大小為 $U_{sd} = eV_{ds} \circ U_{bias}(x, V_{sd})$ 為偏壓位能在量子元件中的分佈情形。箭頭與括號為對電流有貢獻的能量範圍。..... - 43 -
- 圖 2.18 偏壓位能 $U_{sd} > \mu$ 時，源極端和汲極端的費米能量以及偏壓位能分佈的示意圖。源極端費米能量為 $\mu_l = \mu + U_{sd}$ 汲極端的費米能量為 $\mu_r = \mu$ 。外加偏壓能量大小為 $U_{sd} = eV_{ds} \circ U_{bias}(x, V_{sd})$ 為偏壓位能在量子元件中的分佈情形。箭頭與括號為對電流有貢獻的能量範圍。..... - 44 -
- 圖 2.19 步階函數在源極端 $x=x_s$ 的變化。黑色箭頭代表源極端兩旁的波函數。 A_0 、 A_1 為向右行進的平面波振幅。 B_0 、 B_1 為向左行進的平面波振幅。 U_{sd} 為偏壓位能大小。..... - 46 -
- 圖 2.20 步階函數在 $x = x_s$ 的變化。黑色箭頭代表源極端兩旁的波函數形式。 A_0 、 A_1 為向右行進的平面波振幅。 B_0 、 B_1 為向左行進的平面波振幅。 U_{sd} 為偏壓大小。..... - 47 -
- 圖 2.21 這是用 mathematica 程式跑出來的一個步階函數穿透和反射的情形。紅色虛線代表反射係數、藍色實線代表透射係數、青色點線是為了確認電流守恆。..... - 50 -
- 圖 2.22 這是用 Fortran 程式跑出來的一個步階函數穿透和反射的情形。假設 $V_{ds} = 0.9(\text{mV})$ ，則對應的 $U_{sd} = 0.1$ 。紅色虛線代表反射係數、藍色實線代表透射係數、青色點線是為了確認電流守恆。..... - 51 -
- 圖 2.23 穿透係數對偏壓大小 U_{sd} 的關係圖。入射電子能量 $E_{inc} = 1$ ，偏壓大小 U_{sd} 改變量從 0 到 0.5。..... - 52 -
- 圖 2.24 穿透係數與電子能量的關係圖。黑色點線為 $U_{sd} = 0.1$ ，藍色虛線為 $U_{sd} = 0.2$ ，紅色實線為 $U_{sd} = 0.3$ 。..... - 53 -
- 圖 2.25 穿透係數和 E_{inc} 的關係。黑色點線為 $U_{sd} = 0.1$ ，藍色虛線為 $U_{sd} = 0.2$ ，紅色實線為 $U_{sd} = 0.3$ 。..... - 54 -
- 圖 2.26 四種不同偏壓分佈情形。量子系統範圍在 $x_s = 0$ 至 $x_d = 10$ 。黑色實線代表 U_{bs} 。藍色虛線代表 U_{bG} 。綠色點虛線代表 U_{bl} 。紅色點線代表 U_{bd} 。..... - 56 -
- 圖 2.27 四種不同偏壓位能的穿透係數。黑色實線代表 U_{bs} 。藍色虛線代表 U_{bG} 。綠色點虛線代表 U_{bl} 。紅色點線代表 U_{bd} 。..... - 56 -
- 圖 2.28 四種不同偏壓位能的反射係數。黑色實線代表 U_{bs} 。藍色虛線代表 U_{bG} 。綠色點虛線代表 U_{bl} 。紅色點線代表 U_{bd} 。..... - 57 -
- 圖 2.29 電導對汲極費米能量的關係圖。源極和汲極的偏壓 $U_{sd} = 1\text{meV}$ 。散射位能 $V_{sc}(x) = 0$ 。藍色點線代表線性區。紅色虛線代表飽和區。..... - 59 -
- 圖 2.30 此為 $\mu < U_{sd}$ 時，費米能量、穿透係數和積分範圍三者之間的關係。左為兩端費米能量與偏壓 U_{sd} 之示意圖。右為 $U_{bs} \sim U_{bd}$ 四種不同偏壓下的穿透係數。兩圖中的紅色實線方框均為入射電子能量積分範圍。..... - 60 -
- 圖 2.31 此為 $\mu = U_{sd}$ 時，費米能量、穿透係數和積分範圍三者之間的關係。左為兩端費米能量與偏壓 U_{sd} 之示意圖。右為 $U_{bs} \sim U_{bd}$ 四種不同偏壓下的穿透係數。兩圖中的紅色實線方框均為入射電子能量積分範圍。..... - 60 -
- 圖 2.32 此為 $\mu > U_{sd}$ 時，費米能量、穿透係數和積分範圍三者之間的關係。左為兩端費米能量與偏壓 U_{sd} 之示意圖。右為 $U_{bs} \sim U_{bd}$ 四種不同偏壓下的穿透係數。兩圖中的紅色實線方框均為入射電子能量積分範圍。..... - 61 -
- 圖 2.33 I - V 關係圖。固定汲極費米能量 $\mu = 0.1$ 。對四種不同的偏壓位能分佈作圖。..... - 63 -

- 圖 2.34 此為 $U_{sd} < \mu$ 時，費米能量、穿透係數和積分範圍三者之間的關係。左為兩端費米能量與偏壓 U_{sd} 之示意圖。右為 $U_{bs} \sim U_{bd}$ 四種不同偏壓下的穿透係數。兩圖中的紅色實線方框均為入射電子能量積分範圍。..... - 64 -
- 圖 2.35 此為 $\mu = U_{sd}$ 時，費米能量、穿透係數和積分範圍三者之間的關係。左為兩端費米能量與偏壓 U_{sd} 之示意圖。右為 $U_{bs} \sim U_{bd}$ 四種不同偏壓下的穿透係數。兩圖中的紅色實線方框均為入射電子能量積分範圍。..... - 64 -
- 圖 2.36 此為 $U_{sd} > \mu$ 時，費米能量、穿透係數和積分範圍三者之間的關係。左為兩端費米能量與偏壓 U_{sd} 之示意圖。右為 $U_{bs} \sim U_{bd}$ 四種不同偏壓下的穿透係數。兩圖中的紅色實線方框均為入射電子能量積分範圍。..... - 65 -
- 圖 2.37 兩個 delta 散射位能與三種不同偏壓位能分佈示意圖。其中實線為偏壓位能 $U_{bias}(x)$ ，黑色實線代表無散射位能，藍色實線代表偏壓落在源極端，紅色實線代表偏壓落在汲極端。虛線代表兩個 delta 散射位能。偏壓大小 $U_{sd} = 0.1$ ， $V_{d1} = V_{d2} = 10$ 。..... - 67 -
- 圖 2.38 兩個 delta 散射位能的共振穿透係數。黑色實線為偏壓位能 U_{b0} 的穿透係數，藍色虛線為偏壓位能 U_{bs} 的穿透係數，紅色點線為 U_{bd} 的穿透係數。黑色倒三角形為用無窮深位能井模型估算寬度為 10、底部能量為 0 的位能井能階分佈，紅色倒三角形為用無窮深位能井模型估算寬度為 10、底部能量為偏壓大小 0.1 的位能井能階分佈。黑色點虛線代表相對於偏壓大小 0.1 的能量。此系統中 U_{bs} 和 U_{bd} 的偏壓大小 $U_{sd} = 0.1$ ，兩個 delta 散射位能強度 $V_1 = V_2 = 10$ ，源極端 $x_s = 0$ 和汲極端 $x_d = 10$ 。..... - 68 -
- 圖 2.39 準一維奈米線的電導對費米能量關係。源極和汲極的偏壓位能大小 $U_{sd} = 0.56\epsilon_1$ 。 $\epsilon_1 = 0.0987(0.888\text{meV})$ 為第一子帶能量(first sub-band energy)。此子帶能量為通道寬度 10 (80nm) 的結果。..... - 71 -
- 圖 2.40 費米能量和積分範圍之間的關係。源極和汲極的費米能量都比子能帶能量小。沒有電子在可貢獻電流的能量範圍。..... - 72 -
- 圖 2.41 費米能量和積分範圍之間的關係。源極費米能量比子能帶能量大，但汲極費米能量比子能帶能量小。源極電子在能量大於子能帶能量時會對電流產生貢獻。..... - 73 -
- 圖 2.42 費米能量和積分範圍之間的關係。源極和汲極的費米能量均比子能帶能量大。源極電子在能量比汲極費米能量大的範圍會貢獻電流。..... - 73 -
- 圖 2.43 $I_e - U_{sd}$ 關係圖。費米能量為 $\mu = 1\epsilon_1$ 到 $5\epsilon_1$ 。取線性偏壓位能 $U_{bias}(x, V_{sd}) = U_{bl}$ - 74 -
- 圖 2.44 最上面的圖為偏壓 $U_{sd} = 0$ 時，則電流 $I = 0$ 。中間的圖為偏壓 $U_{sd} < \mu - \epsilon_n$ 時，則對電流有貢獻的入射電子能量範圍從 μ 到 $\mu + U_{sd}$ 。最下面的圖為偏壓 $U_{sd} > \mu - \epsilon_n$ 時，則對電流有貢獻的入射電子能量範圍從 U_{sd} 到 $\mu + U_{sd}$ 。紅色細虛線代表第 n 個子帶能量，紅色粗虛線代表電子可在第 n 個傳遞模態。..... - 76 -
- 圖 2.45 電導和入射電子能量關係圖。黑色虛線為溫度 $T = 3\text{mK}$ 的結果。紅色實線為溫度 $T = 3\text{K}$ 的結果。其中偏壓電位差 $V_{sd} = 0.5\text{mV}$ 。..... - 77 -
- 圖 2.46 電子流 I_e 對偏壓 U_{sd} 的關係。溫度 $T = 3\text{mK}$ 。費米能量為 $\mu = 1\epsilon_1$ 到 $5\epsilon_1$ 。此結果與零溫有限偏壓結果相近。..... - 78 -
- 圖 2.47 電流 I 對偏壓 V_{sd} 的關係。溫度 $T = 3\text{K}$ 。汲極端費米能量為 $\mu = 1\epsilon_1$ 到 $5\epsilon_1$ 。此結果可明顯看出溫度壓抑了電流。而且在理想準一維奈米線中，因子帶而出現的轉折變平滑了。 - 79 -

- 圖 3.1 寬-窄-寬結構的二維電子氣量子元件。其中 W_L 為導引的寬度， W_C 為窄通道的寬度， L 為窄通道的長度，左右兩端白色區域為源極與汲極，黃色區域為分離閘極，淺黃色區域為導引。..... - 81 -
- 圖 3.2 電導對入射電子能量關係。系統參數為 $W_L = W_C = 10$ 、 $L = 30$ 。黑色實線為電導對能量的關係曲線，其在寬窄比為 1 時與準一維量子通道相同。..... - 89 -
- 圖 3.3 電導對入射電子能量關係。系統參數為 $W_C = 10$ 、 $L = 30$ 。黑色點線為 $W_L = 10$ 。藍色虛線為 $W_L = 15$ 。紅色實線為 $W_L = 20$ 。黑色倒三角符號為窄通道的束縛態能量。..... - 90 -
- 圖 3.4 電導對入射電子能量關係。系統參數為 $W_L = 20$ 、 $W_C = 10$ 。黑色點線為 $L = 10$ 。藍色虛線為 $L = 20$ 。紅色實線為 $L = 30$ 。倒三角符號為窄通道的束縛態能量。..... - 91 -
- 圖 3.5 考慮不同子帶數，電導對入射電子能量的收斂情形。黑色點線代表考慮 6 個子帶。藍色虛線代表考慮 12 個子帶。紅色實線代表考慮 18 個子帶。 N_{tot} 為系統所考慮的總子帶數。..... - 92 -
- 圖 3.6 取入射電子能量範圍在第一個子帶，考慮不同子帶數，電導對入射電子能量的收斂情形。黑色點線代表考慮 6 個子帶。藍色虛線代表考慮 12 個子帶。紅色實線代表考慮 18 個子帶。 $2N_{tot}$ 為系統所考慮的總子帶數。..... - 93 -
- 圖 3.7 取入射電子能量範圍在第二個子帶，考慮不同子帶數，電導對入射電子能量的收斂情形。黑色點線代表考慮 6 個子帶。藍色虛線代表考慮 12 個子帶。紅色實線代表考慮 18 個子帶。 $2N_{tot}$ 為系統所考慮的總子帶數。..... - 94 -
- 圖 4.1 邊帶峰值間距與光子能量的關係。 κ 代表電壓與能量的轉換係數。FWHM 代表未加微波信號的共振態半高寬。來源取自 T.H.Oosterkamp et al., Phys. Rev. Lett. 78, 1536(1997)。 - 96 -
- 圖 4.2 寬-窄-寬結構的二維電子氣量子元件。藉由頂閘極(top gate)產生交流電壓位能，分離閘極(split gate)產生時變通道。..... - 97 -
- 圖 4.3 寬-窄-寬結構的二維電子氣量子元件。其中 W 為量子通道寬度， L 為量子通道中時變區域的長度，左右兩端白色區域為源極與汲極，黃色區域為分離閘極，淺黃色區域為導引，橘色區域為產生週期性交流電壓位能的頂閘極。..... - 98 -
- 圖 4.4 寬-窄-寬結構的二維電子氣量子元件。藉由頂閘極(top gate)產生交流電壓位能，分離閘極(split gate)產生一窄通道。..... - 106 -
- 圖 4.5 寬-窄-寬結構的二維電子氣量子元件。其中 W_L 為導引的寬度， W_C 為窄通道的寬度， L 為窄通道的長度，左右兩端白色區域為源極與汲極，黃色區域為分離閘極，淺黃色區域為導引，橘色區域為產生週期性交流電壓位能的頂閘極。..... - 107 -
- 圖 4.6 取入射電子能量範圍在第一個子帶底端，考慮不同邊帶數，電導對入射電子能量的收斂情形。黑色點線代表考慮 3 個邊帶。藍色虛線代表考慮 5 個邊帶。紅色實線代表考慮 7 個邊帶。綠色點虛線代表考慮 9 個邊帶。 M_{tot} 為系統所考慮的總邊帶數。..... - 119 -
- 圖 4.7 邊帶躍遷示意圖。藍色圓點代表電子入射的模態。紅色圓點代表離電子入射模態數個光子能量的邊帶模態。..... - 120 -
- 圖 4.8 黑色點線為未加週期性交流電壓位能的電導和入射電子能量的關係。紅色虛線、綠色點虛

- 線和藍色實線分別為交流電壓位能強度為 $V_0 = 0.02\varepsilon_1$ 、 $V_0 = 0.04\varepsilon_1$ 和 $V_0 = 0.06\varepsilon_1$ 的電導對入射電子能量的關係。..... - 121 -
- 圖 4.9 電子在不同模態間的躍遷情形。黑色實線代表電子入射能量。紅色虛線代表電子吸放 m 個光子後的能量。電子放出 m 個光子能量後，跳到子帶底端的準束縛態，短暫停留後反射回左邊導引。..... - 122 -
- 圖 4.10 急降結構時的波函數機率密度分佈。..... - 123 -
- 圖 4.11 寬窄比相同，改變 ω 之電導和入射電子能量的關係。黑色點線、藍色虛線和紅色實線分別為光子能量為 $\hbar\omega = 0.03\varepsilon_1$ 、 $0.04\varepsilon_1$ 和 $0.05\varepsilon_1$ 下的電導對入射電子能量的關係。.... - 124 -
- 圖 4.12 寬窄比相同，改變 L 之電導和入射電子能量的關係。黑色點線、藍色虛線和紅色實線分別為光子能量為 $\hbar\omega = 0.03\varepsilon_1$ 、 $0.04\varepsilon_1$ 和 $0.05\varepsilon_1$ 下的電導對入射電子能量的關係。.... - 125 -
- 圖 4.13 寬窄比相同，改變直流電壓位能 V_B 之電導和入射電子能量的關係。黑色點線為未加直流偏壓的電導和入射電子能量的關係。藍色虛線和紅色實線分別為直流電壓位能為 $V_B = -1.5\varepsilon_1$ 和 $V_B = -3\varepsilon_1$ 的電導對入射電子能量的關係。..... - 127 -
- 圖 4.14 前三個束縛態隨直流電壓位能 V_B 變化的關係圖。黑色實線代表基態，藍色實線代表第一激發態，紅色實線代表第二激發態。紅色虛線代表形成 Fano 結構的入射電子能量為 E_{fano} 。A、B、C 和 D 四點分別代表不同負電壓位能 V_B 時，束縛態能量。..... - 129 -
- 圖 4.15 四種不同直流電壓位能 V_B 對映的電導。A、B、C 和 D 四點分別代表不同負電壓位能 V_B 時，束縛態能量。黑色實線代表 $V_B = -0.15$ ，藍色實線代表 $V_B = -0.50$ ，綠色虛線代表 $V_B = -0.75$ ，紅色實線代表 $V_B = -1.05$ 。..... - 130 -
- 圖 4.16 Fano 結構的示意圖。紅色線為 Fano-dip 的情形。綠色線為 Fano-peak 的情形。Fano 發生的原因為真實束縛態(TBS)與廣延態(extended state)不同路徑所形成的干涉現象。... - 131 -
- 圖 4.17 改變寬窄比之電導和入射電子能量的關係。紅色虛線為導引和窄通道的寬度相同時。綠色虛線為導引寬度為 $W_L = 15(\cong 120\text{nm})$ 。藍色實線為導引寬度為 $W_L = 20(\cong 160\text{nm})$ 。..... - 132 -
- 圖 4.18 不同直流電壓位能 V_B 下，電導和入射電子能量關係圖(為了分析方便做垂直方向平移)。虛線箭頭為未加直流電壓位能 V_B 所形成的第二個子帶底端。實線箭頭為加入直流電壓位能 V_B 所形成的第二個子帶底端。..... - 134 -
- 圖 4.19 改變直流電壓位能 V_B 之電導和入射電子能量的關係。黑色點線為未加交流電壓位能且直流電壓位能 $V_B = -3\varepsilon_1$ 時的對照曲線。藍色實線為直流電壓位能為 $V_B = -3.0\varepsilon_1$ 和交流電壓頻率 $\omega = 0.03\varepsilon_1$ 。..... - 136 -
- 圖 4.20 寬窄比為 2 時，改變 L 之電導和入射電子能量的關係。黑色點線為未加交流電壓時。三條實線分別為光子能量 $\hbar\omega = 0.02\varepsilon_1$ 、 $0.03\varepsilon_1$ 和 $0.04\varepsilon_1$ 且交流電壓位能強度頻率比 $V_0/\hbar\omega = 2$ 的電導和入射電子能量的關係。黑色小三角為邊峰出現的位置。..... - 137 -
- 圖 4.21 寬窄比為 2 時，改變 ω 之電導和入射電子能量的關係。黑色點線為未加交流電壓位能時。三條實線分別為交流電壓位能頻率 $\hbar\omega = 0.02\varepsilon_1$ 、 $0.03\varepsilon_1$ 和 $0.04\varepsilon_1$ 的電導和入射電子能量的關係。黑色小三角為邊峰出現的位置。..... - 139 -

- 圖 4.22 寬窄比為 2 時，改變交流電壓位能強度 V_0 之電導和入射電子能量的關係。黑色點線為未加交流電壓位能時。三條實線分別為交流電壓位能強度 $V_0/\omega = 0.1$ 、 $V_0/\omega = 1$ 和 $V_0/\omega = 2$ 的電導和入射電子能量的關係。黑色小三角為邊帶峰值出現的位置。..... - 140 -
- 圖 4.23 (a)、(b)和(c)三條線分別對應 $V_0/\omega = 1$ 、2 和 3。黑色虛線為不吸放光子的結果。藍色虛線為吸放一個光子的結果。紅色虛線為吸放兩個光子的結果。..... - 141 -
- 圖 4.24 三種耦合強度 $V_0/\hbar\omega = 0.1$ 、 $V_0/\hbar\omega = 1$ 和 $V_0/\hbar\omega = 2$ 下，考慮有限溫度 $T=0.03\text{K}$ 的電導和入射電子能量關係。黑色點線代表零溫的對照曲線。實線考慮的溫度為 0.03K 。(a)為弱耦合(b)為強耦合(c)為超強耦合。..... - 142 -
- 圖 4.25 三種耦合強度 $V_0/\hbar\omega = 0.1$ 、 $V_0/\hbar\omega = 1$ 和 $V_0/\hbar\omega = 2$ 下，考慮有限溫度 $T=0.30\text{K}$ 的電導和入射電子能量關係。黑色點線代表零溫的對照曲線。實線考慮的溫度為 0.30K 。(a)為弱耦合(b)為強耦合(c)為超強耦合。..... - 143 -
- 圖 4.26 寬窄比為 2 時，改變 L 之電導和入射電子能量的關係。黑色點線為未加交流電壓位能時。三條實線分別為窄通道長度 $L = 20$ 、30 和 40 時的電導和入射電子能量的關係。黑色小三角為邊峰出現的位置。..... - 144 -

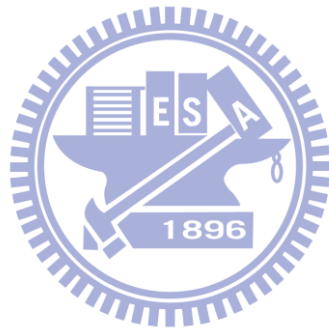


參數表

a_{nl}	第 n 個縱向子帶態和第 l 個縱向子帶態的重疊積分
Δx	矩形位能切片的寬度
D	擴散係數
E	電子能量
$E_{b.s.}$	束縛態能量
\underline{E}	以第一個子帶能量為單位的束縛態能量
E_{Bn}	第 n 個束縛態能量
E_F	材料費米能量
E_{inc}	考慮偏壓位能後的電子入射能量
E_n	第 n 個子帶上的電子動能
$f_{l,r}(E, \mu_{l,r})$	源極或汲極的費米狄拉克分佈
G	直流電導
\hbar	普朗克常數
$I_{e,l \rightarrow r}$	從左到右的電子流
$I_{e,r \rightarrow l}$	從右到左的電子流
k	波向量
k_l	在導引中第 l 個子帶的電子波向量
l_e	平均自由路徑
L	通道長度(窄通道長度)
L_{max}	最高的傳導模態
L_T	熱相干破壞長度
L_φ	相位鬆弛長度
m	電子質量
m^*	等效電子質量
M_{max}	最大可吸放光子數
M_{tot}	總邊帶數
N_{tot}	總子帶數
p	電子動量
$p\%$	高斯位能大小佔總偏壓位能差 U_{sd} 的百分比
r	反射振幅
$r_{l'l'}$	從第 l 個子帶入射，第 l' 個子帶反射的電子波函數振幅
$Refl$	反射係數
R_n	第 n 個子帶模態的反射係數
$S_{m'l'}$	考慮所有重疊積分的和
T	溫度
\mathbf{T}	總轉移矩陣

t	穿透振幅
$t_{l'l'}$	從第 l 個子帶入射，第 l' 個子帶穿透的電子波函數振幅
t	時間
\mathbf{T}'	不包含步階函數的總轉移矩陣
\mathbf{T}_0	步階函數的轉移矩陣
\mathbf{T}_j	第 j 個 delta 轉移矩陣
T_n	第 n 個子帶模態的穿透係數
$Tran$	穿透係數
$Tran_{l \rightarrow r}(E, U_{sd})$	從左到右的穿透係數
$Tran_{r \rightarrow l}(E, U_{sd})$	從右到左的穿透係數
u	遷移率
U_{bd}	在汲極端的步階偏壓位能分佈
U_{bG}	半高斯偏壓位能分佈
$U_{bias}(x, U_{sd})$	偏壓位能
U_{bl}	線性偏壓位能分佈
U_{bs}	在源極端的步階偏壓位能分佈
U_d	汲極的電位能
U_s	源極的電位能
U_{sd}	源極與汲極的電位能差
v	電子速度
V_0	交流電壓位能強度
V_B	直流偏壓位能
$V_c(x)$	侷域位能
v_d	漂移速度
V_{d0}	delta 位能強度
V_{d1}	第一個 delta 散射位能的強度
V_{d2}	第二個 delta 散射位能的強度
V_{ds}	汲極與源極的電位差
V_G	高斯位能強度
V_{G1}	第一個高斯散射位能強度
V_{G2}	第二個高斯散射位能強度
V_j	第 j 個 delta 位能強度
$V_{sc}(x)$	散射位能
V_{sq0}	矩形位能強度
W	量子通道寬度
W_C	窄通道寬度
W_L	導引寬度
x_{G1}	第一個高斯位置

x_{G2}	第二個高斯位置
x_j	第 j 個 delta 位能位置
β	高斯係數
β_n	在窄通道中第 n 個子帶的電子波向量
ε_n	第 n 子帶能量
θ	散射角度
λ	電子波長
μ	零溫零偏壓時的費米能量
σ	高斯位能的標準差
τ_{tr}	傳輸鬆弛時間
μ_l	源極費米能量
μ_r	汲極費米能量
ω	交流電壓位能的角頻率



第一章 緒論

1.1 量子元件簡介

近幾年來由於半導體工業的微縮技術，使得元件的尺寸越變越小而來到了奈米級。在這個尺寸下，古典的理論開始無法精準的解釋電子的運動情形，如量子化的電導 [1]、電子波的相干性 [2]、電子波的同調性 [3] …等等。此時利用量子力學的方式解釋電子在奈米尺度下的運動即為量子傳輸。

量子化電導中最經典的一個實驗由 B.J.van Wees 的團隊在 1988 年發表在 PRL 期刊。他們在 GaAs-AlGaAs 異質結構所形成的二維電子氣上外加電極。外加電極的負偏壓可以在 2DEG 中產生點接觸的一維通道。實驗藉由調整外加負偏壓的大小，改變一維通道寬度。量測一維通道兩端電阻對負偏壓的關係，成功得到 16 個平台狀的結果。他們將電阻結果減去 400Ω 的導引(Lead)電阻，計算電導，並發現量子化電導(每個電導平台為 $2e^2/h$ 的整數倍)。

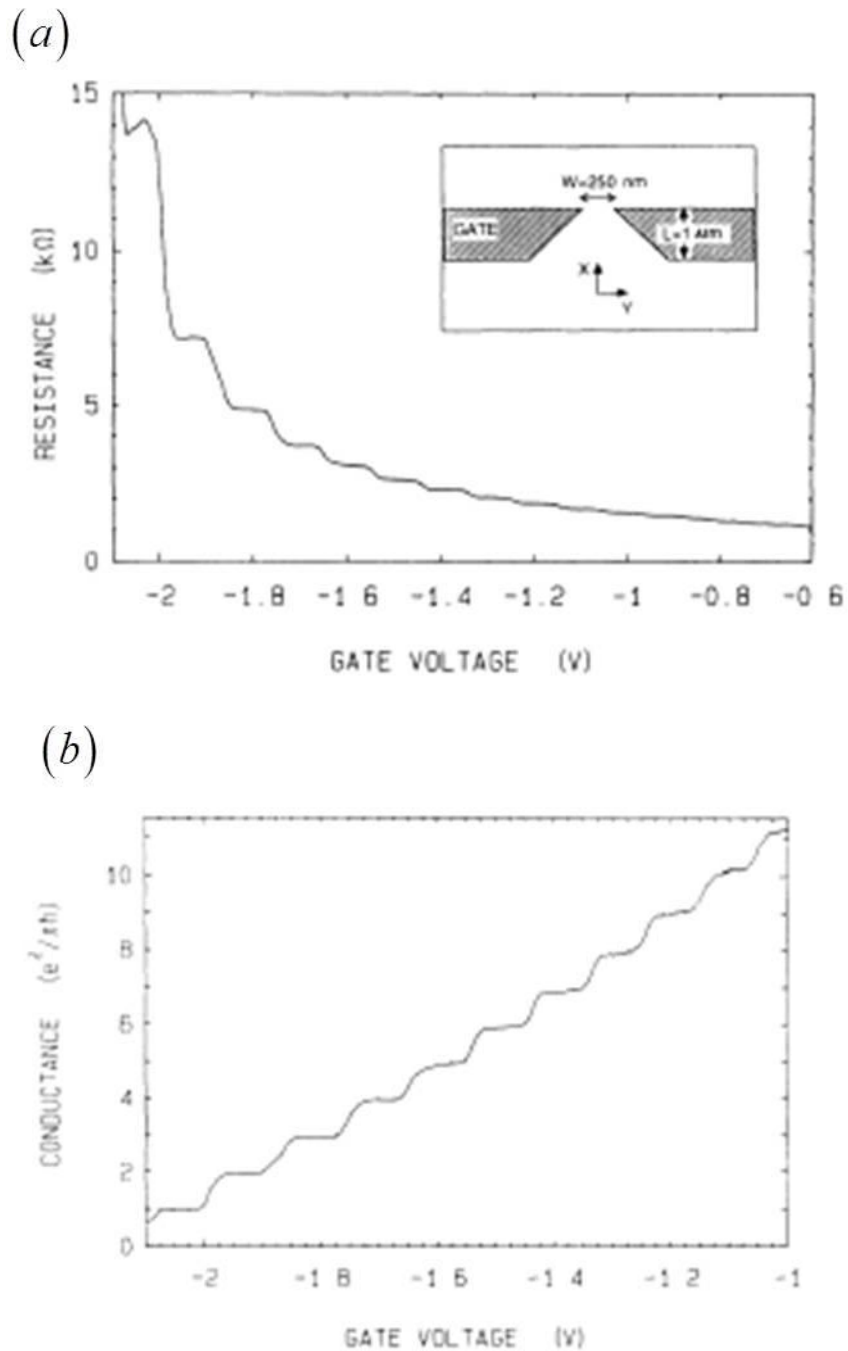


圖 1.1 (a) 電阻和電壓的關係。(b) 電導和電壓的關係。來源取自 B.J.van Wees et al., Phys. Rev. Lett. 60, 848(1988)。

在低維度的系統下，我們可以依照不同的物理量區分出幾個重要的長度尺寸。將其整理成如下表。

1mm	在量子霍爾區域的平均自由路徑
100μm	在 $T < 4K$ 的高遷移率半導體中的 平均自由路徑/相位鬆弛長度
10μm	
1μm	商用半導體元件 (1990)
100nm	半導體內的德布羅依波長 商用半導體元件 (2011)
10nm	
1nm	半導體內的德布羅依波長 原子間的距離
0.1nm	

表 1.1 不同長度對映的物理量 [4]。

在表 1.1 中提到的物理量其物理意義如下：

德布羅意波長 (De Broglie wave length)， λ 。此波長被定義為

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi}{k}$$

其中 $p(k)$ 為有代表性的電子動量 (波向量)。如果是費米氣體 (Fermi gas) 的特徵動量即為費米動量 (Fermi momentum)。若是波茲曼氣體

(Boltzmann gas)， $p = (2mkT)^{1/2}$ ，則

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mkT}}$$

平均自由路徑， l_e 。這是電子在雜質或聲子之間發生碰撞所需的特徵長度。其定義為

$$l_e = v\tau_{tr}$$

其中 v 是有代表性的速度，而 τ_{tr} 是傳輸鬆弛時間 (transport relaxation

time) 。其定義為

$$\frac{1}{\tau_r} \propto \int d\theta \sin \theta W(\theta)(1 - \cos \theta)$$

其中 θ 是散射角度而 $W(\theta)$ 是散射機率。通常以遷移率 (mobility) 作為傳輸 (transport) 的特徵

$$u = \frac{e\tau_r}{m}$$

遷移率的物理意義為電子在一外加電場下所能產生的漂移速度。外加電場漂移速度和遷移率的關係為

$$v_d = uE$$

其中 v_d 為漂移速度、 u 為遷移率、 E 為外加電場。

相位鬆弛長度 (phase-relaxation length) , L_ϕ 。這是一個代表性的量子力學鬆弛長度，而它並無法對映到任何的古典物理量。也就是說古典的運動可以用一個粒子在某個時間某個位置出現的機率來描述。然而在量子力學裡的態可以用有相位的波函數來描述。相位在所謂的干涉現象裡非常重要。這裡的干涉現象指的是在某一點的電子波函數是包含了所有量測之前的訊息。如果波的相位沒有被破壞，則特定的量子干涉現象可以被觀察到且顯得重要。相位鬆弛長度 L_ϕ ，描寫了相位維持住的長度。

顯然地任何穩態且跟自旋無關的位能不會導致相位的鬆弛。事實上，任何穩態位能對映的運動是符合時間反轉定理的。唯一可能改變

相位鬆弛的機制是破壞時間反轉上的對稱性。在一些可以破壞對稱性的非彈性散射包含了聲子之間、電子電子碰撞和自旋翻轉等等。在這些機制裡的一個重要特徵是電子在一個特定時間內做了許多彈性碰撞。因為電子散佈性 (diffusively) 的運動，一個有效地估算對映相位鬆弛長度的方法為

$$L_{\phi} = \sqrt{D\tau_{\phi}}$$

其中 $D = (1/d)vl$ 是擴散係數 (d 是電子氣的尺度)。

熱相干破壞長度(thermal dephasing length, L_T)。之前談論到的鬆弛機制與單電子能態中，波函數之間的干涉有關。然而，兩個能量接近的電子，其交互作用的干涉也很重要。事實上，如果電子之間的能量差約等於 kT ，在時間 \hbar/kT 內幾乎保持其同調性。因此估計同調傳遞 (coherent propagation) 的特徵長度為

$$L_T = \sqrt{\hbar D / kT}$$

比較平均自由路徑 l_e 和系統的特徵大小 L ，我們可以區分出擴散地傳輸為 $l_e \ll L$ 和彈道地傳輸為 $l_e > L$ 。這樣的分類方法在不同樣品大小的時候會有不完備的地方。圖 1.2 說明了樣品長度 L 比寬度 W 大很多時。

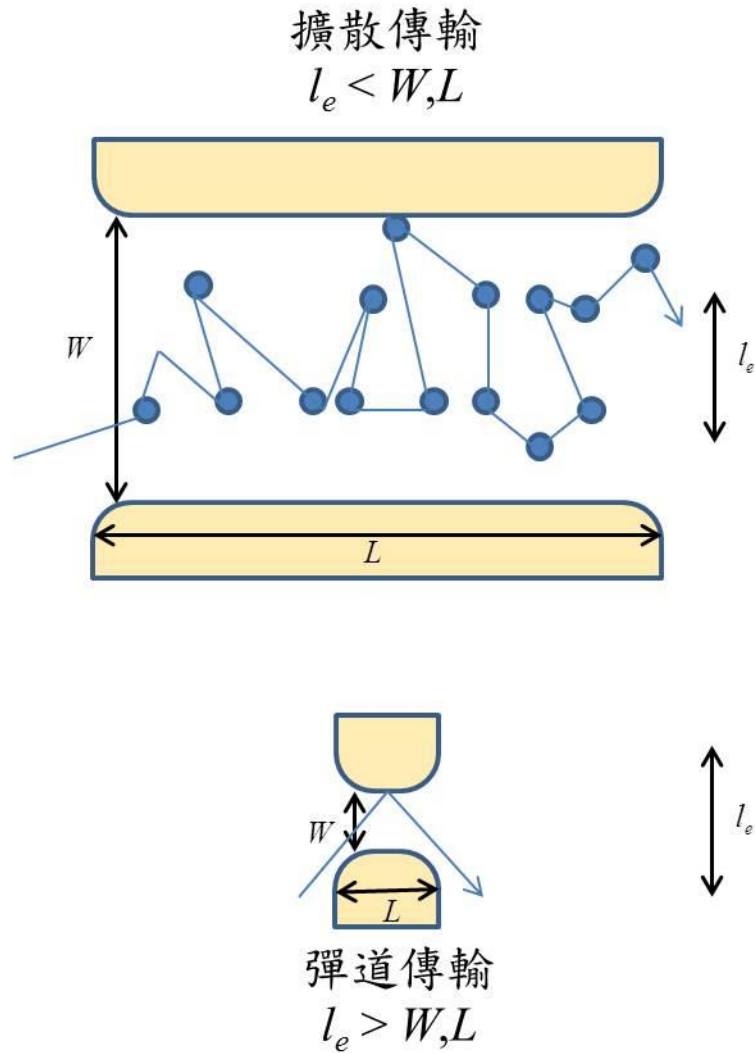


圖 1.2 不同傳輸區域對映的電子軌跡[4]。擴散傳輸， $l_e < W, L$ 。彈道傳輸， $W, L < l_e$ 。

如果相位的同調性被考慮進來，則 L_ϕ 和 L_T 變得相對重要，而情況變得更有意思且豐富。介觀尺度的導體通常被製造成有一端是尺寸相對非常小的平面導體。雖然在這個領域某些領先的實驗可以用金屬製造出導體，目前大部分的工作都還是利用砷化鋁鎵-砷化鎵 (AlGaAs-GaAs) 材料製成系統。砷化鎵的一些重要參數如表 1.2。

本論文工作的重點在探討由窄通道所形成的開放式量子點系

統，其傳輸理論及物理機制。其中我們希望藉由研究在外加週期性交流電壓位能的情形下，光輔助穿隧 (photon assisted tunneling) [5-11] 對同調傳輸 (coherent transport) 的影響。我們知道若電子在運動的過程是保持同調的，則當電子通過一量子點或量子侷域窄通道時，電子會明顯地受到侷域位能的束縛態影響而產生共振現象。此時若系統夠小，而電子同調性未被破壞，則光輔助傳輸會影響電流。我們希望藉由分析週期性交流電壓對元件的影響，瞭解電子在開放式量子點窄通道中光輔助傳輸下的傳輸情形。



		GaAs(100)	Si	Units
Effective Mass	m	0.067	0.19	$m_e=9.1 \times 10^{-31} \text{kg}$
Spin degeneracy	g_s	2	2	
Valley degeneracy	g_v	1	2	
Density of states	$g_s g_v (m/2\pi\hbar)$	0.28	1.59	$10^{11} \text{cm}^{-2} \text{meV}^{-1}$
Electronic sheet density	n_s	4	1-10	10^{11}cm^{-2}
Fermi wave vector	$k_F=(4\pi n_s/g_s g_v)^{1/2}$	1.58	0.56-1.77	10^6cm^{-1}
Fermi velocity	$v_F=\hbar k_F/m$	2.7	0.34-1.1	10^7cm/s
Fermi energy	$E_F=\hbar^2 k_F^2/2m$	14	0.63-6.3	meV
Electron mobility	μ_e	10^4 - 10^6	10^4	$\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$
Scattering time	$\tau=m\mu_e/e$	0.38-38	1.1	ps
Diffusion constant	$D=v_F^2\tau/2$	140-14000	6.4-64	cm^2/s
Resistivity	$\rho=(n_s e \mu_e)^{-1}$	1.6-0.016	6.3-0.63	k Ω
Fermi wavelength	$\lambda_F=2\pi/k_F$	40	112-35	Nm
Mean free path	$l=v_F\tau$	10^2 - 10^4	37-118	nm
Phase coherence length	$l_\phi=(D\tau_\phi)^{1/2}$	200-...	40-400	$\text{nm}(T/K)^{-1/2}$
Thermal length	$l_T=(\hbar D/k_B T)^{1/2}$	330-3300	70-220	$\text{nm}(T/K)^{-1/2}$
Cyclotron radius	$l_{\text{cycl}}=\hbar k_F/eB$	100	37-116	$\text{nm}(B/K)^{-1/2}$
Magnetic length	$l_m=(\hbar/eB)^{1/2}$	26	26	$\text{nm}(B/K)^{-1/2}$
	$k_F l$	15.8-1580	2.1-21	
	$\omega_c \tau$	1-100	1	(B/T)
	$E_F/\hbar\omega$	7.9	1-10	(B/T) ⁻¹
Dielectric constant	ϵ	13.1	11.9	$\epsilon_0=8.9$

表 1.2 在 AlGaAs-GaAs 或 Si 反轉層 (inversion layer) 的二維電子氣中電子特性 [4]。

1.2 研究動機

過去幾十年裡，介觀元件的電子傳輸現象已經備受矚目 [2,12-14]。由次微米共振腔經過點接觸連至兩端導引的開放式量子點已經成為一個研究相位同調程序和其他物理機制的重要元件。量子點的大小和導引寬度可經由分離閘極控制。在高電子遷移率和足夠低溫的條件下，相位同調長度會超越元件的尺寸，而使電子在量子點中來回移動時能保持同調。

此外，介觀元件之電子傳輸的時變性高頻響應，因其在半導體產業之應用潛力而受到大家的關注。高頻響應中的時變場，可以藉由兩個方式產生：高頻電磁波或電極外加交流訊號所產生的時變場。研究及瞭解高頻電磁波或時變場在奈米結構中的響應是未來發展高速開關量子元件、高頻發光源及偵測器、量子共振二極體或三極體和量子電子幫浦的基礎 [15,16]。這些量子元件將是構成並應用在量子通訊和量子電腦運算的關鍵。

除了工程應用方面，時變場在基本物理的研究上也有一定的重要性。其中包含了高頻電磁波和聲子的耦合 [17]、量子力學裡的“穿透時間” [18] 和光輔助傳輸。在本論文裡會針對開放式量子點中時變場所引起的光輔助傳輸做討論。而與光輔助傳輸相關的研究為在原子物理和化學中實現乾淨的人造原子，以及模擬自由電子雷射發出的超強

且同調電磁波[19]。



第二章 一維與準一維系統的量子傳輸

在這個章節裡，我們將探討自由電子在一維系統裡遇到位能障時的運動情形。如果電子或其他帶有質量 m^* 和能量 E 的粒子入射到一個位能時，他們會穿過位能障。這個現象即為量子力學裡的穿隧效應。

模擬這種問題的模型可分成兩類—離散模型(discrete model)與連續模型(continuous model)。離散模型又稱晶格模型(lattice model)，包含了緊束縛法(Tight Binding method)、有限差分法(Finite Difference method)和有限元素法(Finite Element method)。連續模型包含 Lippman Schwinger method 和模態匹配法(mode-matching method)。

除了模型之外，在處理因局域結構或散射位能所形成較複雜系統時，通常我們會先分成不同的小單元，例如格點或晶胞，之後再將這些小單元串連起來。串連的方式可分為兩種—散射矩陣法(scattering matrix method)和轉移矩陣法(transfer matrix method)。以每個小單元為中心，將波的行進方向分成入射和反射兩類，入射波和反射波之間的關係用散射矩陣表示，組合每個小單元的散射矩陣並計算出整個系統的穿隧特性即為散射矩陣法。以每個小單元為中心，將不同區域的波用轉移矩陣連接，組合每個小單元的轉移矩陣並計算出整個系統的穿隧特性即為轉移矩陣法。在這篇論文裡，我們會使用模態匹配法和轉

移矩陣法解決問題。在這些討論中，一個重要的限制是我們只考慮電子是同調的情形，也就是說電子有同調性且未受到破壞。

為了簡化解析計算，在本論文裡某些數學式做了無因次化的動作，各個物理量的無因次化單位整理如下表。

	energy	length	angular frequency
dimensionless	$E^* = E_F$	$a^* = \frac{1}{k_F}$	$\omega^* = \frac{E_F}{\hbar}$
AlGaAs-GaAs 2DEG (SI units)	9 meV	8 nm	13.6 Trad/sec

表 2.1 無因次化的物理量及其 SI 單位下 AlGaAs-GaAs 二維電子氣為基準的值。

2.1 一維系統

雖然我們生活在三維的世界裡，但在這小節裡，我們將從一些簡單的一維問題開始討論，因為許多物理現象在一維空間時即會出現。這些問題說明了一些非古典的效應（即為量子效應）。

2.1.1 模態匹配法 (Mode-matching method)

首先，從自由空間中非時變的 Schrodinger 方程式開始討論。

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

其中 E 代表電子的能量， $V(x)$ 為空間中的位能。事實上，波函數 $\psi(x)$ 在自由空間中會是平面波。接下來，藉由解邊界條件問題得到穿透係數和反射係數。

現在讓我們考慮一個實際的散射位能如下：

$$V(x) = V_{d0} \delta(x)$$

通常 delta 並不是一個函數，因為它在 $x=0$ 時發散。然而它是一個對理論的建立有幫助的數學形式（舉例：電動力學中一個點電荷的電荷密度為一 delta 數學形式）。考慮一個 delta 位能的 Schrodinger 方程式為

$$-\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V_{d0} \delta(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

其中 delta 函數的強度為 V_{d0} 。在 $x \neq 0$ 的區域， $V(x) = 0$ ，所以

Schrodinger 方程式為



$$-\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x) \quad (2.1)$$

(2.1)式的通解為

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx}, & x > 0 \end{cases}$$

波數(波向量的絕對值稱為波數)為

$$k = \sqrt{E}$$

這裡我們假設電子從位障的左到右穿隧，所以我們知道 $x > 0$ 的區域

無反射波，也就是說 $D = 0$ 。

在 $x < 0$ 和 $x > 0$ 的區域，波函數為

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ Ce^{ikx}, & x > 0 \end{cases}$$

我們選擇合適的邊界條件使得波函數在 $x = 0$ 的地方匹配。

邊界條件 1：波函數在 $x = 0$ 連續。因為電子的動量是波函數的微分，而且是一個有限值。所以波函數應該在邊界上連續。

$$A + B = C \quad (2.2)$$

邊界條件 2：我們考慮的是一個在邊界上為無窮大的位障。所以第

二個邊界條件為波函數在 $x = 0$ 上不連續。這裡得到邊界條件的想法

為對 Schrodinger 方程式在 $-\varepsilon$ 和 $+\varepsilon$ 做積分，最後取極限 $\varepsilon \rightarrow 0$ ：

$$-\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) dx + \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} V(x) \psi(x) dx = E \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \psi(x) dx \quad (2.3)$$

在取極限 $\varepsilon \rightarrow 0$ 下，(2.3)式等號右邊的波函數積分為零，因此

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{d\psi(x)}{dx} \Big|_{x=+\varepsilon} - \frac{d\psi(x)}{dx} \Big|_{x=-\varepsilon} \right) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} V(x) \psi(x) dx \quad (2.4)$$

在這個實例中，散射位能 $V(x) = V_{d0} \delta(x)$ ，從 (2.4)式即得

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{d\psi(x)}{dx} \Big|_{x=+\varepsilon} - \frac{d\psi(x)}{dx} \Big|_{x=-\varepsilon} \right) = V_{d0} \psi(0)$$

則波函數為

$$\begin{cases} \frac{d\psi(x)}{dx} = ikAe^{ikx} - ikBe^{ikx}, \text{ for } x < 0 \\ \frac{d\psi(x)}{dx} = ikCe^{ikx}, \text{ for } x > 0 \end{cases}$$

所以從 邊界條件 2 得知

$$ikC - (ikA - ikB) = V_{d0}C$$

或

$$-A + B = \left(\frac{1}{ik} V_{d0} - 1 \right) C \quad (2.5)$$

A 是入射波的振幅， B 是反射波的振幅， C 是透射波的振幅。用(2.2)

式和 (2.5)式解 B 和 C ，我們得到以下關係

$$\frac{B}{A} = \frac{\left(-\frac{iV_{d0}}{2k}\right)}{\left(1 - \frac{iV_{d0}}{2k}\right)}, \quad \frac{C}{A} = \frac{1}{\left(1 - \frac{iV_{d0}}{2k}\right)}$$

一個平面波 Ae^{ikx} 的電流密度為 $\hbar k|A|^2/m^*$ 由此可知電流密度和波向量有關。穿透和反射係數為

$$Refl = \frac{\left(\frac{\hbar k}{m^*}\right)|B|^2}{\left(\frac{\hbar k}{m^*}\right)|A|^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\frac{V_{d0}^2}{4k^2}}{1 + \frac{V_{d0}^2}{4k^2}}$$

和

$$Tran = \frac{(2k)|C|^2}{(2k)|A|^2} = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \frac{V_{d0}^2}{4k^2}}$$

或

$$Tran(E) = \frac{1}{1 + \frac{V_{d0}^2}{4E}} \quad (2.6)$$

其中電流守恆定律為這兩個係數需符合的一個重要的驗證，即

$$Refl + Tran = 1$$

最後由 Landauer formula 得知電導為

$$G = \frac{2e^2}{h} Tran(E) = \frac{2e^2}{h} \frac{1}{\left(1 + \frac{V_{d0}^2}{4E}\right)}$$

2.1.2 轉移矩陣法 (Transfer matrix method)

在這一小節裡，把計算簡單一維位能障的穿隧問題推廣至能夠處

理任意一維位能障的穿隧問題 [28]。我們會用一連串的 delta 位能障去等效地建構出任意一維分佈的位能。首先計算一個帶有能量 E 的粒子穿過第一個 delta 位能障的穿透係數 (transmission coefficient) 和反射係數 (reflection coefficient)。穿隧過第一個 delta 位能障的粒子在遇到第二個 delta 位能障時也有一定穿透和反射的機率。一個 2×2 的轉移矩陣是做為每個 delta 位能障和自由空間傳遞 (free propagation) 的連接，而這個矩陣將包含了電子波函數穿透和反射的振幅大小以及相位的資訊。一維問題的總穿透機率為各別 delta 位能所對應到的轉移矩陣相乘。

在建構這個方法之前，我們必需考慮這種近似方法的適用條件，在合理的誤差內。而這裡通常是由於 delta 位能不足以描述我們所想模擬的位能時產生的誤差。若要使誤差在合理範圍內，則每個 delta 位能的間隔必需遠小於電子波長。

計算穿隧機率的數值程式寫法將分成 Part I 和 Part II 在下面做介紹。Part I summary: 計算一個帶有能量 E 的電子入射到單一個 delta 位能時的轉移矩陣 \mathbf{T}_j 。這個轉移矩陣包含了波函數的穿透和反射。此時我們考慮 delta 位能在 $x = x_j$ 位置時，波函數與 delta 位能的關係如圖 2.1。Part II summary: 藉由把每個各別的轉移矩陣乘起來，得到整個系統位能障的轉移矩陣 \mathbf{T} 。

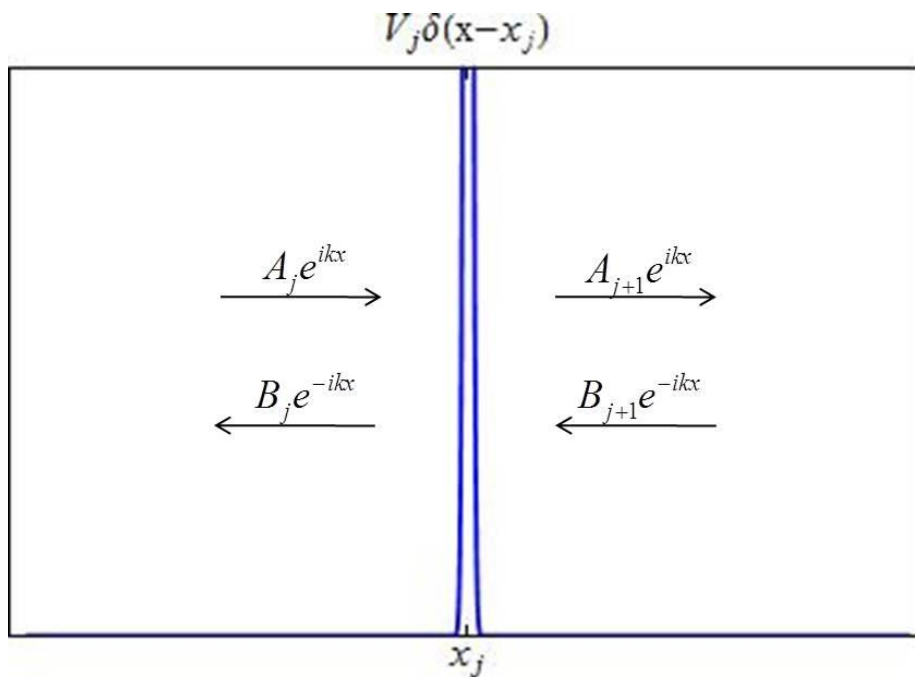


圖 2.1 delta 位能在 $x = x_j$ 位置時，左右兩側波函數的關係。 V_j 為第 j 個 delta 位能強度。

Part I: 第 j 個區間的轉移矩陣 T_j 。

圖 2.1 表示在位置 j 的 delta 位能與波函數的關係。能量 E 的電子在全空間中的波向量為

$$k = \sqrt{E}$$

且在區間 j 和 $j+1$ 的波函數為

$$\psi_j(x) = A_j e^{ikx} + B_j e^{-ikx} \quad (2.7)$$

$$\psi_{j+1}(x) = A_{j+1} e^{ikx} + B_{j+1} e^{-ikx} \quad (2.8)$$

其中 A 是向右傳遞的波函數係數。 B 是向左傳遞的波函數係數。

(2.7)式和 (2.8)式的兩個波函數分別對應到 delta 位能的兩個邊界條件就如同我們之前在 2.1.1 討論的一樣。我們得到

$$\psi_j(x) \Big|_{x=x_j} = \psi_{j+1}(x) \Big|_{x=x_j} \quad (2.9)$$

和

$$\left. \frac{d\psi_{j+1}(x)}{dx} \right|_{x=x_j} - \left. \frac{d\psi_j(x)}{dx} \right|_{x=x_j} = V_j \psi_j(x_j) \quad (2.10)$$

把(2.7)式和 (2.8)式代入 (2.9)式和 (2.10)式，得到兩個方程式為

$$e^{ikx_j} A_{j+1} + e^{-ikx_j} B_{j+1} = e^{ikx_j} A_j + e^{-ikx_j} B_j$$

$$\left(ike^{ikx_j} A_{j+1} - ike^{-ikx_j} B_{j+1} \right) - \left(ike^{ikx_j} A_j - ike^{-ikx_j} B_j \right) = V_j \left(A_j e^{ikx_j} + B_j e^{-ikx_j} \right)$$

用矩陣表示為

$$\begin{bmatrix} e^{ikx_j} & e^{-ikx_j} \\ ike^{ikx_j} & -ike^{-ikx_j} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ikx_j} & e^{-ikx_j} \\ (V_j + ik)e^{ikx_j} & (V_j - ik)e^{-ikx_j} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_j \\ B_j \end{bmatrix}$$

若有一 2×2 矩陣 \mathbf{A} 如下

$$\hat{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}$$

則其反矩陣為

$$\hat{\mathbf{A}}^{-1} = \frac{1}{\det} \begin{bmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{bmatrix}$$

其中矩陣 \mathbf{A} 的行列式值為

$$\det = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

因此， $\begin{bmatrix} e^{ikx_j} & e^{-ikx_j} \\ ike^{ikx_j} & -ike^{-ikx_j} \end{bmatrix}$ 的反矩陣為 $\frac{1}{(-2ik)} \begin{bmatrix} -ike^{-ikx_j} & -e^{-ikx_j} \\ -ike^{ikx_j} & e^{ikx_j} \end{bmatrix}$ ，所以我們

可以寫下如下關係式

$$\begin{bmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{bmatrix} = \frac{1}{(-2ik)} \begin{bmatrix} -ike^{-ikx_j} & -e^{-ikx_j} \\ -ike^{ikx_j} & e^{ikx_j} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{ikx_j} & e^{-ikx_j} \\ (V_j + ik)e^{ikx_j} & (V_j - ik)e^{-ikx_j} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_j \\ B_j \end{bmatrix} = \mathbf{T}_j \begin{bmatrix} A_j \\ B_j \end{bmatrix}$$

其中第 j 個區域的轉移矩陣 \mathbf{T}_j 為

$$\mathbf{T}_j = \left(\frac{1}{-2ik} \right) \begin{bmatrix} -V_j - 2ik & -V_j e^{-2ikx_j} \\ V_j e^{2ikx_j} & V_j - 2ik \end{bmatrix}$$

上式為第 j 個 delta 片段所對應的轉移矩陣。

Part II: 在一系列的 delta 位能之間傳遞，總轉移矩陣與穿透係數。
 考慮用 N 個 delta 位能建構一個任意散射位能 $V_{sc}(x)$ 時，如圖 2.2

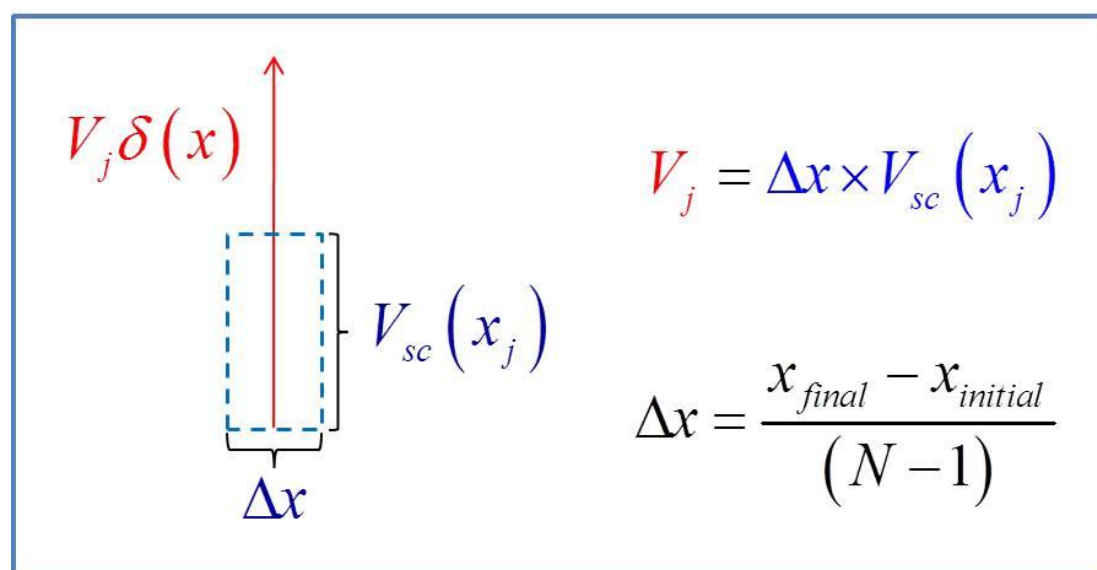
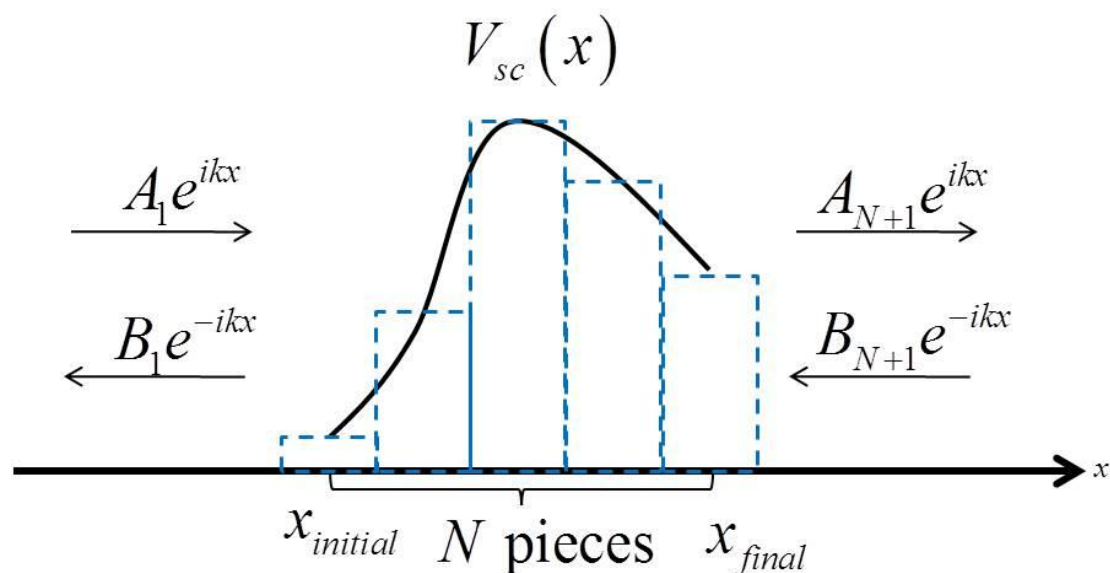


圖 2.2 用 N 個 delta 位能建構一個任意散射位能示意圖。上圖中，黑色曲線代表任意散射位能 $V_{sc}(x)$ ，藍色虛線矩形代表每個切片的矩形位能，其中 N 代表用中點法的切片總數。下圖中，藍色虛線代表每個矩形位能切片，其中 Δx 代表矩形位能切片的寬度， $V_{sc}(x_j)$ 代表矩形位能切片的高度。紅色箭頭代表第 j 片 delta 散射位能 $V_j \delta(x)$ 。

我們寫下每個區域的轉移矩陣 \mathbf{T}_j 並將它們相乘起來以得到總轉移矩陣 \mathbf{T} 。

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_N \mathbf{T}_{N-1} \cdots \mathbf{T}_j \cdots \mathbf{T}_1$$

第 j 個轉移矩陣 \mathbf{T}_j 的等效 delta 散射位能強度為(參考附錄 D)

$$V_j = \Delta x \times V_{sc}(x_j)$$

其中 Δx 為每個 delta 散射位能的等效矩形位能寬度。

$$\Delta x = \frac{x_{final} - x_{initial}}{(N-1)}$$

$x_{initial}$ 代表所模擬位能的起始位置， x_{final} 代表所模擬位能的終點位置。

值得注意的是這裡已經將模擬的散射位能限制為有限寬度，若散射位能的分佈範圍為無窮大，則不適用(參考 2.3.5)。

我們把總轉移矩陣和波函數振幅的關係寫成

$$\begin{bmatrix} A_{N+1} \\ B_{N+1} \end{bmatrix} = \mathbf{T} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix}$$

因為電子從左邊入射， $A_1 = 1$ ，如果不考慮有從右邊反射回來的情况，則 $B_{N+1} = 0$ 。

$$\begin{bmatrix} A_{N+1} \\ 0 \end{bmatrix} = \mathbf{T} \begin{bmatrix} 1 \\ B_1 \end{bmatrix}$$

在這個情形下，穿透振幅 (transmission amplitude) $t = A_{N+1}$ 和反射振幅 (reflection amplitude) $r = B_1$ 為

$$t = A_{N+1} = T_{11} + T_{12}r = T_{11} + T_{12} \left(-\frac{T_{21}}{T_{22}} \right) = \frac{(T_{11}T_{22} - T_{12}T_{21})}{T_{22}} = \frac{\det(\mathbf{T})}{T_{22}}$$

$$r = B_1 = -\frac{T_{21}}{T_{22}}$$

以上結果必需符合時間反轉不變 (time reversal invariant) 和電流守恆

的物理條件，這些我們將在附錄 A 做介紹。若電子的波速度在散射位能兩端相同，則轉移矩陣行列式值 $\det(\mathbf{T}) = 1$ 。

此時穿透係數可以寫成

$$\text{Tran}(E) = |t|^2 = \left| \frac{1}{T_{22}} \right|^2 \quad (2.11)$$

(2.11)式代表電子的波速度在散射位能兩端相同時，轉移矩陣和穿透係數的關係。

在接下來的兩小節裡，我們將分別討論電子在矩形位能與高斯位能的穿透與反射情形。希望藉由探討不同散射位能分佈對電子穿隧的影響。

2.1.3 矩形位勢模型 (Square potential model)

在這一小節中，我們將論論電子入射一矩形位能後的穿透與反射情形。並用解析解和轉移矩陣法的結果做比較，藉以驗證轉移矩陣法的正確性。

系統的 Schrödinger 方程式為

$$\left[-\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x)$$

這裡的位能項 $V(x)$ 即為矩形位能，其數學形式為：

$$V(x) = \begin{cases} V_{s0}, & \text{if } 0 < x < L \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

圖 2.3 為我們所考慮的矩形位能示意圖。

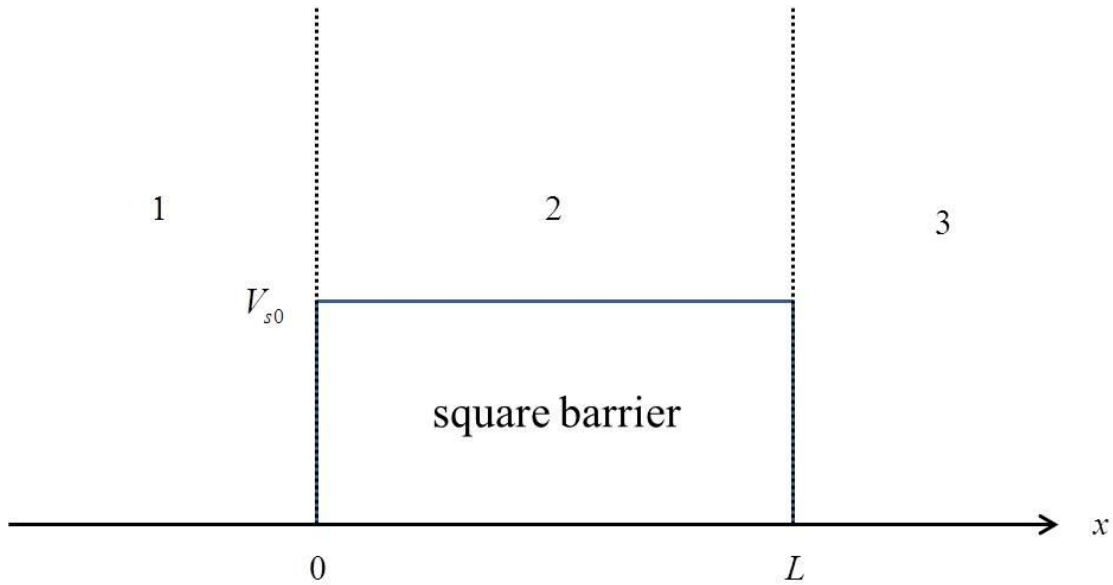


圖 2.3 矩形位勢模型示意圖。矩形位能強度為 V_{s0} ，寬為 L 。在這一小節的討論中，我們假設矩形位能分佈為 $x=0$ 至 $x=L$ 。

為了分析方便，把整個空間切割成 3 區。

解析的部分首先我們考慮電子能量比矩形位能大的電子，即 $E > V_{s0}$ 。此時電子從第 1 區入射，且第 3 區無 $-\hat{x}$ 方向的反射波。則 3 個區域的波函數分別為

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}$$

$$\psi_3(x) = A_3 e^{ik_3 x}$$

其中波向量 k_1 、 k_2 和 k_3 為

$$k_1 = k_3 = \sqrt{E}$$

$$k_2 = \sqrt{E - V_{s0}}$$

利用波函數的匹配，我們得到四個邊界條件為

邊界條件 1： $\psi(x)$ 在 $x=0$ 連續

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \quad (2.12)$$

邊界條件 2： $\frac{d}{dx}\psi(x)$ 在 $x=0$ 連續

$$k_1(A_1 - B_1) = k_2(A_2 - B_2) \quad (2.13)$$

邊界條件 3： $\psi(x)$ 在 $x=L$ 連續

$$A_2 e^{ik_2 L} + B_2 e^{-ik_2 L} = A_3 e^{ik_1 L} \quad (2.14)$$

邊界條件 4： $\frac{d}{dx}\psi(x)$ 在 $x=L$ 連續

$$k_2(A_2 e^{ik_2 L} - B_2 e^{-ik_2 L}) = k_1 A_3 e^{ik_1 L} \quad (2.15)$$

利用(2.12)式和 (2.13)式，將 A_2 和 B_2 用 A_1 和 B_1 表示為

$$A_2 = \frac{(k_1 + k_2)}{2k_2} A_1 - \frac{(k_1 - k_2)}{2k_2} B_1$$

$$B_2 = -\frac{(k_1 - k_2)}{2k_2} A_1 + \frac{(k_1 + k_2)}{2k_2} B_1$$

將以上兩式代回在 L 處的邊界條件，並得到 A_3 、 B_1 和 A_1 之關係

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{[(k_1 + k_2)^2 - (k_1 - k_2)^2]}{[(k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2 L} - (k_1 - k_2)^2 e^{ik_2 L}]}$$

$$\frac{B_1}{A_1} = \frac{(k_1^2 - k_2^2)(e^{-ik_2 L} - e^{ik_2 L})}{[(k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2 L} - (k_1 - k_2)^2 e^{ik_2 L}]}$$

由於波向量皆為實數，化簡分子，並將分母整理成實部和虛部後得到

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{2k_1 k_2 e^{-ik_1 L}}{[2k_1 k_2 \cos(k_2 L) - i(k_1^2 + k_2^2) \sin(k_2 L)]}$$

$$\frac{B_1}{A_1} = \frac{-i \sin(k_2 L)(k_1^2 - k_2^2)}{[2k_1 k_2 \cos(k_2 L) - i(k_1^2 + k_2^2) \sin(k_2 L)]}$$

由以上二式即可得知穿透係數 *Tran* (transmission coefficient) 和反射

係數 *Refl* (reflection coefficient) 為

$$Tran(k) = |t|^2 = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{\left[4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 L) \right]}$$

$$Refl(k) = |r|^2 = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2 = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 L)}{\left[4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 L) \right]}$$

明顯地，*Tran* 和 *Refl* 符合電流守恆定律 $Tran + Refl = 1$

將以上兩式表示成以能量 E 和矩形位能強度 V_{sq} 為變數，即

$$Tran(E) = |t|^2 = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{1}{\left[1 + \frac{V_{s0}^2}{4E(E - V_{s0})} \sin^2(k_2 L) \right]} \quad (2.16)$$

$$Refl(E) = |r|^2 = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2 = \frac{1}{\left[1 + \frac{4E(E - V_{s0})}{V_{s0}^2 \sin^2(k_2 L)} \right]}$$

當考慮電子能量比矩形位能小的電子時，即 $E < V_{s0}$ 。我們做 $k_2 = i\kappa_2$ 的代換，其中 $\kappa_2 = \sqrt{V_{s0} - E}$ ，則穿透係數 *Tran* (transmission coefficient) 和反射係數 *Refl* (reflection coefficient) 為

$$Tran(E) = \frac{4k_1^2 \kappa_2^2}{\left[4k_1^2 \kappa_2^2 + (k_1^2 + \kappa_2^2)^2 \sinh^2(\kappa_2 L) \right]} = \frac{1}{\left[1 + \frac{V_{s0}^2}{4E(V_{s0} - E)} \sinh^2(\kappa_2 L) \right]} \quad (2.17)$$

$$Refl(E) = \frac{(k_1^2 + \kappa_2^2)^2 \sinh^2(\kappa_2 L)}{\left[4k_1^2 \kappa_2^2 + (k_1^2 + \kappa_2^2)^2 \sinh^2(\kappa_2 L) \right]} = \frac{1}{\left[1 + \frac{4E(V_{s0} - E)}{V_{s0}^2 \sinh^2(\kappa_2 L)} \right]}$$

接下來我們用上一小節的轉移矩陣法求解，並與解析做比較。選擇矩形位能強度 $V_{s0} = 1$ 和寬度 $L = 10$ 。圖 2.4 和圖 2.5 分別為解

析和轉移矩陣法的結果。

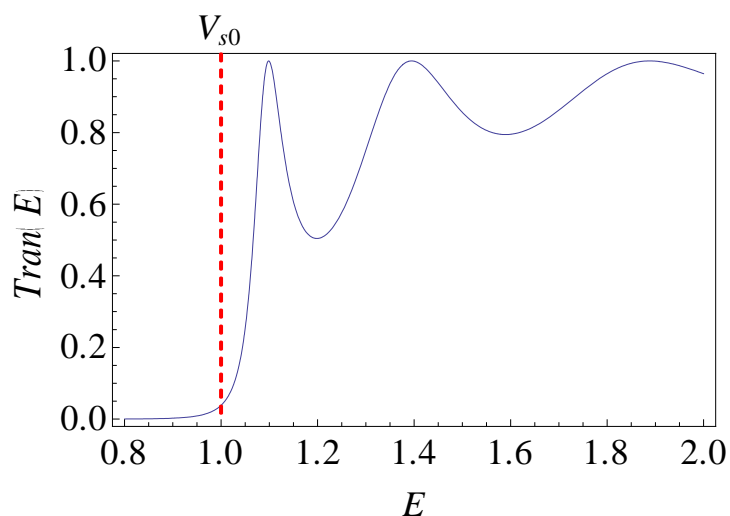


圖 2.4 矩形位能之穿透係數和入射電子能量關係。其中矩形位能強度 $V_{s0} = 1$ 和寬度 $L = 10$ 。此為用 mathematica 畫的解析結果。

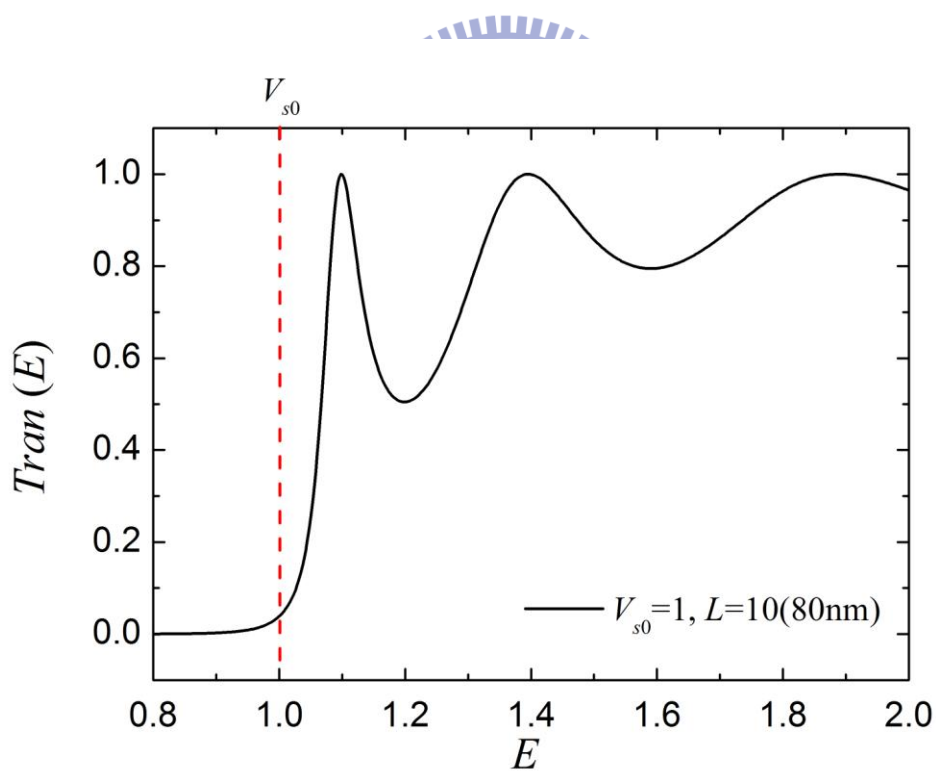


圖 2.5 矩形位能之穿透係數和入射電子能量關係。其中矩形位能強度 $V_{s0} = 1$ 和寬度 $L = 10$ 。此為用 Fortran 語言所寫程式的轉移矩陣畫出數值結果。由於得到相同的結果，轉移矩陣法得以驗證。

2.1.4 高斯位勢模型 (Gaussian potential model)

這一小節裡，我們選擇高斯位勢模型，因為此模型的位勢平滑分佈比較符合閘極控制所產生的對電子造成之等位面曲線。由於高斯位勢模型較難計算，我們利用轉移矩陣法 (transfer matrix method)，來求得穿透係數。

我們考慮高斯位能為 $V(x) = V_G e^{-\beta x^2}$ 如圖 2.6

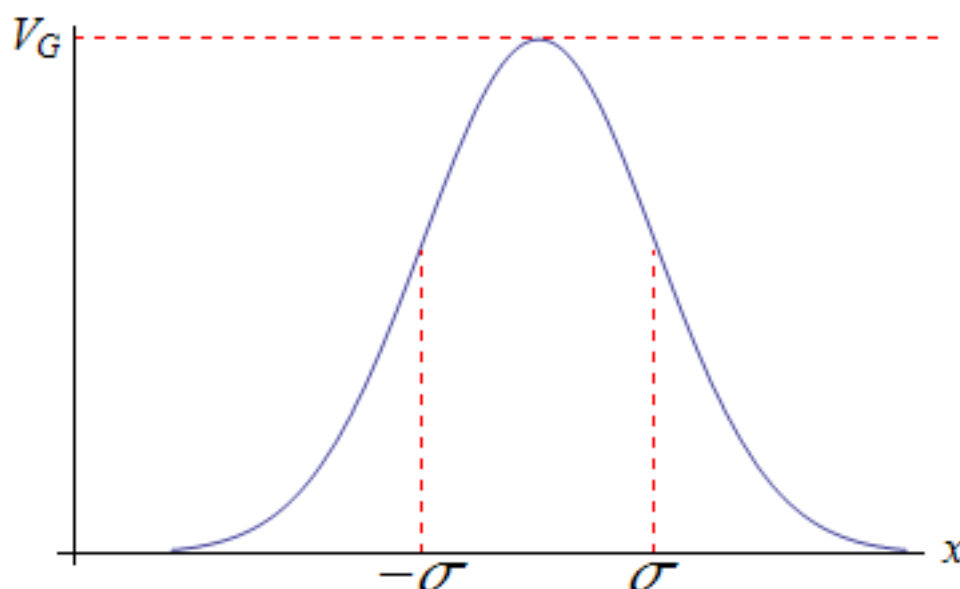


圖 2.6 高斯位能示意圖。藍色曲線代表高斯位能 $V(x)$ 。 V_G 為高斯位能強度。 σ 為高斯分佈的標準差。

其中 V_G 為高斯位能強度， $\sigma = \frac{1}{\sqrt{2\beta}}$ 為高斯位能的標準差。藉由調整高斯位能的標準差和強度，討論不同位能分佈對電子穿隧效應造成的影響。

首先討論固定高斯係數 $\beta = 0.05$ ，即高斯位能的標準差 $\sigma = 3.16 (\cong 25.3 \text{ nm})$ ，改變高斯位能強度為 $V_G = 1 (\cong 9 \text{ meV})$ 、

$V_G = 2(\cong 18\text{meV})$ 、 $V_G = 3(\cong 27\text{meV})$ ，電導對能量的關係如下圖 2.7

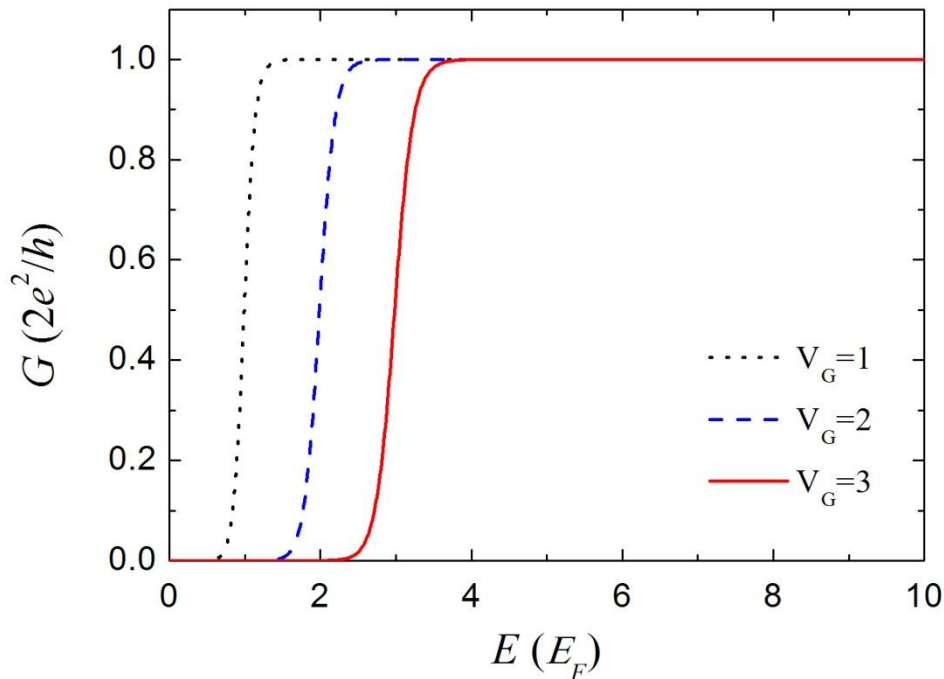


圖 2.7 此為一個高斯位能在 $\beta = 0.05$ 時，改變不同高斯位能強度 V_G 的電導。從圖 2.10 可知高斯位能的強度 V_G 會直接影響階梯狀電導起始能量值。高斯位能的強度越大，電導提升所需的能量會越大。此外和前一小節的矩形位能結果做比較，可發現共振效應明顯消失，此結果應和射散位能的分佈較平滑有關。

接下來討論固定高斯位能強度為 $V_G = 3(\cong 27\text{meV})$ ，改變高斯係數 $\beta = 0.005$ 、 $\beta = 0.05$ 、 $\beta = 0.5$ ，即高斯位能的標準差分別為 $\sigma = 10(\cong 80\text{nm})$ 、 $\sigma = 3.162(\cong 25\text{nm})$ 和 $\sigma = 1(\cong 8\text{nm})$ ，電導對能量的關係如下圖 2.8。

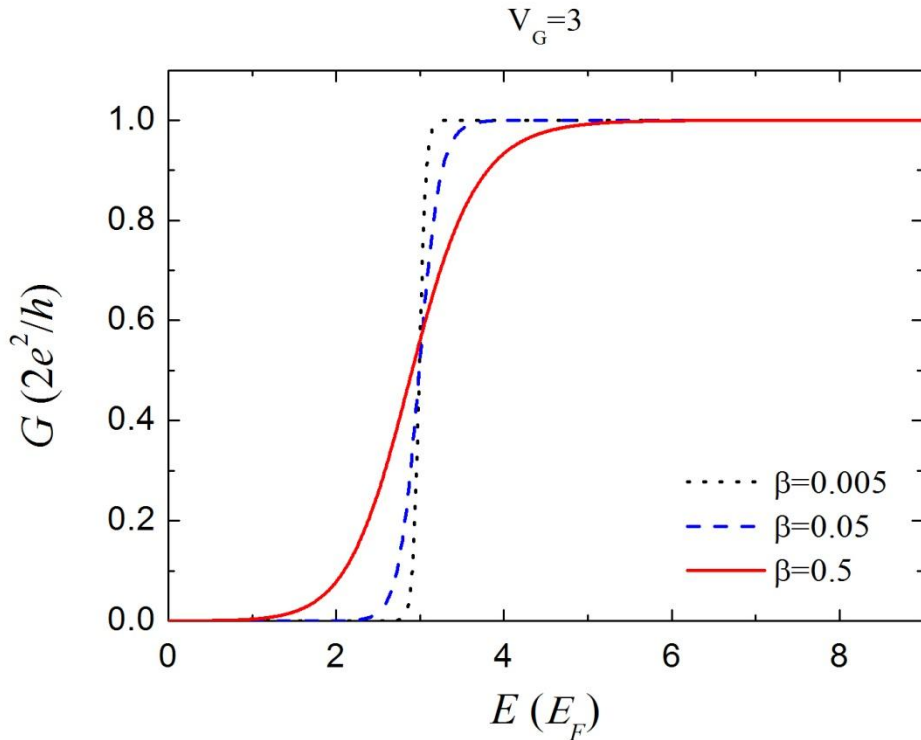


圖 2.8 此為一個高斯位能在強度 $V_G=3$ 時，改變不同 β 的電導。

由此可知，當位能分佈範圍越大時，也就是高斯位能的標準差越大時（如同黑色點線），電導的分佈也越接近古典極限，此時量子力學的穿隧效應較不明顯。但當位能分佈越狹窄時，也就是高斯位能的標準差越小時（如同紅色點線），即使電子能量比高斯位能強度 V_G 還小，電子還是有機會穿隧而對電導產生貢獻，此時量子力學的穿隧效應較顯著。

瞭解一個高斯位能的穿透情形後，我們接著模擬二個高斯位能時所產生的穿透情形。

我們考慮兩個高斯位能為 $V(x) = V_{G1}e^{-\beta_1(x-x_{G1})^2} + V_{G2}e^{-\beta_2(x-x_{G2})^2}$ 如圖

2.9

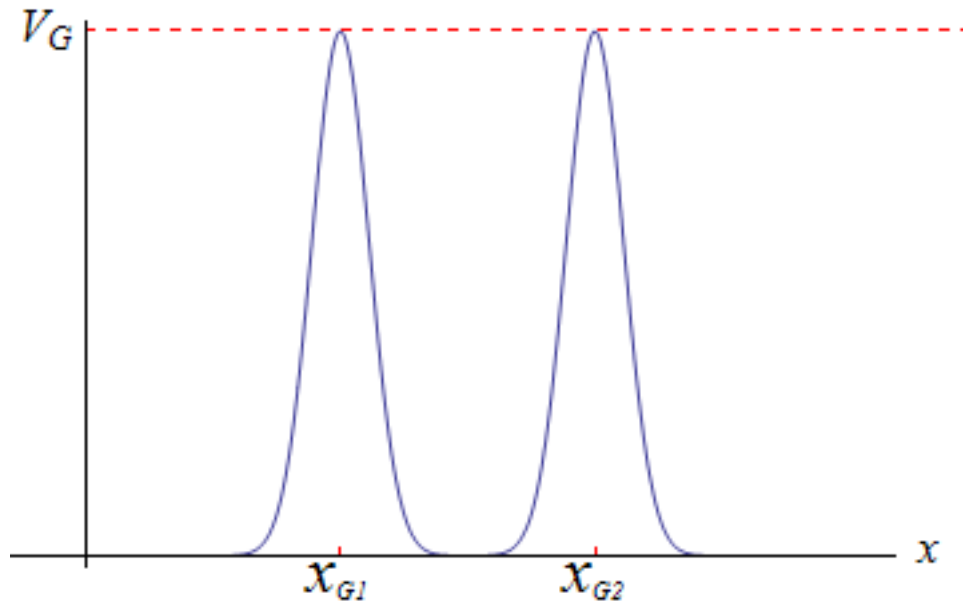


圖 2.9 兩個高斯位能示意圖。藍色曲線代表兩個高斯位能 $V(x)$ 。 V_G 為高斯位能強度。 x_{G1} 和 x_{G2} 分別為第一個和第二個高斯分佈的位置。

其中 V_G 為高斯位能強度， $\sigma = \frac{1}{\sqrt{2\beta}}$ 為高斯位能的標準差。藉由調整高斯位能的標準差和強度，討論不同位能分佈對電子穿隧效應造成的影響。

討論兩個高斯散射位能的高斯係數和高斯強度相同，即 $\beta_1 = \beta_2 = \beta = 0.05$ 和 $V_{G1} = V_{G2} = V_G$ ，首先固定即高斯位能的標準差 $\sigma = 3.16 (\cong 25.3 \text{nm})$ ，改變高斯位能強度為 $V_G = 1 (\cong 9 \text{meV})$ 、 $V_G = 2 (\cong 18 \text{meV})$ 、 $V_G = 3 (\cong 27 \text{meV})$ ，電導對能量的關係如下圖 2.10

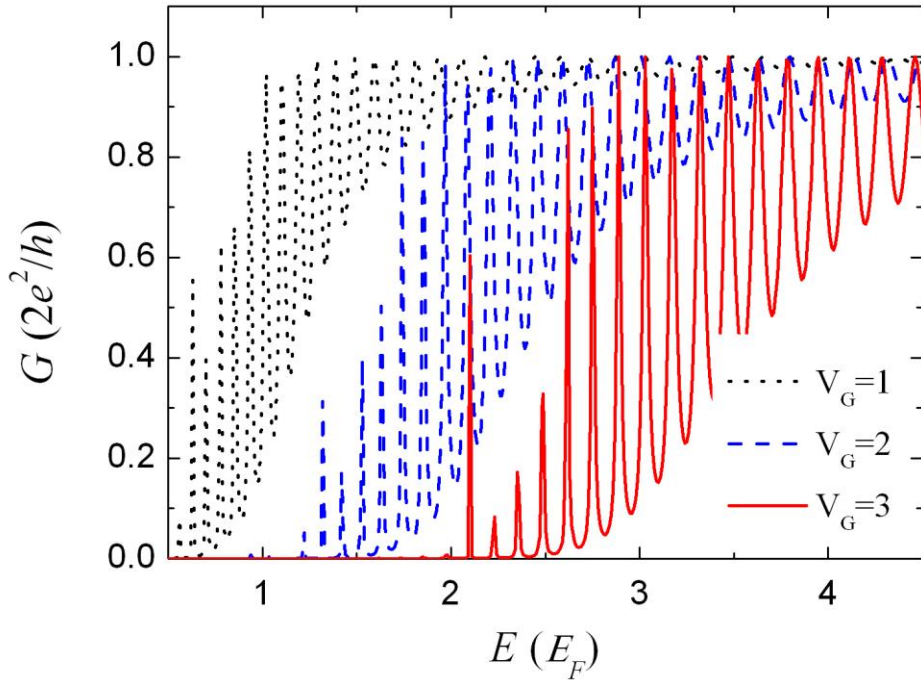


圖 2.10 此為一個高斯位能在 $\beta = 0.05$ 時，改變不同高斯位能強度 V_G 的電導。

從圖 2.10 的結果可以看出明顯的共振穿隧效應。在高斯位能強度 $V_G = 1$ 時，比入射電子能量小的共振峰有 6 個。高斯位能強度 $V_G = 2$ 時，比入射電子能量小的共振峰有 7 個。高斯位能強度 $V_G = 3$ 時，比入射電子能量小的共振峰有 7 個。高斯強度越大，共振態間隔越大，因此推測兩個高斯的準束縛態量化程度也越大。

2.2 準一維系統

2.1 節介紹了處理一維系統傳輸問題時的一些方法。在之後的章節裡，我們將系統擴展到準一維。不過這裡 2.2 節要先談論的是在傳遞方向有均勻侷限位能分佈的準一維系統。

2.2.1 準一維量子通道

圖(2.2.1)為我們系統的俯視圖，其中藉由分離閘極(split-gate)產生一個準一維的通道。由於是二維系統，若只討論中間準一維通道的部分，則系統如圖 2.11 的紅色部分。

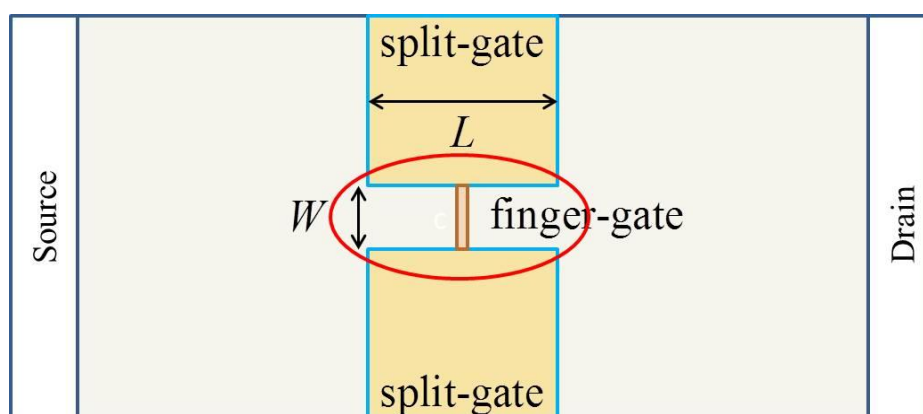


圖 2.11 簡單的準一維通道實驗系統圖。紅色圓圈為準一維彈道傳輸的區域。通道寬度為 W 。通道中間上方加入指狀閘極。

這裡考慮的散射位能我們假設為一個 delta 函數，在實際上大多以指狀閘極 (finger gate) 實現。畫出準一維系統的示意圖，並標示出侷域

位能和 delta 散射位能的相對座標位置如圖 2.12。

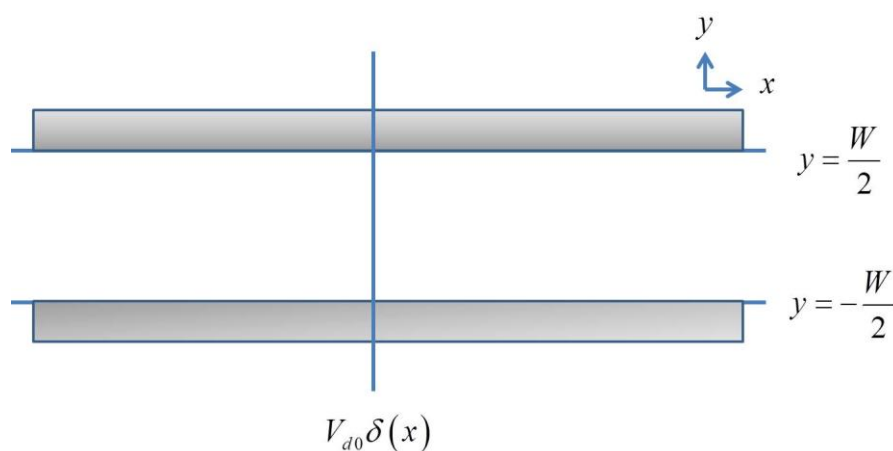


圖 2.12 簡化後的準一維通道系統圖。 V_{d0} 為 delta 散射位能強度。通道的座標位置如圖所示。

系統的漢米爾頓 (Hamiltonian) 為

$$H = -\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + V_c(y) + V(x)$$

其中 $V_c(y)$ 是侷域位能，在這裡我們選擇的侷域位能為無窮深硬牆 (hardwall) 形式，所以為

$$V_c(x, y) = \begin{cases} 0, & |y| < \frac{W}{2} \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases}$$

這裡的 W 為通道寬度。而非時變的 delta 位能則為

$$V(x) = V_{d0} \delta(x)$$

非時變的 Schrödinger 方程式為

$$\left[-\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + V_c(y) + V(x)\right]\Psi(x, y) = E\Psi(x, y) \quad (2.18)$$

以下將利用分離變數法解波函數，並配合邊界條件得知穿透係數或電導。

假設波函數可分解成 x -dependent 和 y -dependent 的兩函數相乘

$$\Psi(x, y) = \psi(x)\varphi(y)$$

代入(2.18)式得到

$$-\left[\psi''(x)\varphi(y) + \varphi''(y)\psi(x)\right] + V_c(y)\psi(x)\varphi(y) + V_{d0}\delta(x)\psi(x)\varphi(y) = E\psi(x)\varphi(y)$$

將等式左右兩邊同除以 $\psi(x)\varphi(y)$

$$-\frac{\psi''(x)}{\psi(x)} - \frac{\varphi''(y)}{\varphi(y)} + V_c(y) + V_{d0}\delta(x) = E$$

等式右邊的常數分解成 $(E - \varepsilon_n) + \varepsilon_n$ ，則可分離成 x 和 y 獨立的兩個

微分方程如下

$$-\frac{\partial^2 \varphi(y)}{\partial y^2} = \varepsilon_n \varphi(y)$$

$$-\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V_{d0} \delta(x) \psi(x) = (E - \varepsilon_n) \psi(x) = E_n \psi(x)$$

因為侷域位能在 x 方向為均勻分佈，因此電子通過非時變的散射位能時不會有子帶之間的躍遷 (inter-subband transition)。第 n 個子帶對應到的 x 方向波函數為

$$\psi_n(x) = \begin{cases} e^{ik_n x} + r_n e^{-ik_n x}, & x < 0 \\ t_n e^{ik_n x}, & x > 0 \end{cases}$$

其中波向量為 $k_n = \sqrt{E - \varepsilon_n}$ 。

在邊界 $x=0$ 的波函數匹配條件為：

邊界條件 1： $\psi_n(x)$ 在 $x=0$ 連續

$$1 + r_n = t_n$$

邊界條件 2： $\frac{\partial}{\partial x} \psi_l(x, y)$ 在 $x=0$ 不連續

$$-ik_n t_n - ik_n (1 - r_n) + V_{d0} t_n = 0$$

參考 2.1.1 節解邊界條件的方法得到 r_n 和 t_n 為

$$t_n = \frac{1}{(1 + \frac{iV_{d0}}{2k_n})}$$

$$r_n = \frac{-\frac{iV_{d0}}{2k_n}}{(1 + \frac{iV_{d0}}{2k_n})}$$

將波向量代入，並求得穿透係數和反射係數為

$$T_n = |t_n|^2 = \frac{1}{1 + \frac{V_{d0}^2}{4(E - \varepsilon_n)}}$$

$$R_n = |r_n|^2 = \frac{\frac{V_{d0}^2}{4(E - \varepsilon_n)}}{1 + \frac{V_{d0}^2}{4(E - \varepsilon_n)}}$$

由 Landauer formula 得知電導為

$$G(E) = \sum_n T_n(E) = \sum_n \frac{1}{1 + \frac{V_{d0}^2}{4(E - \varepsilon_n)}}$$

從均勻侷限位能分佈的準一維系統中，我們知到受到侷限位能的影響，電子在通道中傳輸時將選擇特定一子帶。換句話說，電子將有數個一維通道可供傳輸時選擇，因此電導必需考慮所有子帶通道的總和。

圖 2.13 為固定通道寬度 $W = 10 (\cong 80\text{nm})$ 時，不同 δ 位能強度所對應的電導。其中 ε_1 表示準一維通道中最低子帶的能量。當 δ 散射位能越大時，電導越不容易達到理想的階梯狀分佈。又因為這裡我們考慮的侷域位能為硬牆模型，因此前兩個子帶的位置分別落在 $1\varepsilon_1$ 和 $4\varepsilon_1$ 。

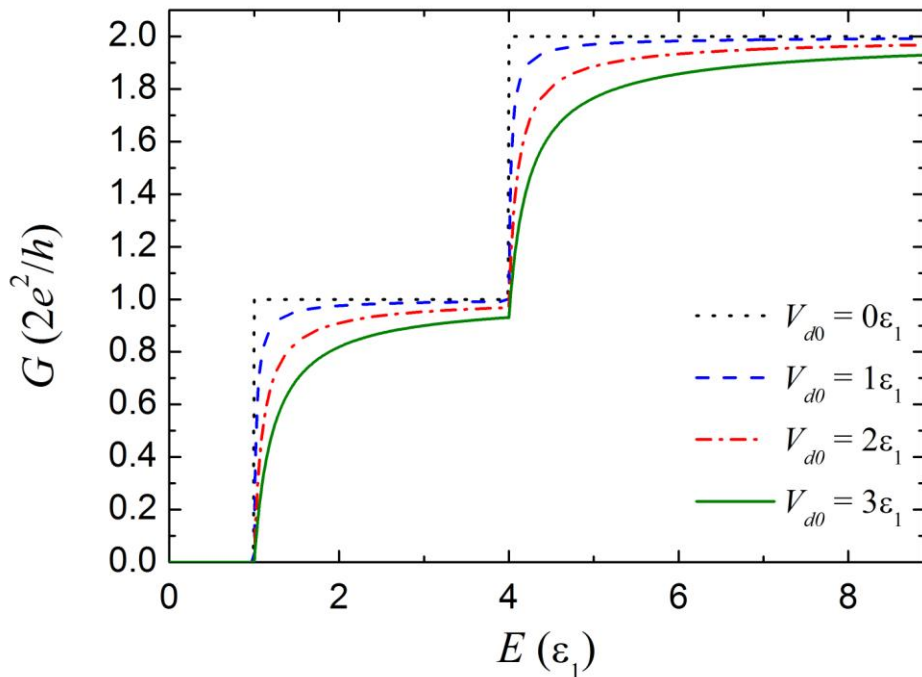


圖 2.13 delta 位能強度為 $V_{d0} = 0\epsilon_1$ 、 $V_{d0} = 1\epsilon_1$ 、 $V_{d0} = 2\epsilon_1$ 和 $V_{d0} = 3\epsilon_1$ 時，電導對入射電子能量作圖。

2.3 溫度與偏壓效應

在之前的兩個小節討論一維和準一維系統的量子傳輸理論時，我們都簡化成在零溫度且極小偏壓的情況下做探討，此時電子能量窗口 (energy window) 限制在費米能量附近的極小區間，換句話說從電子庫進入量子元件時的電子能量剛好等於費米能量。但在一般的情形下，有限溫度和偏壓時的電子傳輸必需考慮一個有限的能量窗口範圍 [21,22]。除此之外，考慮偏壓時，電子的傳輸還會受到背向散射(back scattering)的影響。在 2.3 節裡，我們將對有限溫度與偏壓效應做詳細的討論。

2.3.1 溫度與偏壓的一般理論

首先我們從計算一維系統的電流出發。考慮增加一個正偏壓在一維元件右端，如圖 2.14，

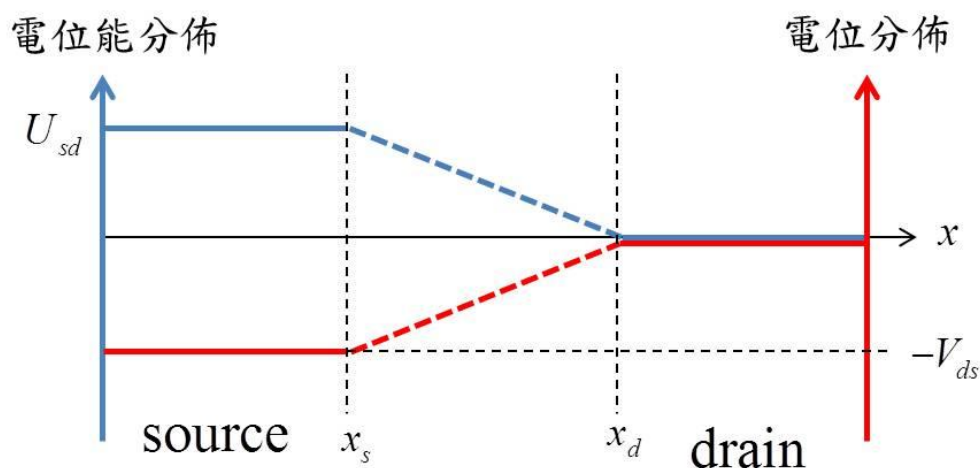


圖 2.14 此為簡單的一維系統外加偏壓示意圖。藍色線表示電位能分佈，紅色線表示電位分佈。左端代表源極，右端代表汲極。 $U_{sd} = U_s - U_d$ 為源極與汲極的電位能差。 $V_{ds} = V_d - V_s$ 為汲極與源極的電位差。

則電子從左到右貢獻的電子流為

$$I_{e,l \rightarrow r} = \frac{2e}{h} \int_0^\infty f_l(E, \mu_l) \text{Tran}_{l \rightarrow r}(E, U_{sd}) dE \quad (2.19)$$

其中 $e = 1.602 \times 10^{-19}$ 代表一個電子的電荷量，源極與汲極的電位能差 $U_{sd} = eV_{ds}$ ， V_{ds} 為汲極與源極的電位差，而能量為 E 的入射電子在 V_{ds} 的偏壓下，其穿透係數為 $\text{Tran}_{l \rightarrow r}(E, U_{sd})$ 。(2.19) 式中常數 2 是考慮了自旋向上 (spin up) 和自旋向下 (spin down) 的兩個自旋簡併態的總和。源極端的電子庫 (electron reservoir) 滿足費米-狄拉克分佈 (Fermi-Dirac distribution)

$$f_l(E, \mu_l) = \frac{1}{\left(e^{(E-\mu_l)/k_B T} + 1\right)} \quad (2.20)$$

其中 $\mu_l = \mu + U_s$ 為源極端在外加偏壓下的費米能量。即在源極費米能量為 μ_l 時，能量 E 的態被電子占據的機率分佈。

同理，電子從右到左所貢獻的電子流為

$$I_{e,r \rightarrow l} = -\frac{2e}{h} \int_0^\infty f_r(E, \mu_r) \text{Tran}_{r \rightarrow l}(E, U_{sd}) dE$$

其中汲極端的電子庫滿足費米-狄拉克分佈

$$f_r(E, \mu_r) = \frac{1}{\left(e^{(E-\mu_r)/k_B T} + 1\right)} \quad (2.21)$$

綜合考慮向左和向右傳輸的電子流 $I_{e,r \rightarrow l}$ 和 $I_{e,l \rightarrow r}$ 後，則總電子流 I_e 可寫成

$$\begin{aligned} I_e(\mu, T, U_{sd}) &= I_{e,l \rightarrow r} + I_{e,r \rightarrow l} \\ &= \frac{2e}{h} \int_0^\infty \left[f_l(E, \mu_l) \text{Tran}_{l \rightarrow r}(E, U_{sd}) - f_r(E, \mu_r) \text{Tran}_{r \rightarrow l}(E, U_{sd}) \right] dE \end{aligned}$$

上式代表一維系統下考慮有限溫度和有限偏壓的電子流。由於時間反轉的對稱性 (time-reversal symmetry) 和電流守恆，不管電子的流向為何，穿透係數皆相同，即 $\text{Tran}_{l \rightarrow r}(E, U_{sd}) = \text{Tran}_{r \rightarrow l}(E, U_{sd}) = \text{Tran}(E, U_{sd})$ 。總電子流可簡化成

$$I_e(\mu, T, U_{sd}) = I_{e,l \rightarrow r} + I_{e,r \rightarrow l} = \frac{2e}{h} \int_0^\infty \left[f_l(E, \mu_l) - f_r(E, \mu_r) \right] \text{Tran}(E, U_{sd}) dE$$

在總電子流的公式中，和溫度有關的因素為兩個電極(源極和汲極)的費米-狄拉克分佈，即(2.20)式和(2.21)式。然而和偏壓有關的因素除了兩個電極的費米能量之外還有因偏壓修正後的穿透係數

$Tran(E, U_{sd})$ 。在有限偏壓的情形下，電流公式中有兩項需要討論：1. 費米能量與偏壓位能分佈、2. 穿透係數。

在考慮有限偏壓時，定義汲極端導電帶的底端 (conduction band bottom) 為 U_d ，源極端導電帶的底端為 U_s ，有限偏壓大小為 U_{sd} ，入射電子能量為 E_{inc} 。其中入射電子能量 E_{inc} 為相對於源極端導電帶的底端 U_s 的電子能量，即 $E_{inc} = E - U_s$ 。

1. 費米能量與偏壓位能分佈

源極端費米能量在有限偏壓的情形下會受到修正，這裡我們將費米能量的變化寫成如下形式

$$\mu_l = \mu + U_s \quad \mu_r = \mu + U_d$$

其中 U_s (U_d) 為源極(汲極)導電帶的底端。而源極與汲極兩端的電位能差 U_{sd} 和電位差 V_{ds} 的關係為

$$U_{sd} = U_s - U_d = eV_{ds}$$

示意如圖 2.15

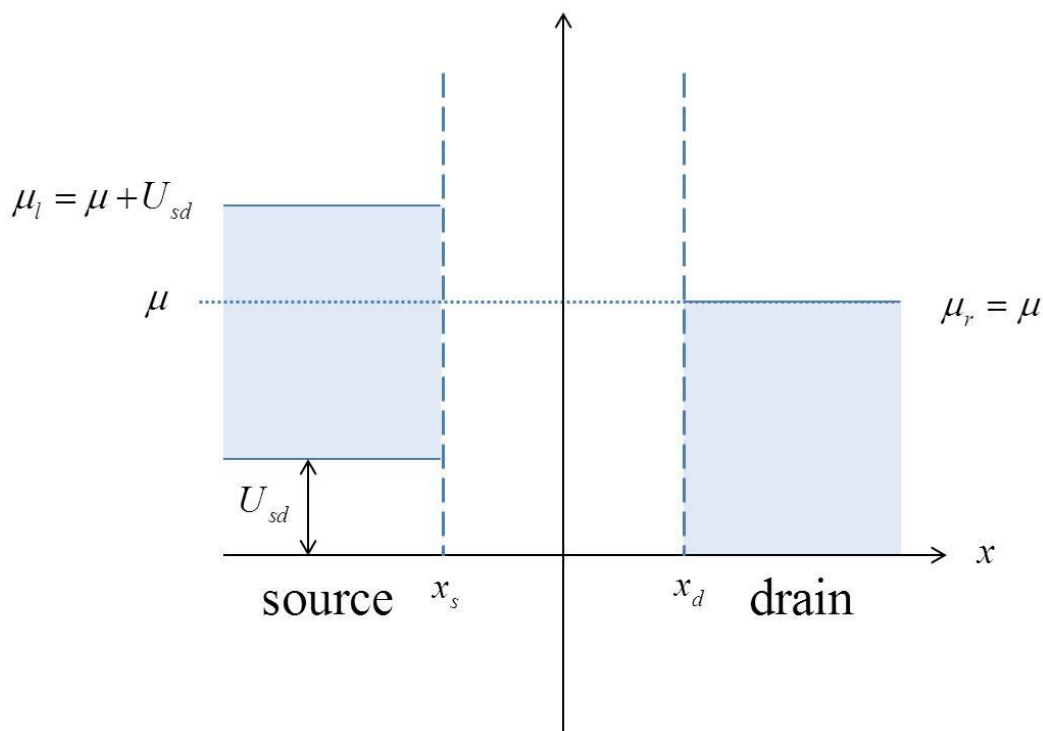


圖 2.15 源極端和汲極端的費米能量示意圖。源極端費米能量為 μ_l 。汲極端的費米能量為 μ_r 。外加偏壓能量大小為 U_{sd} 。

因為電位差為相對量，所以在這篇論文裡假設汲極端的導電帶的底端

$U_d = 0$ ，則源極端導電帶的底端 U_s 提升了 U_{sd} ，即 $U_s = U_{sd}$ ，如圖

2.15。，則源極端和汲極端的費米能量為

$$\mu_l = \mu + U_{sd} ; \mu_r = \mu$$

圖 2.15 顯示了兩個電極的費米能量。

在瞭解偏壓對電子庫裡的費米能量變化後，我們進一步討論在量子元件中受到偏壓影響後的位能分佈情形。為了讓一維有限偏壓的理論具有普遍的適用性，並在未來用例如 Poisson 方程式(參考附錄 C) 計算出位能的分佈情形後能適用 [30]，這裡我們不限制偏壓位能 $U_{bias}(x, U_{sd})$ 的形式。在目前的工作裡，先假設偏壓位能 $U_{bias}(x, U_{sd})$ 已

知，則我們可用一維轉移矩陣法計算考慮偏壓位能 $U_{bias}(x, U_{sd})$ 的穿透係數 $Tran(E, U_{sd})$ 。這個部分的詳細理論將在 2.3.5 小節做介紹。圖 2.16 為假設偏壓位能為線性分佈的情況下，源極端和汲極端以及量子元件中的偏壓位能分佈關係。其中 x_s 為源極和量子元件的邊界， x_d 為汲極和量子元件的邊界。

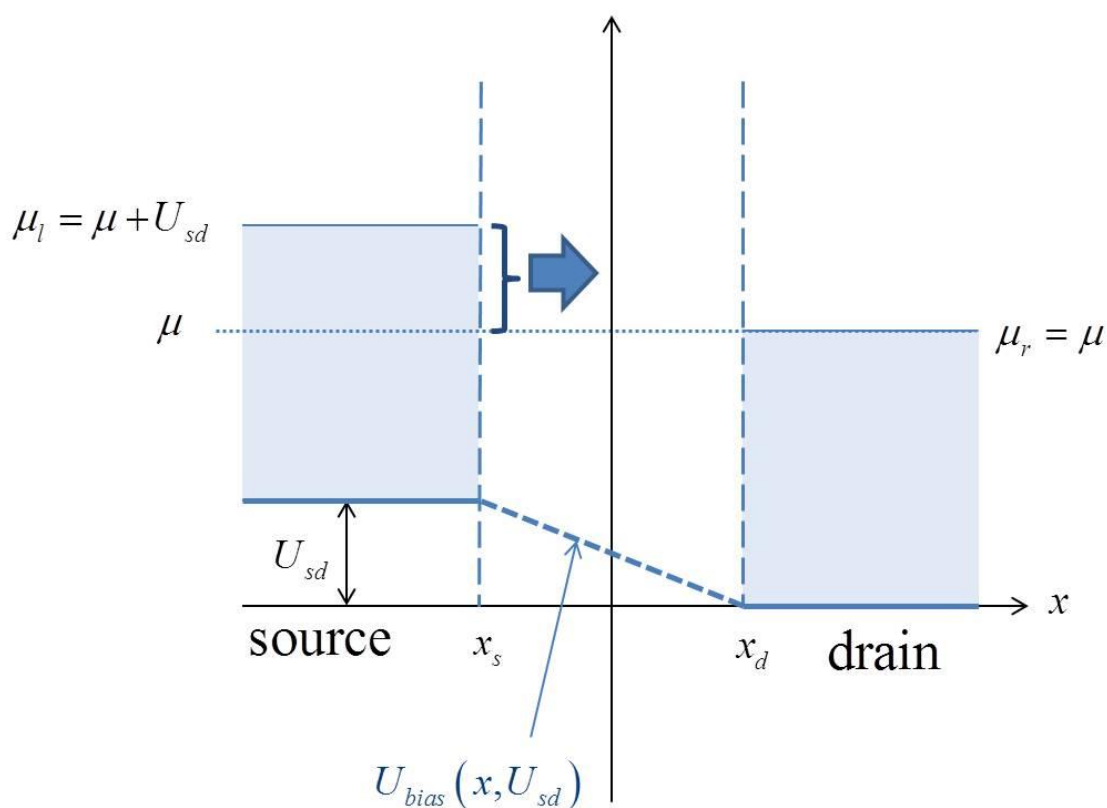


圖 2.16 源極端和汲極端的費米能量以及偏壓位能分佈的示意圖。源極端費米能量為 μ_l 。汲極端的費米能量為 μ_r 。外加偏壓能量大小為 U_{sd} 。 $U_{bias}(x, U_{sd})$ 為偏壓位能在量子元件中的分佈情形。

2. 穿透係數

考慮一維系統時，在有限偏壓的情形下，電子通過量子元件時，穿隧效應除了考慮系統本身存在的散射位能 $U_{sc}(x)$ 之外，還要考慮因

偏壓位能 $U_{bias}(x, U_{sd})$ 造成的影響，所以穿透係數 $Tran(E, U_{sd})$ 為入射電子能量 E 和偏壓位能 U_{sd} 的函數。定義在量子元件中，總位能 $U(x, U_{sd})$ 為散射位能 $U_{sc}(x)$ 和偏壓位能 $U_{bias}(x, U_{sd})$ 的總和，則其關係為 $U(x, U_{sd}) = U_{sc}(x) + U_{bias}(x, U_{sd})$ 。也就是說電子的穿透係數 $Tran(E, U_{sd})$ 和總位能 $U(x, U_{sd})$ 的分佈有關。而其中受外加偏壓影響的為偏壓位能 $U_{bias}(x, U_{sd})$ 。

因為這裡的總位能 $U(x, U_{sd})$ 適用於任意情形的散射位能 $U_{sc}(x)$ 和偏壓位能 $U_{bias}(x, U_{sd})$ ，所以在這個工作裡，我們試著利用 2.1.2 小節介紹過的轉移矩陣法計算此位能的穿透係數。但我們發現有限偏壓位能在源極端 $x = x_S$ 為一步階函數分佈，而 2.1.2 小節的轉移矩陣法並不適用於位能在無窮遠處有值的情形，因此我們在 2.3.5 小節修正了 2.1.2 小節的轉移矩陣法，並使其適用於計算有限偏壓的穿透係數。一維系統考慮一步階函數在位能最左端的詳細理論請參考「2.3.5 源極和汲極的偏壓效應」。接下來的三個小節，我們對不同溫度或偏壓的極限條件做討論。

2.3.2 有限溫度與極小偏壓

在有限溫度和極小偏壓下，電流積分式中，兩端費米-狄拉克分佈的差在偏壓很小時，也就是兩端費米能量為 $\mu = \mu_l = \mu_r$ 時，可將其對

費米能量用泰勒式展開後，取一次項做近似為[30]

$$f_l(E, \mu_l) - f_r(E, \mu_r) = -U_{sd} \frac{\partial f(E, \mu)}{\partial E}$$

接下來，我們討論穿透係數 $Tran(E, U_{sd})$ 的部分。由 2.3.1 小節可知，當 $U_{ds} \rightarrow 0$ 時，偏壓位能 $U_{bias}(x, U_{sd}) = 0$ ，而總位能 $U(x, U_{sd}) = U_{sc}(x)$ 和偏壓無關。因此穿透係數可改寫成只和入射電子能量 E 有關的函數 $Tran(E)$ 。

所以低偏壓下的總電子流為

$$I_e(\mu, T, U_{ds} \rightarrow 0) = \frac{2eU_{sd}}{h} \int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f(E, \mu)}{\partial E} \right) Tran(E) dE$$

將電流對偏壓做一次微分，得到有限溫度且偏壓趨近於零的電導為

$$G(\mu, T, V_{ds} \rightarrow 0) = \frac{I(T, V_{ds} \rightarrow 0)}{V_{ds}} = \frac{2e^2}{h} \int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f(E, \mu)}{\partial E} \right) Tran(E) dE$$

2.3.3 零溫度與有限偏壓

另一種極限為考慮零溫，但有限偏壓時的情形。由於在零溫的極限下，費米狄拉克為 $f(E, \mu) = 1 - \theta(E - \mu)$ ，則電流積分式中的費米狄拉克分佈的差為

$$f(E, \mu_l) - f(E, \mu_r) = \theta(E - \mu_r) - \theta(E - \mu_l)$$

零溫且有限偏壓時的電子流為

$$I_e(\mu, T \rightarrow 0, U_{sd}) = \frac{2e}{h} \int_0^{\infty} [\theta(E - \mu_r) - \theta(E - \mu_l)] Tran(E, U_{sd}) dE$$

這裡假設汲極端導電帶不改變而源極端導電帶的底端上升 U_{sd} ，即 $\mu_l = \mu + U_{sd}$ 且 $\mu_r = \mu$ 。此時對電流有貢獻的入射電子能量範圍需考慮偏壓位能 U_{sd} 和汲極端費米能量 μ 的相對大小。

若偏壓位能 $U_{sd} < \mu$ ，如圖 2.17

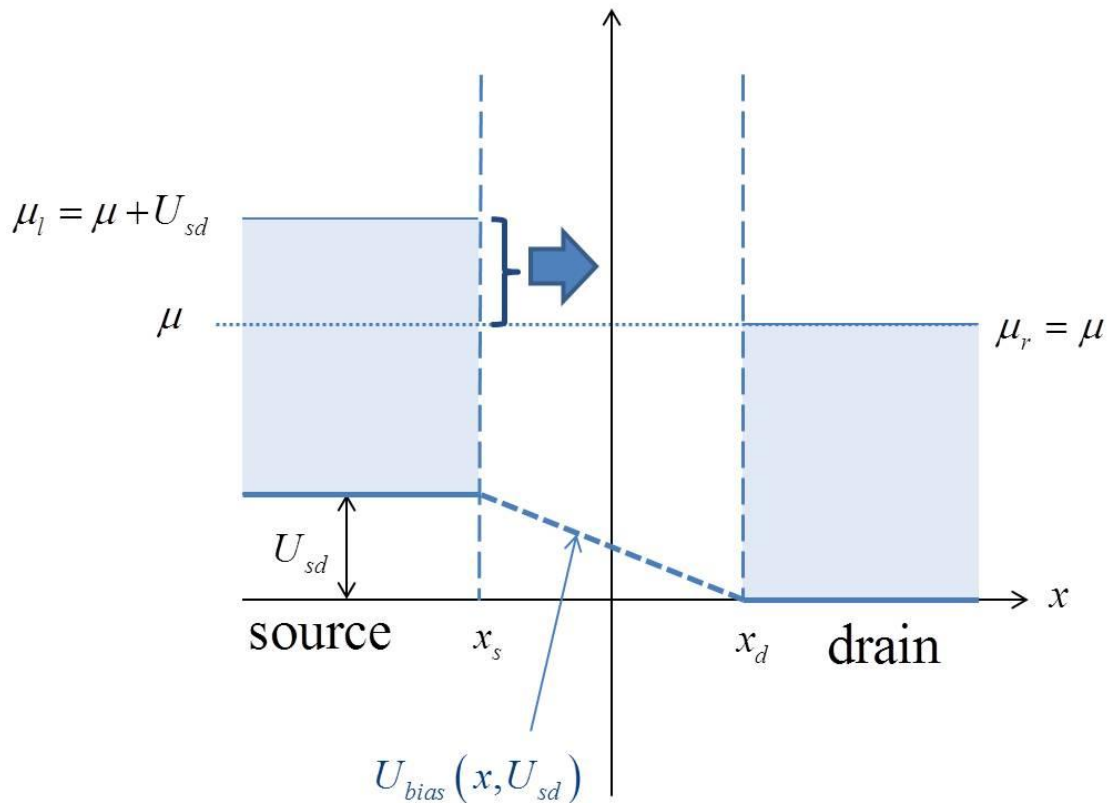


圖 2.17 偏壓位能 $U_{sd} < \mu$ 時，源極端和汲極端的費米能量以及偏壓位能分佈的示意圖。源極端費米能量為 $\mu_l = \mu + U_{sd}$ 。汲極端的費米能量為 $\mu_r = \mu$ 。外加偏壓能量大小為 $U_{sd} = eV_{ds}$ 。 $U_{bias}(x, V_{sd})$ 為偏壓位能在量子元件中的分佈情形。箭頭與括號為對電流有貢獻的能量範圍。

此偏壓與費米能量的關係下，對電流有貢獻的電子能量範圍為 μ 至 $\mu + U_{sd}$ 。則電子流為

$$I_e(\mu, T \rightarrow 0, U_{sd}) = \frac{2e}{h} \int_{\mu}^{\mu + U_{sd}} \text{Tran}(E, U_{sd}) dE$$

若偏壓位能 $U_{sd} > \mu$ ，如圖 2.18

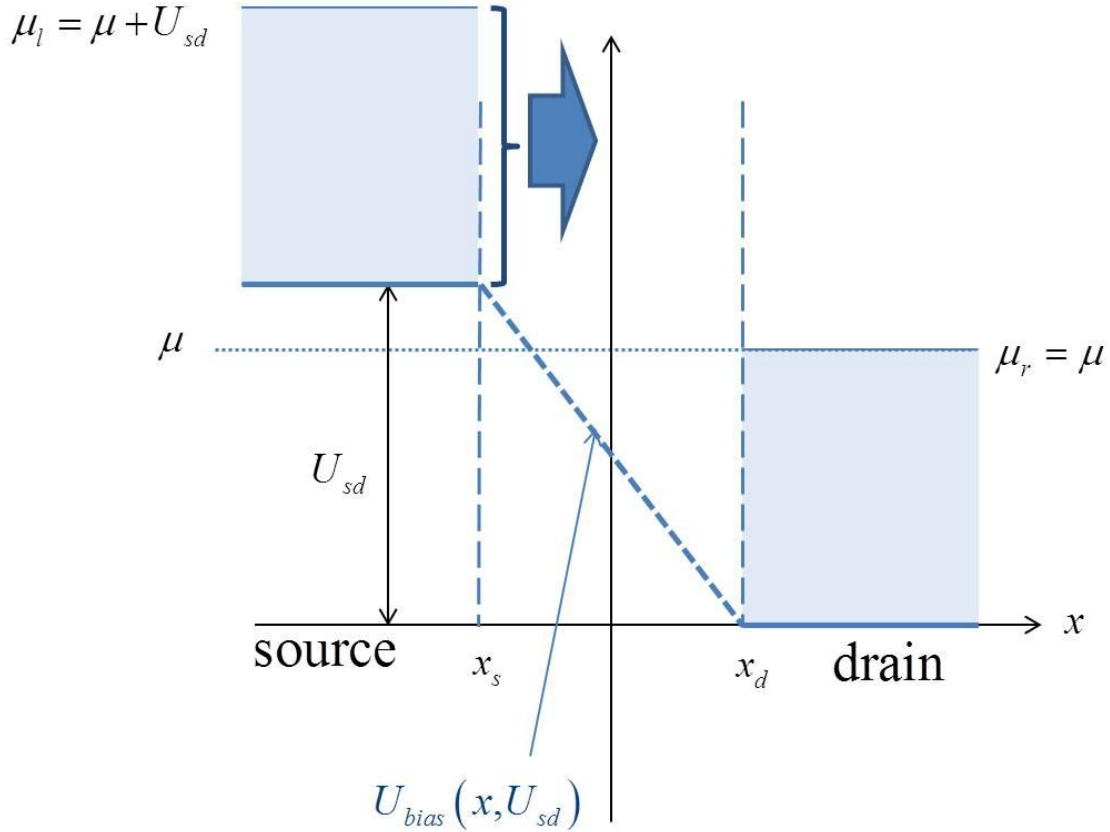


圖 2.18 偏壓位能 $U_{sd} > \mu$ 時，源極端和汲極端的費米能量以及偏壓位能分佈的示意圖。源極端費米能量為 $\mu_l = \mu + U_{sd}$ 。汲極端的費米能量為 $\mu_r = \mu$ 。外加偏壓能量大小為 $U_{sd} = eV_{ds}$ 。 $U_{bias}(x, U_{sd})$ 為偏壓位能在量子元件中的分佈情形。箭頭與括號為對電流有貢獻的能量範圍。

此偏壓與費米能量的關係下，對電流有貢獻的入射電子能量範圍為

U_{sd} 至 $\mu + U_{sd}$ 。則電流為

$$I_e(\mu, T \rightarrow 0, U_{sd}) = \frac{2e}{h} \int_{U_{sd}}^{\mu + U_{sd}} \text{Tran}(E, U_{sd}) dE$$

綜合以上結果，得到零溫度且有限偏壓的電子流通式為

$$I_e(\mu, T \rightarrow 0, U_{sd}) = \frac{2e}{h} \int_{\max(\mu, U_{sd})}^{\mu + U_{sd}} \text{Tran}(E, U_{sd}) dE$$

其中 $\max(\mu, U_{sd})$ 為括號中較大者。將電流對偏壓做一次微分，得到有

限溫度且偏壓趨近於零的微分電導(differential conductance) 為

$$G(\mu, T \rightarrow 0, V_{ds}) = \frac{\partial I(T \rightarrow 0, V_{ds})}{\partial V_{ds}} = \frac{2e}{h} \frac{\partial}{\partial V_{ds}} \left[\int_{\max(\mu, U_{sd})}^{\mu + U_{sd}} T(E, V_{ds}) dE \right]$$

2.3.4 零溫度與極小偏壓

最後討論的是零溫度且極小偏壓時。觀察(2.3.13)式明顯得知當為低偏壓時，則在電導的計算中，穿透係數的部分就限制在只考慮散射位能 $U_{sc}(x)$ 的情形，也就是 $Tran(E)$ 。且此時的費米能量分別為 $\mu_l = \mu$ 和 $\mu_r = \mu - \delta\mu$ 。則零溫且極小偏壓時的電子流為

$$I_e(\mu, T \rightarrow 0, U_{sd} \rightarrow 0) = \frac{2eU_{sd}}{h} Tran(\mu)$$

則零溫且低偏壓時的電導為

$$G(\mu, T \rightarrow 0, U_{sd} \rightarrow 0) = \frac{2eU_{sd}}{hV_{ds}} \int_{\mu - \delta\mu}^{\mu} Tran(E) dE = \frac{2e^2}{h} Tran(\mu)$$

此即為 Landauer 理論

2.3.5 源極和汲極的偏壓效應

為了使 2.1.3 小節的 delta 轉移矩陣法適用於有限偏壓的問題，我們修正 2.1.3 小節的 delta 轉移矩陣法無法計算位能初始分佈不為零，或在源極與量子元件的界面有一個步階位能 (step function) 的情形。首先再次寫下 delta 轉移矩陣法的總轉移矩陣為

$$\mathbf{T}' = \mathbf{T}_N \mathbf{T}_{N-1} \cdots \mathbf{T}_j \cdots \mathbf{T}_1$$

每個 delta 轉移矩陣 \mathbf{T}_j 為

$$\mathbf{T}_j = \begin{pmatrix} 1 \\ -2ik \end{pmatrix} \begin{bmatrix} -V_j - 2ik & -V_j e^{-2ikx_j} \\ V_j e^{2ikx_j} & V_j - 2ik \end{bmatrix}$$

其中 $k = (E)^{1/2}$ 為自由電子能量所對應的波向量。

考慮有限偏壓時，即 $U_s = U_{sd}$ ， $U_d = 0$ ，在源極端的偏壓位能為一有限值，這裡我們用一個步階函數來描述，如圖 2.19。

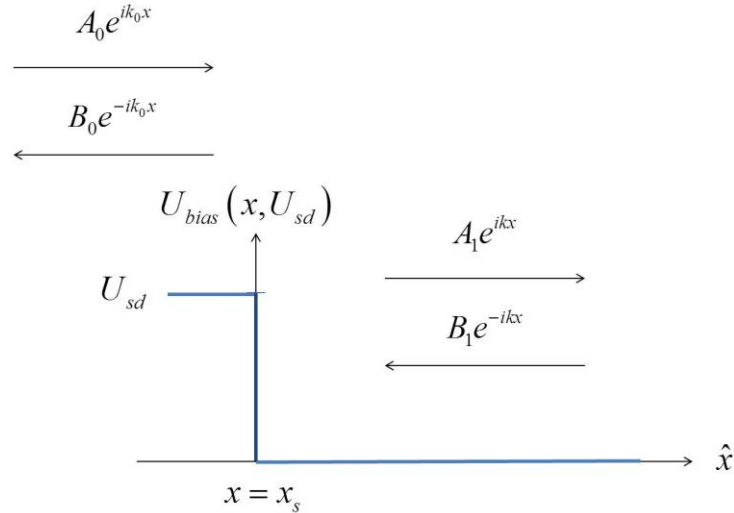


圖 2.19 步階函數在源極端 $x=x_s$ 的變化。黑色箭頭代表源極端兩旁的波函數。 A_0 、 A_1 為向右行進的平面波振幅。 B_0 、 B_1 為向左行進的平面波振幅。 U_{sd} 為偏壓位能大小。

因此總轉移矩陣必需多出一項步階函數的轉移矩陣 \mathbf{T}_0 ，如下式

$$\mathbf{T}_0 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{k_0}{k}\right) e^{-i(k-k_0)x_0} & \left(1 - \frac{k_0}{k}\right) e^{-i(k+k_0)x_0} \\ \left(1 - \frac{k_0}{k}\right) e^{i(k+k_0)x_0} & \left(1 + \frac{k_0}{k}\right) e^{i(k-k_0)x_0} \end{bmatrix}$$

其中 $k_0 = (E - U_{sd})^{1/2}$ 為源極端電子的波向量。

則總轉移矩陣可寫成

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_N \mathbf{T}_{N-1} \cdots \mathbf{T}_j \cdots \mathbf{T}_1 \mathbf{T}_0$$

藉由總轉移矩陣我們可以求出此一維有限偏壓系統的位能所對應的穿透振幅 (transmission amplitude) 和反射振幅 (reflection amplitude) 為

$$\begin{cases} t = T_{11} + T_{12}r = T_{11} + T_{12}\left(-\frac{T_{21}}{T_{22}}\right) = \frac{(T_{11}T_{22} - T_{12}T_{21})}{T_{22}} = \frac{\det(T)}{T_{22}} \\ r = -\frac{T_{21}}{T_{22}} \end{cases}$$

而穿透係數可以寫成 $|t|^2$ ，或

$$|t|^2 = \left| \frac{\det(T)}{T_{22}} \right|^2$$

我們使用匹配法 (matching method) 求得一個步階函數的轉移矩

陣 \mathbf{T}_0 ，其中波函數和步階位能函數的示意關係如圖 2.20

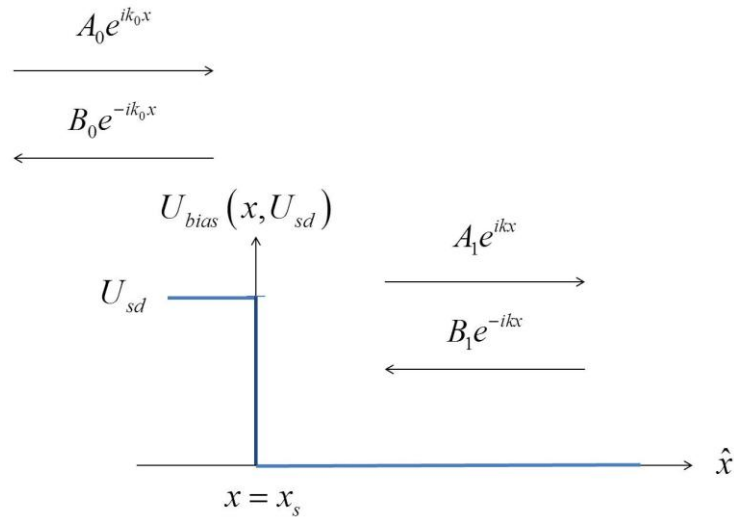


圖 2.20 步階函數在 $x = x_s$ 的變化。黑色箭頭代表源極端兩旁的波函數形式。 A_0 、 A_1 為向右行進的平面波振幅。 B_0 、 B_1 為向左行進的平面波振幅。 U_{sd} 為偏壓大小。

步階偏壓位能 $U_{bias}(x, U_{sd})$ 為

$$U_{bias}(x, U_{sd}) = U_{sd} [1 - \theta(x)]$$

$x < x_0$ 的波函數為

$$\psi_0 = A_0 e^{ik_0 x} + B_0 e^{-ik_0 x}$$

$x > x_0$ 的波函數為

$$\psi_1 = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$$

在邊界上做波函數的匹配：

波函數連續

$$A_1 e^{ikx_0} + B_1 e^{-ikx_0} = A_0 e^{ik_0 x_0} + B_0 e^{-ik_0 x_0}$$

波函數一階導數連續

$$kA_1 e^{ikx_0} - kB_1 e^{-ikx_0} = k_0 A_0 e^{ik_0 x_0} - k_0 B_0 e^{-ik_0 x_0}$$

整理成矩陣形式為

$$\begin{bmatrix} e^{ikx_0} & e^{-ikx_0} \\ e^{ikx_0} & -e^{-ikx_0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ik_0 x_0} & e^{-ik_0 x_0} \\ \frac{k_0}{k} e^{ik_0 x_0} & -\frac{k_0}{k} e^{-ik_0 x_0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix}$$

化簡後得到

$$\begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{k_0}{k}\right) e^{-i(k-k_0)x_0} & \left(1 - \frac{k_0}{k}\right) e^{-i(k+k_0)x_0} \\ \left(1 - \frac{k_0}{k}\right) e^{i(k+k_0)x_0} & \left(1 + \frac{k_0}{k}\right) e^{i(k-k_0)x_0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix}$$

所以 \mathbf{T}_0 為

$$\mathbf{T}_0 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{k_0}{k}\right) e^{-i(k-k_0)x_0} & \left(1 - \frac{k_0}{k}\right) e^{-i(k+k_0)x_0} \\ \left(1 - \frac{k_0}{k}\right) e^{i(k+k_0)x_0} & \left(1 + \frac{k_0}{k}\right) e^{i(k-k_0)x_0} \end{bmatrix}$$

可假設 $A_0 = 1$ 、 $B_0 = r$ 、 $A_1 = t$ 、 $B_1 = 0$ ，則矩陣關係變為

$$\begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} = \mathbf{T}_0 \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix}$$

其中 \mathbf{T}_0 可表示成

$$\mathbf{T}_0 = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix}$$

穿透振幅 t (transmission amplitude) 、反射振幅 r (reflection amplitude)

和轉移矩陣 \mathbf{T}_0 的矩陣元關係為

$$\begin{cases} t = T_{11} + T_{12}r \\ 0 = T_{21} + T_{22}r \end{cases}$$

整理後得到

$$\begin{cases} t = T_{11} + T_{12} \left(-\frac{T_{21}}{T_{22}} \right) = \frac{(T_{11}T_{22} - T_{12}T_{21})}{T_{22}} = \frac{1}{T_{22}} \times \frac{k_0}{k} \\ r = -\frac{T_{21}}{T_{22}} \end{cases}$$

穿透係數

$$Tran(E, U_{sd}) = |t|^2 \times \frac{k}{k_0} = \left| \frac{(T_{11}T_{22} - T_{12}T_{21})}{T_{22}} \right|^2 \times \frac{k}{k_0} = \frac{4|\sqrt{E - U_{sd}}|^2}{\left(\sqrt{E} + \sqrt{E - U_{sd}} \right)^2} \times \sqrt{\frac{E}{E - U_{sd}}}$$

反射係數

$$Refl(E, U_{sd}) = \left| -\frac{T_{21}}{T_{22}} \right|^2 = \left| \frac{(\sqrt{E} - \sqrt{E - U_{sd}})}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - U_{sd}})} \right|^2$$

計算穿透係數和反射係數的總合為

$$Tran(E, U_{sd}) + Refl(E, U_{sd}) = \frac{4|\sqrt{E - U_{sd}}|^2}{\left(\sqrt{E} + \sqrt{E - U_{sd}} \right)^2} \times \sqrt{\frac{E}{E - U_{sd}}} + \left| \frac{(\sqrt{E} - \sqrt{E - U_{sd}})}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - U_{sd}})} \right|^2$$

當電流守恆定律成立且電子能量比源極位能還大時，即 $E > U_{sd}$ ，穿

透係數和反射係數的總合為

$$Tran(E, U_{sd}) + Refl(E, U_{sd}) = \frac{4(E - U_{sd}) \times \sqrt{\frac{E}{E - U_{sd}}} + (\sqrt{E} - \sqrt{E - U_{sd}})^2}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - U_{sd}})^2} = 1$$

此結果代表電流守恆若入射電子能量比源極偏壓位能還小時，即 $E < U_s$ ，因為電子無法傳遞，所以不討論穿透和反射係數。

用解析的方法算出步階函數的穿透係數和反射係數之後，我們用 mathematica 畫出穿透係數和反射係數對能量的關係如圖 2.21

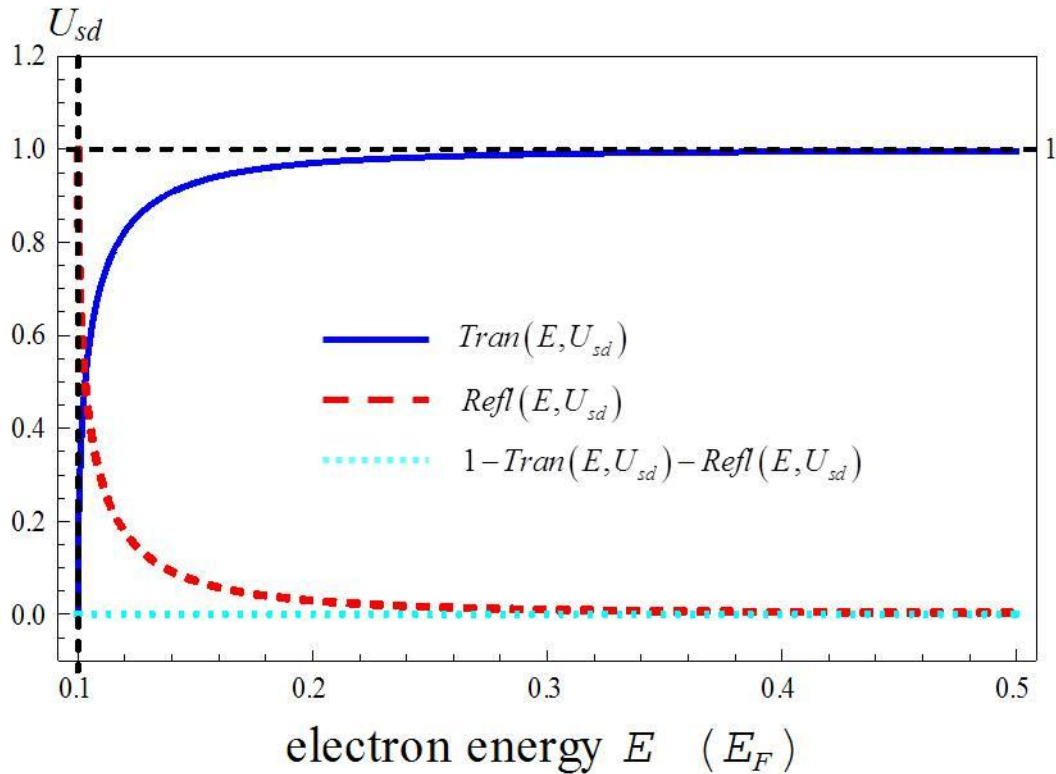


圖 2.21 這是用 mathematica 程式跑出來的一個步階函數穿透和反射的情形。紅色虛線代表反射係數、藍色實線代表透射係數、青色點線是為了確認電流守恆。

在圖 2.21 中，我們假設電位差 $V_{ds} = 0.9(\text{mV})$ ，則對應的偏壓位能 $U_{sd} = 0.1$ 。

單位換算：

$$V_{ds} = 0.9\text{mV}; U_{sd} = 0.9\text{meV}; U_s = 0.1 \text{ (以GaAs的} E_F \text{當單位)}$$

接下來我們討論同樣的偏壓情形，以 Fortran 語言做計算的結果如圖

2.22

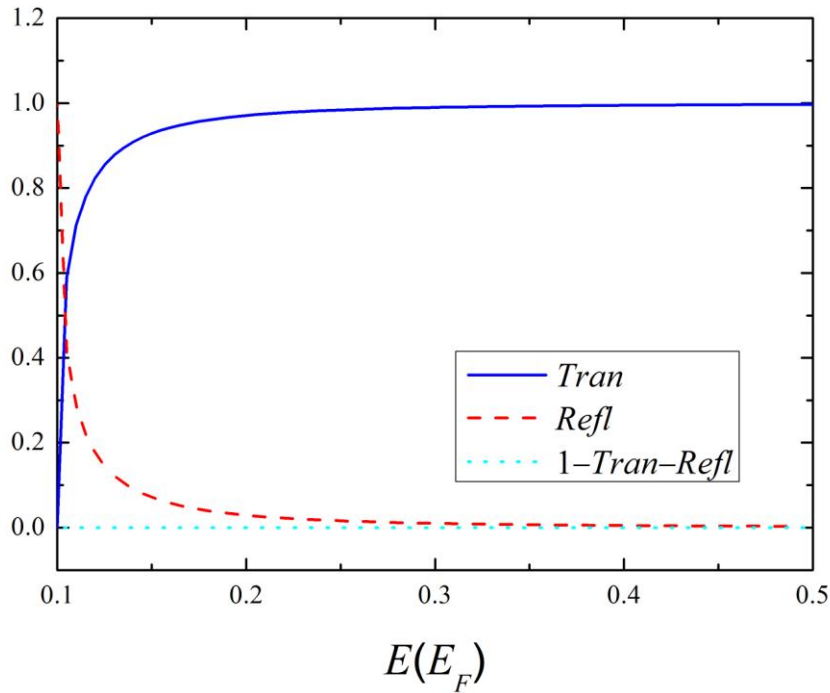


圖 2.22 這是用 Fortran 程式跑出來的一個步階函數穿透和反射的情形。假設 $V_{ds} = 0.9(\text{mV})$ ，則對應的 $U_{sd} = 0.1$ 。紅色虛線代表反射係數、藍色實線代表透射係數、青色點線是為了確認電流守恆。

觀察步階函數的穿透係數，電子能量 E 需大於偏壓大小 U_{sd} 的能量才有電子穿透的情形。

接著我們討論不同偏壓大小 U_{sd} 時，穿透係數的分佈是否固定。整理

解析結果可得到當電子能量 E 大於偏壓大小 U_{sd} 時，穿透係數為

$$\begin{aligned}
Tran(E, U_{sd}) &= \frac{4|\sqrt{E-U_{sd}}|^2}{|\sqrt{E} + \sqrt{E-U_{sd}}|^2} \times \sqrt{\frac{E}{E-U_{sd}}} \\
&= \frac{4(E-U_{sd})}{(\sqrt{E} + \sqrt{E-U_{sd}})^2} \times \sqrt{\frac{E}{E-U_{sd}}} \\
&= \frac{4\sqrt{E(E-U_{sd})}}{E + (E-U_{sd}) + 2\sqrt{E(E-U_{sd})}}
\end{aligned}$$

為了分析穿透係數的分佈，我們定義電子能量 E 和偏壓大小 U_{sd} 的能量差距為入射電子能量 E_{inc} ，即 $E_{inc} = (E-U_{sd})$ 。則穿透係數經由變數變換可改寫成

$$Tran(E_{inc}, U_{sd}) = \frac{4\sqrt{(E_{inc} + U_{sd})E_{inc}}}{2E_{inc} + 2\sqrt{(E_{inc} + U_{sd})E_{inc}} + U_{sd}} \quad (2.22)$$

由(2.22)式的解析結果可知，穿透係數將隨入射電子能量大小和偏壓大小而改變。討論固定 $E_{inc} = E - U_{sd} = 1$ 時，不同偏壓大小 U_{sd} 對穿透係數的影響。圖 2.23 為，穿透係數和入射電子能量的關係。

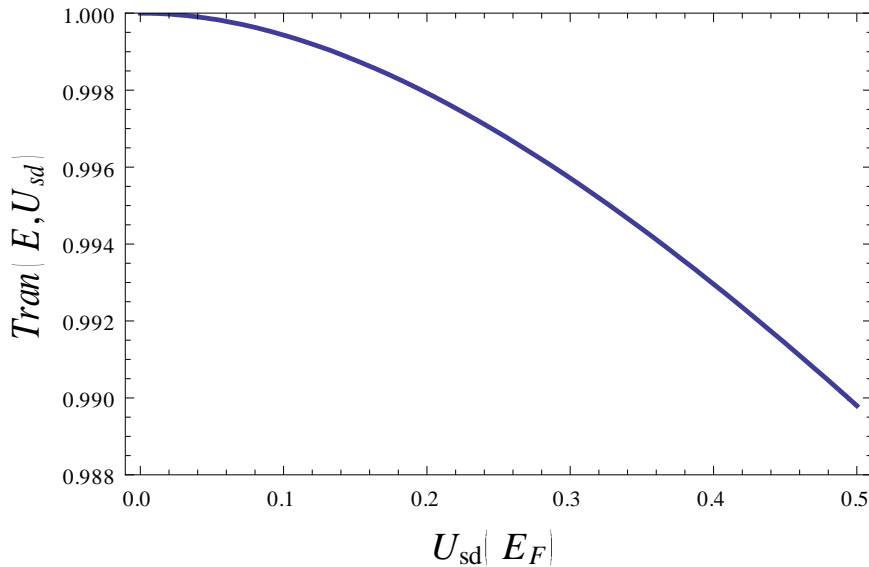


圖 2.23 穿透係數對偏壓大小 U_{sd} 的關係圖。入射電子能量 $E_{inc} = 1$ ，偏壓大小 U_{sd} 改變量從 0 到 0.5。

由以上分析可知，當偏壓大小 U_{sd} 增大時，一維系統穿透係數將被壓抑 (suppress)。圖 2.24 為不同偏壓大小時，穿透係數與電子能量的關係。

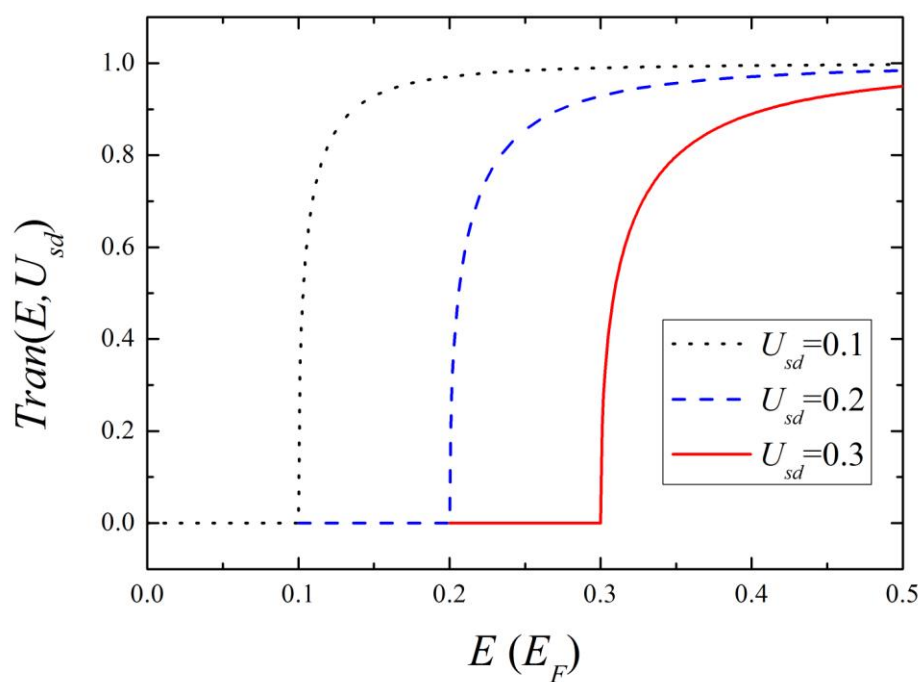


圖 2.24 穿透係數與電子能量的關係圖。黑色點線為 $U_{sd}=0.1$ ，藍色虛線為 $U_{sd}=0.2$ ，紅色實線為 $U_{sd}=0.3$ 。

圖 2.25 為穿透係數和入射電子能量 E_{inc} 的關係。

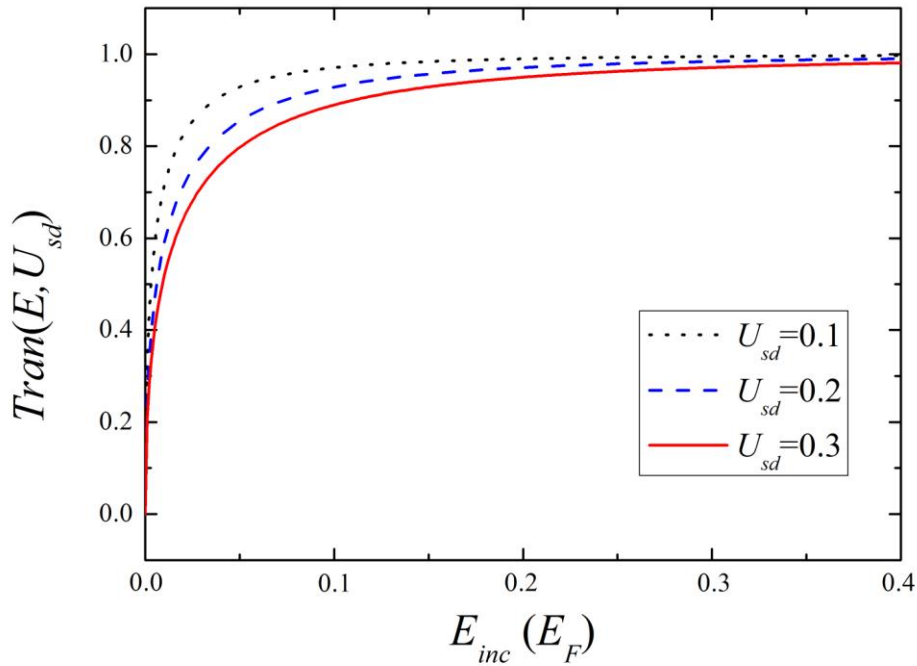


圖 2.25 穿透係數和 E_{inc} 的關係。黑色點線為 $U_{sd}=0.1$ ，藍色虛線為 $U_{sd}=0.2$ ，紅色實線為 $U_{sd}=0.3$ 。

當固定入射電子能量 E_{inc} 時，偏壓大小 U_{sd} 越大，穿透係數越小。由此結果可知，偏壓越大時，背向散射 (back scattering) 越強。

在瞭解轉移矩陣法如何求出電子穿透和反射的情形後，我們對在量子系統中，不同位能分佈所產生的傳輸差異做探討。我們定義源極位置在 $x = x_s$ ，汲極位置在 $x = x_d$ 。量子元件的左端在 $x = x_{qdl}$ ，右端在 $x = x_{qdr}$ 。則偏壓位能 $U_{bias}(x, V_{ds})$ 的分佈範圍 $L_{bias} = x_d - x_s$ ，即源極和汲極之間的距離。而且量子元件長度為 $L_{system} = x_{qdr} - x_{qdl}$ 。討論四種不同的偏壓位能 $U_{bias}(x, V_{sd})$ 情況下，電子穿透和反射的情形。第一種偏壓位能為一個在源極端變化的步階函數 $U_{bias}(x, U_{sd}) = U_{bs}$ ，即

$$U_{bs} = U_{sd} [1 - \theta(x - x_s)]$$

位能在源極端有一個陡峭的改變。

第二種偏壓位能在量子系統中為一個半高斯分佈 $U_{bias}(x, U_{sd}) = U_{bG}$ ，

即

$$U_{bG} = U_{sd} [1 - \theta(x - x_s)] + U_{sd} e^{-\beta(x-x_s)^2} \theta(x - x_s)$$

此偏壓位能也是最接近由 (Poisson-Schrödinger) 方程式解出的位能分佈情形。

第三種偏壓位能在量子系統中為一線性分佈 $U_{bias}(x, U_{sd}) = U_{bl}$ ，即

$$U_{bl} = U_{sd} [1 - \theta(x - x_s)] + U_{sd} \left[1 - \frac{(x - x_s)}{L} \right] [\theta(x - x_s) - \theta(x - x_d)]$$

第四種偏壓位能為一個在汲極端變化的步階函數 $U_{bias}(x, U_{sd}) = U_{bd}$ ，即

$$U_{bd} = U_{sd} [1 - \theta(x - x_d)]$$

其中半個高斯分佈的偏壓位能，其高斯分佈的範圍與量子系統的大小關係需由 β 值決定。這裡我們取高斯位能小至源極位能的 $p\%$ 時作為高斯位能分佈在系統中的範圍，此時 β 值和源極位能的關係為

$$e^{-\beta L^2} < U_{sd} \times p\%$$

移項化簡後的 β 值為

$$\beta > -\left(\frac{1}{L^2}\right) \ln\left(U_{sd} \times \frac{p}{100}\right)$$

圖 2.26 為這四種偏壓位能的分佈情形，這裡假設 $x_s = 0$ 且 $x_d = 10$ ，偏壓 $V_{ds} = 0.9\text{mV}$ 。若考慮 p 為 1，則 $\beta = 0.068$ 。

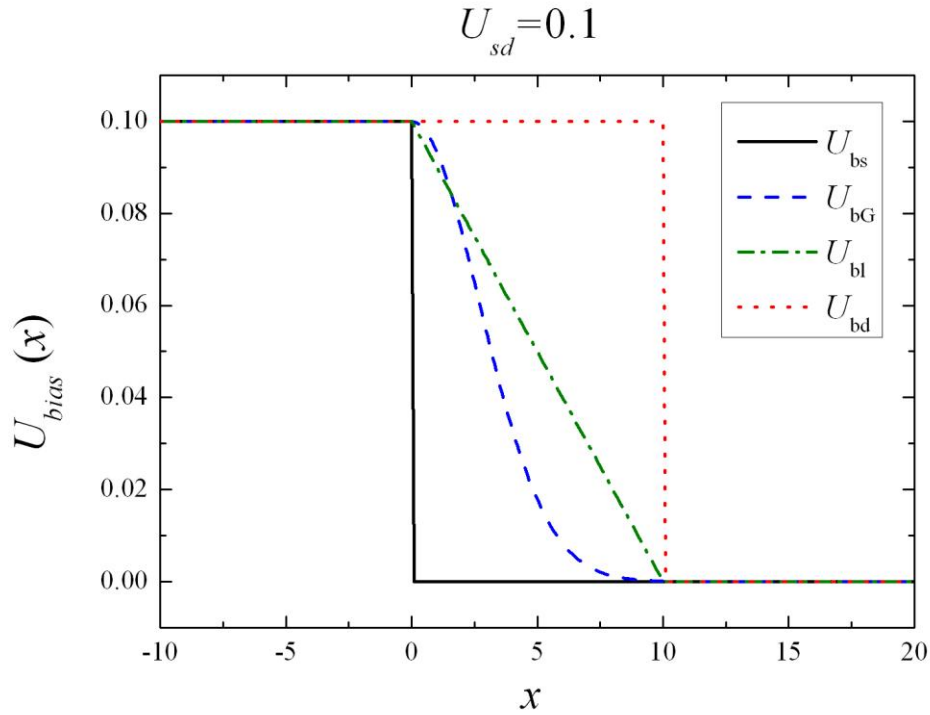


圖 2.26 四種不同偏壓分佈情形。量子系統範圍在 $x_s = 0$ 至 $x_d = 10$ 。黑色實線代表 U_{bs} 。藍色虛線代代表 U_{bG} 。綠色點虛線代表 U_{bl} 。紅色點線代表 U_{bd} 。

得到偏壓位能分佈的曲線後，不同偏壓位能的穿透係數如圖 2.27。

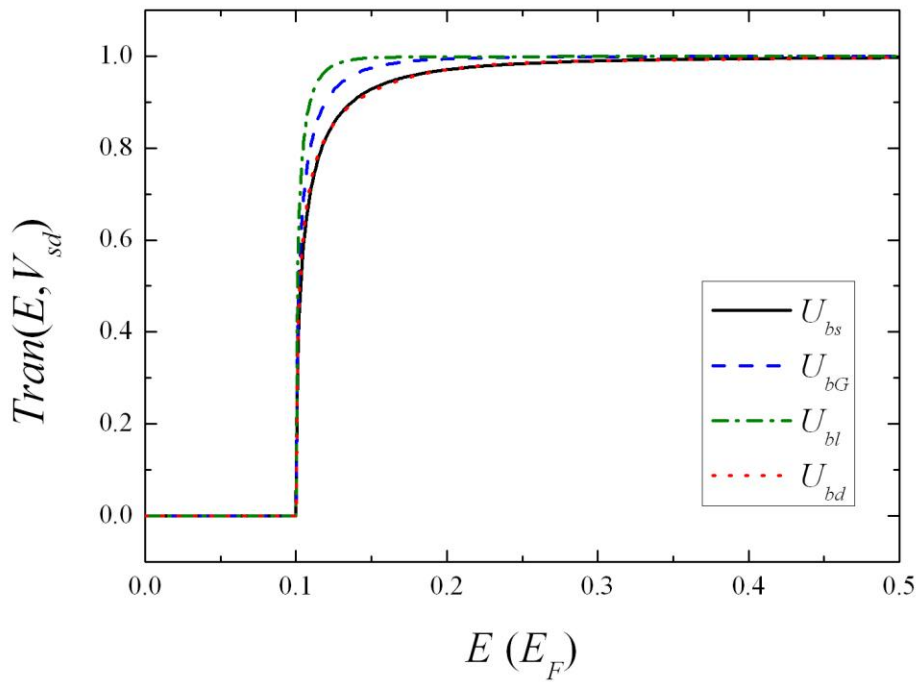


圖 2.27 四種不同偏壓位能的穿透係數。黑色實線代表 U_{bs} 。藍色虛線代代表 U_{bG} 。綠色點虛線代表 U_{bl} 。紅色點線代表 U_{bd} 。

比較圖 2.26 的偏壓位能分佈和圖 2.27 的穿透係數結果可以發現穿透係數和偏壓位能分佈的陡峭情形有關。當偏壓位能越陡峭時，則穿透係數隨電子入射能量變化越緩慢，最極端的情形例如黑色實線和紅色點線的步階分佈。當偏壓位能越平緩時，則穿透係數隨電子入射能量變化越劇烈，最極端的情形例如綠色點虛線的線性分佈。

反射係數如圖 2.28

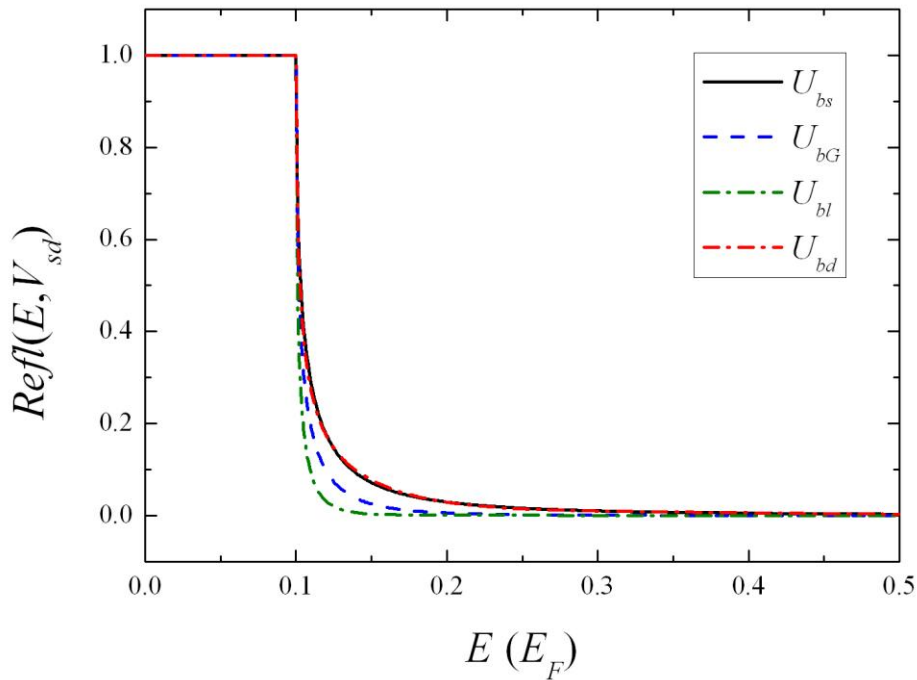


圖 2.28 四種不同偏壓位能的反射係數。黑色實線代表 U_{bs} 。藍色虛線代代表 U_{bG} 。綠色點虛線代表 U_{bl} 。紅色點線代表 U_{bd} 。

如同穿透係數部分的討論，當偏壓位能越陡峭時，則反射係數隨電子入射能量變化越緩慢，最極端的情形例如黑色實線和紅色點線的步階分佈。當偏壓位能越平緩時，則反射係數隨電子入射能量變化越劇烈，最極端的情形例如綠色點虛線的線性分佈。

在得知四種不同偏壓位能的穿透係數後，我們利用穿透係數求得零溫且有限偏壓的電流，其關係式為

$$I(\mu_r, T \rightarrow 0, U_{sd}) = \frac{2e}{h} \int_{\max(\mu, U_{sd})}^{\mu+U_{sd}} \text{Tran}(E, U_{sd}) dE$$

其中 $\max(\mu, U_{sd})$ 為取括號中較大者。為了分析方便，我們計算在零溫且 $V_{ds} = 0.9$ (mV) 時的直流電導，即

$$G(\mu_r, T \rightarrow 0, V_{ds}) = \frac{2e}{hV_{ds}} \int_{\max(\mu, U_{sd})}^{\mu+U_{sd}} \text{Tran}(E, U_{sd}) dE$$

由圖 2.27 得知 U_{bl} 和 U_{bG} 的穿透係數結果可用步階函數做近似

$$\text{Tran}(E, U_{sd}) = \theta(E - U_{sd})$$

若 $\mu < U_{sd}$ ，則對電導有貢獻的電子能量範圍為 U_{sd} 至 $\mu + U_{sd}$ ，因此電導為

$$G(\mu < U_{sd}, T \rightarrow 0, V_{ds}) = \frac{2e}{hV_{ds}} \int_{U_{sd}}^{\mu+U_{sd}} \theta(E - U_{sd}) dE = \frac{2e}{hV_{ds}} (\mu)$$

在這個費米能量 μ 比偏壓位能大小 U_{sd} 小的區域內，直流電導 G 與費米能量 μ 成正比，又稱此區域為線性區。

若 $\mu > U_{sd}$ ，則對電導有貢獻的電子能量範圍為 μ 至 $\mu + U_{sd}$ ，因此電導為

$$G(\mu > U_{sd}, T \rightarrow 0, V_{ds}) = \frac{2e}{hV_{ds}} \int_{\mu}^{\mu+U_{sd}} \theta(E - U_{sd}) dE = \frac{2e}{hV_{ds}} (eV_{ds}) = \frac{2e^2}{h}$$

在這個費米能量 μ 比偏壓位能大小 U_{sd} 大的區域內，直流電導 G 為一定值，因而稱此區域為飽和區。

圖 2.29 為四種不同偏壓位能所對映的直流電導與端費米能量 μ 之關係。

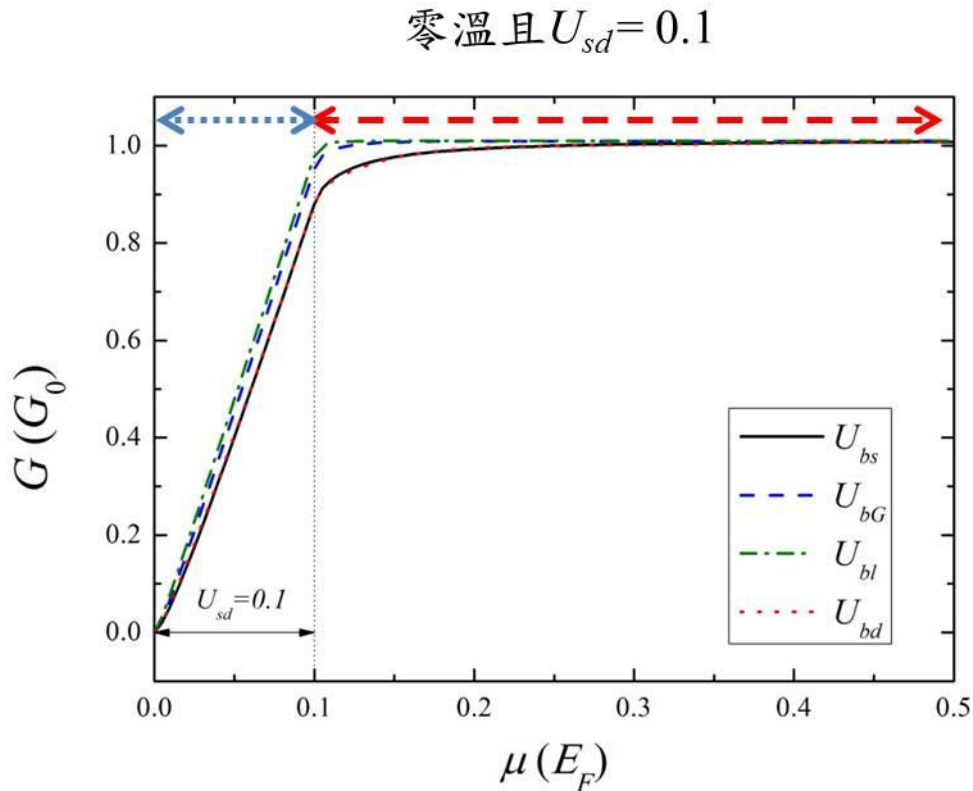


圖 2.29 電導對及極費米能量的關係圖。源極和汲極的偏壓 $U_{sd} = 1\text{meV}$ 。散射位能 $V_{sc}(x) = 0$ 。藍色點線代表線性區。紅色虛線代表飽和區。

無散射位能的一維系統中，零溫且有限偏壓的情況下，電導對費米能量的關係可區分成兩段：線性區 (linear regime) 與飽和區 (saturate regime)。在 $\mu < U_{sd}$ 時為線性區，費米能量越大，則電導值越大。在 $\mu > U_{sd}$ 時為飽和區，此時電導不隨費米能量而改變。圖 2.29 中，電導和費米能量的關係在 $\mu = U_{sd}$ 時發生轉折，且轉折的程度隨偏壓位能的不同而有差異。

為了對平滑轉折所發生的原因做討論，我們分析費米能量、穿透

係數和積分範圍三者之間的關係。當 $\mu < U_{sd}$ 時，如圖 2.30。此時積分範圍隨費米能量的上升而增加，則電導也會隨之上升。

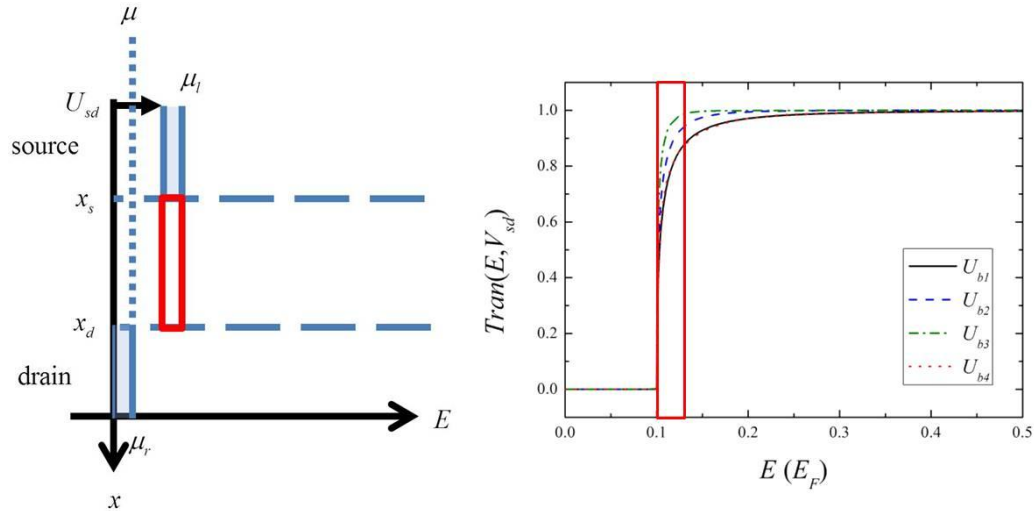


圖 2.30 此為 $\mu < U_{sd}$ 時，費米能量、穿透係數和積分範圍三者之間的關係。左為兩端費米能量與偏壓 U_{sd} 之示意圖。右為 $U_{b1} \sim U_{b4}$ 四種不同偏壓下的穿透係數。兩圖中的紅色實線方框均為入射電子能量積分範圍。

當 $\mu = U_{sd}$ 時，如圖 2.31。此時積分範圍達到最大，則電導與費米能量的關係在此為一轉折點。

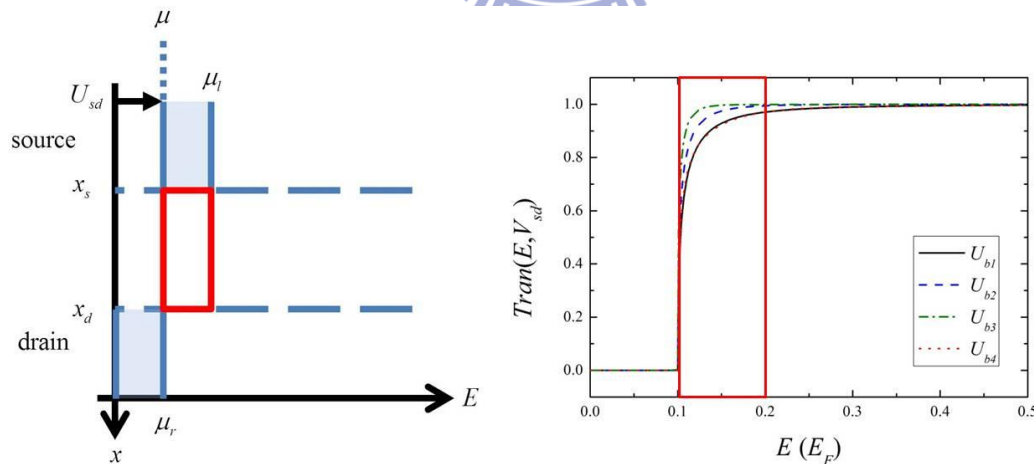


圖 2.31 此為 $\mu = U_{sd}$ 時，費米能量、穿透係數和積分範圍三者之間的關係。左為兩端費米能量與偏壓 U_{sd} 之示意圖。右為 $U_{b1} \sim U_{b4}$ 四種不同偏壓下的穿透係數。兩圖中的紅色實線方框均為入射電子能量積分範圍。

當 $\mu > U_{sd}$ 時，如圖 2.32。此時積分範圍已固定，則電導與費米能量的關係只受偏壓的背向散射影響而有微小下降。

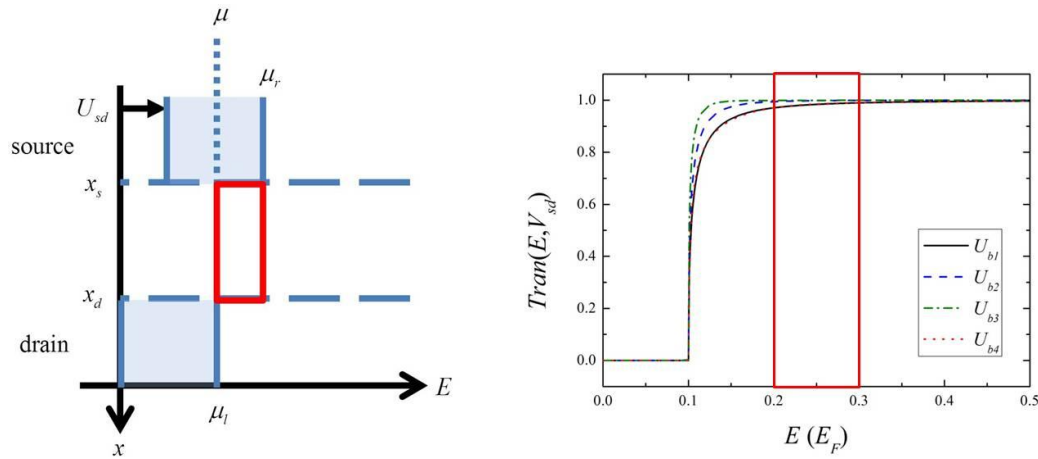


圖 2.32 此為 $\mu > U_{sd}$ 時，費米能量、穿透係數和積分範圍三者之間的關係。左為兩端費米能量與偏壓 U_{sd} 之示意圖。右為 $U_{bs} \sim U_{bd}$ 四種不同偏壓下的穿透係數。兩圖中的紅色實線方框均為入射電子能量積分範圍。

注意右邊穿透係數與入射電子能量的關係，可發現穿透係數受到背向散射的影響，其並非完美的步階函數，而是以較平滑的曲線呈現。此一特性也是造成電流對費米能量的關係有一平滑分佈的原因。由模擬的結果可知， U_{bs} 和 U_{bd} 有較明顯的背向散射，因此穿透係數和電流的分佈曲線在轉折點時均較為平滑。反之， U_{bG} 和 U_{bl} 背向散射較不明顯，因此穿透係數和電流的分佈曲線在轉折點時的變化均較為劇烈。在此得到的一個小結論為，當偏壓位能對位置的分佈較不平均時，穿透係數和電流在轉折處較平滑。反之，則穿透係數和電流在轉折處的變化較劇烈。

在討論完電導隨費米能量的改變後，接著探討無散射位能的一維 $I-V$ 關係。首先乎略偏壓所造成背向散射的影響，即穿透係數呈現步階函數分佈

$$\text{Tran}(E, U_{sd}) = \theta(E - U_{sd})$$

若 $U_{sd} < \mu$ ，則對電導有貢獻的電子能量範圍為 μ 至 $\mu + U_{sd}$ ，因此電導為

$$G(U_{sd} < \mu, T \rightarrow 0, V_{ds}) = \frac{2e}{hV_{ds}} \int_{\mu}^{\mu+U_{sd}} \theta(E - U_{sd}) dE = \frac{2e}{hV_{ds}} (U_{sd})$$

在這個偏壓位能大小 U_{sd} 比及極費米能量 μ 小的區域內，直流電導 G 與偏壓位能大小 U_{sd} 成正比，又稱此區域為線性區。

若 $U_{sd} > \mu$ ，則對電導有貢獻的電子能量範圍為 U_{sd} 至 $\mu + U_{sd}$ ，因此電導為

$$G(U_{sd} > \mu, T \rightarrow 0, V_{ds}) = \frac{2e}{hV_{ds}} \int_{U_{sd}}^{\mu+U_{sd}} \theta(E - U_{sd}) dE = \frac{2e}{hV_{ds}} (\mu_r)$$

在這個偏壓位能大小 U_{sd} 比及極費米能量 μ 大的區域內，直流電導 G 為一定值，因而稱此區域為飽和區。

接下來探討實際偏壓位能分佈的情形，圖 2.33 為四種不同偏壓位能所對映的 I - V 關係。

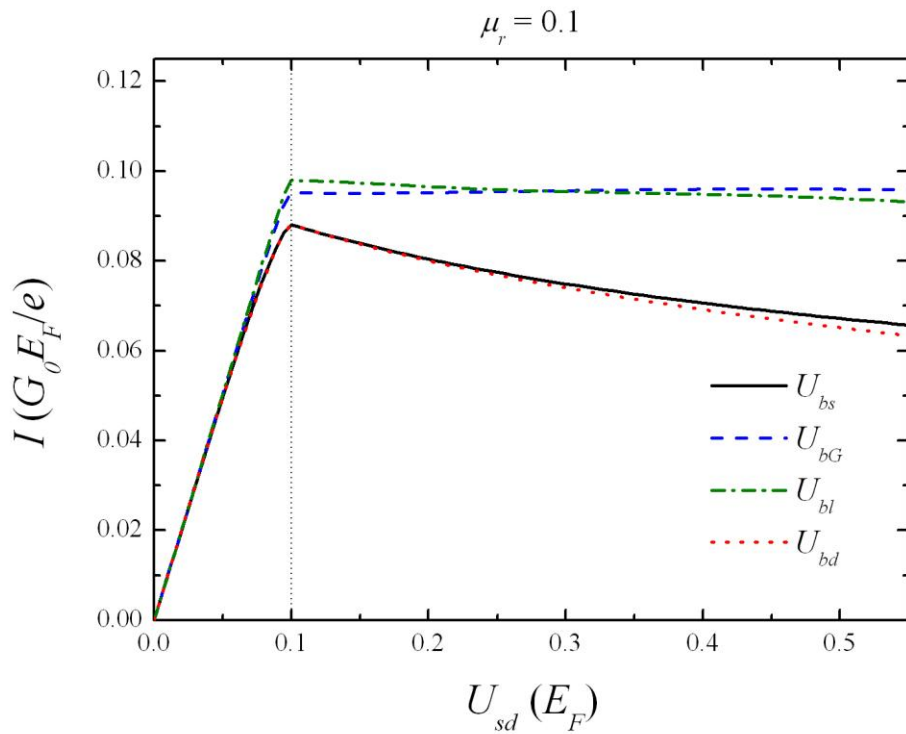


圖 2.33 I - V 關係圖。固定汲極費米能量 $\mu = 0.1$ 。對四種不同的偏壓位能分佈作圖。無散射位能的一維系統中，零溫且有限偏壓的情況下， I - V 的關係可區分成兩段：在 $U_{sd} < \mu$ 時， I - V 呈類線性關係。在 $U_{sd} > \mu$ 時， I - V 呈非線性的遞減，且遞減的程度隨偏壓位能的分佈而有所不同。以下說明了費米能量和穿透係數的積分範圍關係。圖 2.33 中，電導和費米能量的關係在 $U_{sd} = \mu$ 時發生轉折，且轉折的程度以及對映的電流大小隨偏壓位能的不同而有差異。為了對不同的轉折所發生的原因做討論，我們分析費米能量、穿透係數和積分範圍三者之間的關係。當 $U_{sd} < \mu$ 時，如圖 2.34。此時積分範圍隨費米能量的上升而增加，則電導也會隨之上升。

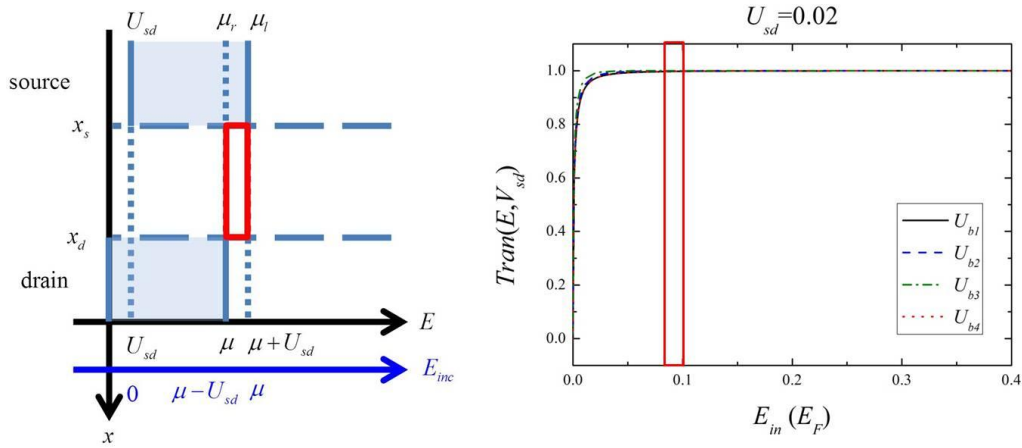


圖 2.34 此為 $U_{sd} < \mu$ 時，費米能量、穿透係數和積分範圍三者之間的關係。左為兩端費米能量與偏壓 U_{sd} 之示意圖。右為 $U_{bs} \sim U_{bd}$ 四種不同偏壓下的穿透係數。兩圖中的紅色實線方框均為入射電子能量積分範圍。

當 $\mu = U_{sd}$ 時，如圖 2.35。此時積分範圍達到最大，則電導與偏壓大小的關係在此為一轉折點。

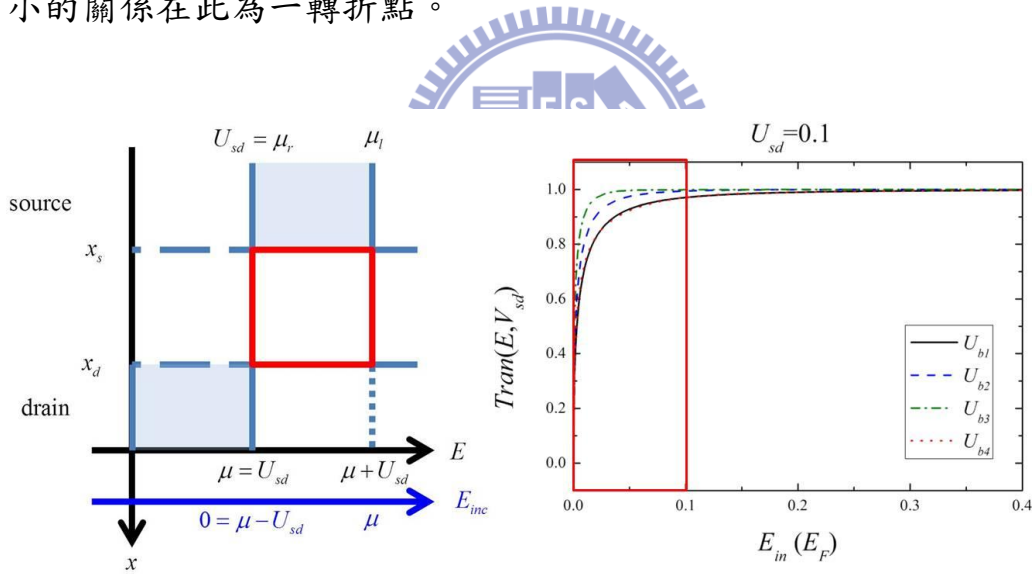


圖 2.35 此為 $\mu = U_{sd}$ 時，費米能量、穿透係數和積分範圍三者之間的關係。左為兩端費米能量與偏壓 U_{sd} 之示意圖。右為 $U_{bs} \sim U_{bd}$ 四種不同偏壓下的穿透係數。兩圖中的紅色實線方框均為入射電子能量積分範圍。

當 $U_{sd} > \mu$ 時，如圖 2.36。此時積分範圍已固定，則電導與偏壓大小的關係只受偏壓的背向散射影響而有微小下降。

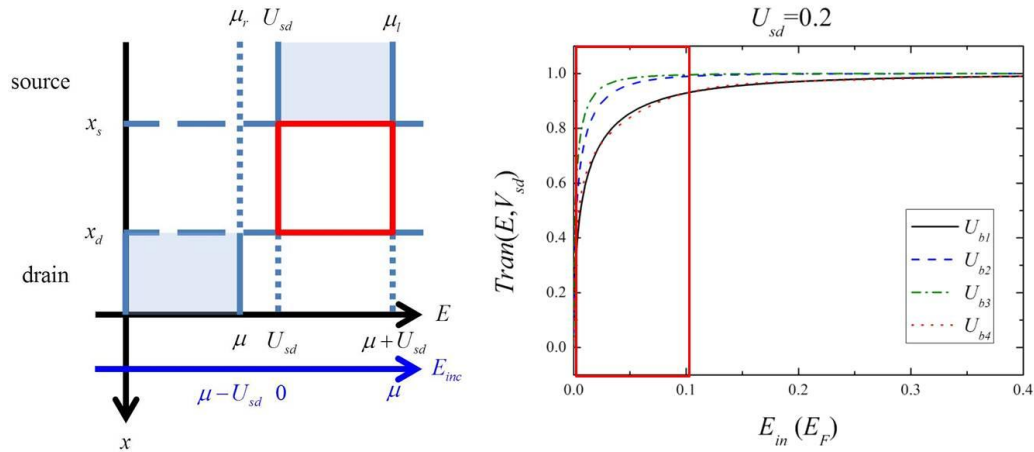


圖 2.36 此為 $U_{sd} > \mu$ 時，費米能量、穿透係數和積分範圍三者之間的關係。左為兩端費米能量與偏壓 U_{sd} 之示意圖。右為 $U_{bs} \sim U_{bd}$ 四種不同偏壓下的穿透係數。兩圖中的紅色實線方框均為入射電子能量積分範圍。

由(2.3.5.30)式可知，電流受到積分範圍和穿透係數的影響。當 U_{sd} 從圖 2.34 到圖 2.35 時，電流隨積分範圍的增加而變大，若此時假設穿透係數不隨 U_{sd} 而改變，則如左側示意圖的情形，電流與 U_{sd} 為線性關係。但若同時考慮穿透係數會隨 U_{sd} 而有背向散射變強的趨勢時，電流將向下做微小的修正，且 U_{sd} 越大，則電流向下修正的值越大。當 U_{sd} 從圖 2.35 到圖 2.36 時，因為積分範圍不再增加，此時只需考慮穿透係數會隨 U_{sd} 而有背向散射變強的趨勢，則電流將持續向下做微小的修正。模擬的結果可知， U_{bs} 和 U_{bd} 背向散射隨 U_{sd} 增加而變強的趨勢較大，因此電流隨 U_{sd} 下降的趨勢也較大。反之， U_{bG} 和 U_{bl} 背向散射隨 U_{sd} 增加而變強的趨勢較不明顯，因此電流隨 U_{sd} 下降的趨勢也較平緩。在此得到的一個小結論為，當偏壓位能對位置的分佈較不平均時，電流隨 U_{sd} 下降的趨勢也較大。反之，則電流隨 U_{sd} 下

降的趨勢也較不明顯。

2.3.6 共振穿隧效應 (resonance tunneling effect)

雙位壘的共振穿隧已經被廣泛的應用在基本物理及工程的研究中。最常見的例子是穿隧式掃描顯微鏡 (Scanning Tunneling Microscopy, STM)，它具有原子尺寸的空間解析度，科學家可以利用它研究原子在表面的排列結構及動態行為、原子尺度的磊晶成長及相變行為和電性量測。除此之外，STM 還可以進行小至一個量子點的 I - V 能譜量測。這個稱為掃描穿隧能譜 (scanning tunneling spectroscopy, STS) 的技術可以用來觀察量子點或奈米晶體的電子結構。在 2.2 節裡，我們討論過電子在極小偏壓時通過兩個高斯位能的共振穿隧情形。這一小節裡，我們將比較考慮偏壓位能 $U_{bias}(x, U_{sd})$ 後，電子的共振穿隧是否有所改變。

為了模擬做 STM 量測時，探針與樣品間的位障以及樣品與基板間的接觸電阻，這裡我們假設源極位置即為探針位置，汲極位置即為基板位置，考慮強度為 V_{d1} 和 V_{d2} 的兩個 delta 散射位能 $V_{d1}\delta(x-x_{qd1})$ 和 $V_{d2}\delta(x-x_{qdr})$ 分別落在源極和汲極兩端，即 $x_{qd1} = x_s$ 且 $x_{qdr} = x_d$ 。則總散射位能 $U_{sc}(x)$ 為

$$U_{sc}(x) = V_{d1}\delta(x-x_s) + V_{d2}\delta(x-x_d)$$

當兩邊散射位能強度一樣時，即 $V_{d1} = V_{d2} = 10$ ，討論無偏壓和偏壓落在源極以及偏壓落在汲極三種情形。兩個 delta 散射位能和三種偏壓情形對映的位能分佈如圖 2.37。

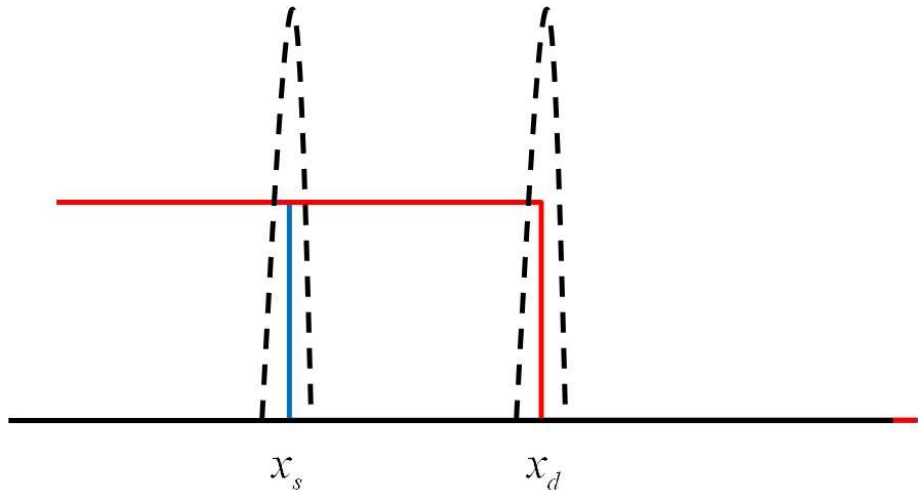


圖 2.37 兩個 delta 散射位能與三種不同偏壓位能分佈示意圖。其中實線為偏壓位能 $U_{bias}(x)$ ，黑色實線代表無散射位能，藍色實線代表偏壓落在源極端，紅色實線代表偏壓落在汲極端。虛線代表兩個 delta 散射位能。偏壓大小 $U_{sd} = 0.1$ ， $V_{d1} = V_{d2} = 10$ 。

利用轉移矩陣法得到三種位能分佈 $U(x, U_{sd})$ 的穿透結果如圖 2.38

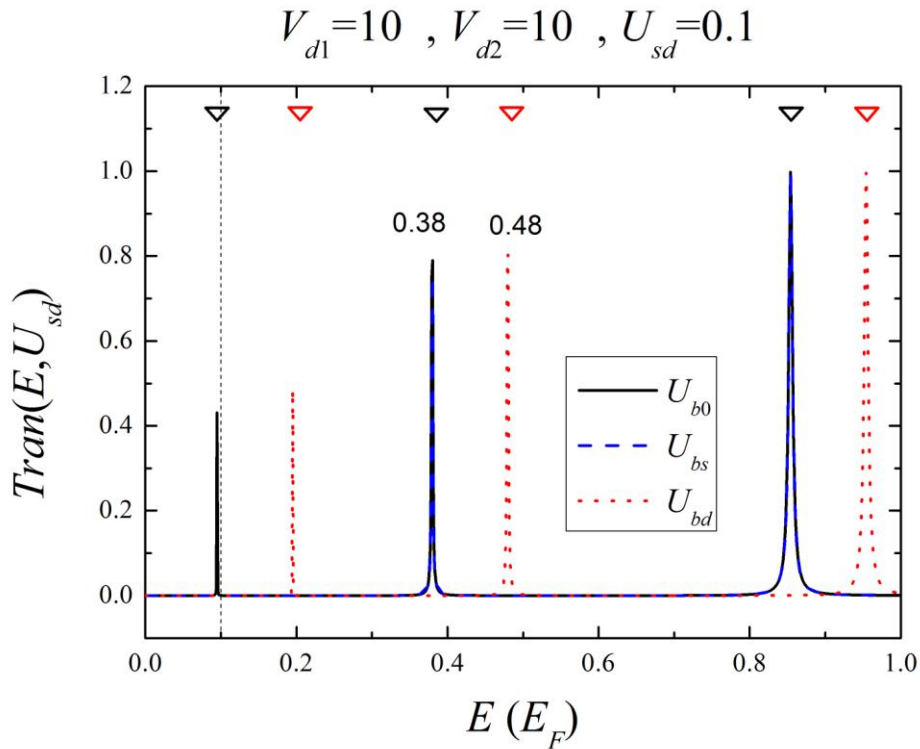


圖 2.38 兩個 delta 散射位能的共振穿透係數。黑色實線為偏壓位能 U_{b0} 的穿透係數，藍色虛線為偏壓位能 U_{bs} 的穿透係數，紅色點線為 U_{bd} 的穿透係數。黑色倒三角形為用無窮深位能井模型估算寬度為 10、底部能量為 0 的位能井能階分佈，紅色倒三角形為用無窮深位能井模型估算寬度為 10、底部能量為偏壓大小 0.1 的位能井能階分佈。黑色點虛線代表相對於偏壓大小 0.1 的能量。此系統中 U_{bs} 和 U_{bd} 的偏壓大小 $U_{sd} = 0.1$ ，兩個 delta 散射位能強度 $V_1 = V_2 = 10$ ，源極端 $x_s = 0$ 和汲極端 $x_d = 10$ 。

在有限偏壓的共振穿隧效應下，有四個值得討論的地方。首先，由於兩個 delta 散射位能的強度夠大，因此共振態能量可用無窮深位能井的束縛態估算。再者比較 U_{b0} 和 U_{bs} ，即無偏壓和有偏壓之間的共振態出現數量。結果顯示 U_{bs} 偏壓分佈時，因為源極的偏壓大小固定為 0.1，則共振態出現的能量至少必需大於偏壓大小，或是更精確的說，考慮偏壓後，只有比偏壓大小 0.1 還大的共振態會存在。接下來討論的是偏壓在量子元件中的分佈會影響共振腔內的束縛態 (bound state)

能量大小，當偏壓在量子元件中的分佈為零，即偏壓位能為 U_{b0} 和 U_{bs} 時，束縛態為 $E_n^{b0} = E_n^{bs} = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$ 。當偏壓在量子元件中的分佈為一定值，即偏壓位能為 U_{bd} 時，束縛態為 $E_n^{bd} = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 + U_{sd}$ 。比較 U_{bd} 和 U_{bs} 的第二個束縛態 $E_n^{bs} = \left(\frac{2\pi}{10}\right)^2 = 0.395$ 和 $E_n^{bd} = \left(\frac{2\pi}{10}\right)^2 + 0.1 = 0.495$ ，可發現能量差剛好等於偏壓大小 0.1。最後我們討論不同能量的共振態所對映電子在共振腔內的鬆弛時間 (relaxation time)，由圖 2.38 中發現，當共振態能量越高時，其半高寬也越大，這表示鬆弛時間將越短，換句話說，電子在共振腔內的生命週期 (life time) 越短，電子越不容易處在共振腔內。



2.3.7 準一維奈米線考慮有限偏壓效應

在元件接近奈米尺度時，會出現量子效應，此時的電子不同於巨觀時的擴散方式運動，而是以彈道傳輸的方式。Landauer 成功解釋了彈道傳輸時的量化電導。之後又有許多人投入這方面的研究，而 Phillip F. Bagwell 又將 Landauer 的理論推廣至有限偏壓的情形。

準一維系統的 Schrödinger 方程式為

$$\left[-\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + U_c(y) + U(x, U_{sd})\right]\Psi(x, y) = E\Psi(x, y)$$

其中 $U_c(y)$ 為 y 方向的侷域位能， $U(x, U_{sd})$ 為 x 方向相關的位能。

利用分離變數法得到的兩個微分方程為

$$-\frac{\partial^2}{\partial y^2} \varphi(y) + U_c(y) \varphi(y) = \varepsilon_n \varphi(y)$$

$$-\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + U(x, U_{sd}) \psi(x) = E_n \psi(x)$$

其中 $U(x, U_{sd}) = U_{sc}(x) + U_{bias}(x, U_{sd})$ 是考慮了準一維系統本身的散射位能 $U_{sc}(x)$ 和偏壓造成的位能 $U_{bias}(x, U_{sd})$ ，而在傳輸 x 方向第 n 個子帶的動能為 $E_n = E - \varepsilon_n$ 。在瞭解 x 方向相關的位能分佈後，我們可利用轉移矩陣法求出對應到每個子帶的理想一維穿透係數 $T_n(E_n, U_{sd})$ 。此一維穿透係數的計算方式可參考 2.3.5 「源極和汲極的偏壓效應」。

用轉移矩陣法求出每個子帶所對應的穿透係數 $T_n(E_n, U_{sd})$ 後，考慮所有子帶的貢獻，並求出理想的準一維奈米線穿透係數 $Tran(E, U_{sd})$ 。

根據 Landauer 的理論，準一維系統的穿透係數為

$$Tran(E, U_{sd}) = \sum_n T_n(E_n, U_{sd})$$

在零溫時，費米狄拉克分佈為步階函數，則考慮偏壓下，電子流為

$$I_e(\mu, T \rightarrow 0, U_{sd}) = \frac{2e}{h} \int_{\max(\mu, U_{sd})}^{\mu + U_{sd}} Tran(E, U_{sd}) dE$$

其中 $Tran(E, U_{sd})$ 為準一維奈米線下考慮了所有子帶的穿透係數， $\max(\mu, U_{sd})$ 為取括號中較大者。

為了具體的討論準一維系統中，零溫且有限偏壓下，電流和費米能量的關係。假設準一維的通道寬度 $W = 10$ ，在零溫且 $V_{ds} = 0.5$ (mV)

時，選擇偏壓分佈為 U_{bl} (線性分佈)，則電導對汲極費米能量 μ 的關係如圖 2.39。在無散射位能的準一維系統中，受偏壓影響後，電導與費米能量的關係不再只有步階函數分佈，參考前一小節的討論可知兩者之間存在一段線性相關的區域。其中線性分佈的區域發生在 $\varepsilon_n < \mu < \varepsilon_n + U_{sd}$ 。這裡的偏壓位能 $U_{bias}(x, U_{sd})$ 為 U_{bl} 的分佈。在 $\mu \sim \varepsilon_n + U_{sd}$ 時，準一維系統中的電流同樣也會有在一維系統中平滑轉折的結果。

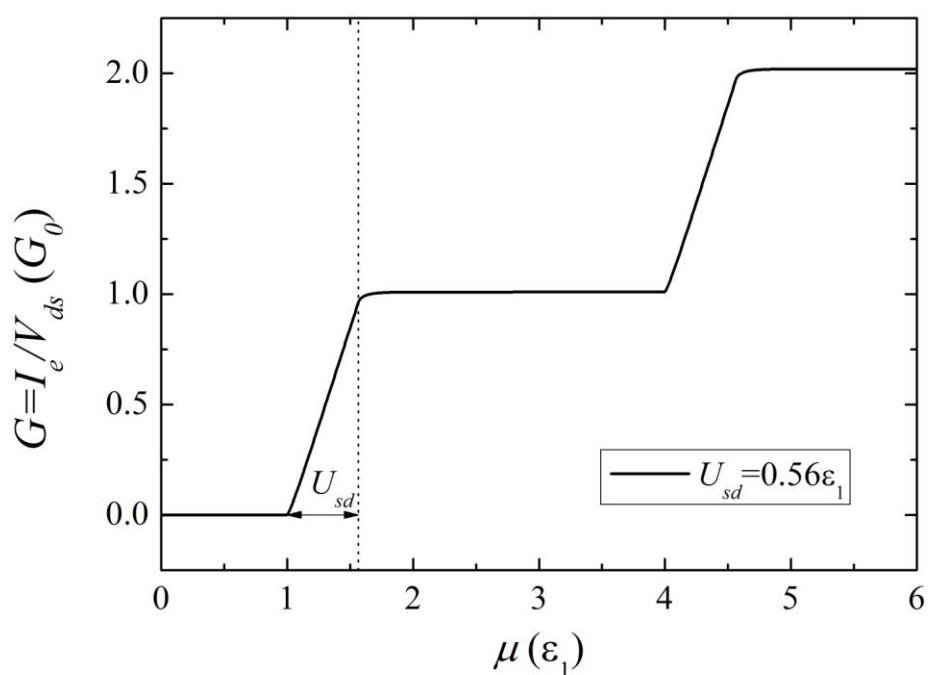


圖 2.39 準一維奈米線的電導對費米能量關係。源極和汲極的偏壓位能大小 $U_{sd} = 0.56\varepsilon_1$ 。 $\varepsilon_1 = 0.0987(0.888\text{meV})$ 為第一子帶能量(first sub-band energy)。此子帶能量為通道寬度 10 (80nm) 的結果。

為了進一步討論固定偏壓下的量化電導，我們分析費米能量、子帶能量之間的關係，並找出量化電導線性區分佈的能量範圍。這裡針

對某一子帶能量做討論，準一維系統的電流只要重覆考慮過所有子帶的情形後，即可得到有限偏壓下的量化電導和線性區的分佈。

我們將焦點放在第一個子帶上，在固定 U_{sd} 下，費米能量變化範圍從 0~2。當 $\mu < \varepsilon_1$ 時， $I = 0$ ，汲極端源極端的費米能量 μ_r 和 μ_l 與第一子帶能量 ε_1 之間的關係如圖 2.40。

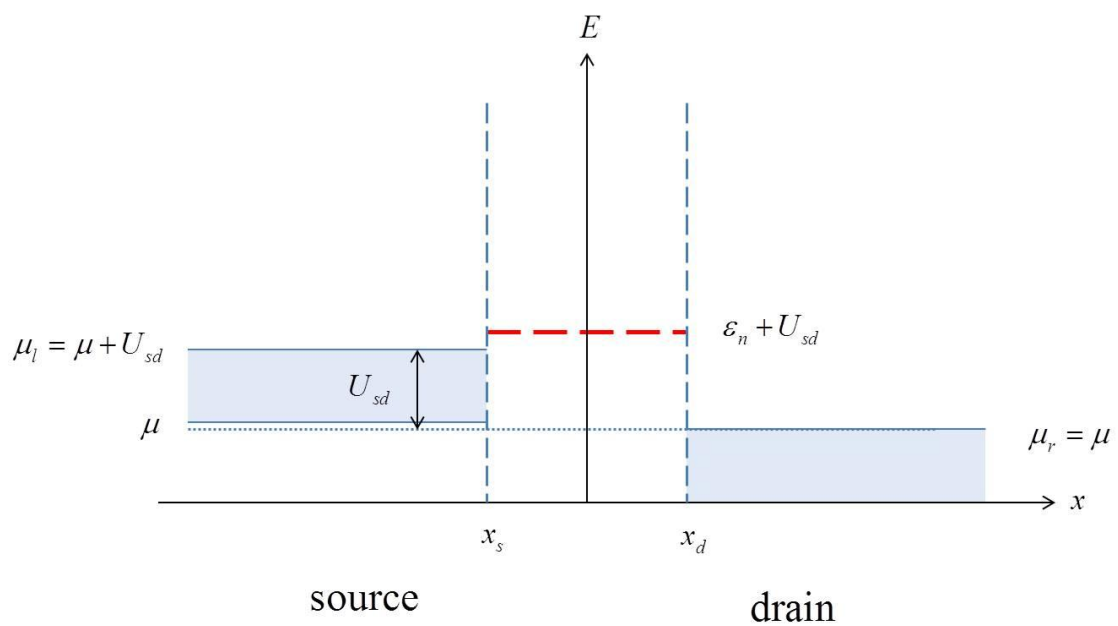


圖 2.40 費米能量和積分範圍之間的關係。源極和汲極的費米能量都比子能帶能量小。沒有電子在可貢獻電流的能量範圍。

在此能量區間，源極端無任何電子處於傳導模態 (propagating mode)，因此電流 $I = 0$ 。當 $\varepsilon_1 < \mu < \varepsilon_1 + U_{sd}$ 時，電流與費米能量呈線性關係，汲極端源極端的費米能量 μ_r 和 μ_l 與第一子帶能量 ε_1 之間的關係如圖 2.41。

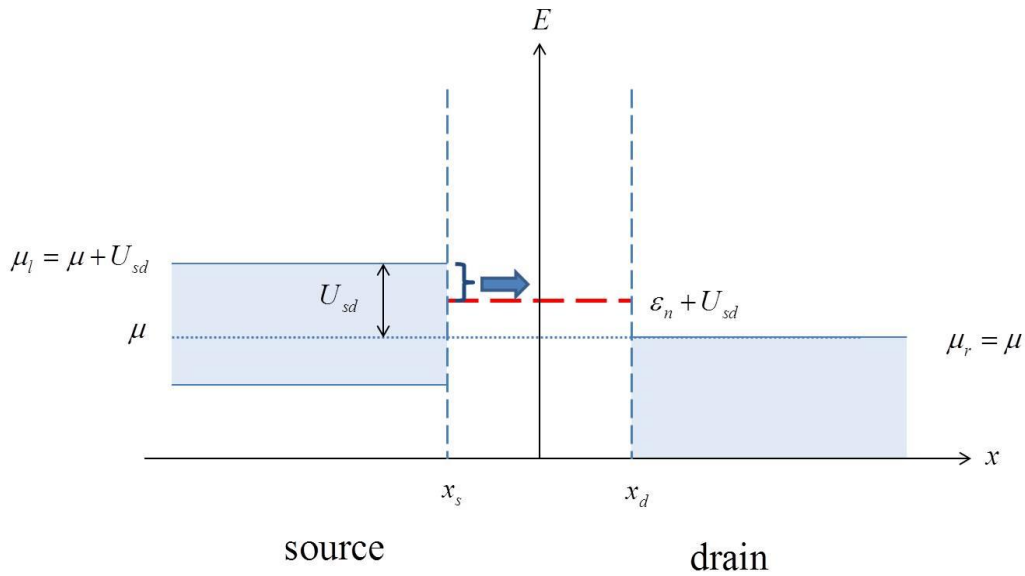


圖 2.41 費米能量和積分範圍之間的關係。源極費米能量比子能帶能量大，但汲極費米能量比子能帶能量小。源極電子在能量大於子能帶能量時會對電流產生貢獻。

在此能量區間，源極端費米能量 μ_l 高於子帶能量，因此有電子佔據傳導模態，且隨著費米能量的上升，佔據傳導模態的電子越多，電流也越大。當 $\mu > \epsilon_1 + U_{sd}$ 時，電子流與費米能量呈飽和狀，汲極端源極端的費米能量 μ_r 和 μ_l 與第一子帶能量 ϵ_1 之間的關係如圖 2.42。

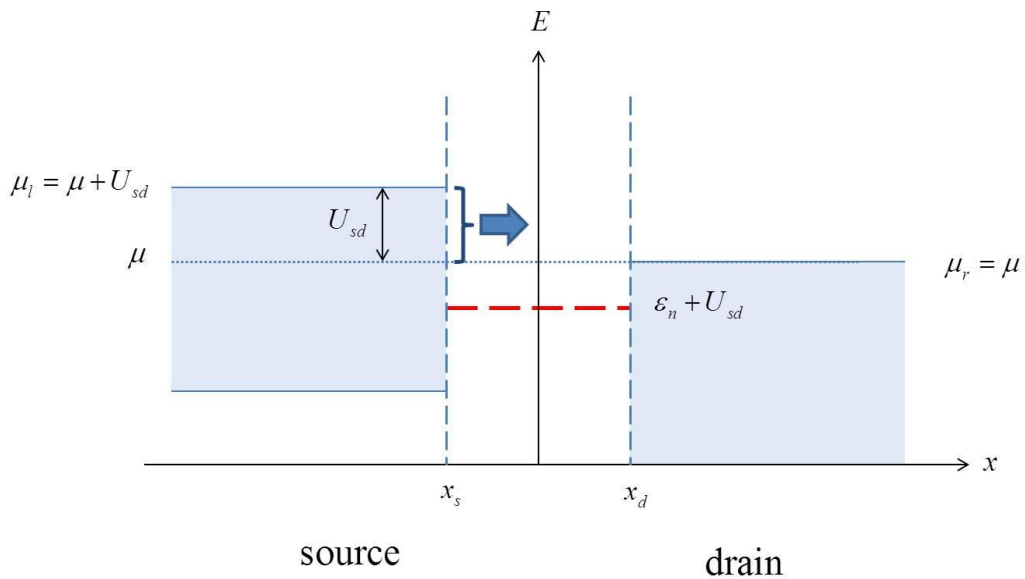


圖 2.42 費米能量和積分範圍之間的關係。源極和汲極的費米能量均比子能帶能量大。源極電子在能量比汲極費米能量大的範圍會貢獻電流。

在此能量區間， μ_r 和 μ_l 均高於子帶能量，由於 U_{sd} 不變，則對電流有貢獻的電子數不變，因此電流處於飽和狀態。

瞭解電導對費米能量的關係後，我們進一步分析準一維系統中，電子流 I_e 和偏壓 U_{sd} 的關係。當改變不同電子入射能量時（範圍從 1 到 5 倍第一子帶能量），電子流 I_e 對偏壓 U_{sd} 的關係如圖 2.43。

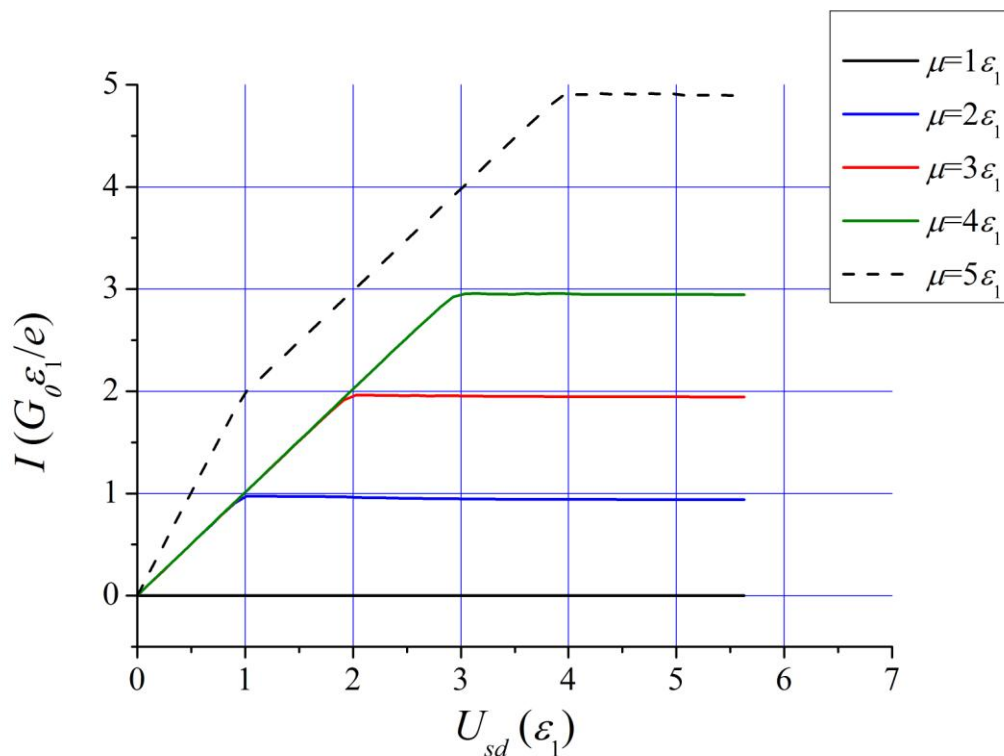
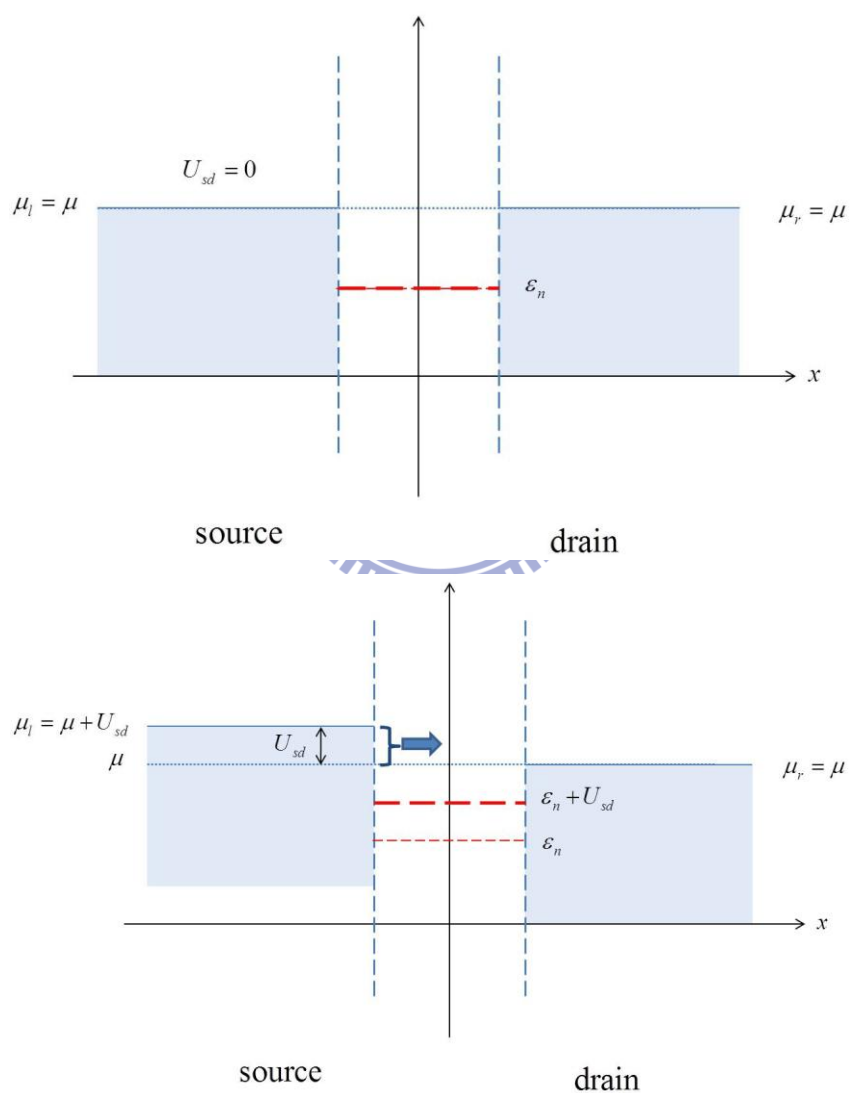


圖 2.43 I_e-U_{sd} 關係圖。費米能量為 $\mu = 1\epsilon_1$ 到 $5\epsilon_1$ 。取線性偏壓位能 $U_{bias}(x, V_{sd}) = U_{bl}$ 以及極費米能量為兩倍第一子帶能量為例，在偏壓位能在 0 至 1 倍第一子帶能量之間時，因為極費米能量所佔據的傳導模態數為 2，所以電流斜率等於 2。但當偏壓位能接近第一子帶能量時，其穿透係數受到偏壓位能在源極端產生的步階位能函數的影響，電流受到背向散射的壓抑，趨近於 1 但不等於 1。當偏壓位能超過第一子帶能量時，

其電流同樣受到背向散射的影響，電流將緩慢變小，此結果接近 Kirczenow 所預測的固定飽和值 [32]。注意飽和區域的曲線可發現背向散射對電流的影響，此結果與 2.3.5 「源極和汲極的偏壓效應」的結論一致。圖 2.44 為源極和汲極兩端費米能量以及準一維奈米線子帶能量之間的關係。



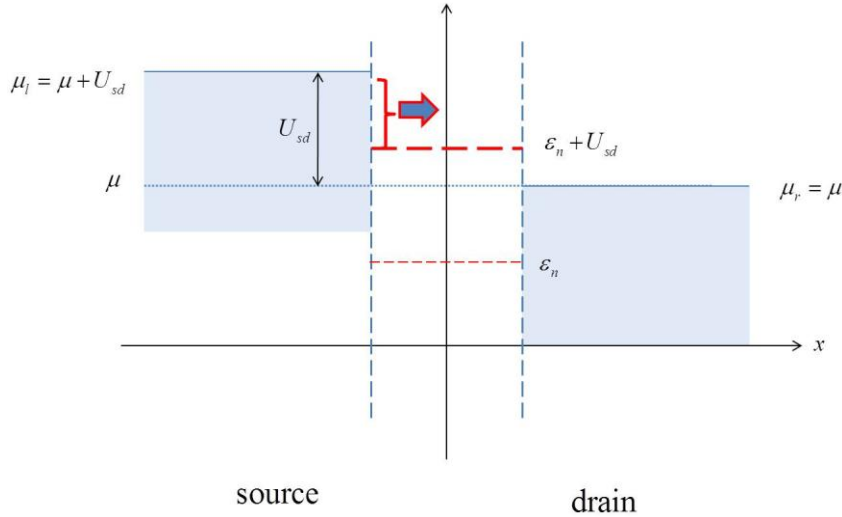


圖 2.44 最上面的圖為偏壓 $U_{sd}=0$ 時，則電流 $I=0$ 。中間的圖為偏壓 $U_{sd}<\mu-\epsilon_n$ 時，則對電流有貢獻的入射電子能量範圍從 μ 到 $\mu+U_{sd}$ 。最下面的圖為偏壓 $U_{sd}>\mu-\epsilon_n$ 時，則對電流有貢獻的入射電子能量範圍從 U_{sd} 到 $\mu+U_{sd}$ 。紅色細虛線代表第 n 個子帶能量，紅色粗虛線代表電子可在第 n 個傳遞模態。

2.3.8 準一維奈米線考慮有限溫度與偏壓的效應

在 2.3.1 「偏壓與溫度效應的一般理論」時，總電子流為

$$I_e(\mu, T, U_{sd}) = I_{e,l \rightarrow r} + I_{e,r \rightarrow l} = \frac{2e}{h} \int_0^\infty [f_l(E, \mu_l) - f_r(E, \mu_r)] \text{Tran}(E, U_{sd}) dE \quad (2.23)$$

由前一小節的討論我們知道準一維奈米線的理想穿透係數為

$$\text{Tran}(E, U_{sd}) = \sum_{n=1}^N T_n(E_n, U_{sd}) \approx \sum_{n=1}^N \theta(E - \epsilon_n - eV_{ds}) \quad (2.24)$$

其中 $E_n = E - \epsilon_n$ 為電子傳輸 x 方向第 n 個子帶的動能。 U_{sd} 為源極與汲極的偏壓位能。在綜合以上(2.23)式和(2.24)式後，我們可以得到考慮

有限偏壓和有限溫度下，準一維奈米線的電流為

$$I_e(\mu, T, U_{sd}) = I_{e,l \rightarrow r} + I_{e,r \rightarrow l} = \frac{2e}{h} \int_0^\infty \sum_{n=1}^N [f_l(E, \mu_l) - f_r(E, \mu_r)] \theta(E - \epsilon_n - eV_{ds}) dE$$

或

$$I_e(\mu, T, V_{sd}) = I_{e,l \rightarrow r} + I_{e,r \rightarrow l} = \frac{2e}{h} \sum_{n=1}^N \int_0^{\infty} [f_l(E, \mu_l) - f_r(E, \mu_r)] \theta(E - \varepsilon_n - eV_{ds}) dE$$

以下將近一步討論準一維系統在有限溫度和偏壓下，數值計算出的結果。為了將焦點放在有限溫度和偏壓對電流及電導的影響，選定 U_{bl} 偏壓位能做討論。在溫度 $T = 3\text{mK}$ 和 3K 且 $V_{ds} = 0.5\text{ mV}$ 時，電導和入射電子能量的關係如圖 2.45。

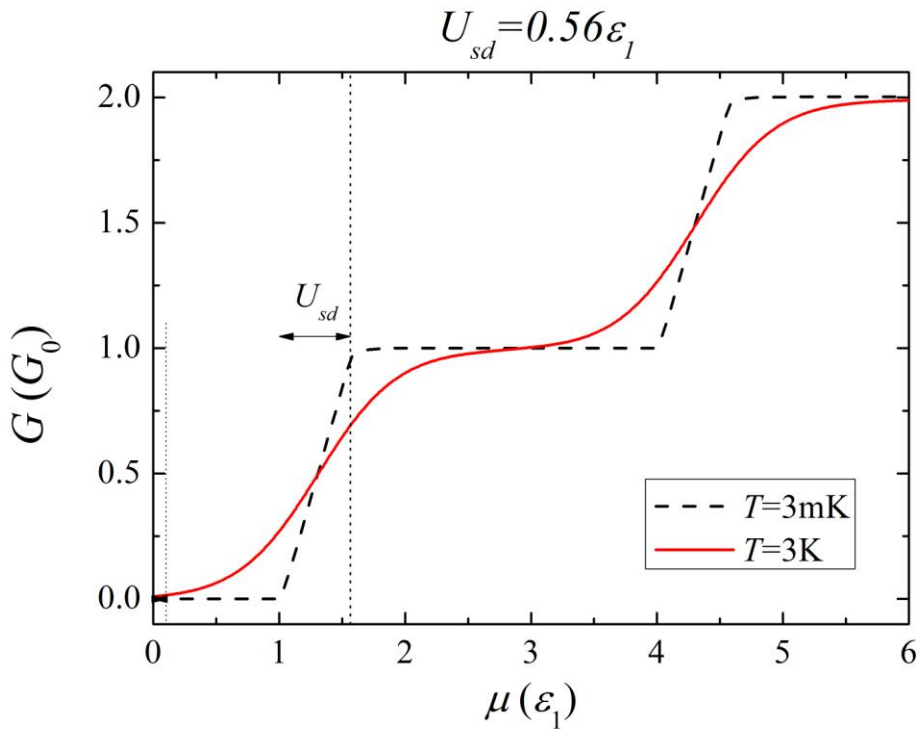


圖 2.45 電導和入射電子能量關係圖。黑色虛線為溫度 $T = 3\text{mK}$ 的結果。紅色實線為溫度 $T = 3\text{K}$ 的結果。其中偏壓電位差 $V_{sd} = 0.5\text{ mV}$ 。

由有限溫度且有限偏壓的結果可知，受偏壓影響的結果呈現出電導與入射電子能量的關係存在一段線性相關的區域，且線性相關所對映入射電子能量範圍為 U_{sd} ，而受溫度影響的結果為曲線更加平滑化。

在瞭解電導對入射電子能量的關係後，我們進一步分析電子流和

偏壓的關係。當改變不同入射電子能量時(範圍從 1 到 5 倍第一子帶能量)，討論電子流 I_e 對偏壓 U_{sd} 的關係。

為了比較溫度的差異，首先考慮極低溫 $T = 3\text{mK}$ 時如圖 2.46。

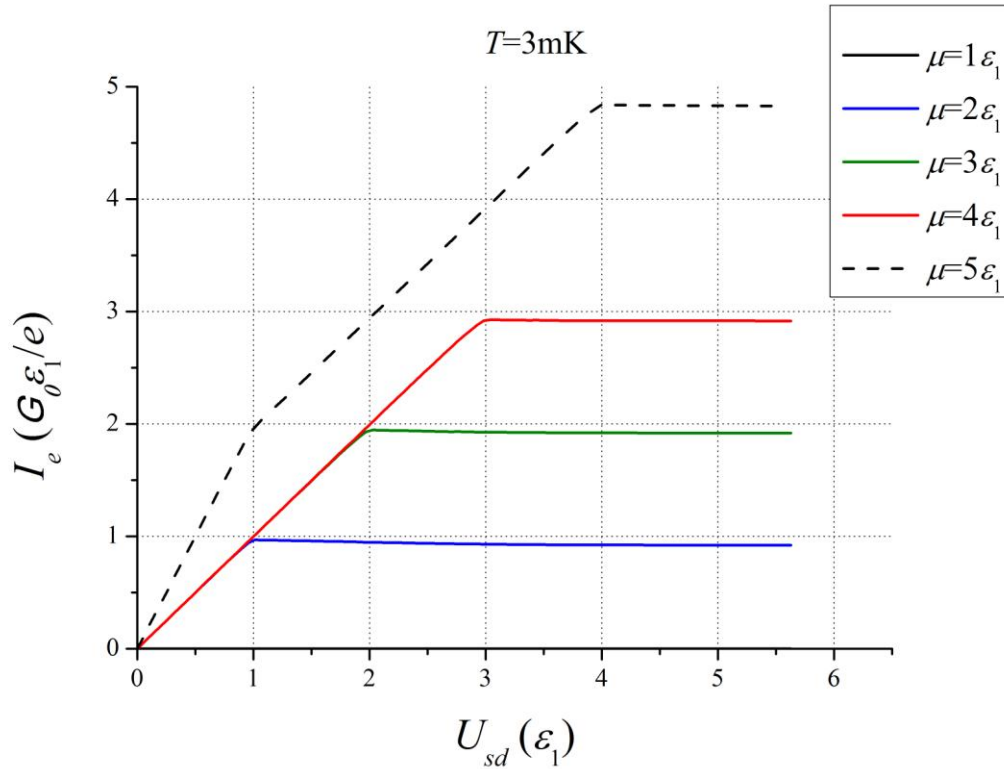


圖 2.46 電子流 I_e 對偏壓 U_{sd} 的關係。溫度 $T = 3\text{mK}$ 。費米能量為 $\mu = 1\epsilon_1$ 到 $5\epsilon_1$ 。此結果與零溫有限偏壓結果相近。

極低溫度 $T = 3\text{mK}$ 時， $I_e - U_{sd}$ 的結果與圖 2.43 相同。接著討論有限

溫度 $T = 3\text{K}$ 時， $I_e - U_{sd}$ 的關係如圖 2.47。因為 $I - U_{sd}$ 圖中的斜率即為

電導，在此低溫條件時，斜率皆趨近於定值，也就是線性分佈，則此

為量化電導。在達飽和區之前，可從斜率的數目判斷及極費米能量所

包含的傳導模態數。

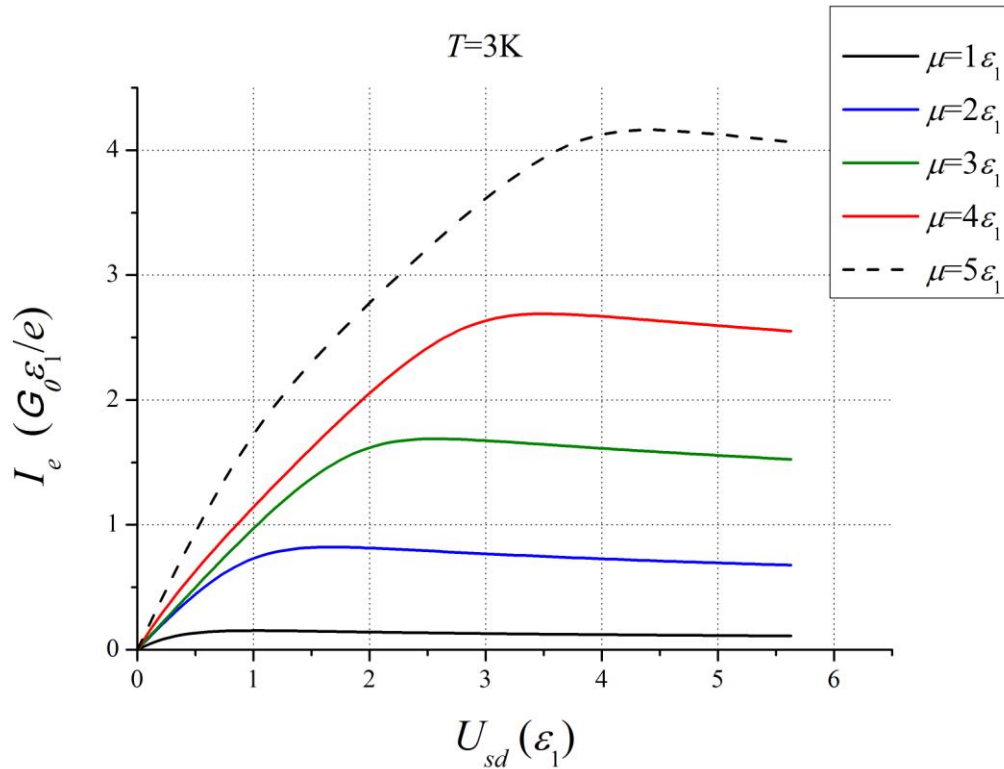


圖 2.47 電流 I 對偏壓 V_{sd} 的關係。溫度 $T=3\text{K}$ 。汲極端費米能量為 $\mu = 1\epsilon_1$ 到 $5\epsilon_1$ 。此結果可明顯看出溫度壓抑了電流。而且在理想準一維奈米線中，因子帶而出現的轉折變平滑了。

比較 3mK 和 3K 時的有限溫度和有限偏壓的 I - V 關係。第一，受到溫度的影響， I - V 關係有連續的斜率分佈，即量化電導不明顯。第二，在汲極端費米能量等於第一個子帶能量時，有限溫度和零溫的差別在於電子可因費米狄拉克分佈而對電流產生微小的貢獻。

第三章 寬-窄-寬量子元件的靜態量子傳輸

在第二章，我們討論了準一維窄通道的量化電導。在真實的實驗量測裡，通常在二維電子氣半導體上外加電極，藉由外加控制電極的電壓大小調整準一維窄通道的寬度[26]。在這種情形下，和窄通道連接的二維電子氣導引(Lead)部分對量測的影響是我們應該考慮的。為了將和窄通道連接的二維電子氣導引部分納入考慮範圍，我們假想一個寬-窄-寬非緩變(non-adiabatic)的侷域位能系統，藉由導引與窄通道寬度的不同，模擬出實驗上分離閘極所產生準一維量子傳輸 [27]。每個導引皆有一些傳遞模態，所以不能簡單分解成一維系統，必需考慮模態之間的耦合情形。



3.1 理論模型與方法

圖 3.1 為我們寬-窄-寬(WNW)系統的俯視圖，其中藉由分離閘極(split-gate) 在 $-\frac{L}{2}$ 和 $\frac{L}{2}$ 之間產生一窄通道 (Narrow constriction)。這裡我們以遷移率較大的 AlGaAs-GaAs 異質結構所產生的二維電子氣為物理參數。在足夠低溫時的電子遷移率為 $\mu_e \sim 10^6 \text{ cm}^2 / \text{Vs}$ 、平均自由路徑為 $l_e \sim 1 \mu\text{m}$ ，而此時窄通道的部分即為彈道傳輸區域。

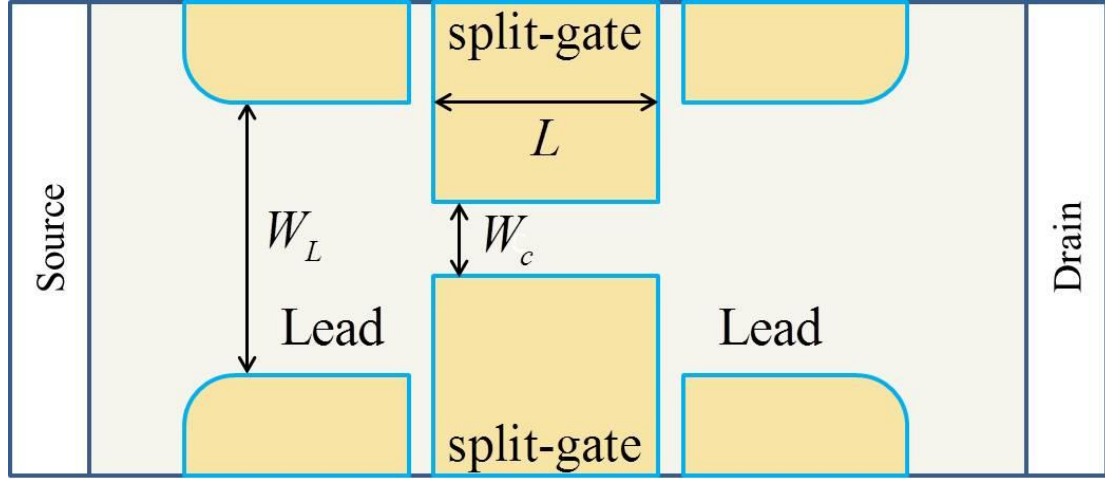


圖 3.1 寬-窄-寬結構的二維電子氣量子元件。其中 W_L 為導引的寬度， W_C 為窄通道的寬度， L 為窄通道的長度，左右兩端白色區域為源極與汲極，黃色區域為分離閘極，淺黃色區域為導引。

為了簡化，我們用以下單位把之後算式中的物理量作無因次化。能量

單位 $E^* = E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}$ 、波向量單位 $k^* = k_F$ 、長度單位 $a^* = \frac{1}{k_F}$ 、時間單位 $t^* = \frac{\hbar}{E_F}$ 、角頻率單位 $\omega^* = \frac{1}{t^*} = \frac{E_F}{\hbar}$ 。系統的漢米爾頓 (Hamiltonian) 為

$$H = -\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + V_C(x, y)$$

其中 $V_C(x, y)$ 是侷域位能，在這裡我們選擇的侷域位能為硬牆形式，所以在窄通道和導引中為

$$V_C(x, y) = \begin{cases} 0, & |x| < \frac{L}{2} \text{ and } |y| < \frac{W_C}{2} \\ 0, & |x| > \frac{L}{2} \text{ and } |y| < \frac{W_L}{2} \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases}$$

這裡的 W_L 和 W_C 分別對應到導引和窄通道中的通道寬度。

從導引中第 l 個通道入射的電子波函數為

$$\psi_l(x, y, t) = \begin{cases} e^{ik_l x} \chi_l(y) + \sum_{l'} r_{l'l} e^{-ik_{l'} x} \chi_{l'}(y) & , x < -\frac{L}{2} \\ \sum_{n'} (A_{n'l} e^{i\beta_n x} + B_{n'l} e^{-i\beta_n x}) \varphi_{n'}(y) & , -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ \sum_{l'} t_{l'l} e^{ik_{l'} x} \chi_{l'}(y) & , x > \frac{L}{2} \end{cases}$$

其中以下標 l' 和 n' 表示導引和窄通道中不同的子帶 (subband)。因

此導引和窄通道中，在第 l 個通道中以能量 E 運動的電子有效波向

量分別為 $k_l = \sqrt{E - \left(\frac{l\pi}{W_L}\right)^2}$ 和 $\beta_n = \sqrt{E - \left(\frac{n\pi}{W_C}\right)^2}$ 。在導引和窄通道中歸

一化後的縱向波函數為

$$\chi_l(y) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{W_L}} \sin\left[\frac{l\pi}{W_L} y + \frac{l\pi}{2}\right], & \text{if } |y| < \frac{W_L}{2} \\ 0 & , \text{otherwise} \end{cases}$$

$$\varphi_n(y) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{W_C}} \sin\left[\frac{n\pi}{W_C} y + \frac{n\pi}{2}\right], & \text{if } |y| < \frac{W_C}{2} \\ 0 & , \text{otherwise} \end{cases}$$

在邊界 $x = -\frac{L}{2}$ 和 $x = \frac{L}{2}$ 波函數的匹配條件如下：

邊界條件 1： $\psi_l(x, y)$ 在 $x = -\frac{L}{2}$ 連續

$$e^{-ik_l \frac{L}{2}} \chi_l(y) + \sum_{l'} r_{l'l} e^{ik_{l'} \frac{L}{2}} \chi_{l'}(y) = \sum_{n'} \left(A_{n'l} e^{-i\beta_n \frac{L}{2}} + B_{n'l} e^{i\beta_n \frac{L}{2}} \right) \varphi_{n'}(y) \quad (3.1)$$

邊界條件 2： $\frac{\partial}{\partial x} \psi_l(x, y)$ 在 $x = -\frac{L}{2}$ 連續

$$k_l e^{-ik_l \frac{L}{2}} \chi_l(y) - \sum_{l'} k_{l'} r_{l'l} e^{ik_{l'} \frac{L}{2}} \chi_{l'}(y) = \sum_{n'} \left(\beta_n A_{n'l} e^{-i\beta_n \frac{L}{2}} - \beta_n B_{n'l} e^{i\beta_n \frac{L}{2}} \right) \varphi_{n'}(y) \quad (3.2)$$

邊界條件 3： $\psi_l(x, y)$ 在 $x = \frac{L}{2}$ 連續

$$\sum_{n'} \left(A_{n'l} e^{i\beta_n \frac{L}{2}} + B_{n'l} e^{-i\beta_n \frac{L}{2}} \right) \varphi_{n'}(y) = \sum_{l'} t_{l'l} e^{ik_r \frac{L}{2}} \chi_{l'}(y)$$

邊界條件 4： $\frac{\partial}{\partial x} \psi_l(x, y)$ 在 $x = \frac{L}{2}$ 連續

$$\sum_{n'} \left(\beta_n A_{n'l} e^{i\beta_n \frac{L}{2}} - \beta_n B_{n'l} e^{-i\beta_n \frac{L}{2}} \right) \varphi_{n'}(y) = \sum_{l'} k_l t_{l'l} e^{ik_r \frac{L}{2}} \chi_{l'}(y)$$

因為波函數有正交性，我們運用重疊積分 (overlap integral)。由於我們選擇硬牆的侷限位能，在 $W_C < |y| < W_L$ 的邊界上波函數應為零，但波函數的斜率不一定會相等。所以波函數連續的邊界條件的重疊積分範圍應為導引的寬度範圍，而波函數斜率連續的邊界條件，重疊積分

範圍應為窄通道的寬度範圍。把以下兩個重疊積分 $\int_{\frac{W_C}{2}}^{\frac{W_L}{2}} dy \chi_m(y)$ 和 $\int_{\frac{W_C}{2}}^{\frac{W_C}{2}} dy \varphi_n(y)$ 分別代入(3.1)式和(3.2)式，得到

$$\delta_{ml} e^{-ik_m \frac{L}{2}} + r_{ml} e^{ik_m \frac{L}{2}} = \sum_{n'} \left(A_{n'l} e^{-i\beta_n \frac{L}{2}} + B_{n'l} e^{i\beta_n \frac{L}{2}} \right) a_{n'm} \quad (3.3)$$

$$k_l a_{nl} e^{-ik_l \frac{L}{2}} - \sum_{l'} k_{l'} a_{n'l'} e^{ik_{l'} \frac{L}{2}} r_{l'l} = \beta_n e^{-i\beta_n \frac{L}{2}} A_{nl} - \beta_n e^{i\beta_n \frac{L}{2}} B_{nl} \quad (3.4)$$

用相同的重疊積分方法在邊界 $x = \frac{L}{2}$ 上得到

$$\sum_{n'} \left(A_{n'l} e^{i\beta_n \frac{L}{2}} + B_{n'l} e^{-i\beta_n \frac{L}{2}} \right) a_{n'm} = t_{ml} e^{ik_m \frac{L}{2}} \quad (3.5)$$

$$\beta_n A_{nl} e^{i\beta_n \frac{L}{2}} - \beta_n B_{nl} e^{-i\beta_n \frac{L}{2}} = \sum_{l'} k_{l'} a_{n'l'} e^{ik_{l'} \frac{L}{2}} t_{l'l} \quad (3.6)$$

對應到不同縱向子帶態 (transverse sub-band states) 的重疊積分為

$$a_{nl} \equiv \int_{\frac{W_C}{2}}^{\frac{W_C}{2}} dy \varphi_n(y) \chi_l(y)$$

波函數的連續性邊界條件需考慮所有的子帶模態 (inter modes)，也

就是說 $\sum_m k_m a_{nm}$ ·(3.3)式

$$k_l a_{nl} e^{-ik_l \frac{L}{2}} + \sum_m k_m a_{nm} e^{ik_m \frac{L}{2}} r_{ml} = \sum_{n'} \left(A_{n'l} e^{-i\beta_{n'} \frac{L}{2}} + B_{n'l} e^{i\beta_{n'} \frac{L}{2}} \right) \left(\sum_m k_m a_{nm} a_{n'm} \right)$$

用 $S_{m'}$ 化簡後得到

$$k_l a_{nl} e^{-ik_l \frac{L}{2}} + \sum_m k_m a_{nm} e^{ik_m \frac{L}{2}} r_{ml} = \sum_{n'} \left(A_{n'l} e^{-i\beta_{n'} \frac{L}{2}} + B_{n'l} e^{i\beta_{n'} \frac{L}{2}} \right) S_{m'} \quad (3.7)$$

其中 $S_{m'} \equiv \sum_m a_{nm} k_m a_{n'm}$ °

用 (3.4)式和 (3.7)式消去反射振幅 (reflection amplitude) $r_{l'l}$

$$2k_l a_{nl} e^{-ik_l \frac{L}{2}} = \sum_{n'} \left[\left(S_{m'} e^{-i\beta_{n'} \frac{L}{2}} + \delta_{m'n'} \beta_{n'} e^{-i\beta_{n'} \frac{L}{2}} \right) A_{n'l} + \left(S_{m'} e^{i\beta_{n'} \frac{L}{2}} - \delta_{m'n'} \beta_{n'} e^{i\beta_{n'} \frac{L}{2}} \right) B_{n'l} \right] \quad (3.8)$$

同理，在邊界 $\frac{L}{2}$ 考慮所有的子帶，也就是說 $\sum_m k_m a_{nm}$ ·(3.5)式

$$\sum_{n'} \left(B_{n'l} e^{-i\beta_{n'} \frac{L}{2}} + A_{n'l} e^{i\beta_{n'} \frac{L}{2}} \right) S_{m'} = \sum_m k_m t_{ml} e^{ik_m \frac{L}{2}} a_{nm} \quad (3.9)$$

其中 $S_{m'} = \sum_m k_m a_{nm} a_{n'm}$ °

用 (3.6)式和 (3.9)式消去透射振幅 (transmission amplitude) $t_{l'l}$

$$\sum_{n'} \left[\left(S_{m'} - \delta_{m'n'} \beta_{n'} \right) e^{i\beta_{n'} \frac{L}{2}} A_{n'l} + \left(S_{m'} + \delta_{m'n'} \beta_{n'} \right) e^{-i\beta_{n'} \frac{L}{2}} B_{n'l} \right] = 0 \quad (3.10)$$

把(3.8)式用矩陣形式表示

$$\mathbf{K} = \mathbf{M}^+ \mathbf{A} + \mathbf{M} \mathbf{B} \quad (3.11)$$

其中的矩陣元為

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \vdots \\ A_{n'l} \\ \vdots \end{bmatrix}; \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} \vdots \\ B_{n'l} \\ \vdots \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \vdots \\ 2k_l a_{n'l} e^{-ik_l \frac{L}{2}} \\ \vdots \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}^- = \begin{bmatrix} \ddots & & & \cdot & & \cdot \\ \cdot & S_{nn'} e^{i\beta_n \frac{L}{2}} - \beta_{n'} \delta_{nn'} e^{i\beta_n \frac{L}{2}} & & & & \cdot \\ \cdot & & \ddots & & & \cdot \\ \cdot & & & \ddots & & \cdot \\ \cdot & & & & \ddots & \cdot \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}^+ = \begin{bmatrix} \ddots & & & \cdot & & \cdot \\ \cdot & S_{nn'} e^{-i\beta_n \frac{L}{2}} + \beta_{n'} \delta_{nn'} e^{-i\beta_n \frac{L}{2}} & & & & \cdot \\ \cdot & & \ddots & & & \cdot \\ \cdot & & & \ddots & & \cdot \\ \cdot & & & & \ddots & \cdot \end{bmatrix}$$

為了數值計算的可行性，使用模態截短的程序 (mode-truncation procedure) [32]。則矩陣方程(3.11)式由固定矩陣大小的矩陣所組成：

$$\begin{bmatrix} K_1 \\ K_2 \\ \vdots \\ K_{N_{tot}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11}^+ & \cdots & M_{1N_{tot}}^+ \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ M_{N_{tot}1}^+ & \cdots & M_{N_{tot}N_{tot}}^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{1l} \\ \vdots \\ A_{N_{tot}l} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} M_{11}^- & \cdots & M_{1N_{tot}}^- \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ M_{N_{tot}1}^- & \cdots & M_{N_{tot}N_{tot}}^- \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_{1l} \\ \vdots \\ B_{N_{tot}l} \end{bmatrix} \quad (3.12)$$

其中 N_{tot} 為考慮的總子帶數。

把 (3.10)式用矩陣形式表示

$$\mathbf{M}^- \mathbf{A} + \mathbf{M}^+ \mathbf{B} = \mathbf{0}$$

同樣藉由模態截短的程序將每個矩陣大小固定。

之後再利用上式，將 \mathbf{A} 矩陣用 \mathbf{B} 矩陣表示

$$\mathbf{B} = -(\mathbf{M}^+)^{-1} \mathbf{M}^- \mathbf{A} \quad (3.13)$$

將(3.13)式代回(3.11)式，得到 \mathbf{A} 矩陣為

$$\mathbf{A} = \left[\mathbf{M}^+ - \mathbf{M}^- (\mathbf{M}^+)^{-1} \mathbf{M}^- \right]^{-1} \mathbf{K}$$

將上式代回(3.13)式，得到 \mathbf{B} 矩陣為

$$\mathbf{B} = -(\mathbf{M}^+)^{-1} \mathbf{M}^- \left[\mathbf{M}^+ - \mathbf{M}^- (\mathbf{M}^+)^{-1} \mathbf{M}^- \right]^{-1} \mathbf{K}$$

在求得的 \mathbf{A} 和 \mathbf{B} 矩陣後，利用(3.3)式可知反射係數 (reflection coefficient) 矩陣為

$$\mathbf{R} = \mathbf{N}^- \mathbf{A} + \mathbf{N}^+ \mathbf{B}$$

利用(3.5)式可知穿射係數 (transmission coefficient) 矩陣為

$$\mathbf{T} = \mathbf{N}^+ \mathbf{A} + \mathbf{N}^- \mathbf{B}$$

其中的不同矩陣對應的矩陣元為

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \vdots \\ A_{n'l} \\ \vdots \end{bmatrix} ; \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} \vdots \\ B_{n'l} \\ \vdots \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \vdots \\ \delta_{ml} e^{-ik_m \frac{L}{2}} + r_{ml} e^{ik_m \frac{L}{2}} \\ \vdots \end{bmatrix} ; \quad \mathbf{T} = \begin{bmatrix} \vdots \\ t_{ml} e^{ik_m \frac{L}{2}} \\ \vdots \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{N}^- = \begin{bmatrix} \ddots & & & & & \\ & & & & & \\ & & a_{n'm} e^{-i\beta_n \frac{L}{2}} & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \ddots \\ & & & & & & \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{N}^+ = \begin{bmatrix} \ddots & & & & & \\ & & & & & \\ & & a_{n'm} e^{i\beta_n \frac{L}{2}} & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \ddots \\ & & & & & & \end{bmatrix}$$

其中 \mathbf{N}^+ 和 \mathbf{N}^- 為 $N_{tot} \times N_{tot}$ 方陣 ($m = n = N_{tot}$)。

在解出矩陣方程式後，我們得到從第 l 個子帶入射的電子的反射係數和透射係數：

$$R_l = \sum_{m=1}^{N_{tot}} R_{ml} ; T_l = \sum_{n'=1}^{N_{tot}} T_{n'l}$$

其中 $R_{ml} = |r_{ml}|^2 \frac{k_m}{k_l}$ 和 $T_{n'l} = |t_{n'l}|^2 \frac{\beta_{n'}}{k_l}$

從第 l 個子帶入射的電子需滿足歸一化的條件為：

$$R_l + T_l = 1$$

最後從 Landauer 理論得知，直流電導為電子從每個傳遞模態入射的穿透機率的加總結果：

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{l=1}^{L_{max}} T_l$$

其中 L_{max} 為最高的行進模態。 L_{max} 與入射電子能量 E 的關係為

$$\left[\frac{L_{max} \pi}{W_L} \right]^2 < \mu < \left[\frac{(L_{max} + 1) \pi}{W_L} \right]^2$$

或

$$L_{\max} = \text{Int} \left[\frac{\sqrt{E}}{\left(\frac{\pi}{W_L} \right)} \right]$$

這裡 $\text{Int}[x]$ 為 x 無條件捨去取到個位數。

3.2 數值結果與分析

在這一小節裡，首先我們計算沒有週期性交流電壓位能影響下 WNW 系統中間窄通道的束縛態(true bound state)。束縛態能量為

$E_{b.s.} = \left(\frac{n_x \pi}{L} \right)^2 + \left(\frac{n_y \pi}{W_C} \right)^2$ 。如果重新調整能量單位以窄通道的 y 方向無窮

深位能井的基態 $\varepsilon_1 = \left(\frac{\pi}{W_C} \right)^2$ 來表示，則束縛態能量為

$\underline{E}(n_x, n_y) \equiv \frac{E_{b.s.}}{\varepsilon_1} = \left(\frac{n_x W_C}{L} \right)^2 + n_y^2$ 。我們選定一組長度為 $L = 30 (\cong 240\text{nm})$

和寬度為 $W_C = 10 (\cong 80\text{nm})$ 的窄通道來做分析。此時最低的幾個束縛

態為 $E_{B1} \cong \underline{E}(1,1) = 1.11\bar{1}$ 、 $E_{B2} \cong \underline{E}(2,1) = 1.44\bar{4}$ 和 $E_{B3} \cong \underline{E}(3,1) = 2$ 。在

瞭解窄通道的束縛態能量後，這對 WNW-static 的共振態分析提供了一個比較的基準。

第一個部分的分析為討論寬窄比 (WN aspect ratio) 相等時，在此量子通道中，電子的傳輸無子帶間的耦合，其結果預期將與準一維系統一致。這裡我們固定 $W_L = W_C = 10$ 。圖 3.2 為電導與入射電子能量的關係。

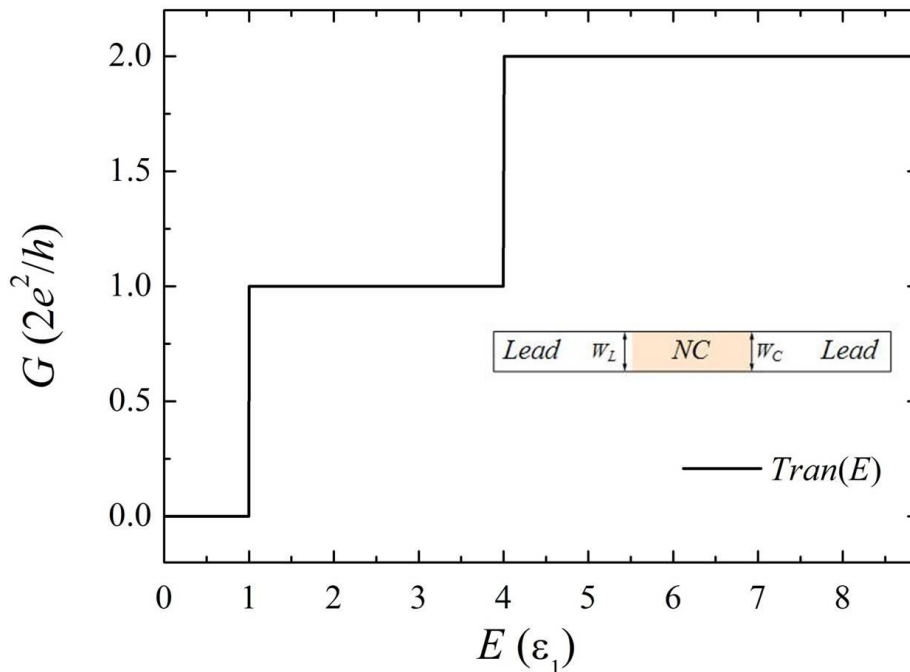


圖 3.2 電導對入射電子能量關係。系統參數為 $W_L = W_C = 10$ 、 $L = 30$ 。黑色實線為電導對能量的關係曲線，其在寬窄比為 1 時與準一維量子通道相同。

圖 3.2 中的黑色實線為電導對能量的關係曲線，其在寬窄比為 1 時與準一維系統相同，都具有量化電導的特性。

第二個部分的分析是導引的寬度效應，即導引和窄通道的寬度不同的電子傳輸情形。這裡我們固定窄通道的寬度 $W_C = 10$ 和長度 $L = 30$ 。改變導引的寬度為 $W_L = 10$ 、 15 、 20 。在這三種不同導引寬度的情形下，電導和入射電子能量的關係如圖 3.3。

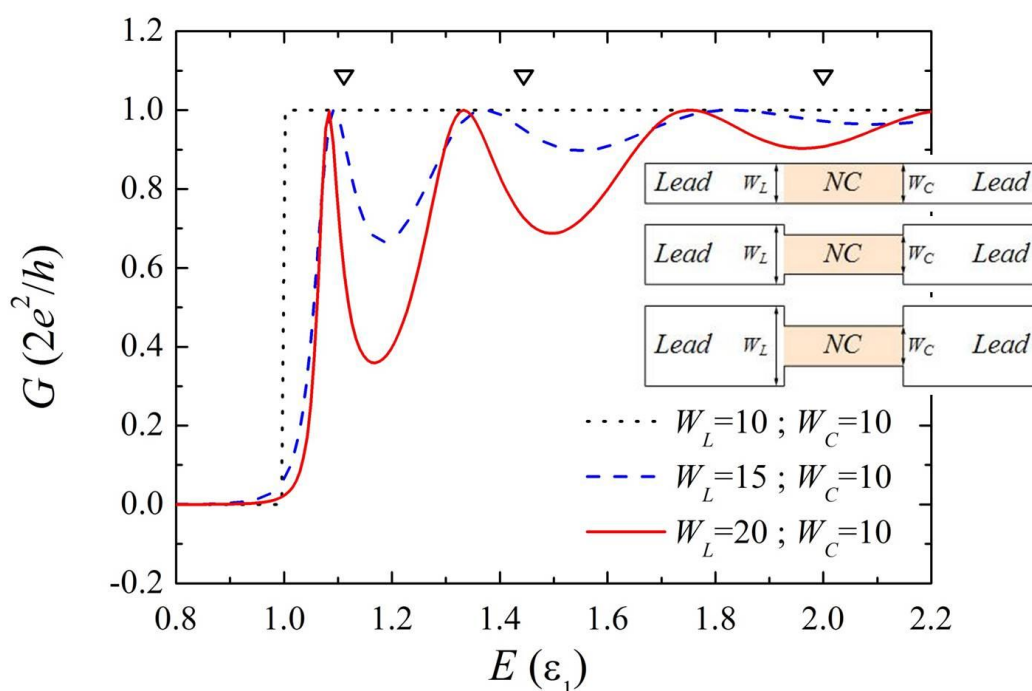


圖 3.3 電導對入射電子能量關係。系統參數為 $W_C = 10$ 、 $L = 30$ 。黑色點線為 $W_L = 10$ 。藍色虛線為 $W_L = 15$ 。紅色實線為 $W_L = 20$ 。黑色倒三角符號為窄通道的束縛態能量。

當導引寬度越寬時，電子開始受到傳輸通道變窄的影響而有背向散射 (back scattering) 的情形。而且寬窄比越大時，背向散射的情形越強。

除了背向散射以外，系統因為寬窄寬結構而有共振穿隧效應。為了討論共振態出現的能量，我們考慮電子入射能量包含前三個束縛態，發現共振態會有紅移 (red shift) 的現象，且能量越高的共振態，紅移的越多。由於窄通道的束縛態是以封閉系統硬牆模型做估算，因此會高估實際開放系統中窄通道的束縛態能量。

第三個部分為固定寬窄比，改變窄通道的長度 L ，比較不同窄通道長度下，共振穿隧的情形。這裡我們固定導引的寬度為 $W_L = 10$ 和窄通道的寬度 $W_C = 10$ 。改變窄通道的長度 $L = 10$ 、 20 、 30 。在這三

種不同窄通道長度的情形下，電導和入射電子能量的關係如圖 3.4。

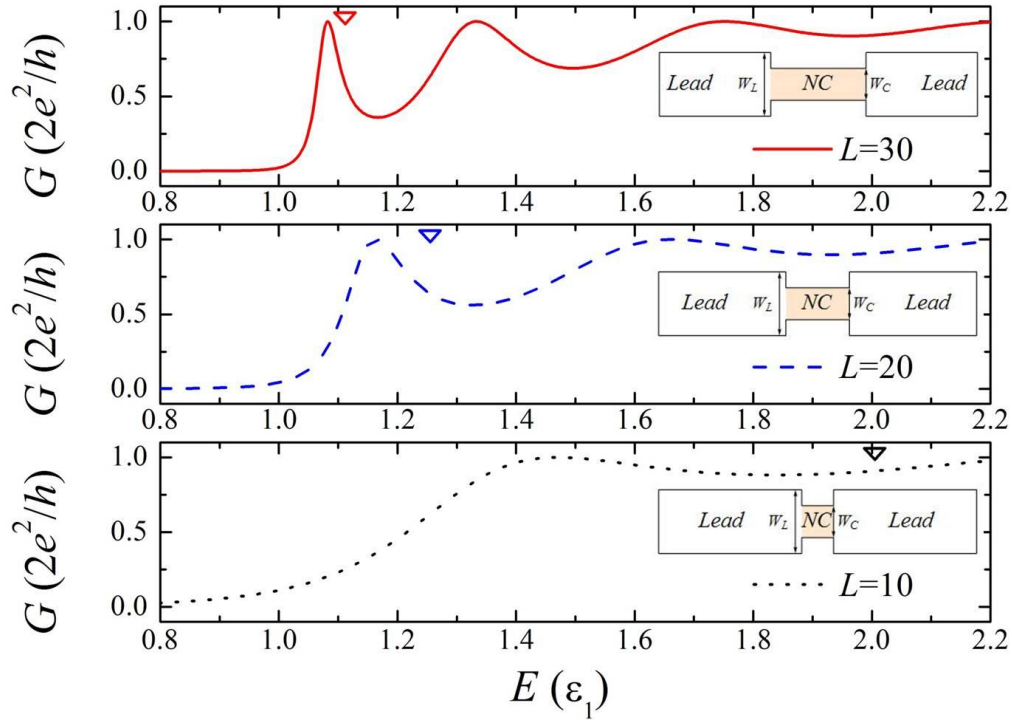


圖 3.4 電導對入射電子能量關係。系統參數為 $w_L = 20$ 、 $w_C = 10$ 。黑色點線為 $L = 10$ 。藍色虛線為 $L = 20$ 。紅色實線為 $L = 30$ 。倒三角符號為窄通道的束縛態能量。當窄通道長度 L 改變後，系統因為寬窄寬結構而有的共振穿隧效應，其共振態出現的能量將隨窄通道長度 L 的增長而越小。

以硬牆模型估算不同窄通道長度所對映的基態束縛態為 $E_{B1} \approx E(1,1) = \left(\frac{10}{L}\right)^2 + 1$ 。這裡三種不同窄通道長度 $L = 30$ 、 20 、 10 所對映的不同基態束縛態分別為 1.11、1.25、2。由此結果發現，窄通道長度越長，其共振態的量化越小，且越接近用硬牆估算的束縛態。

在這章裡，討論的重點在於寬-窄-寬侷域位能結構對電子傳輸的影響。由模擬結果可知，寬窄結構對物理機制的影響即電子因此產生

子帶間躍遷的情形。既然電子會在子帶間躍遷，那包含的子帶範圍就是第四部分我們進一步想瞭解的問題點。在解析所寫下的波函數中，展開的基底為硬牆位能井的波函數，理論上要考慮無窮多組基底才能符合完備性。但在數值計算中我們只能取有限個基底展開的連立方程式做計算，因此收斂的程度是這一部分我們關心的重點。同時在物理上，子帶的收斂反應的是電子所能活動的子帶範圍。

這裡我們適當地選取一組系統來做討論，參數為 $W_L = 20$ 、 $W_C = 10$ 、 $L = 30$ ，如圖 3.5。其中 N_{tot} 為系統所考慮的總子帶數。

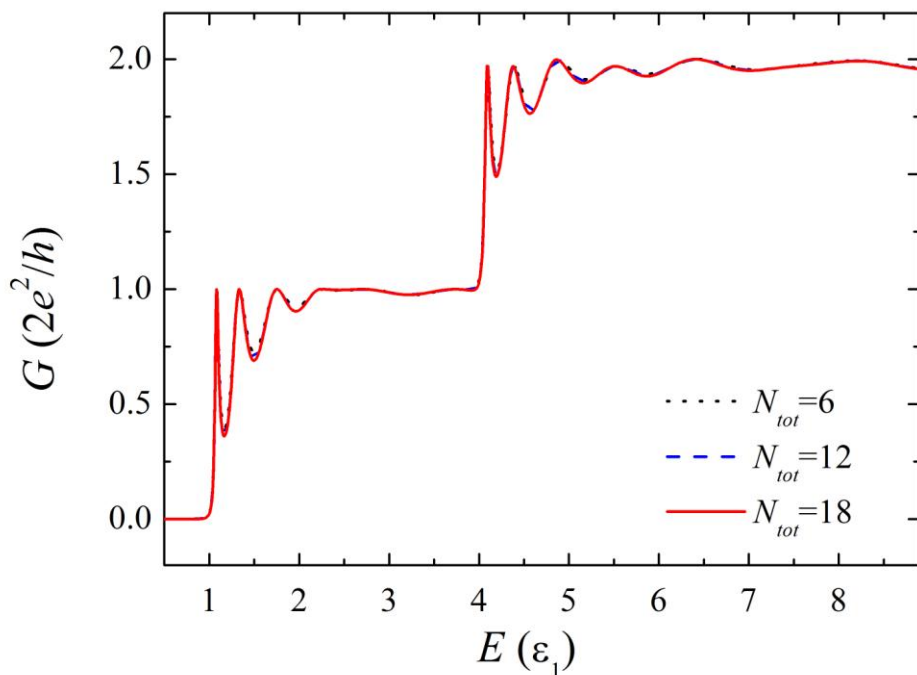


圖 3.5 考慮不同子帶數，電導對入射電子能量的收斂情形。黑色點線代表考慮 6 個子帶。藍色虛線代表考慮 12 個子帶。紅色實線代表考慮 18 個子帶。 N_{tot} 為系統所考慮的總子帶數。

針對入射電子能量在第一個子帶的範圍做討論如圖 3.6。

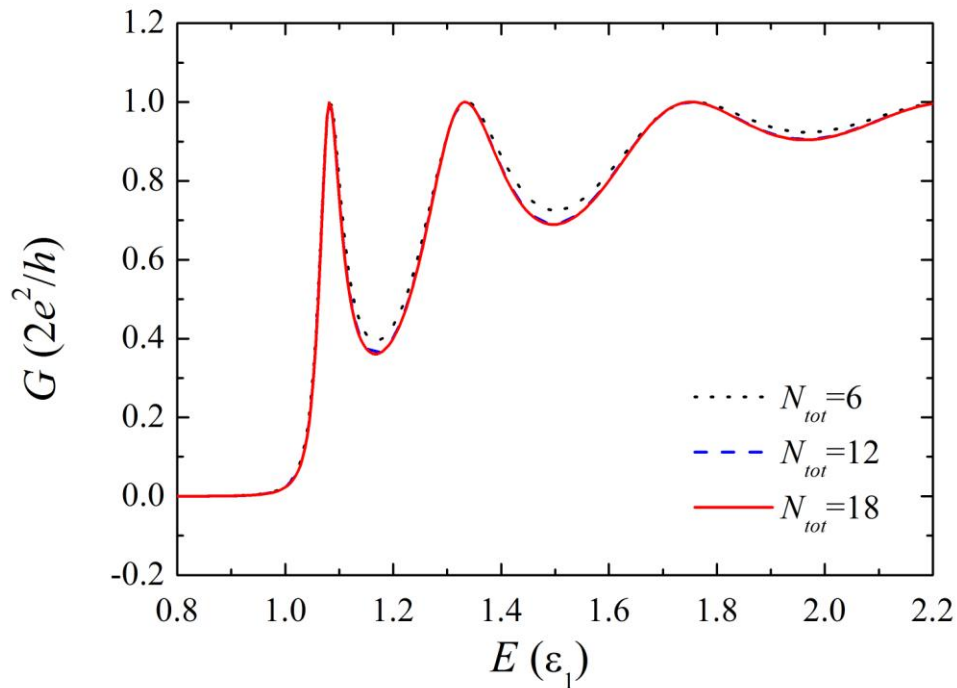


圖 3.6 取入射電子能量範圍在第一個子帶，考慮不同子帶數，電導對入射電子能量的收斂情形。黑色點線代表考慮 6 個子帶。藍色虛線代表考慮 12 個子帶。紅色實線代表考慮 18 個子帶。 $2N_{tot}$ 為系統所考慮的總子帶數。

由圖 3.6 中可看出考慮 12 個子帶後，入射電子能量範圍在第一個子帶之內時，電導的計算即收斂，換句話說，電子耦合的子帶到比第 12 個子帶還高機率極低。

針對入射電子能量在第二個子帶的範圍做討論如圖 3.7。

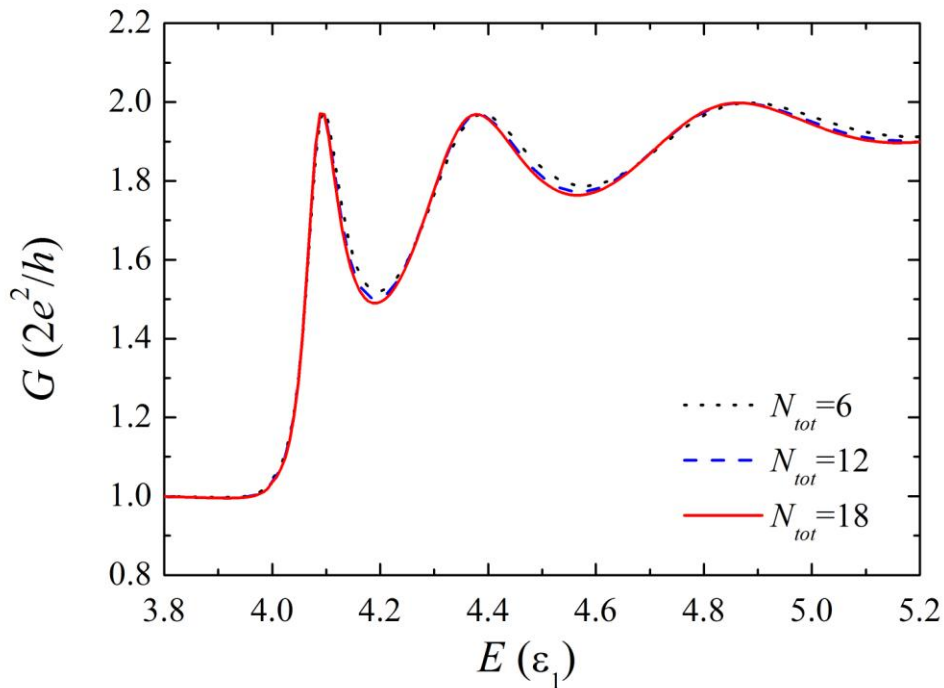


圖 3.7 取入射電子能量範圍在第二個子帶，考慮不同子帶數，電導對入射電子能量的收斂情形。黑色點線代表考慮 6 個子帶。藍色虛線代表考慮 12 個子帶。紅色實線代表考慮 18 個子帶。 $2N_{tot}$ 為系統所考慮的總子帶數。

由圖 3.7 中可看出考慮 12 個子帶後，電導的計算即收斂，換句話說，電子耦合的子帶到比第 12 個子帶還高機率極低。比較圖 3.6 和圖 3.7，發現入射電子能量較低時收斂速度較快。除此之外，共振峰值的收斂性又比共振谷值的收斂性好。

第四章 寬-窄-寬元件的動態量子傳輸

我們的最終目的地是用轉移矩陣建構一個數值解方法，它可計算在有限偏壓下工作的任意二維結構量子元件[28]。在這四章裡，我們先用模態匹配法討論寬-窄-寬時變系統可能存在的物理機制。

時變量子傳輸的實驗方面，T.H.Oosterkamp 和 L.P.Kouwenhoven 等人在 1997 年的 PRL 期刊上發表了一篇與量子點光輔助傳輸相關的實驗。他們在 GaAs/AlGaAs 的二維電子氣上利用兩對金屬閘極製造出兩個量子點接觸，並在兩個量子點接觸中間，配合另一組金屬閘極，定義出一個量子點，如圖中的小圖所示。在其中一個中央閘極外加微信號 ΔV_g ，並研究此系統中的動態量子傳輸。這個實驗結果有兩項重要的結論：1. 當光子能量比量子點的量化能階還小時，發現基態的邊帶共振。2. 當光子能量比量子點的量化能階還大時，發現光子誘發的激發態共振。藉由研究光輔助傳輸的實驗，瞭解研究兩個量子點耦合的 Rabi-type 振盪的可行性。

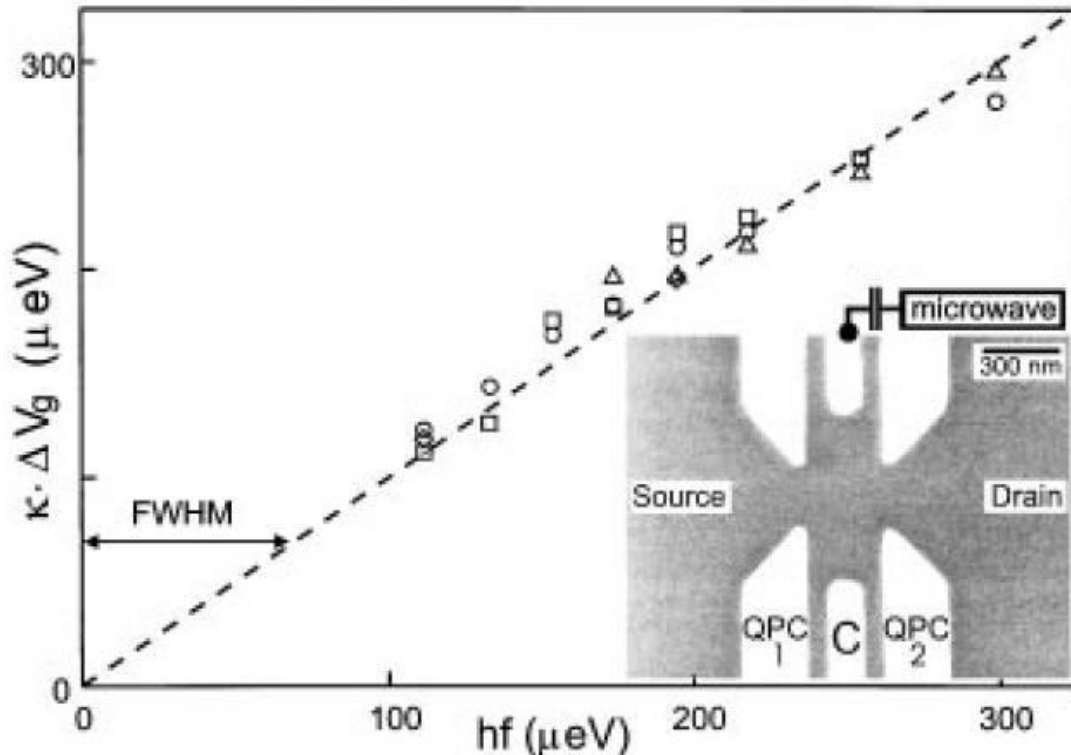


圖 4.1 邊帶峰值間距與光子能量的關係。 κ 代表電壓與能量的轉換係數。FWHM 代表未加微波信號的共振態半高寬。來源取自 T.H.Oosterkamp et al., Phys. Rev. Lett. 78, 1536(1997)。

4.1 理論模型與方法

在這一小節裡，我們將從數值結果分析週期性交流電壓位能對量子傳輸的影響。在以下的分析裡，我們選擇能量單位 $E^* = 9\text{meV}$ ，長度單位 $a^* = 8\text{nm}$ ，角頻率單位 $\omega^* = 13.6\text{Trad/s}$ ，和 GaAs 的電子有效質量 $m^* = 0.067m_e$ 。為了使電導和子帶的關係能一目瞭然，我們定義 ε_1 為在窄通道中第一個子帶能階，而之後所分析的結果均以此為單位。

在瞭解沒有週期性交流電壓位能影響下的傳輸行為之後，我們將

把週期性交流電壓位能加進來，做一系列的比較分析，以瞭解電子在時變傳輸時的物理機制[29]。

4.1.1 量子通道的理論模型

幾何形狀的部分，量子通道的寬度為 W ，時變通道的長度為 L 。圖 4.2 為寬窄寬元件理想的實驗裝置圖。在二維電子氣上外加分離閘極(split gate)，使其產生一連接兩端導引的窄通道。外加頂閘極提供在時變通道內的直流和交流電壓位能。其中在頂閘極和分離閘極間利用 PMMA 使兩電極可互相獨立操作而不受影響。

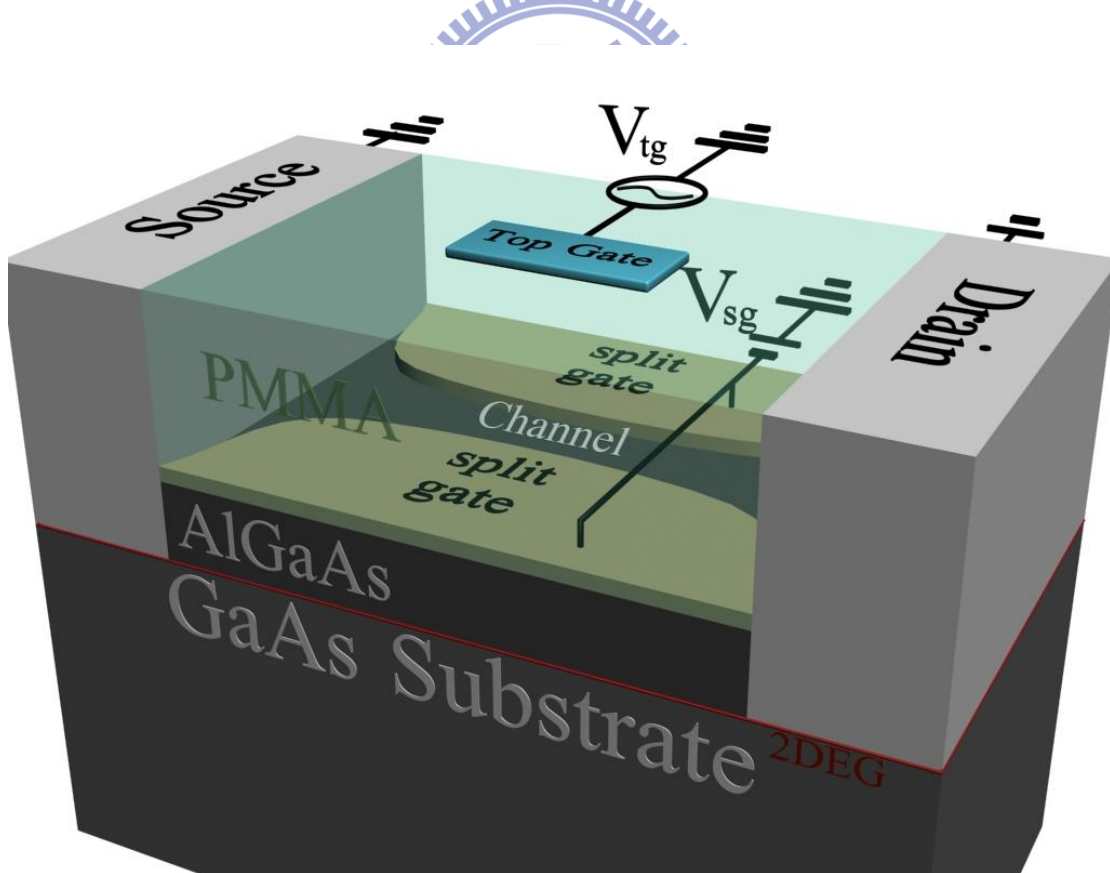


圖 4.2 寬-窄-寬結構的二維電子氣量子元件。藉由頂閘極(top gate)產生交流電壓位能，分離閘極(split gate)產生時變通道。

圖 4.3 為我們系統的俯視圖，其中藉由頂閘極 (top-gate) 在時變通道

中產生週期性交流電壓位能。這裡我們以遷移率較大的異質結構二維電子氣為物理參數，例如在足夠低溫時的遷移率為 $\mu_e \sim 10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 、平均自由路徑為 $l_e \sim 1 \mu\text{m}$ ，而此時窄通道的部分即為彈道傳輸區域。

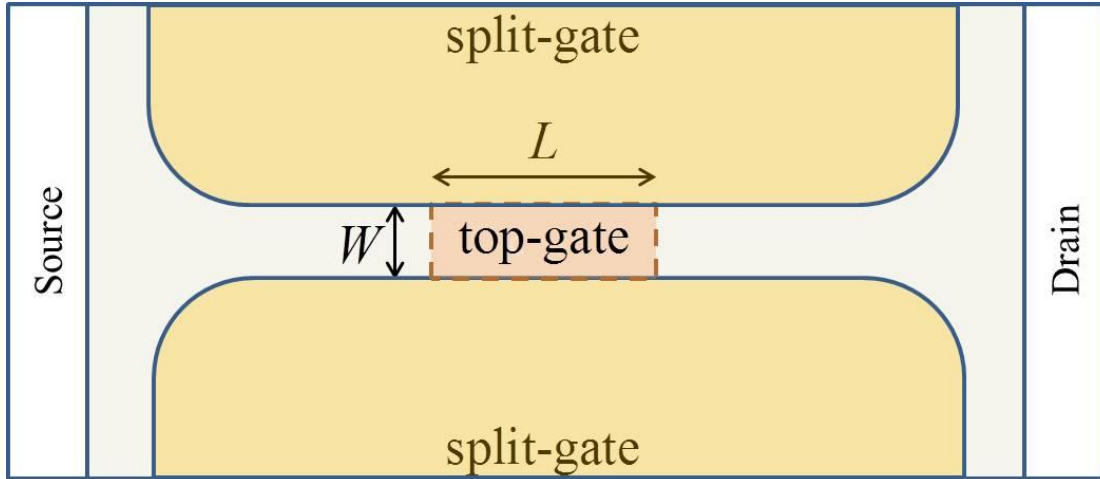


圖 4.3 寬-窄-寬結構的二維電子氣量子元件。其中 W 為量子通道寬度， L 為量子通道中時變區域的長度，左右兩端白色區域為源極與汲極，黃色區域為分離閘極，淺黃色區域為導引，橘色區域為產生週期性交流電壓位能的頂閘極。

系統的漢米爾頓 (Hamiltonian) 為

$$H = -\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + V_c(x, y) + V(x, t)$$

其中 $V_c(x, y)$ 是侷域位能 (confining potential energy)，在這裡我們選擇的侷域位能 $V_c(x, y)$ 為硬牆形式，所以 $V_c(x, y)$ 在量子通道中為

$$V_c(x, y) = \begin{cases} 0 & , |y| < \frac{W}{2} \\ \infty & , otherwise \end{cases}$$

這裡的 W 代表量子通道寬度。 L 代表時變通道長度。我們考慮在量子通道上外加一頂閘極所產生的電壓位能 $V(x, t)$ 為：

$$V(x,t) = [V_B + V_0 \cos(\omega t)] \theta\left(\frac{L}{2} - |x|\right)$$

其中 $V(x,t)$ 包括一個直流電壓位能 V_B 以及一個交流電壓位能 $V_0 \cos(\omega t)$ ，其電壓位能強度為 V_0 ，而 ω 為交流電壓位能的角頻率， L 為時變通道的長度。

為了簡化，我們用以下單位把之後算式中的物理量作無因次化。
 能量單位 $E^* = \hbar^2 k_F^2 / 2m^*$ 、波向量單位 $k^* = k_F$ 、長度單位 $a^* = 1/k_F$ 、
 時間單位 $t^* = \hbar / E_F$ 、角頻率單位 $\omega^* = 1/t^* = E_F / \hbar$ 。無因次化後的
 Schrödinger 方程式為

$$\left[-\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V_c(x,y) + V(x,t) \right] \Psi(x,y,t) = i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,y,t)$$

這裡我們利用分離變數法將波函數寫成

$$\Psi_l(x,y,t) = \psi_l(x,t) \phi_l(y)$$

其中 $\psi_l(x,t)$ 為電子傳輸方向波函數，而 $\phi_l(y)$ 為局域方向的電子波函數。參考圖 4.3 的座標將局域方向的電子波函數寫成

$$\phi_l(y) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{W}} \sin\left(\frac{n\pi}{W} y + \frac{n\pi}{2}\right), & |y| \leq \frac{W}{2} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

從導引中第 l 個通道入射的電子波函數為

$$\psi_l(x,t) = \begin{cases} e^{ik_l(E)x} e^{-iEt} + \sum_{m'} r_l(m') e^{-ik_l(E+m'\omega)x} e^{-i(E+m'\omega)t} & , x < -\frac{L}{2} \\ \int d\varepsilon \left[\tilde{B}_l(\varepsilon) e^{-i\beta_l(\varepsilon)x} + \tilde{A}_l(\varepsilon) e^{i\beta_l(\varepsilon)x} \right] e^{-i\varepsilon t} e^{-i\frac{V_0}{\omega} \sin(\omega t)} & , -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ \sum_{m'} t_l(m') e^{ik_l(E+m'\omega)x} e^{-i(E+m'\omega)t} & , x > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (4.1)$$

其中以下標 l 表示導量子通道中不同的子帶 (subband)，以下標 m' 表示不同的邊帶 (sideband)。因此在量子通道和時變通道中，第 l 個通道以能量 E 運動的電子有效波向量分別為 $k_l = [E - (l\pi/W)^2]^{1/2}$ 和 $\beta_l = [E - (l\pi/W)^2 - V_B]^{1/2}$ 。為了使邊界條件的匹配在所有時間點皆符合，積分式(4.8)式裡的能量變數 ε 必需為離散值 $E + m'\omega$ 。由此我們

可以寫出如下兩個條件

$$\begin{aligned} \tilde{A}_l(\varepsilon) &= \sum_{m'} A_l(m') \delta(\varepsilon - E - m'\omega) \\ \tilde{B}_l(\varepsilon) &= \sum_{m'} B_l(m') \delta(\varepsilon - E - m'\omega) \end{aligned}$$

把 $e^{-i\left(\frac{V_0}{\omega}\right)\sin(\omega t)}$ 項 傅 利 葉 轉 換 (Fourier transform) 成

$$e^{-i\left(\frac{V_0}{\omega}\right)\sin(\omega t)} = \sum_p J_p\left(\frac{V_0}{\omega}\right) e^{-ip\omega t} \quad [19], \text{ 得到波函數為}$$

$$\psi_l(x,t) = \begin{cases} e^{ik_l(E)x} e^{-iEt} + \sum_{m'} r_l(m') e^{-ik_l(E+m'\omega)x} e^{-i(E+m'\omega)t} & , x < -\frac{L}{2} \\ \left[\sum_{m'} B_l(m') e^{-i\beta_l(E+m'\omega)x} + \sum_{m'} A_l(m') e^{i\beta_l(E+m'\omega)x} \right] e^{-i(E+m'\omega)t} e^{-i\frac{V_0}{\omega} \sin(\omega t)}, & |x| < \frac{L}{2} \\ \sum_{m'} t_l(m') e^{ik_l(E+m'\omega)x} e^{-i(E+m'\omega)t} & , x > \frac{L}{2} \end{cases}$$

重新把波函數寫成第 m 個邊帶波函數的相加形式 $\psi_l = \sum_m \psi_l^m(x,y)$

$e^{-ip(E+m\omega)t}$ ，抽離出第 m 個邊帶的波函數為

$$\psi_l^m(x) = \begin{cases} \delta_{m0} e^{ik_l(E+m\omega)x} + r_l(m) e^{-ik_l(E+m\omega)x} & , x < -\frac{L}{2} \\ \sum_{m'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) A_l(m) e^{i\beta_l(E+m'\omega)x} \\ + \sum_{m'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) B_l(m) e^{-i\beta_l(E+m'\omega)x} & , |x| < \frac{L}{2} \\ t_l(m') e^{ik_l(E+m\omega)x} & , x > \frac{L}{2} \end{cases}$$

在邊界 $x = -L/2$ 和 $x = L/2$ 做第 m 個邊帶波函數的匹配。

邊界條件 1： $\psi_l^m(x)$ 在 $x = -L/2$ 連續

$$\begin{aligned} & \delta_{m0} e^{-ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}} + r_l(m) e^{ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}} \\ & = \sum_{m'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) \left[A_l(m') e^{-i\beta_l(E+m'\omega)\frac{L}{2}} + B_l(m') e^{i\beta_l(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \right] \end{aligned} \quad (4.2)$$

邊界條件 2： $\partial \psi_l^m(x)/\partial x$ 在 $x = -L/2$ 連續

$$\begin{aligned} & \delta_{m0} k_l(E+m\omega) e^{-ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}} - k_l(E+m\omega) r_l(m) e^{ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}} \\ & = \sum_{m'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) \left[\beta_l(E+m'\omega) A_l(m') e^{-i\beta_l(E+m'\omega)\frac{L}{2}} - \beta_l(E+m'\omega) B_l(m') e^{i\beta_l(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \right] \end{aligned} \quad (4.3)$$

邊界條件 3： $\psi_l^m(x)$ 在 $x = L/2$ 連續

$$\begin{aligned} & \sum_{m'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) \left[A_l(m') e^{i\beta_l(E+m'\omega)\frac{L}{2}} + B_l(m') e^{-i\beta_l(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \right] \\ & = t_l(m) e^{ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}} \end{aligned} \quad (4.4)$$

邊界條件 4： $\partial \psi_l^m(x)/\partial x$ 在 $x = L/2$ 連續

$$\begin{aligned} & \sum_{m'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) \left[\beta_l(E+m'\omega) A_l(m') e^{i\beta_l(E+m'\omega)\frac{L}{2}} - \beta_l(E+m'\omega) B_l(m') e^{-i\beta_l(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \right] \\ & = k_l(\mu+m\omega) t_l(m) e^{ik_l(\mu+m\omega)\frac{L}{2}} \end{aligned} \quad (4.5)$$

用 (4.2) 式和 (4.3) 式消去反射振幅 (reflection amplitude) $r_l(m)$

$$\begin{aligned}
& 2\delta_{m_0} k_l (E+m\omega) e^{-ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}} \\
& = \sum_{m'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) \left[K_l^+(m; m') A_l(m') e^{-i\beta_l(E+m'\omega)\frac{L}{2}} + K_l^-(m; m') B_l(m') e^{i\beta_l(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \right] \quad (4.6)
\end{aligned}$$

其中 $K_l^\pm(m; m') \equiv k_l(E+m\omega) \pm \beta_l(E+m'\omega)$

同理，用 (4.4) 式和 (4.5) 式消去穿透振幅(transmission amplitude) $t_l(m)$

$$\sum_{m'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) \left[K_l^-(m; m') A_l(m') e^{i\beta_l(E+m'\omega)\frac{L}{2}} + K_l^+(m; m') B_l(m') e^{-i\beta_l(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \right] = 0 \quad (4.7)$$

把(4.6)式和 (4.7)式用矩陣形式表示

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M}_{11} & \mathbf{M}_{12} \\ \mathbf{M}_{21} & \mathbf{M}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{B} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{K} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

其中的子矩陣為

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} A_l(m') \\ \vdots \\ A_l(m') \\ \vdots \end{bmatrix}; \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} B_l(m') \\ \vdots \\ B_l(m') \\ \vdots \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \vdots \\ 2\delta_{m_0} k_l (E+m\omega) e^{-ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}} \\ \vdots \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{11} = \begin{bmatrix} \ddots & & & \\ \cdot & M_{11}(m; m') & \cdot & \\ \cdot & & \ddots & \\ \cdot & & & \ddots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \ddots & & & \\ \cdot & K_l^+(m; m') J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) e^{-i\beta_l(E+m'\omega)\frac{L}{2}} & \cdot & \\ \cdot & & \ddots & \\ \cdot & & & \ddots \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{12} = \begin{bmatrix} \ddots & & & \\ \cdot & M_{12}(n, m; n', m') & \cdot & \\ \cdot & & \ddots & \\ \cdot & & & \ddots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \ddots & & & \\ \cdot & K_l^-(m; m') J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) e^{i\beta_l(E+m'\omega)\frac{L}{2}} & \cdot & \\ \cdot & & \ddots & \\ \cdot & & & \ddots \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{21} = \begin{bmatrix} \ddots & & & \\ \cdot & M_{21}(n, m; n', m') & \cdot & \\ \cdot & & \ddots & \\ \cdot & & & \ddots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \ddots & & & \\ \cdot & K_l^-(m; m') J_{m-m'}\left(\frac{V_0}{\omega}\right) e^{i\beta_n(E+m'\omega)\frac{L}{2}} & \cdot & \\ \cdot & & \ddots & \\ \cdot & & & \ddots \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{22} = \begin{bmatrix} \ddots & & & \\ \cdot & M_{22}(n, m; n', m') & \cdot & \\ \cdot & & \ddots & \\ \cdot & & & \ddots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \ddots & & & \\ \cdot & K_l^+(m; m') J_{m-m'}\left(\frac{V_0}{\omega}\right) e^{-i\beta_n(E+m'\omega)\frac{L}{2}} & \cdot & \\ \cdot & & \ddots & \\ \cdot & & & \ddots \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{21} = \mathbf{M}_{12} \quad ; \quad \mathbf{M}_{22} = \mathbf{M}_{11}$$

為了數值計算的可行性，使用模態截短的程序 (mode-truncation procedure) [32]。則矩陣方程由固定矩陣大小的矩陣所組成：

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} A_l(-M_{\max}) \\ \vdots \\ A_l(M_{\max}) \end{bmatrix} ; \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} B_l(-M_{\max}) \\ \vdots \\ B_l(M_{\max}) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 2\delta_{m0} k_l(E+m\omega) e^{-ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}} \\ \vdots \\ 2\delta_{m0} k_l(E+m\omega) e^{-ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 2k_l(E) e^{-ik_l(E)\frac{L}{2}} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{11} = \begin{bmatrix} M_{11}(-M_{\max}; -M_{\max}) & \cdot & M_{11}(-M_{\max}; M_{\max}) \\ \cdot & \ddots & \cdot \\ M_{11}(M_{\max}; 1, -M_{\max}) & \cdot & M_{11}(M_{\max}; M_{\max}) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{12} = \begin{bmatrix} M_{12}(-M_{\max}; 1, -M_{\max}) & \cdot & M_{12}(-M_{\max}; M_{\max}) \\ \cdot & \ddots & \cdot \\ M_{12}(M_{\max}; 1, -M_{\max}) & \cdot & M_{12}(M_{\max}; M_{\max}) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{21} = \begin{bmatrix} M_{21}(-M_{\max}; -M_{\max}) & \cdot & M_{21}(-M_{\max}; M_{\max}) \\ \cdot & \ddots & \cdot \\ M_{21}(M_{\max}; -M_{\max}) & \cdot & M_{21}(M_{\max}; M_{\max}) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{22} = \begin{bmatrix} M_{22}(-M_{\max}; -M_{\max}) & \cdot & M_{22}(-M_{\max}; M_{\max}) \\ \cdot & \ddots & \cdot \\ M_{22}(M_{\max}; -M_{\max}) & \cdot & M_{22}(M_{\max}; M_{\max}) \end{bmatrix}$$

其中 M_{\max} 為最大可吸放光子數。這裡定義 M_{tot} 為考慮的總邊帶數，其與光子散射個數的關係為

$$M_{\text{tot}} = 2M_{\max} + 1$$

利用子矩陣的運算，我們得到時變通道中的波函數振幅 $A_l(m')$ 和 $B_l(m')$ 的大小：

$$\mathbf{M}_{11}\mathbf{A} + \mathbf{M}_{12}\mathbf{B} = \mathbf{K} ; \mathbf{M}_{21}\mathbf{A} + \mathbf{M}_{22}\mathbf{B} = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{B} = -\mathbf{M}_{22}^{-1}\mathbf{M}_{21}\mathbf{A} = -\mathbf{M}_{11}^{-1}\mathbf{M}_{12}\mathbf{A}$$

$$\mathbf{A} = [\mathbf{M}_{11} - \mathbf{M}_{12}\mathbf{M}_{22}^{-1}\mathbf{M}_{21}]^{-1} \mathbf{K}$$

把 (4.2)式和(4.4)式用矩陣形式表示

$$\begin{bmatrix} \mathbf{N}_{11} & \mathbf{N}_{12} \\ \mathbf{N}_{21} & \mathbf{N}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{B} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{T} \\ \mathbf{R} \end{bmatrix}$$

其中的矩陣元為

$$\mathbf{T} = t_l(m) e^{ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}}$$

$$\mathbf{R} = \delta_{m0} e^{-ik_l(E)\frac{L}{2}} + r_l(m) e^{ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}}$$

$$\mathbf{N}_{11} = J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) e^{i\beta_l(E+m'\omega)\frac{L}{2}}$$

$$\mathbf{N}_{12} = J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) e^{-i\beta_l(E+m'\omega)\frac{L}{2}}$$

$$\mathbf{N}_{21} = \mathbf{N}_{12} \quad ; \quad \mathbf{N}_{22} = \mathbf{N}_{11}$$

在解出矩陣方程式後，我們得到從第 l 個子帶入射的電子的反射係數和透射係數：

$$R_l = \sum_{m=-M_{\max}}^{M_{\max}} R_l(m) \quad ; \quad T_l = \sum_{m=-M_{\max}}^{M_{\max}} T_l(m)$$

$$\text{其中 } R_l(m) = |r_l(m)|^2 \frac{k_l(E+m\omega)}{k_l(E)} \quad \text{和} \quad T_l(m) = |t_l|^2 \frac{k_l(E+m\omega)}{k_l(E)}$$

從第 l 個子帶入射的電子需滿足歸一化的條件為：

$$R_l + T_l = 1$$

最後直流電導為電子從每個子帶入射的穿透機率加總的結果：

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{l=1}^{L_{\max}} T_l$$

其中 L_{\max} 為最高的傳導模態。 L_{\max} 與入射電子能量 μ 的關係為

$$\left[\frac{L_{\max} \pi}{W} \right]^2 < \mu < \left[\frac{(L_{\max} + 1) \pi}{W} \right]^2$$

或

$$L_{\max} = \text{Int} \left[\frac{\sqrt{E}}{\left(\frac{\pi}{W} \right)} \right]$$

這裡 $\text{Int}[x]$ 為 x 無條件捨去取到個位數。

4.1.2 寬-窄-寬元件的理論模型

幾何形狀的部分，導引的寬為 W_L ，窄通道的寬為 W_C ，窄通道的長度為 L 。圖 4.4 為寬窄寬元件理想的實驗裝置圖。在二維電子氣上外加分離閘極(split gate)，使其產生一連接兩端導引的窄通道。外加頂閘極提供在窄通道內的直流和交流電壓位能。其中在頂閘極和分離閘極間利用 PMMA 使兩電極可互相獨立操作而不受影響。

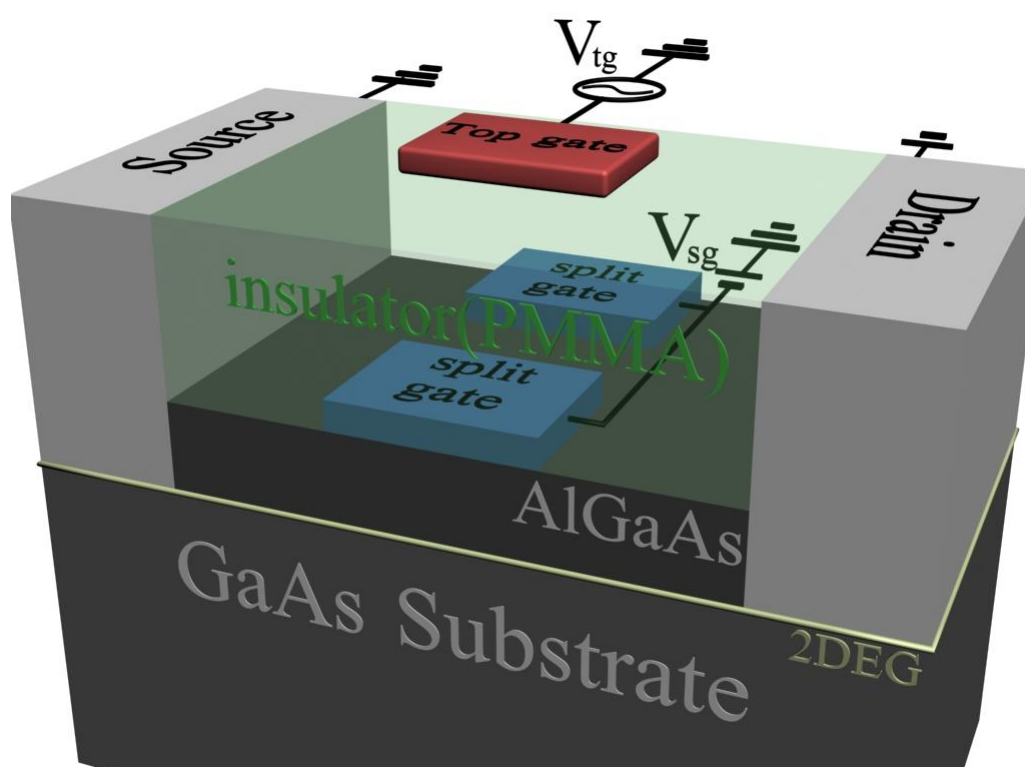


圖 4.4 寬-窄-寬結構的二維電子氣量子元件。藉由頂閘極(top gate)產生交流電壓位能，分離閘極(split gate)產生一窄通道。

圖 4.5 為我們系統的俯視圖，其中藉由頂閘極 (top-gate) 在窄通道 (narrow channel, NC) 中產生週期性交流電壓位能。這裡我們以遷移率較大的異質結構二維電子氣為物理參數，例如在足夠低溫時的遷移率為 $\mu_e \sim 10^6 \text{cm}^2/\text{Vs}$ 、平均自由路徑為 $l_e \sim 1 \mu\text{m}$ ，而此時窄通道的部分

即為彈道傳輸區域。

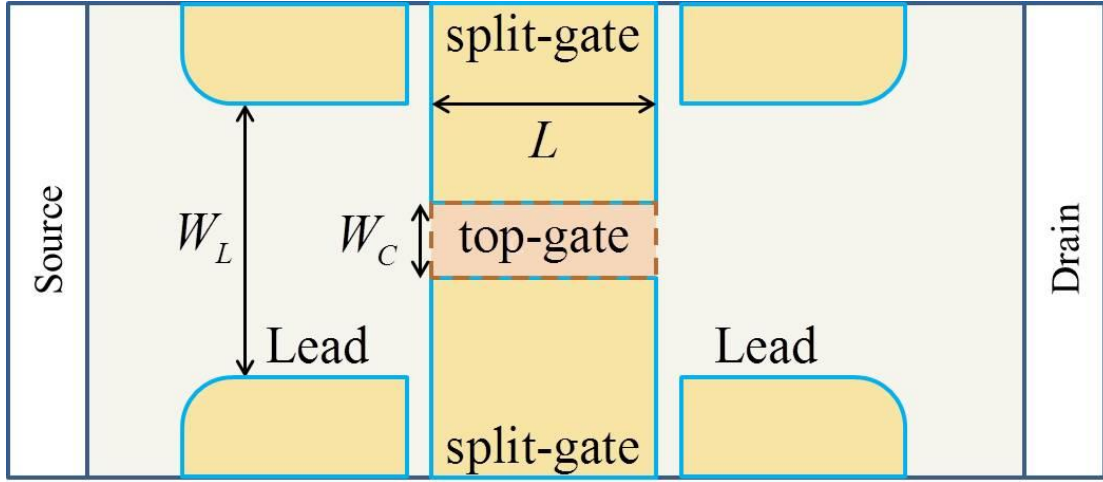


圖 4.5 寬-窄-寬結構的二維電子氣量子元件。其中 W_L 為導引的寬度， W_C 為窄通道的寬度， L 為窄通道的長度，左右兩端白色區域為源極與汲極，黃色區域為分離閘極，淺黃色區域為導引，橘色區域為產生週期性交流電壓位能的頂閘極。

系統的漢米爾頓 (Hamiltonian) 為

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V_c(x, y) + V(x, t)$$

其中 $V_c(x, y)$ 是侷域位能 (confining potential energy)，在這裡我們選擇的侷域位能 $V_c(x, y)$ 為硬牆形式，所以 $V_c(x, y)$ 在窄通道和導引中為

$$V_c(x, y) = \begin{cases} 0, & |x| < \frac{L}{2} \text{ and } |y| < \frac{W_C}{2} \\ 0, & |x| > \frac{L}{2} \text{ and } |y| < \frac{W_L}{2} \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases}$$

這裡的 W_L 和 W_C 分別對應到導引和窄通道中的通道寬度。而週期性交流電壓位能的部分則作用在窄通道之上。我們考慮在窄通道上外加一頂閘極所產生的電壓位能 $V(x, t)$ 為：

$$V(x, t) = [V_B + V_0 \cos(\omega t)] \theta\left(\frac{L}{2} - |x|\right)$$

其中 $V(x,t)$ 包括一個直流電壓位能 V_B 以及一個交流電壓位能 $V_0 \cos(\omega t)$ ，其電壓位能強度為 V_0 ，而 ω 為交流電壓位能的角頻率， L 為窄通道的長度。

為了簡化，我們用以下單位把之後算式中的物理量作無因次化。
 能量單位 $E^* = \hbar^2 k_F^2 / 2m^*$ 、波向量單位 $k^* = k_F$ 、長度單位 $a^* = 1/k_F$ 、
 時間單位 $t^* = \hbar / E_F$ 、角頻率單位 $\omega^* = 1/t^* = E_F / \hbar$ 。無因次化後的
 Schrodinger 方程式為

$$\left[-\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V_c(x, y) + V(x, t) \right] \Psi(x, y, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, y, t)$$

從導引中第 l 個通道入射的電子波函數為

$$\psi_l(x, y, t) = \begin{cases} e^{ik_l(E)x} e^{-iEt} \chi_l(y) + \sum_{l'} \sum_{m'} r_{l'l}(m') e^{-ik_{l'}(E+m'\omega)x} e^{-i(E+m'\omega)t} \chi_{l'}(y) & , x < -\frac{L}{2} \\ \sum_{n'} \int d\varepsilon \left[\tilde{B}_{n'l}(\varepsilon) e^{-i\beta_n(\varepsilon)x} + \tilde{A}_{n'l}(\varepsilon) e^{i\beta_n(\varepsilon)x} \right] e^{-i\varepsilon t} \varphi_{n'}(y) e^{-i\frac{V_0}{\omega} \sin(\omega t)} & , -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ \sum_{l'} \sum_{m'} t_{l'l}(m') e^{ik_{l'}(E+m'\omega)x} e^{-i(E+m'\omega)t} \chi_{l'}(y) & , x > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (4.8)$$

其中以下標 l' 和 n' 表示導引和窄通道中不同的子帶 (subband)，以下標 m' 表示不同的邊帶 (sideband)。因此在導引和窄通道中，第 l 個通道以能量 μ 運動的電子有效波向量分別為 $k_l = [E - (l\pi/W_L)^2]^{1/2}$ 和 $\beta_n = [E - (n\pi/W_C)^2 - V_B]^{1/2}$ 。在導引和窄通道中歸一化後的縱向波函數為

$$\chi_l(y) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{W_L}} \sin \left[\frac{l\pi}{W_L} y + \frac{l\pi}{2} \right], & \text{if } |y| < \frac{W_L}{2} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$\varphi_n(y) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{W_C}} \sin \left[\frac{n\pi}{W_C} y + \frac{n\pi}{2} \right], & \text{if } |y| < \frac{W_C}{2} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

為了使邊界條件的匹配在所有時間點皆符合，積分式(4.8)式裡的能量

變數 ε 必需為離散值 $E+m'\omega$ 。由此我們可以寫出如下兩個條件

$$\tilde{A}_{n'l}(\varepsilon) = \sum_{m'} A_{n'l}(m') \delta(\varepsilon - \mu - m'\omega)$$

$$\tilde{B}_{n'l}(\varepsilon) = \sum_{m'} B_{n'l}(m') \delta(\varepsilon - \mu - m'\omega)$$

把 $e^{-i\left(\frac{V_0}{\omega}\right)\sin(\omega t)}$ 項 傅 利 葉 轉 換 (Fourier transform) 成

$$e^{-i\left(\frac{V_0}{\omega}\right)\sin(\omega t)} = \sum_p J_p \left(\frac{V_0}{\omega} \right) e^{-ip\omega t} \quad [19], \text{ 得到波函數為}$$

$$\psi_l(x, y) = \begin{cases} e^{ik_l(E)x} e^{-i\mu t} \chi_l(y) + \sum_{l'} \sum_{m'} r_{l'l}(m') e^{-ik_{l'}(E+m'\omega)x} e^{-i(E+m'\omega)t} \chi_{l'}(y) & , x < -\frac{L}{2} \\ \sum_{n'} \left[\sum_{m'} B_{n'l}(m') e^{-i\beta_{n'}(E+m'\omega)x} + \sum_{m'} A_{n'l}(m') e^{i\beta_{n'}(E+m'\omega)x} \right] e^{-i(E+m'\omega)t} \varphi_{n'}(y) e^{-i\frac{V_0}{\omega}\sin(\omega t)} & , |x| < \frac{L}{2} \\ \sum_{l'} \sum_{m'} t_{l'l}(m') e^{ik_{l'}(E+m'\omega)x} e^{-i(E+m'\omega)t} \chi_{l'}(y) & , x > \frac{L}{2} \end{cases}$$

重新把波函數寫成第 m 個邊帶波函數的相加形式 $\psi_l = \sum_m \psi_l^m(x, y)$

$e^{-ip(\mu+m\omega)t}$ ，抽離出第 m 個邊帶的波函數為

$$\psi_l^m(x, y) = \begin{cases} \delta_{m0} \chi_l(y) e^{ik_l(E+m\omega)x} + \sum_{l'} r_{l'l}(m) \chi_{l'}(y) e^{-ik_{l'}(E+m\omega)x}, & x < -\frac{L}{2} \\ \sum_{n'} \sum_{m'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) \varphi_{n'}(y) A_{n'l}(m') e^{i\beta_{n'}(E+m'\omega)x} \\ + \sum_{n'} \sum_{m'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) \varphi_{n'}(y) B_{n'l}(m') e^{-i\beta_{n'}(E+m'\omega)x}, & |x| < \frac{L}{2} \\ \sum_{l'} t_{l'l}(m) \chi_{l'}(y) e^{ik_{l'}(E+m\omega)x}, & x > \frac{L}{2} \end{cases}$$

在邊界 $x = -L/2$ 和 $x = L/2$ 做第 m 個邊帶波函數的匹配。

邊界條件 1： $\psi_l^m(x, y)$ 在 $x = -L/2$ 連續

$$\begin{aligned} & \delta_{m0} \chi_l(y) e^{-ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}} + \sum_{l'} r_{l'l}(m) \chi_{l'}(y) e^{ik_{l'}(E+m\omega)\frac{L}{2}} \\ &= \sum_{n'} \varphi_{n'}(y) \sum_{m'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) \left[A_{n'l}(m') e^{-i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} + B_{n'l}(m') e^{i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \right] \end{aligned} \quad (4.9)$$

邊界條件 2： $\partial \psi_l^m(x, y) / \partial x$ 在 $x = -L/2$ 連續

$$\begin{aligned} & \delta_{m0} \chi_l(y) k_l(E+m\omega) e^{-ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}} - \sum_{l'} k_{l'}(E+m'\omega) r_{l'l}(m) \chi_{l'}(y) e^{ik_{l'}(E+m\omega)\frac{L}{2}} \\ &= \sum_{n'} \varphi_{n'}(y) \sum_{m'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) \left[\beta_{n'}(E+m'\omega) A_{n'l}(m') e^{-i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \right. \\ & \quad \left. - \beta_{n'}(E+m'\omega) B_{n'l}(m') e^{i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \right] \end{aligned} \quad (4.10)$$

邊界條件 3： $\psi_l^m(x, y)$ 在 $x = L/2$ 連續

$$\begin{aligned} & \sum_{n'} \sum_{m'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) \varphi_{n'}(y) \left[A_{n'l}(m') e^{i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} + B_{n'l}(m') e^{-i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \right] \\ &= \sum_{l'} t_{l'l}(m) \chi_{l'}(y) e^{ik_{l'}(E+m\omega)\frac{L}{2}} \end{aligned} \quad (4.11)$$

邊界條件 4： $\partial \psi_l^m(x, y) / \partial x$ 在 $x = L/2$ 連續

$$\sum_{n'} \sum_{m'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) \varphi_{n'}(y) \begin{bmatrix} \beta_{n'}(E+m'\omega) A_{n'l}(m') e^{i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \\ -\beta_{n'}(E+m'\omega) B_{n'l}(m') e^{-i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

$$= \sum_{l'} k_{l'}(E+m\omega) t_{l'}(m) \chi_{l'}(y) e^{ik_{l'}(E+m\omega)\frac{L}{2}}$$

因為波函數有正交性，我們運用重疊積分 (overlap integral)。由於我們選擇硬牆的侷限位能，在 $W_C < |y| < W_L$ 的邊界上波函數應為零，但波函數的斜率不一定會相等。所以波函數連續的邊界條件，重疊積分範圍應為導引的寬度範圍，而波函數斜率連續的邊界條件中，重疊積分範圍應為窄通道的寬度範圍。把以下兩個重疊積分 $\int_{\frac{W_C}{2}}^{\frac{W_L}{2}} dy \chi_{l'}(y)$ 和

$$\int_{\frac{W_C}{2}}^{\frac{W_L}{2}} dy \varphi_n(y) \text{ 分別代入(4.9)式和 (4.10)式}$$

$$\delta_{m0} \delta_{l'l} e^{-ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}} + r_{l'l}(m) e^{ik_{l'}(E+m\omega)\frac{L}{2}} \quad (4.13)$$

$$= \sum_{n'} a_{n'l'} \sum_{m'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) \begin{bmatrix} A_{n'l}(m') e^{-i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} + B_{n'l}(m') e^{i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \end{bmatrix}$$

$$\delta_{m0} a_{nl} k_l(E+m\omega) e^{-ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}} - \sum_{l'} k_{l'}(E+m\omega) r_{l'l}(m) a_{nl} e^{ik_{l'}(E+m\omega)\frac{L}{2}} \quad (4.14)$$

$$= \sum_{m'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) \begin{bmatrix} \beta_n(E+m'\omega) A_{nl}(m') e^{-i\beta_n(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \\ -\beta_n(E+m'\omega) B_{nl}(m') e^{i\beta_n(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \end{bmatrix}$$

用相同的重疊積分方法在邊界 $x = L/2$ 上

$$\sum_{n'} a_{n'l'} \sum_{m'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) \begin{bmatrix} A_{n'l}(m') e^{i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} + B_{n'l}(m') e^{-i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \end{bmatrix} \quad (4.15)$$

$$= t_{l'l}(m) e^{ik_{l'}(E+m\omega)\frac{L}{2}}$$

$$\begin{aligned} & \sum_{m'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) \begin{bmatrix} \beta_n(E+m'\omega) A_{nl}(m') e^{i\beta_n(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \\ -\beta_n(E+m'\omega) B_{nl}(m') e^{-i\beta_n(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \end{bmatrix} \\ & = \sum_{l'} a_{nl} k_{l'}(E+m\omega) t_{l'l}(m) e^{ik_{l'}(E+m\omega)\frac{L}{2}} \end{aligned} \quad (4.16)$$

對應到不同橫向子帶模態 (transverse subband states) 的重疊積分為

$$a_{nl} \equiv \int_{-\frac{W_C}{2}}^{\frac{W_C}{2}} dy \varphi_n(y) \chi_l(y)$$

波函數的連續性邊界條件需考慮所有的子帶模態 (inter modes) ，也

就是說 $\sum_{l'} a_{nl} k_{l'}(\mu+m\omega) \cdot (4.1.6) \cdot (4.1.3)$

$$\begin{aligned} & \delta_{m0} a_{nl} k_l(E+m\omega) e^{-ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}} + \sum_{l'} a_{nl} k_{l'}(E+m\omega) r_{l'l}(m) e^{ik_{l'}(E+m\omega)\frac{L}{2}} \\ & = \sum_{n'} \sum_{l'} a_{nl} k_{l'}(E+m\omega) a_{n'l'} \sum_{m'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) \begin{bmatrix} A_{n'l}(m') e^{-i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \\ + B_{n'l}(m') e^{i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.17)$$

用 $\xi_{nn'}(m)$ 化簡後得到

$$\begin{aligned} & \delta_{m0} a_{nl} k_l(E+m\omega) e^{-ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}} + \sum_{l'} a_{nl} k_{l'}(E+m\omega) r_{l'l}(m) e^{ik_{l'}(E+m\omega)\frac{L}{2}} \\ & = \sum_{n'} \xi_{nn'}(m) \sum_{m'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) \begin{bmatrix} A_{n'l}(m') e^{-i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \\ + B_{n'l}(m') e^{i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.18)$$

其中 $\xi_{nn'}(m) \equiv \sum_{l'} a_{nl} k_{l'}(E+m\omega) a_{n'l'}$ 。

用 (4.14) 式和 (4.18) 式消去反射振幅 (reflection amplitude) $r_{l'l}(m)$

$$\begin{aligned} & 2\delta_{m0} a_{nl} k_l(E+m\omega) e^{-ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}} \\ & = \sum_{n'} \sum_{m'} [\xi_{nn'}(m) + \delta_{nn'} \beta_{n'}(E+m'\omega)] J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) e^{-i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} A_{n'l}(m') \\ & \quad + \sum_{n'} \sum_{m'} [\xi_{nn'}(m) - \delta_{nn'} \beta_{n'}(E+m'\omega)] J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) e^{i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} B_{n'l}(m') \end{aligned} \quad (4.19)$$

同理，考慮所有的子帶，也就是說 $\sum_{l'} a_{nl} k_{l'}(E+m\omega) \cdot (4.15)$

$$\begin{aligned} & \sum_{n'} \xi_{nm'}(m) \sum_{m'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) \left[A_{n'l}(m') e^{i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} + B_{n'l}(m') e^{-i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \right] \\ & = \sum_{l'} a_{n'l'} k_{l'}(E+m\omega) t_{l'l}(m) e^{ik_{l'}(E+m\omega)\frac{L}{2}} \end{aligned} \quad (4.20)$$

其中 $\xi_{nm'}(m) \equiv \sum_{l'} a_{n'l'} k_{l'}(E+m\omega) a_{n'l'}$ 。

用 (4.16) 式和 (4.20) 式消去透射振幅 (transmission amplitude) $t_{l'l}(m)$

$$\begin{aligned} & \sum_{n'} \sum_{m'} \left[\xi_{nm'}(m) - \delta_{nm'} \beta_{n'}(E+m'\omega) \right] J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) e^{i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} A_{n'l}(m') \\ & + \sum_{n'} \sum_{m'} \left[\xi_{nm'}(m) + \delta_{nm'} \beta_{n'}(E+m'\omega) \right] J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) e^{-i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} B_{n'l}(m') = 0 \end{aligned} \quad (4.21)$$

把(4.19)式和 (4.21)式用矩陣形式表示

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M}_{11} & \mathbf{M}_{12} \\ \mathbf{M}_{21} & \mathbf{M}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{B} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{K} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

其中的子矩陣為

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \vdots \\ A_{n'l}(m') \\ \vdots \end{bmatrix}; \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} \vdots \\ B_{n'l}(m') \\ \vdots \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \vdots \\ 2\delta_{m0} a_{nl} k_l(E+m\omega) e^{-ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}} \\ \vdots \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{11} = \begin{bmatrix} \ddots & & & \\ \cdot & M_{11}(n, m; n', m') & \cdot & \\ \cdot & & \ddots & \\ \cdot & & & \ddots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \ddots & & & \\ \cdot & \left[\xi_{nm'}(m) + \delta_{nm'} \beta_{n'}(E+m'\omega) \right] J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) e^{-i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} & \cdot & \\ \cdot & & \ddots & \\ \cdot & & & \ddots \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{12} = \begin{bmatrix} \ddots & & & \\ \cdot & M_{12}(n, m; n', m') & \cdot & \\ \cdot & & \ddots & \\ \cdot & & & \ddots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \ddots & & & \\ \cdot & [\xi_{m'}(m) - \delta_{m'} \beta_{n'}(E + m'\omega)] J_{m-m'}\left(\frac{V_0}{\omega}\right) e^{i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} & \cdot & \\ \cdot & & \ddots & \\ \cdot & & & \ddots \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{21} = \begin{bmatrix} \ddots & & & \\ \cdot & M_{21}(n, m; n', m') & \cdot & \\ \cdot & & \ddots & \\ \cdot & & & \ddots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \ddots & & & \\ \cdot & [\xi_{m'}(m) - \delta_{m'} \beta_{n'}(E + m'\omega)] J_{m-m'}\left(\frac{V_0}{\omega}\right) e^{i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} & \cdot & \\ \cdot & & \ddots & \\ \cdot & & & \ddots \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{22} = \begin{bmatrix} \ddots & & & \\ \cdot & M_{22}(n, m; n', m') & \cdot & \\ \cdot & & \ddots & \\ \cdot & & & \ddots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \ddots & & & \\ \cdot & [\xi_{m'}(m) + \delta_{m'} \beta_{n'}(E + m'\omega)] J_{m-m'}\left(\frac{V_0}{\omega}\right) e^{-i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} & \cdot & \\ \cdot & & \ddots & \\ \cdot & & & \ddots \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{21} = \mathbf{M}_{12} \quad ; \quad \mathbf{M}_{22} = \mathbf{M}_{11}$$

為了數值計算的可行性，使用模態截短的程序 (mode-truncation procedure) [32]。則矩陣方程由固定矩陣大小的矩陣所組成：

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} A_{1l}(-M_{\max}) \\ \vdots \\ A_{1l}(M_{\max}) \\ \vdots \\ A_{N_{tot}l}(-M_{\max}) \\ \vdots \\ A_{N_{tot}l}(M_{\max}) \end{bmatrix} ; \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} B_{1l}(-M_{\max}) \\ \vdots \\ B_{1l}(M_{\max}) \\ \vdots \\ B_{N_{tot}l}(-M_{\max}) \\ \vdots \\ B_{N_{tot}l}(M_{\max}) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 2\delta_{m0} a_{1l} k_l (E + m\omega) e^{-ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}} \\ \vdots \\ 2\delta_{m0} a_{1l} k_l (E + m\omega) e^{-ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}} \\ \vdots \\ 2\delta_{m0} a_{N_{tot}l} k_l (E + m\omega) e^{-ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}} \\ \vdots \\ 2\delta_{m0} a_{N_{tot}l} k_l (E + m\omega) e^{-ik_l(E+m\omega)\frac{L}{2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vdots \\ 2a_{1l} k_l (E) e^{-ik_l(E)\frac{L}{2}} \\ \vdots \\ \vdots \\ 2a_{N_{tot}l} k_l (E) e^{-ik_l(E)\frac{L}{2}} \\ \vdots \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{11} = \begin{bmatrix} M_{11}(1, -M_{\max}; 1, -M_{\max}) & \cdot & M_{11}(1, -M_{\max}; N_{tot}, M_{\max}) \\ \cdot & \ddots & \cdot \\ M_{11}(N_{tot}, M_{\max}; 1, -M_{\max}) & \cdot & M_{11}(N_{tot}, M_{\max}; N_{tot}, M_{\max}) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{12} = \begin{bmatrix} M_{12}(1, -M_{\max}; 1, -M_{\max}) & \cdot & M_{12}(1, -M_{\max}; N_{tot}, M_{\max}) \\ \cdot & \ddots & \cdot \\ M_{12}(N_{tot}, M_{\max}; 1, -M_{\max}) & \cdot & M_{12}(N_{tot}, M_{\max}; N_{tot}, M_{\max}) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{21} = \begin{bmatrix} M_{21}(1, -M_{\max}; 1, -M_{\max}) & \cdot & M_{21}(1, -M_{\max}; N_{tot}, M_{\max}) \\ \cdot & \ddots & \cdot \\ M_{21}(N_{tot}, M_{\max}; 1, -M_{\max}) & \cdot & M_{21}(N_{tot}, M_{\max}; N_{tot}, M_{\max}) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{22} = \begin{bmatrix} M_{22}(1, -M_{\max}; 1, -M_{\max}) & \cdot & M_{22}(1, -M_{\max}; N_{tot}, M_{\max}) \\ \cdot & \ddots & \cdot \\ M_{22}(N_{tot}, M_{\max}; 1, -M_{\max}) & \cdot & M_{22}(N_{tot}, M_{\max}; N_{tot}, M_{\max}) \end{bmatrix}$$

其中 N_{tot} 為考慮的總子帶數， M_{\max} 為考慮的光子散射個數。這裡定義

M_{tot} 為考慮的總邊帶數，其與光子散射個數的關係為

$$M_{tot} = 2M_{\max} + 1$$

利用子矩陣的運算，我們得到振幅 $A_{n'l}(m')$ 和 $B_{n'l}(m')$ 的大小：

$$\mathbf{M}_{11}\mathbf{A} + \mathbf{M}_{12}\mathbf{B} = \mathbf{K} \quad ; \quad \mathbf{M}_{21}\mathbf{A} + \mathbf{M}_{22}\mathbf{B} = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{B} = -\mathbf{M}_{22}^{-1}\mathbf{M}_{21}\mathbf{A} = -\mathbf{M}_{11}^{-1}\mathbf{M}_{12}\mathbf{A}$$

$$\mathbf{A} = \left[\mathbf{M}_{11} - \mathbf{M}_{12}\mathbf{M}_{22}^{-1}\mathbf{M}_{21} \right]^{-1} \mathbf{K}$$

把 (4.13)式和(4.15)式用矩陣形式表示

$$\begin{bmatrix} \mathbf{N}_{11} & \mathbf{N}_{12} \\ \mathbf{N}_{21} & \mathbf{N}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{B} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{T} \\ \mathbf{R} \end{bmatrix}$$

其中的矩陣元為

$$\begin{aligned} \mathbf{T} &= t_{l'l}(m) e^{ik_r(E+m\omega)\frac{L}{2}} \\ \mathbf{R} &= \delta_{m0}\delta_{l'l} e^{-ik_l(E)\frac{L}{2}} + r_{l'l}(m) e^{ik_r(E+m\omega)\frac{L}{2}} \\ \mathbf{N}_{11} &= a_{n'l'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) e^{i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \\ \mathbf{N}_{12} &= a_{n'l'} J_{m-m'} \left(\frac{V_0}{\omega} \right) e^{-i\beta_{n'}(E+m'\omega)\frac{L}{2}} \\ \mathbf{N}_{21} &= \mathbf{N}_{12} \quad ; \quad \mathbf{N}_{22} = \mathbf{N}_{11} \end{aligned}$$

在解出矩陣方程式後，我們得到從第 l 個子帶入射的電子的反射係數

和透射係數：

$$R_l = \sum_{l'=1}^{N_{tot}} \sum_{m=-M_{max}}^{M_{max}} R_{l'l}(m) \quad ; \quad T_l = \sum_{l'=1}^{N_{tot}} \sum_{m=-M_{max}}^{M_{max}} T_{l'l}(m)$$

其中 $R_{l'l}(m) = |r_{l'l}(m)|^2 \frac{k_{l'}(E+m\omega)}{k_l(E)}$ 和 $T_{l'l}(m) = |t_{l'l}(m)|^2 \frac{k_{l'}(E+m\omega)}{k_l(E)}$

從第 l 個子帶入射的電子需滿足歸一化的條件為：

$$R_l + T_l = 1$$

最後直流電導為電子從每個子帶入射的穿透機率加總的結果：

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{l=1}^{L_{max}} T_l$$

其中 L_{max} 為最高的傳遞模態。 L_{max} 與入射電子能量 E 的關係為

$$\left[\frac{L_{max} \pi}{W_L} \right]^2 < \mu < \left[\frac{(L_{max} + 1) \pi}{W_L} \right]^2$$

或

$$L_{max} = \text{Int} \left[\frac{\sqrt{E}}{\left(\frac{\pi}{W_L} \right)} \right]$$

這裡 $\text{Int}[x]$ 為 x 無條件捨去取到個位數。

4.2 量子通道的動態傳輸

在過去的幾年裡，非彈性散射的量子傳輸已經受到許多關注。在一個系統中加入時變位能是幾個常用來討論非彈性散射的模型之一。這種模型適合做為研究在同調傳輸下的非彈性散射。這一小節裡，我們主要目標是研究在一個隨時變的量子通道中，電子因非彈性散射所引起的傳輸特性。其中包含了邊帶的收斂性、急降結構和 Fano 結構。

4.2.1 邊帶的收斂性討論

由 4.1 的理論分析我們知道電子通過一受週期性週期性交流電壓位能的區域時，電子會受到週期性交流電壓位能的影響吸放數個光子的能量，而在不同的邊帶間躍遷。在解析所寫下的波函數中，展開的基底為電子吸放數個光子能量後的波函數，理論上要考慮無窮多組基

底才能符合完備性。但在數值計算中我們只能取有限個基底展開的連立方程式做計算，因此收斂的程度是這一部分我們關心的重點。同時在物理上，邊帶的收斂反應的是電子所能活動的邊帶範圍。

影響邊帶收斂性的因素包含了寬窄比、週期性交流電壓位能強度和頻率。為了獨立討論邊帶的收斂性，我們將去除子帶間耦合的影響，故選擇量子通道為我們收斂性的討論系統。接著選取一組週期性交流電壓位能的參數如表 4.1

固定 時變通道長度 L	固定 直流電壓位能 V_B	固定 時變場強度 V_0	固定 時變場頻率 ω
$L=30(\cong 240\text{nm})$	$V_B=0$	$V_0=0.06\varepsilon_1$ (0.0533meV)	$\omega=0.03\varepsilon_1$ =0.0267meV ($f=64.94\text{ GHz}$)

表 4.1 討論邊帶收斂性的參數。

圖 4.6 為考慮不同總邊帶數時，電導對入射電子能量的關係。其中 M_{tot} 為總邊帶數。

圖 4.6 顯示入射電子能量在第一子帶底端的邊帶收斂性。黑色點線 $M_{tot} = 3$ 為單光子近似 (one photon approximation)，而其他曲線代表多光子散射 (muti-photon scattering)。由數值模擬的結果可知單光子近似不足以描述此動態量子傳輸的電子運動行為，而需要以多光子散射來探討。比較 $M_{tot} = 5、7$ 和 9 的電導計算得知收斂的結果需考慮超過 7 個邊帶。換句話說，電子一次吸放超過 3 個光子的機率極低。為了達到較佳的收斂性，第四章的數值結果 \hbar 皆考慮了 14 個子帶 (N_{tot}

= 14) 和 13 個邊帶 ($M_{tot} = 13$)。

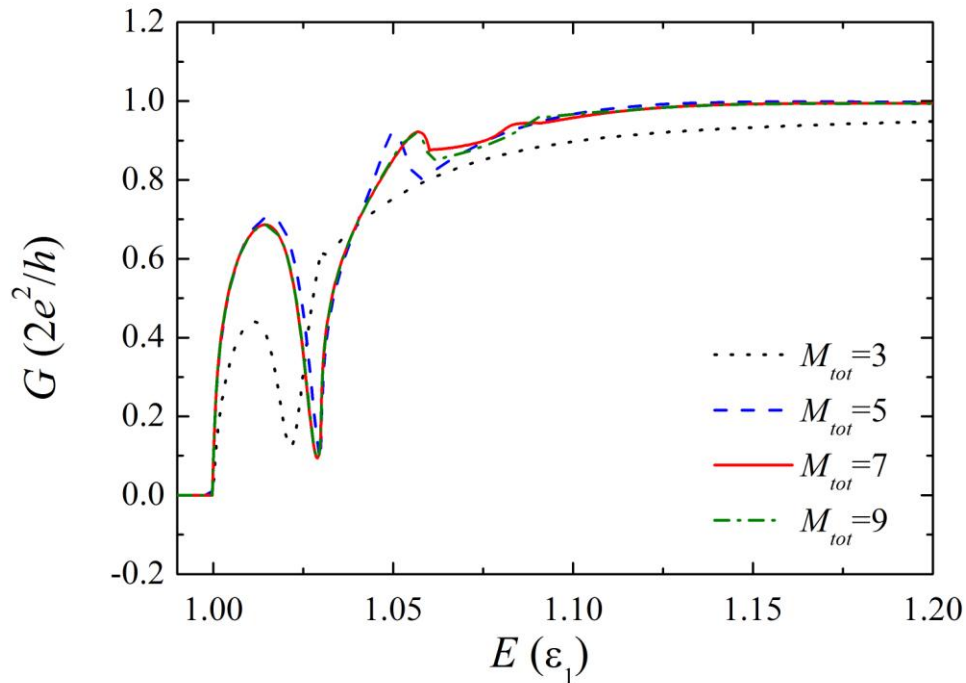


圖 4.6 取入射電子能量範圍在第一個子帶底端，考慮不同邊帶數，電導對入射電子能量的收斂情形。黑色點線代表考慮 3 個邊帶。藍色虛線代表考慮 5 個邊帶。紅色實線代表考慮 7 個邊帶。綠色點虛線代表考慮 9 個邊帶。 M_{tot} 為系統所考慮的總邊帶數。

一開始我們先討論交流電壓位能的強度效應。量子通道的寬度 $W = 10$ 時，即 $W_L = W_C = W = 10$ ($\cong 80\text{nm}$)，比較不同週期性交流電壓位能強度 V_0 下的電導對入射電子能量的關係。將討論的參數整理如表 4.2。

固定 時變通道長度 L	固定 直流電壓位能 V_B	改變 時變場強度 V_0	固定 時變場頻率 ω
$L=30(\cong 240\text{nm})$	$V_B=0$	$V_0=0, 0.02\epsilon_1,$ $0.04\epsilon_1, 0.06\epsilon_1$	$\omega=0.03\epsilon_1$

表 4.2 寬窄比相同，改變交流電壓位能強度 V_0 之寬窄寬時變系統物理參數。黑體字為固定參數。藍體字為主要討論的參數。

4.2.2 量子通道的準束縛態結構

這一小節裡主要討論外加交流電壓位能後的吸放多個光子機制。當中間窄通道加入交流電壓位能後，電子在經過中間交流電壓位能的過程中會有邊帶之間的躍遷 (inter-side band transition)。即電子有可能吸放數個光子能量後，躍遷至較原本入射能態還低或高的邊帶模態。

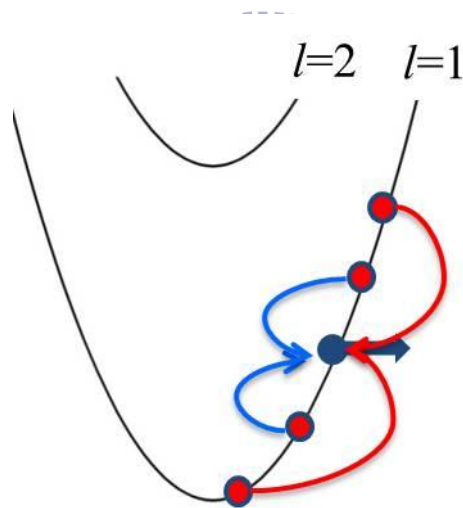


圖 4.7 邊帶躍遷示意圖。藍色圓點代表電子入射的模態。紅色圓點代表離電子入射模態數個光子能量的邊帶模態。

利用表 4.2 的參數畫圖 4.8 的電導和入射電子能量關係，四種不同交流電壓位能強度 $V_0 = 0$ 、 $V_0 = 0.02\varepsilon_l$ 、 $V_0 = 0.04\varepsilon_l$ 和 $V_0 = 0.06\varepsilon_l$ 下，電導對入射能量的關係。

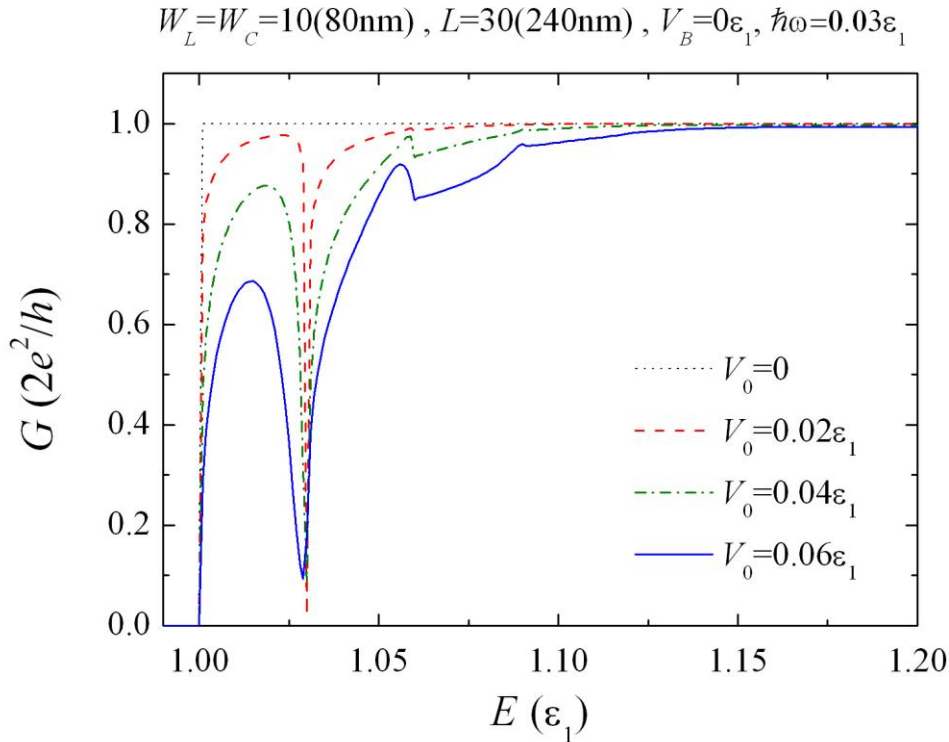


圖 4.8 黑色點線為未加週期性交流電壓位能的電導和入射電子能量的關係。紅色虛線、綠色點虛線和藍色實線分別為交流電壓位能強度為 $V_0 = 0.02\varepsilon_1$ 、 $V_0 = 0.04\varepsilon_1$ 和 $V_0 = 0.06\varepsilon_1$ 的電導對入射電子能量的關係。

由圖 4.8 我們可以發現明顯的急降結構 (dip structure) 在入射電子能量為 $1.03 \varepsilon_1$ 和 $1.06 \varepsilon_1$ 時。因為量子通道內侷域位能不變，所以無子帶間耦合的效應。這表示若入射電子能量為 $E_{dip} = \varepsilon_1 + m\omega$ 時，電子有一定的機率會因為週期性交流電壓位能放出一個或多個光子的能量，進而跳到準束縛態 (quasi bound state)。當週期性交流電壓位能強度越大時，第一個急降結構的特徵變弱，但第二個急降結構的特徵變強。

圖 4.9 為電子在不同模態間的躍遷情形。

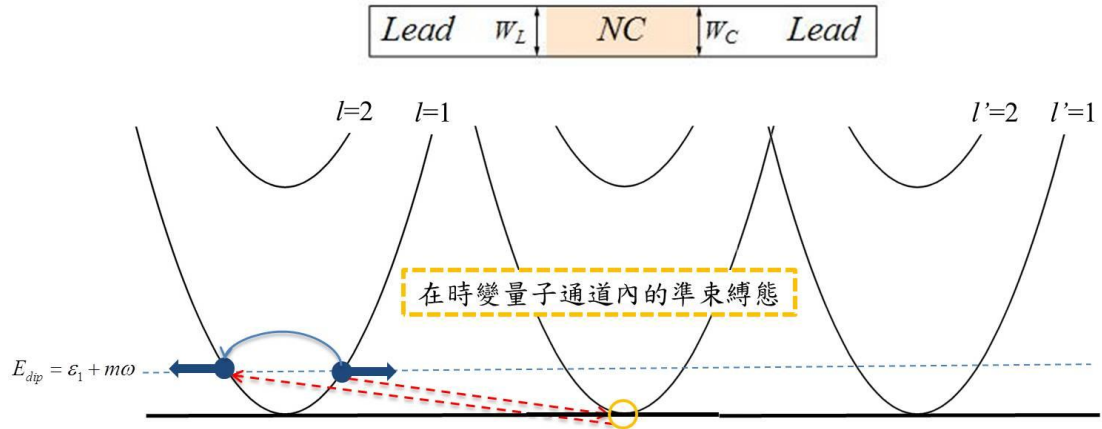
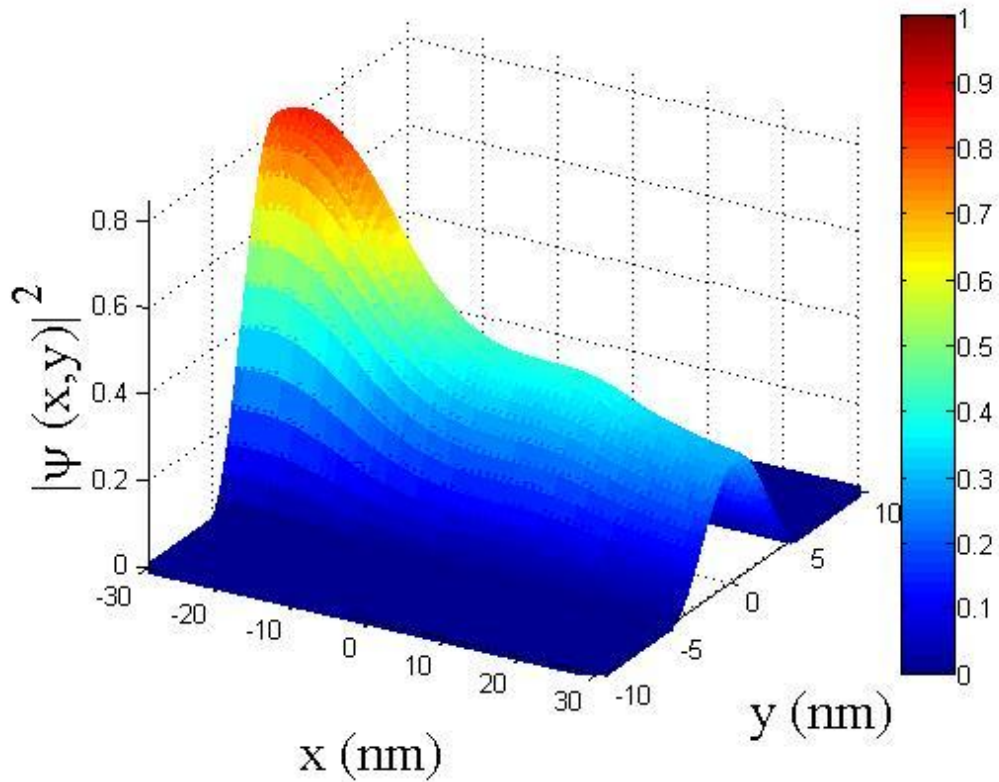


圖 4.9 電子在不同模態間的躍遷情形。黑色實線代表電子入射能量。紅色虛線代表電子吸放 m 個光子後的能量。電子放出 m 個光子能量後，跳到子帶底端的準束縛態，短暫停留後反射回左邊導引。

考慮在急降結構時的波函數分佈如圖



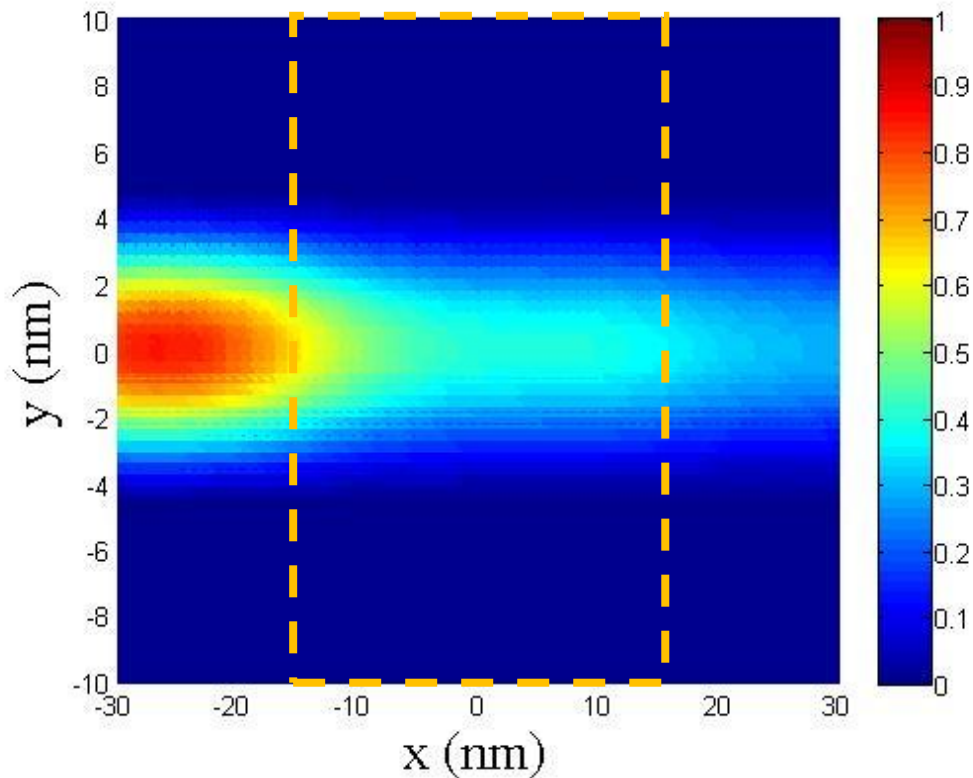


圖 4.10 急降結構時的波函數機率密度分佈。

由波函數機率密度的分佈得知電子在左邊導引的機率較高，也就是說電子易反射回左邊導引。此結果和我們預測的電子放出一個光子能量而跳至左邊導引中的準束縛態後，反射回左邊導引的想法一致。

接下來，我們探討交流電壓位能的頻率效應。固定交流電壓位能強度 V_0 ，比較不同交流電壓位能頻率 ω 下的電導對入射電子能量的關係。將討論的參數整理如表 4.3。

固定 時變通道長度 L	固定 直流電壓位能 V_B	固定 時變場強度 V_0	改變 時變場頻率 ω
$L=30(\cong 240\text{nm})$	$V_B=0$	$V_0=0.06\epsilon_1$	$\omega=0.03\epsilon_1, 0.04\epsilon_1,$ $0.05\epsilon_1$

表 4.3 寬窄比相同，改變 ω 之寬窄寬時變系統物理參數。黑體字為固定參數。藍體字為主要討論的參數。

圖 4.11 為四種不同交流電壓位能的光子能量 $\hbar\omega = 0.03\varepsilon_1$ 、 $0.04\varepsilon_1$ 和 $0.05\varepsilon_1$ 下，電導和入射電子能量的關係。

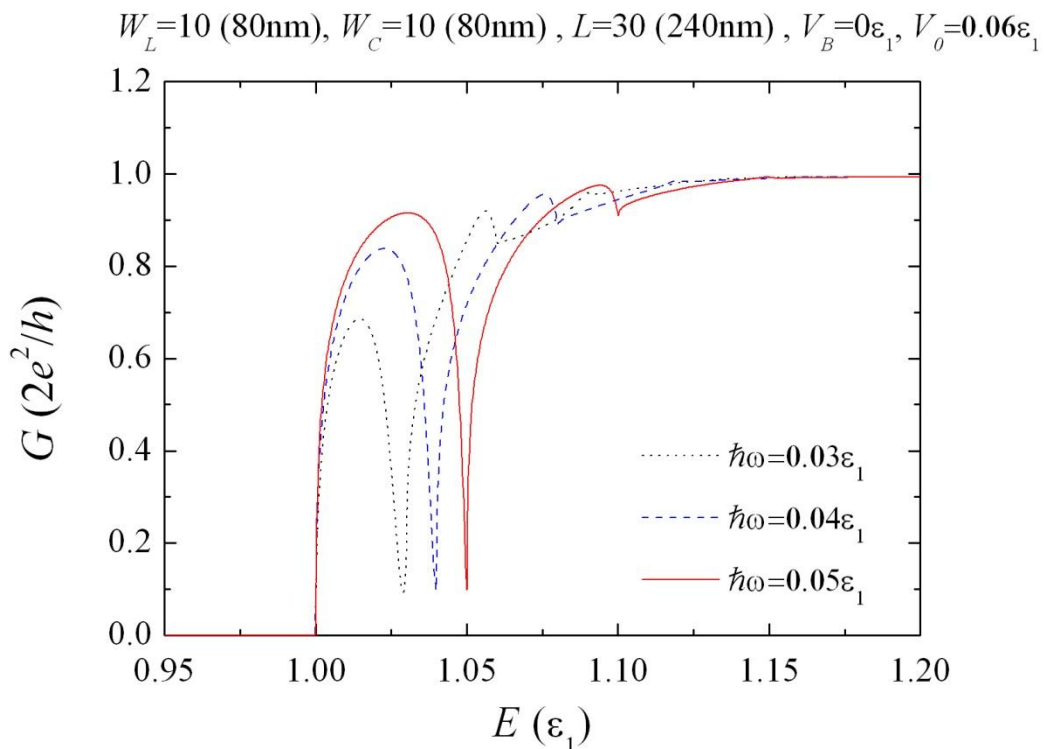


圖 4.11 寬窄比相同，改變 ω 之電導和入射電子能量的關係。黑色點線、藍色虛線和紅色實線分別為光子能量為 $\hbar\omega = 0.03\varepsilon_1$ 、 $0.04\varepsilon_1$ 和 $0.05\varepsilon_1$ 下的電導對入射電子能量的關係。

圖 4.11 中，不同交流電壓位能頻率對映的急降結構中，其所出現的能量與子帶底端的能量差等於交流電壓位能所產生的光子能量。這使我們確信電子通過量子通道時，會受交流電壓位能影響而放出數個光子的能量跳到子帶底端的準束縛態。

若調整頂閘極與量子通道的距離可影響時變通道的長度，則時變通道

的長度效應可在此討論。比較不同時變通道長度 L 時的電導對入射電子能量的關係。將討論的參數整理如表 4.4。

改變 時變通道長度 L	固定 直流電壓位能 V_B	固定 時變場強度 V_0	固定 時變場頻率 ω
$L=20, 30, 40$ ($\cong 1600\text{nm},$ $240\text{nm}, 320\text{nm}$)	$V_B=0$	$V_0=0.06\epsilon_1$	$\omega=0.03\epsilon_1$

表 4.4 寬窄比相同，改變 L 之寬窄寬時變系統物理參數。黑體字為固定參數。藍體字為主要討論的參數。

圖 4.12 為四種不同窄通道長度 $L=20$ 、 30 和 40 ，電導和入射電子能量的關係。

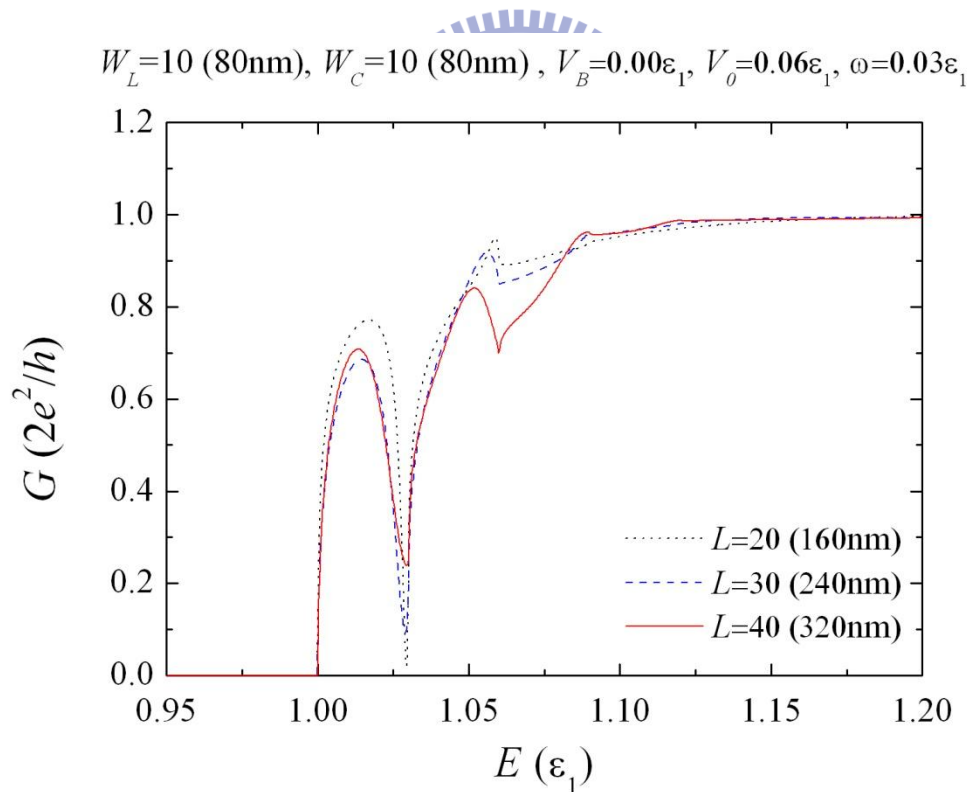


圖 4.12 寬窄比相同，改變 L 之電導和入射電子能量的關係。黑色點線、藍色虛線和紅色實線分別為光子能量為 $\hbar\omega = 0.03\epsilon_1$ 、 $0.04\epsilon_1$ 和 $0.05\epsilon_1$ 下的電導對入射電子能量的關係。

圖 4.12 中，改變窄通道長度對第一和第二個急降結構的影響不同。

第一個急降結構隨時變通道越長而越淺。但第二個急降結構隨時變通道越長而越深。結果顯示，增加時變通道長度有利電子一次放出兩個光子能量。同時我們發現，在量子通道中且直流電壓位能為零時，因為不存在共振結構，所以就算時變通道有交流電壓位能也無共振效應。

之前的討論聚焦在交流電壓位能對電導的影響，所以都固定直流電壓位能 $V_B = 0$ ，在這一小節最後，我們比較不同直流電壓位能 V_B 下的電導對入射電子能量的關係。將討論的參數整理如表 4.5。

固定 時變通道長度 L	改變 直流電壓位能 V_B	固定 時變場強度 V_0	固定 時變場頻率 ω
$L=30$ ($\cong 240\text{nm}$)	$V_B = -3\varepsilon_1,$ $-1.5\varepsilon_1, 0.0\varepsilon_1$	$V_0 = 0.06\varepsilon_1$	$\omega = 0.03\varepsilon_1$

表 4.5 寬窄比相同，改變直流電壓位能 V_B 之寬窄寬時變系統物理參數。黑體字為固定參數。藍體字為主要討論的參數。

$W_L=10$ (80nm), $W_C=10$ (80nm), $L=30$ (240nm), $V_0=0.06\varepsilon_1$, $\omega=0.03\varepsilon_1$

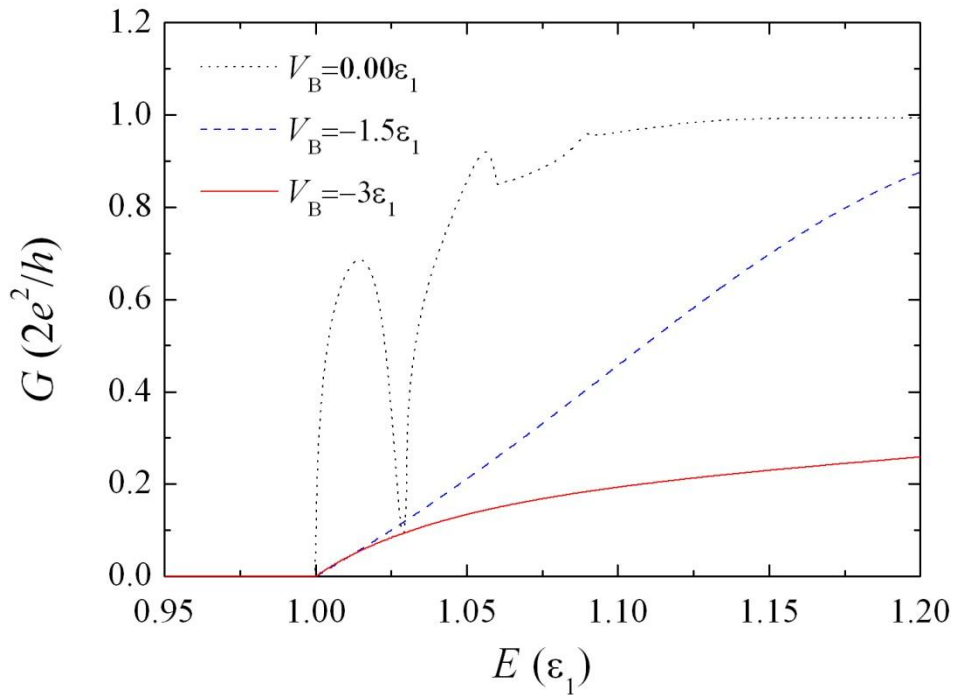


圖 4.13 寬窄比相同，改變直流電壓位能 V_B 之電導和入射電子能量的關係。黑色點線為未加直流偏壓的電導和入射電子能量的關係。藍色虛線和紅色實線分別為直流電壓位能為 $V_B = -1.5\varepsilon_1$ 和 $V_B = -3\varepsilon_1$ 的電導對入射電子能量的關係。

圖 4.13 為四種不同交流電壓位能頻率 $\hbar\omega = 0.03\varepsilon_1$ 、 $0.04\varepsilon_1$ 和 $0.05\varepsilon_1$

下，電導和入射電子能量的關係。增加直流電壓位能後，其背向散射效應也增強，使得急降結構會快速消失。這表示加入直流電壓位能後，放出光子的機制不再顯現，取而代之的是背向散射的影響。

4.2.3 量子通道的 Fano 結構

由前一小節的數值分析得知，當中間時變通道加入交流電壓位能後，電子在經過時變通道的過程中，因邊帶模態與準束縛態之間耦合而產生的急降結構。這是只考慮交流電壓位能 $V_0\cos(\omega t)$ 的情形。這

一小節裡主要討論外加負直流電壓位能 V_B 後，邊帶模態與束縛態之間的耦合情形。

在討論電導結果之前，我們先瞭解負直流電壓位能 V_B 與束縛態的關係。在我們量子通道的系統中，若將中間有限長度時變場區域視為封閉系統，則可用硬牆模型得到一組束縛態

$$E_{n_x, n_y}^{bs}(V_B) = \left(\frac{n_x}{L}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{W}\right)^2 + V_B \quad (4.22)$$

其中 n_x 、 n_y 分別代表 x 、 y 方向的量子數。為求分析上的方便，我們用量子通道的第一個子帶能量 (first subband energy) ε_1 作為能量單位，化簡束縛態為

$$\underline{E}_{n_x, n_y}^{bs}(V_B) = \frac{E_{n_x, n_y}^{bs}(V_B)}{\varepsilon_1} = \left(\frac{n_x W}{L}\right)^2 + (n_y)^2 + V_B \quad (4.23)$$

考慮的系統參數：量子通道寬度為 $W = 10$ (80nm)、時變通道長度 $L = 30$ (240nm)，則此系統隨不同量子數及直流電壓位能 V_B 所對映的束縛態為

$$\underline{E}_{n_x, n_y}^{bs}(V_B) = \frac{E_{n_x, n_y}^{bs}(V_B)}{\varepsilon_1} = \left(\frac{n_x 10}{30}\right)^2 + n_y^2 + V_B = \frac{1}{9}n_x^2 + n_y^2 + V_B \quad (4.24)$$

寫下前三個能態後，將其束縛態與直流電壓位能 V_B 的關係整理如下：

$$\underline{E}_{1,1}^{bs}(V_B) = \frac{1}{9} + 1 + V_B = 1.11 + V_B \quad (4.25)$$

$$\underline{E}_{2,1}^{bs}(V_B) = \frac{4}{9} + 1 + V_B = 1.44 + V_B \quad (4.26)$$

$$\underline{E}_{3,1}^{bs}(V_B) = 1 + 1 + V_B = 2 + V_B \quad (4.27)$$

外加負直流電壓位能 V_B ，使得時變通道中存在束縛態。藉由調整負直流電壓位能 V_B 的大小，控制束縛態的能量，並討論束縛態與邊帶模態的耦合如何影響電導。

取四種不同大小負直流電壓位能 V_B 所對映的束縛態，如圖 4.14 中的 A、B、C 和 D，並比較這四種情形的電導結果，如圖 4.15。

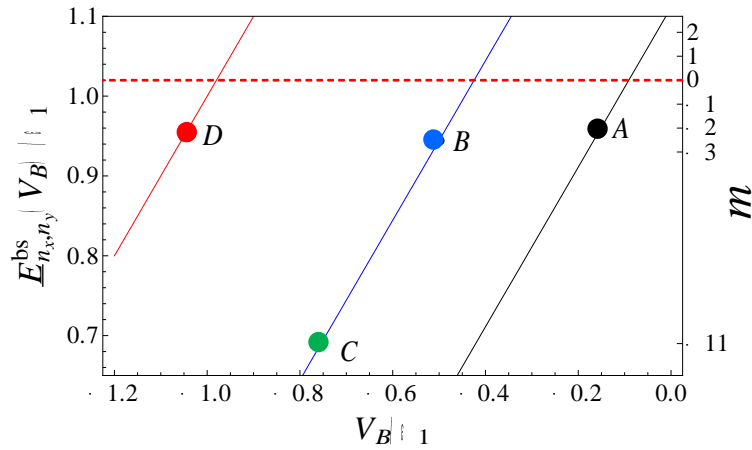


圖 4.14 前三個束縛態隨直流電壓位能 V_B 變化的關係圖。黑色實線代表基態，藍色實線代表第一激發態，紅色實線代表第二激發態。紅色虛線代表形成 Fano 結構的入射電子能量為 E_{fano} 。A、B、C 和 D 四點分別代表不同負電壓位能 V_B 時，束縛態能量。

當直流電壓位能 $V_B = -0.15$ 時，恰只有一個束縛態存在時變場區域，將此束縛態 $E_{B,A} = \underline{E}_{1,1}^{bs}(V_B = -0.15) = 0.96$ 標示為 A。當直流電壓位能 $V_B = -0.50$ 時，有兩個束縛態存在時變場區域，將第一激發態 $E_{B,B} = \underline{E}_{2,1}^{bs}(V_B = -0.5) = 0.94$ 標示為 B。當直流電壓位能 $V_B = -0.75$ 時，有兩個束縛態存在時變場區域，將第一激發態 $E_{B,C} = \underline{E}_{2,1}^{bs}(V_B = -0.75) = 0.69$ 標示為 C。當負直流電壓位能 $V_B = -1.05$ 時，有三個束縛態存在時變

場區域，將第二激發態 $E_{B,D} = E_{3,1}^{bs}(V_B = -1.05) = 0.95$ 標示為 D 。

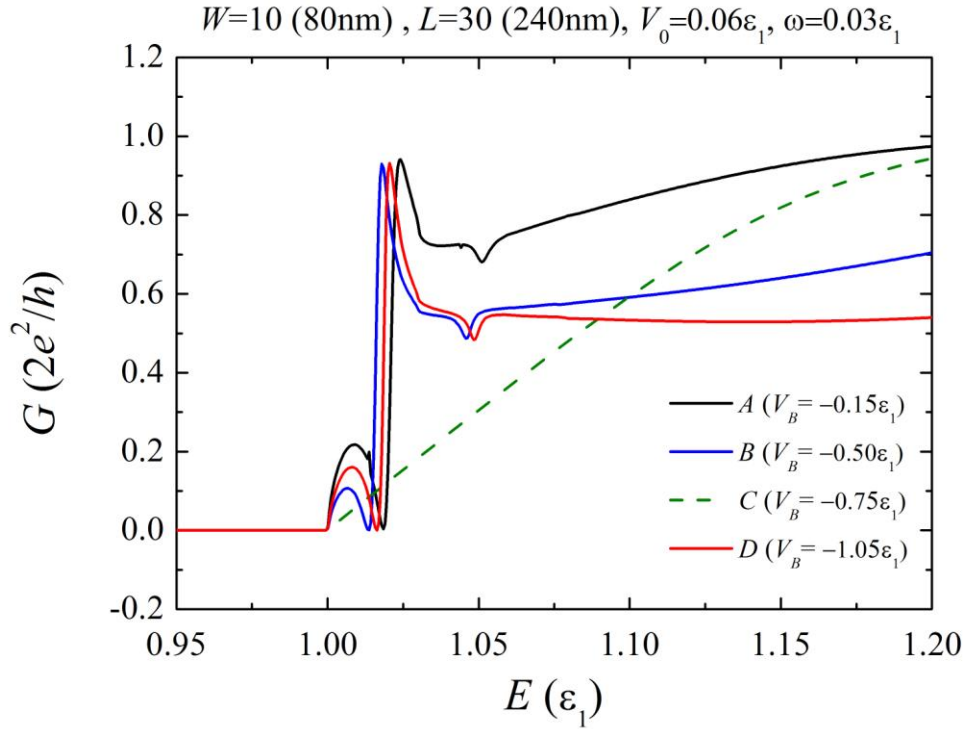


圖 4.15 四種不同直流電壓位能 V_B 對映的電導。A、B、C 和 D 四點分別代表不同負電壓位能 V_B 時，束縛態能量。黑色實線代表 $V_B = -0.15$ ，藍色實線代表 $V_B = -0.50$ ，綠色虛線代表 $V_B = -0.75$ ，紅色實線代表 $V_B = -1.05$ 。

計算 ABCD 四種不同直流電壓位能的電導結果如圖 4.15。由圖 4.15 中可發現 ABD 三條線均有急降後急升的電導結構，稱此為 Fano 結構，並將 Fano 結構對映的入射電子能量定為 E_{Fano} 。由圖 4.15 可知 $E_{Fano} \approx 1.02$ 。再加上 A、B 和 D 三者中，比第一子帶能量小，但最靠近 E_{Fano} 的束縛態約為 0.95。推得此三者均為入射電子放出兩個光子，躍遷至束縛態。由此可知，當入射電子能量 E 與束縛態差距 m 個光子能量時，電導可以形成 Fano 結構。

$$E_{Fano} + m\omega = E \quad (4.28)$$

其中 E 為束縛態能量。值得注意的是 m 越大，躍遷機率越小，因此

若束縛態能量離入射電子能量太遠，如圖 4.14 中的 C，則此種經束縛態干涉產生的 Fano 結構將不存在。圖為 Fano 結構的示意圖。

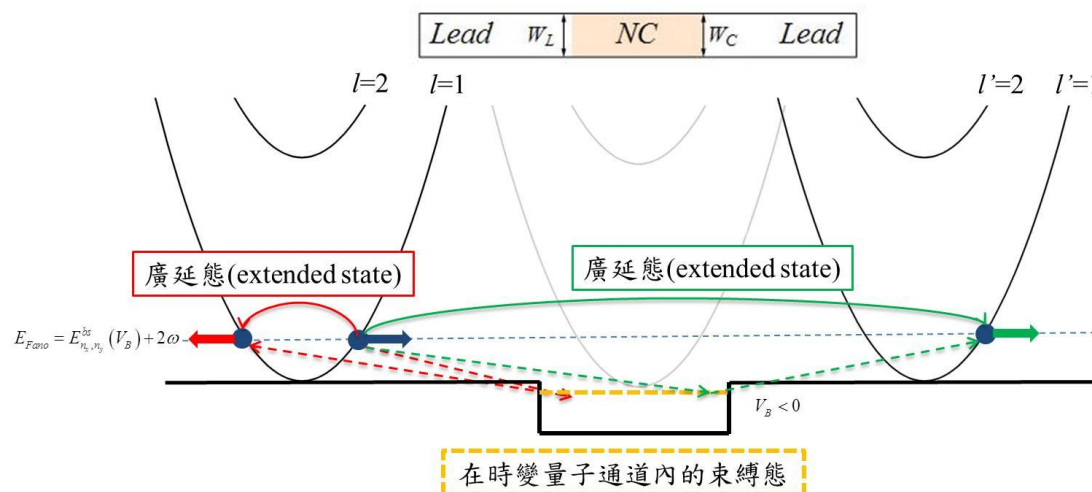


圖 4.16 Fano 結構的示意圖。紅色線為 Fano-dip 的情形。綠色線為 Fano-peak 的情形。Fano 發生的原因為真實束縛態(TBS)與廣延態(extended state)不同路徑所形成的干涉現象。

在這一小節裡，量子通道的動態傳輸出現兩種干涉現象，即急降結構的破壞性干涉和 Fano 干涉現象。急降結構是因為電子經由邊帶，躍遷跳至子帶能量底端的準束縛態所產生的破壞性干涉。Fano 結構是因為電子經由邊帶，躍遷跳至時變通道內的束縛態，與廣延態(extended state) 兩種不同路徑所形成的干涉現象。

4.3 寬-窄-寬元件的動態傳輸

在這一小節裡探討動態傳輸的導引寬度效應，改變導引的寬度 W_L ，比較不同導引的寬度 W_L 下的電導對入射電子能量的關係。將討論的參數整理如表 4.6

改變 寬窄比 W_L/W_C	固定 窄通道長度 L	固定 直流電壓位能 V_B	固定 時變場強度 V_0	固定 時變場頻率 ω
$W_L/W_C=1, 1.5, 2$ $W_C=10(\cong 80\text{nm})$	$L=30(\cong 240\text{nm})$	$V_B=0$	$V_0=0.06\epsilon_1$	$\omega=0.03\epsilon_1$

表 4.6 改變寬窄比之寬窄寬時變系統物理參數。黑體字為固定參數。藍體字為主要討論的參數。

圖 4.17 為三種不同導引的寬度 $W_L=10(\cong 80\text{nm})$ 、 $W_L=15(\cong 120\text{nm})$ 和 $W_L=20(\cong 160\text{nm})$ ，電導和入射電子能量的關係。

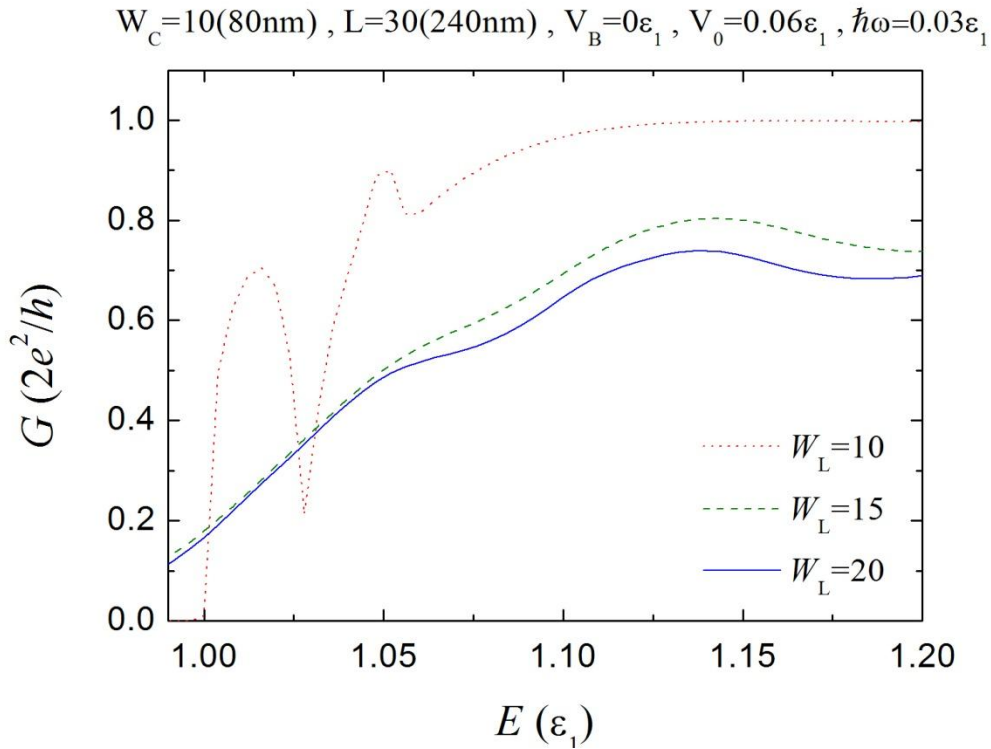


圖 4.17 改變寬窄比之電導和入射電子能量的關係。紅色虛線為導引和窄通道的寬度相同時。綠色虛線為導引寬度為 $W_L=15(\cong 120\text{nm})$ 。藍色實線為導引寬度為 $W_L=20(\cong 160\text{nm})$ 。

由圖 4.17 的結果得知，當導引的寬度比窄通道寬時，原來有的急降結構平滑消失了。而且因為導引中的最低子帶能量比窄通道中還來得低，這使得入射電子能量不需達到 ϵ_1 即可對電導有貢獻。

4.3.1 光電耦合效應

這一小節裡，討論寬窄比為 2 且綜合考慮直流電壓位能 V_B 和交流電壓位能所影響的物理機制。首先是直流電壓位能效應，固定交流電壓位能強度和頻率，單純討論直流電壓位能對量化電導的影響。將討論的參數整理如表 4.7

固定 寬窄比 W_L/W_C	固定 窄通道長度 L	改變 直流電壓位能 V_B	固定 時變場強度 V_0	固定 時變場頻率 ω
$W_L/W_C=2$ $W_L=20(\cong 160\text{nm})$ $W_C=10(\cong 80\text{nm})$	$L=30(\cong 240\text{nm})$	$V_B = -3.0\varepsilon_1,$ $-1.5\varepsilon_1, 0.0\varepsilon_1$	$V_0=0.06\varepsilon_1$	$\omega=0.03\varepsilon_1$

表 4.7 寬窄比為 2 時，改變直流電壓位能 V_B 之寬窄寬時變系統物理參數。黑體字為固定參數。藍體字為主要討論的參數。

圖 4.19 為四種不同直流電壓位能 $V_B = -3\varepsilon_1$ 、 $V_B = -2\varepsilon_1$ 、 $V_B = -1\varepsilon_1$ 和 $V_B = 0\varepsilon_1$ 下，電導和入射電子能量的關係。主要兩個物理特徵為：(1) 電子在邊帶之間的躍遷(inter-sideband transition) 對電導的影響。(2) 直流電壓位能對電導的影響。

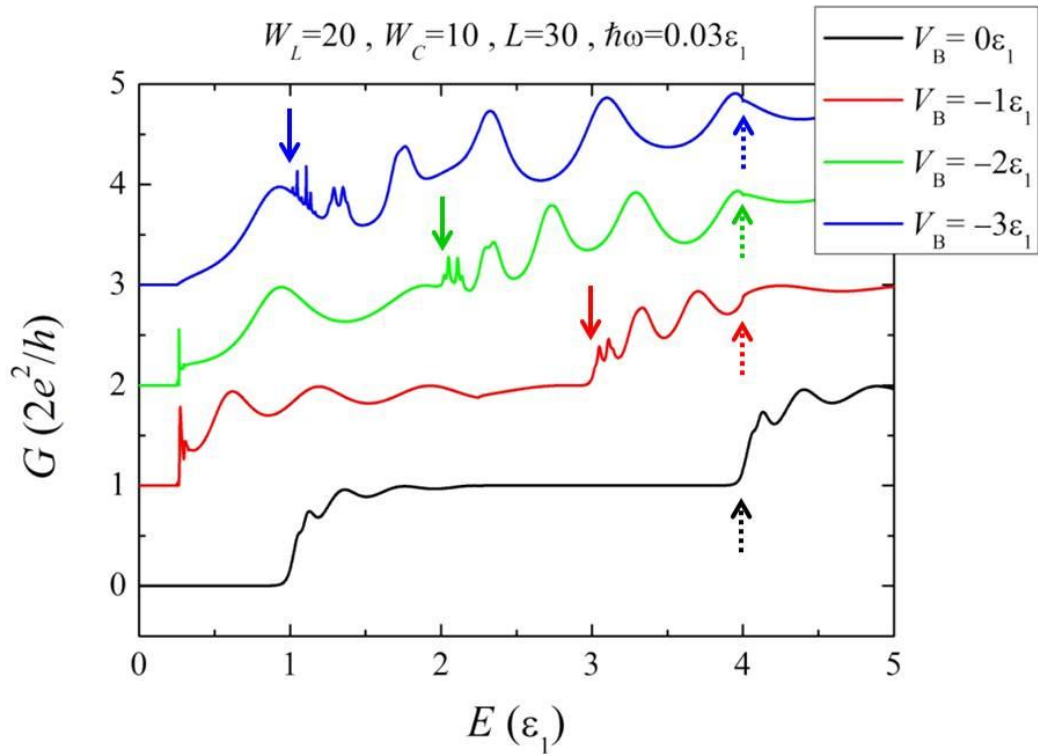


圖 4.18 不同直流電壓位能 V_B 下，電導和入射電子能量關係圖(為了分析方便做垂直方向平移)。虛線箭頭為未加直流電壓位能 V_B 所形成的第二個子帶底端。實線箭頭為加入直流電壓位能 V_B 所形成的第二個子帶底端。

黑圓圈為加入直流電壓位能 V_B 所形成的束縛態和光輔助傳輸。束縛

態只在直流電壓位能為負時($V_B < 0$)出現，，因為此時在窄通道為一量子點，有束縛態出現。隨著直流電壓位能 V_B 的減小，子帶能量也跟著減小，因此束縛態也同時減小。且因為窄通道所形成的量子點為矩形，長軸為電子傳輸方向，短軸為量子通道侷域方向，所以一個子帶能量範圍裡有數個束縛態，第一個共振態在靠近子帶底端處。同時我們發現隨著直流電壓位能 V_B 減小，束縛態與光輔助傳輸的效應越明顯。仔細觀察直流電壓位能 $V_B = -3\epsilon_1$ 的結果可發現第二組束縛態的光輔助光抑制傳輸開始形成。

為了瞭解束縛態的能量，我們用硬牆模型估算窄通道量子點的束縛態，其能量與窄通道的長和寬以及直流電壓位能 V_B 的關係為：

$$E_{n_x, n_y}^{bs}(V_B) = \left(\frac{n_x \pi}{L} \right)^2 + \left(\frac{n_y \pi}{W} \right)^2 + V_B \quad (4.29)$$

為求分析上的方便，我們用窄通道的第一個子帶能量 (first subband energy) ε_1 作為能量單位化簡束縛態為

$$\underline{E}_{n_x, n_y}^{bs}(V_B) = \frac{E_{n_x, n_y}^{bs}(V_B)}{\varepsilon_1} = \left(\frac{n_x W}{L} \right)^2 + (n_y)^2 + V_B \quad (4.30)$$

接下來我們以直流電壓位能 $V_B = -3\varepsilon_1$ ，討論束縛態和邊帶的分佈情形。圖 4.19 為改變直流電壓位能 V_B 之電導和入射電子能量的關係。虛線為未加交流電壓位能且直流電壓位能 $V_B = -3\varepsilon_1$ 時的對照曲線。藍色實線為直流電壓位能為 $V_B = -3.0\varepsilon_1$ 和交流電壓頻率 $\omega = 0.03\varepsilon_1$ 。從圖中的黑色點線和藍色實線得知，當有交流電壓位能影響時，電導會有邊峰 (side peaks) 的產生，而邊峰發生的位置為束縛態吸放多個光子的能量。所以入射電子能量與束縛態的關係為

$$E = E_{n_x, n_y}^{bs}(V_B) \pm m\omega \quad (4.31)$$

$E_{n_x, n_y}^{bs}(V_B)$ 為束縛態能量， m 為吸放光子數。

當光子能量為 $\omega = 0.03\varepsilon_1$ 、直流電壓位能為 $V_B = -3.0\varepsilon_1$ 時，束縛態出現在 $E_{1,2}^{bs}(V_B = -3\varepsilon_1) = 1.08\varepsilon_1$ ，此時邊峰出現的位置為 $E = E_{n_x, n_y}^{bs}(V_B) \pm \omega$ ， $E = E_{n_x, n_y}^{bs}(V_B) \pm 2\omega$ 即為 $E = 1.02\varepsilon_1, 1.05\varepsilon_1, 1.11\varepsilon_1, 1.14\varepsilon_1$ 。這個現象表

示當入射電子能量為 $E = E_{n_x, n_y}^{bs}(V_B) \pm 2\omega$ 時，電子有機會躍遷至束縛態而使電導值微幅上升。

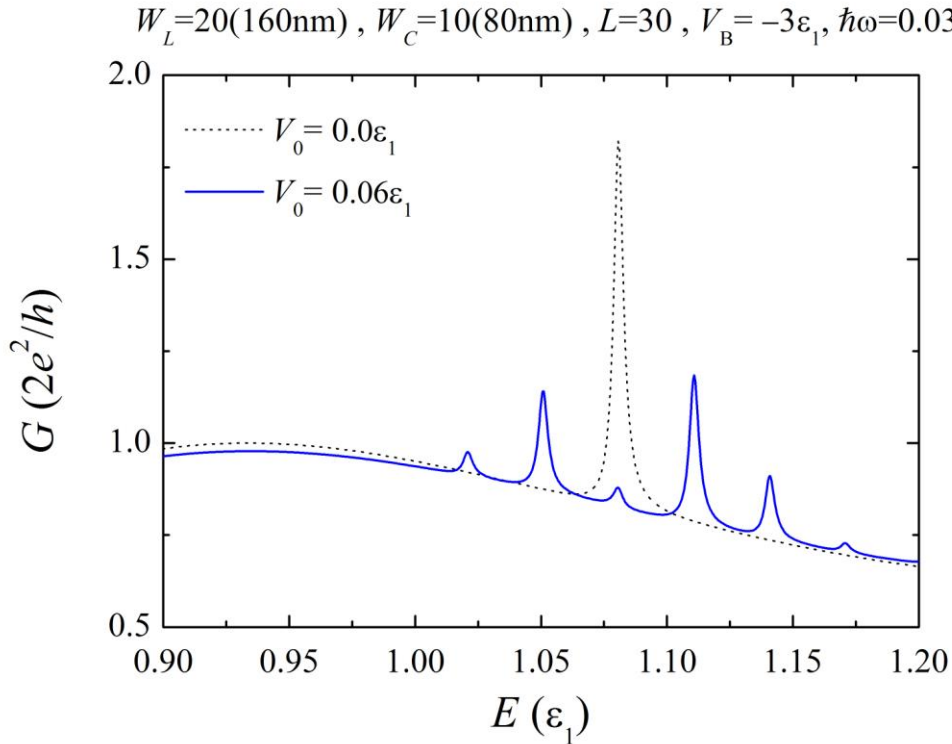


圖 4.19 改變直流電壓位能 V_B 之電導和入射電子能量的關係。黑色點線為未加交流電壓位能且直流電壓位能 $V_B = -3\epsilon_1$ 時的對照曲線。藍色實線為直流電壓位能為 $V_B = -3.0\epsilon_1$ 和交流電壓頻率 $\omega = 0.03\epsilon_1$ 。

最後觀察束縛態峰值和邊峰的大小，發現束縛態的峰值明顯較無交流電壓位能時小，且各個邊峰之間的強度也不同。因為光輔助傳輸機制下，電子容易躍遷至邊帶，所以束縛態峰值會減小，同時伴隨邊峰的出現。

之前將焦點放在直流偏壓對電子傳輸的影響。這一部分將討論時交流電壓位能 $V_0\cos(\omega t)$ 對電子傳輸的影響，因此我們固定直流電壓位能 $V_B = -3.0\epsilon_1$ 。第一部分為同時調整交流電壓位能強度和頻率，

參數的整理如表 4.8。

固定 寬窄比 W_L/W_C	固定 窄通道長度 L	固定 直流電壓位能 V_B	改變 時變場強度 V_0	改變 時變場頻率 ω
$W_L/W_C=2$ $W_L=20(\cong 160\text{nm})$ $W_C=10(\cong 80\text{nm})$	$L=30(\cong 240\text{nm})$	$V_B=-3.0\varepsilon_1$	固定 $V_0/\omega=2$ $V_0=0.04\varepsilon_1,$ $0.06\varepsilon_1, 0.08\varepsilon_1$	固定 $V_0/\omega=2$ $\omega=0.02\varepsilon_1,$ $0.03\varepsilon_1, 0.04\varepsilon_1$

表 4.8 寬窄比為 2 時，改變窄通道長度 L 之寬窄比和交流電壓位能強度頻率比 V_0/ω 為 2 時，改變交流電壓位能頻率 ω 之寬窄寬時變系統物理參數。黑體字為固定參數。藍體字為主要討論的參數。

圖 4.20 為三種不同光子能量 $\hbar\omega = 0.02\varepsilon_1$ 、 $0.03\varepsilon_1$ 和 $0.04\varepsilon_1$ 下，電導和入射電子能量的關係。圖中多加了只有直流電壓位能，但無交流電壓位能的對照曲線。

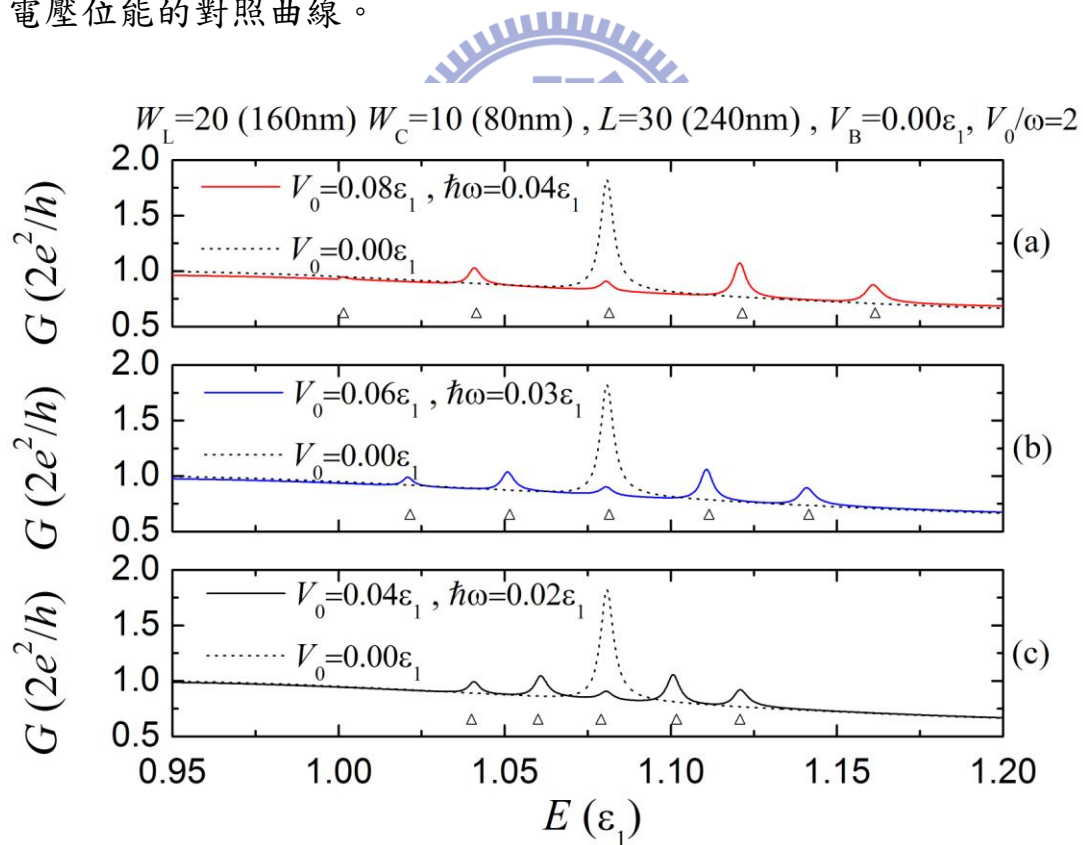


圖 4.20 寬窄比為 2 時，改變 L 之電導和入射電子能量的關係。黑色點線為未加交流電壓時。三條實線分別為光子能量 $\hbar\omega = 0.02\varepsilon_1$ 、 $0.03\varepsilon_1$ 和 $0.04\varepsilon_1$ 且交流電壓位能強度頻率比 $V_0/\hbar\omega = 2$ 的電導和入射電子能量的關係。黑色小三角為邊峰出現的位置。

圖 4.20 為固定交流電壓位能強度和頻率的比值，改變交流電壓位能頻率的結果。黑色點線為無交流電壓位能下的對照結果。黑色小三角為邊峰出現的位置為，即 $E = E_{n_x, n_y}^{bs}(V_B) \pm m\omega$ 。當頻率越大時，光子的能量也越大，則邊峰和共振態的能量間距也越大。

第二部分為固定交流電壓位能強度和改變交流電壓位能頻率的討論，參數的整理如表 4.9。

固定寬窄比 W_L/W_C	固定窄通道長度 L	固定直流電壓位能 V_B	固定時變場強度 V_0	改變時變場頻率 ω
$W_L/W_C=2$ $W_L=20(\cong 160\text{nm})$ $W_C=10(\cong 80\text{nm})$	$L=30(\cong 240\text{nm})$	$V_B = -3.0\varepsilon_1$	$V_0 = 0.06\varepsilon_1$	$\omega = 0.02\varepsilon_1,$ $0.03\varepsilon_1, 0.04\varepsilon_1$

表 4.9 寬窄比為 2 時，改變 ω 之寬窄寬時變系統物理參數。黑體字為固定參數。藍體字為主要討論的參數。

圖 4.21 為三種不同光子能量 $\omega = 0.02 \varepsilon_1$ 、 $0.03 \varepsilon_1$ 和 $0.04 \varepsilon_1$ ，電導和入射電子能量的關係。圖中多加了只有直流電壓位能，但無交流電壓位能的對照黑色點線。黑色小三角為邊峰出現的位置，即 $E = E_{n_x, n_y}^{bs}(V_B) \pm m\omega$ 。當頻率越大時，光子的能量也越大，則邊峰和共振態的能量間距也越大。值得注意的是，若對邊峰的強度做分析，則可發現 $\omega = 0.02 \varepsilon_1$ 時，單光子、雙光子和三光子的程序發生的機率相近，然而在 $\omega = 0.03 \varepsilon_1$ 時，單光子、雙光子程序發生的機率相近但雙光子以上程序幾乎不存在。最後， $\omega = 0.04 \varepsilon_1$ 時，單光子程序的發生但單

光子以上程序幾乎不存在。綜合以上的結果，單獨調高交流電壓位能頻率會減低多光子程序發生的機率。

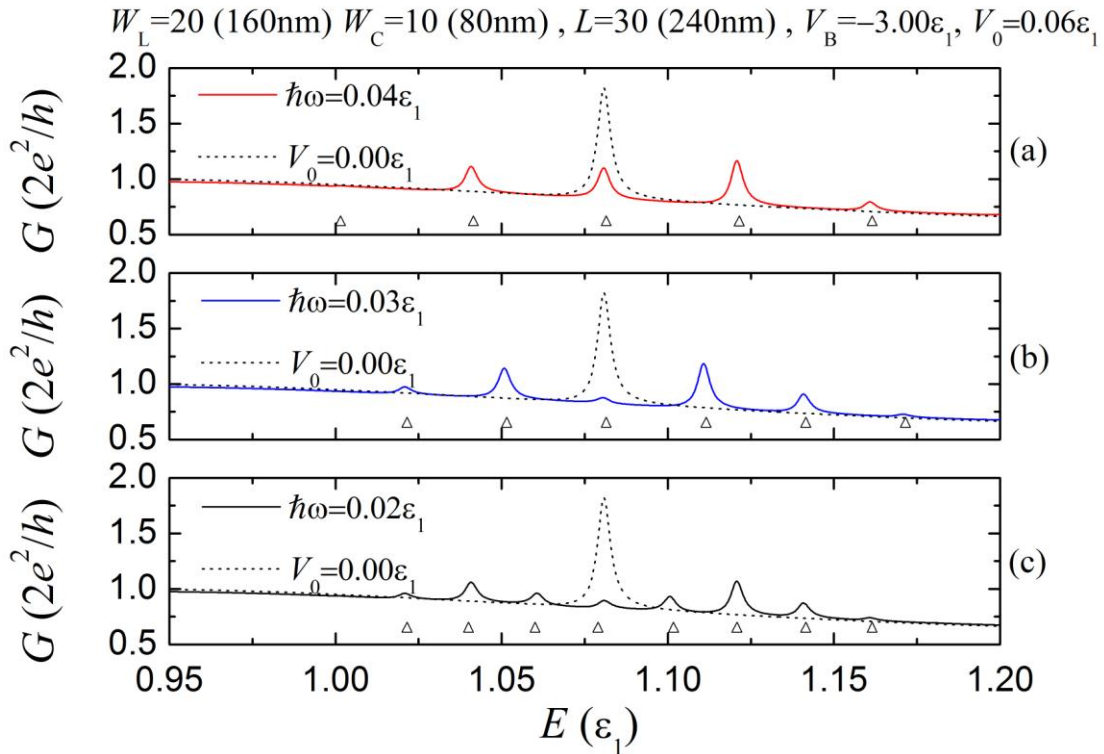


圖 4.21 寬窄比為 2 時，改變 ω 之電導和入射電子能量的關係。黑色點線為未加交流電壓位能時。三條實線分別為交流電壓位能頻率 $\hbar\omega = 0.02\epsilon_1$ 、 $0.03\epsilon_1$ 和 $0.04\epsilon_1$ 的電導和入射電子能量的關係。黑色小三角為邊峰出現的位置。

第三部分為固定交流電壓位能頻率並改變交流電壓位能強度 V_0 的討論，參數的整理如表 4.10。由於交流電壓位能強度與頻率的比值 $V_0/\hbar\omega$ 同時也代表了電子與光子的耦合強弱。

固定 寬窄比 W_L/W_C	固定 窄通道長度 L	固定 直流電壓位能 V_B	改變 時變場強度 V_0	固定 時變場頻率 ω
$W_L/W_C=2$ $W_L=20(\cong 160\text{nm})$ $W_C=10(\cong 80\text{nm})$	$L=30(\cong 240\text{nm})$	$V_B=-3.0\epsilon_1$	$V_0=0.03\epsilon_1,$ $0.06\epsilon_1, 0.09\epsilon_1$	$\omega=0.03\epsilon_1$

表 4.10 寬窄比為 2 時，改變交流電壓位能強度 V_0 之寬窄寬時變系統物理參數。黑體字為固定參數。藍體字為主要討論的參數。

我們挑選弱、強和超強三種不同耦合強度，即 $V_0/\omega = 0.1$ 、 $V_0/\omega = 1$ 和 $V_0/\omega = 2$ ，討論電導和入射電子能量的關係如圖 4.22。圖中多加了只有直流電壓位能，但無交流電壓位能的對照曲線。

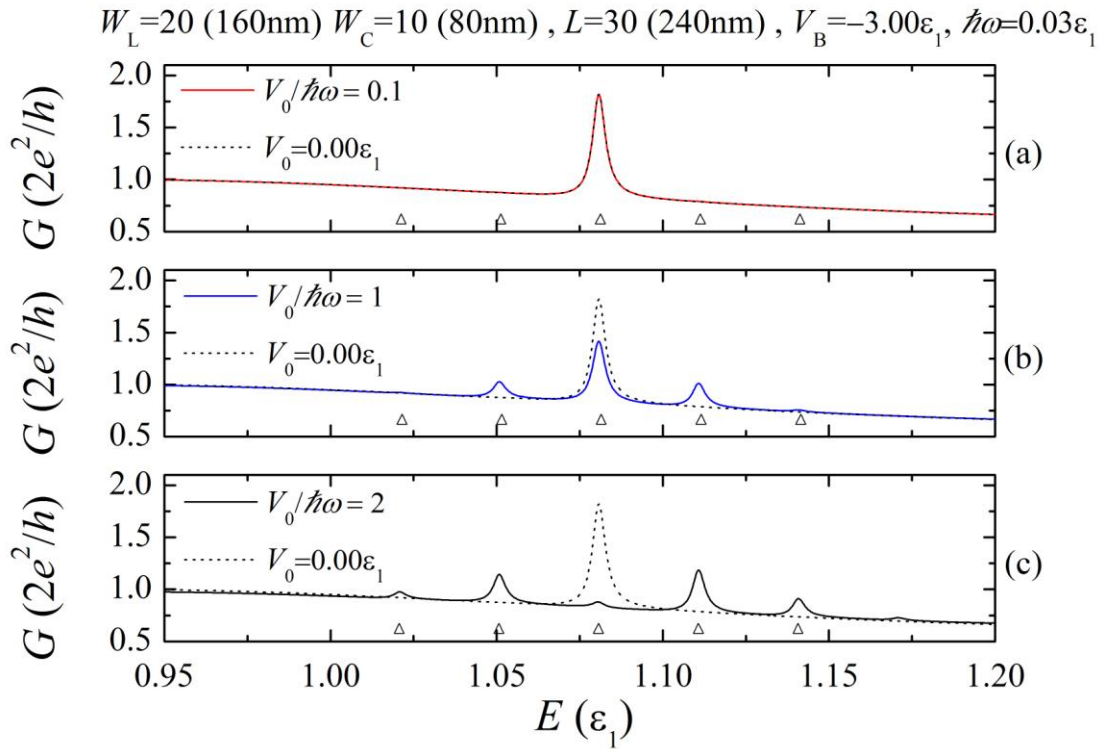


圖 4.22 寬窄比為 2 時，改變交流電壓位能強度 V_0 之電導和入射電子能量的關係。黑色點線為未加交流電壓位能時。三條實線分別為交流電壓位能強度 $V_0/\omega = 0.1$ 、 $V_0/\omega = 1$ 和 $V_0/\omega = 2$ 的電導和入射電子能量的關係。黑色小三角為邊帶峰值出現的位置。

圖 4.22 為固定交流電壓位能頻率並改變交流電壓位能強度的電導結果。黑色點線為無交流電壓位能下的對照結果。黑色小三角為邊峰出現的位置為，即 $E = E_{n_x, n_y}^{bs}(V_B) \pm m\omega$ 。在弱耦合區，例如 $V_0/\omega = 0.1$ 時，電子傳輸過程幾乎不會吸放光子，此時可用緩變模型做近似。在強耦合區，例如 $V_0/\omega = 1$ 時，電子傳輸過程有機會吸放一個光子，此時可做單光子近似，又稱單光子程序(one photon process)。在超強耦

合區，例如 $V_0/\omega = 2$ 時，電子傳輸過程中會吸放數個光子，此時無法做任何近似而必需用數值的方式算出精確解。由文獻可知[11]，電子因為吸放 m 個光子而發生光輔助傳輸的機率正比於 $J_m^2\left(\frac{V_0}{\omega}\right)$ ，畫 $J_m^2\left(\frac{V_0}{\omega}\right)$ 對 V_0/ω 的關係如圖 4.23。

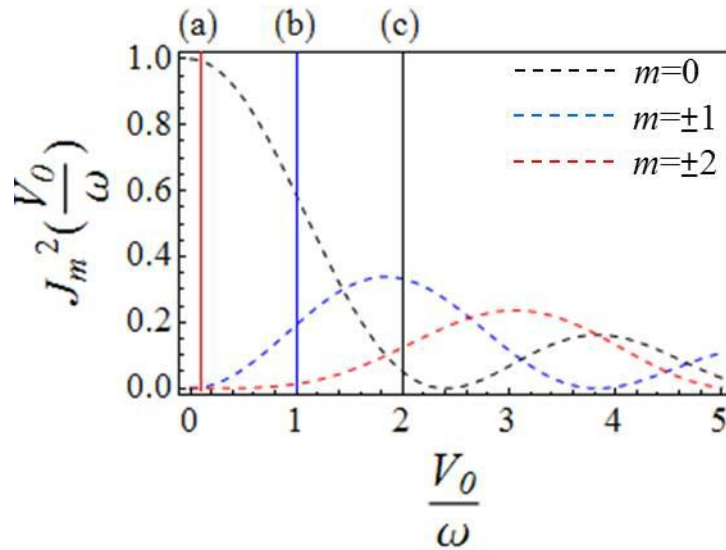


圖 4.23 (a)、(b)和(c)三條線分別對應 $V_0/\omega = 1$ 、 2 和 3 。黑色虛線為不吸放光子的結果。藍色虛線為吸放一個光子的結果。紅色虛線為吸放兩個光子的結果。在 $V_0/\omega = 1$ 時，即圖中的(a)情形，主峰 $>$ 第一邊峰 $>$ 第二邊峰，電子躍遷至邊帶的機率不高。在 $V_0/\omega = 2$ 時，即圖中的(b)情形，第一邊峰 $>$ 第二邊峰 $>$ 主峰，電子跳至第一邊帶的機率最高。在 $V_0/\omega = 3$ 時，即圖中的(c)情形，第二邊峰 $>$ 第一邊峰 \approx 主峰，電子跳至第二邊帶的機率最高而跳至第一邊帶或不跳躍的機率相同。在第三個部分的最後討論裡，我們考慮溫度 $T = 0.03\text{K}$ 和零溫下，不同耦合強度的電導對入射電子能量的關係比較如圖 4.24 和圖 4.25。

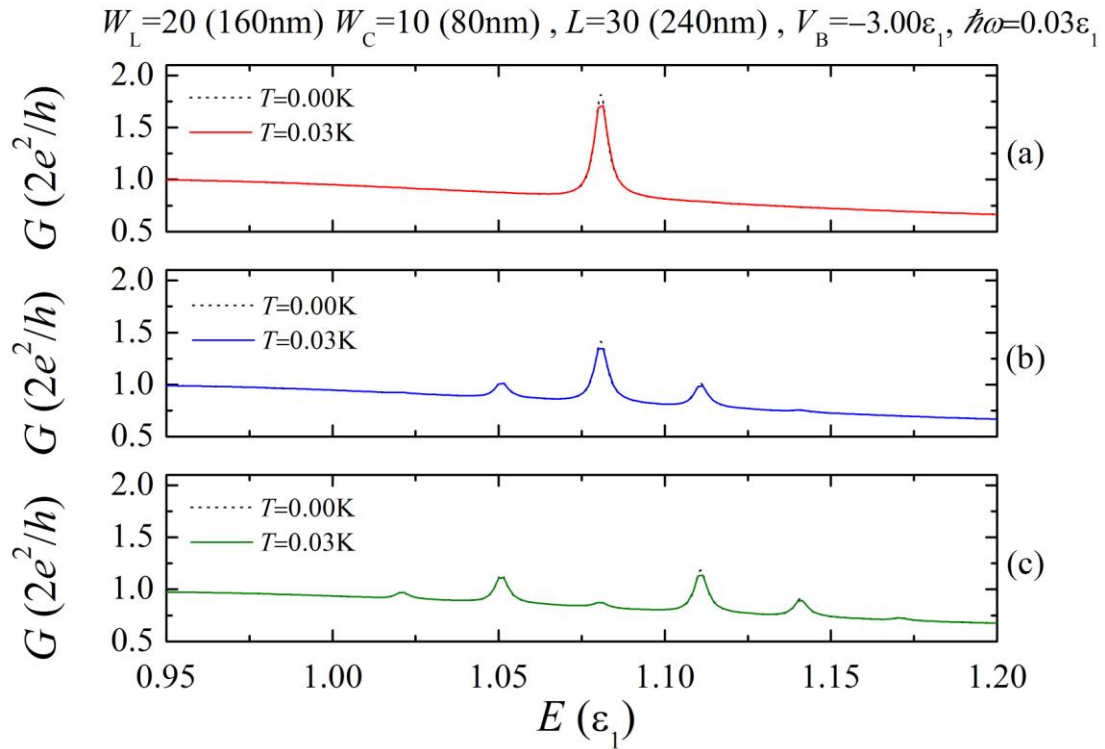


圖 4.24 三種耦合強度 $V_0/\hbar\omega = 0.1$ 、 $V_0/\hbar\omega = 1$ 和 $V_0/\hbar\omega = 2$ 下，考慮有限溫度 $T=0.03\text{K}$ 的電導和入射電子能量關係。黑色點線代表零溫的對照曲線。實線考慮的溫度為 0.03K 。(a)為弱耦合(b)為強耦合(c)為超強耦合。

圖 4.24 考慮溫度 $T = 0.03\text{K}$ ，對映的熱能為 $k_B T = 2.91 \times 10^{-3} \varepsilon_1 \approx 0.1\omega$ ，大約為光子能量的 0.1 倍。

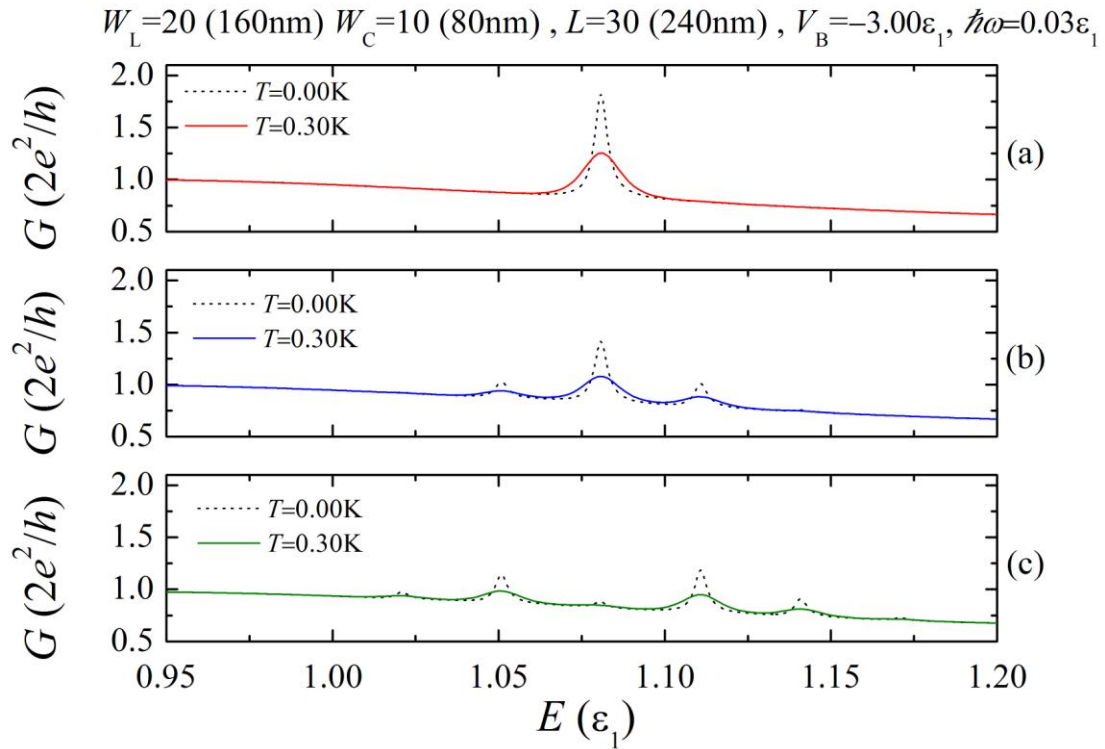


圖 4.25 三種耦合強度 $V_0/\hbar\omega = 0.1$ 、 $V_0/\hbar\omega = 1$ 和 $V_0/\hbar\omega = 2$ 下，考慮有限溫度 $T=0.30\text{K}$ 的電導和入射電子能量關係。黑色點線代表零溫的對照曲線。實線考慮的溫度為 0.30K 。(a)為弱耦合(b)為強耦合(c)為超強耦合。

圖 4.25 考慮溫度 $T = 0.30\text{K}$ ，對映的熱能為 $k_B T = 2.91 \times 10^{-2} \varepsilon_1 \approx 1\omega$ ，大約為光子能量的 1 倍。考慮有限溫度的影響後，電子受到熱擴張性質 (thermal broadening)，邊峰的強度變小，而半高寬變大。

第四部分為窄通道的長度效應。固定交流電壓位能頻率和強度並改變窄通道長度 L 的討論，參數的整理如表 4.11。

固定 寬窄比 W_L/W_C	改變 窄通道長度 L	固定 直流電壓位能 V_B	固定 時變場強度 V_0	固定 時變場頻率 ω
$W_L/W_C=2$ $W_L=20(\cong 160\text{nm})$ $W_C=10(\cong 80\text{nm})$	$L=20, 30, 40$ ($\cong 160\text{nm},$ $240\text{nm}, 320\text{nm}$)	$V_B = -3.0\varepsilon_1$	$V_0 = 0.06\varepsilon_1$	$\omega = 0.03\varepsilon_1$

表 4.11 寬窄比為 2 時，改變 L 之寬窄寬時變系統物理參數。黑體字為固定參數。藍體字為主要討論的參數。

圖 4.26 為三種不同窄通道長度 $L=20$ 、 30 和 40 時，電導和入射電子能量的關係。圖中多加了只有直流電壓位能，但無交流電壓位能的對照曲線。

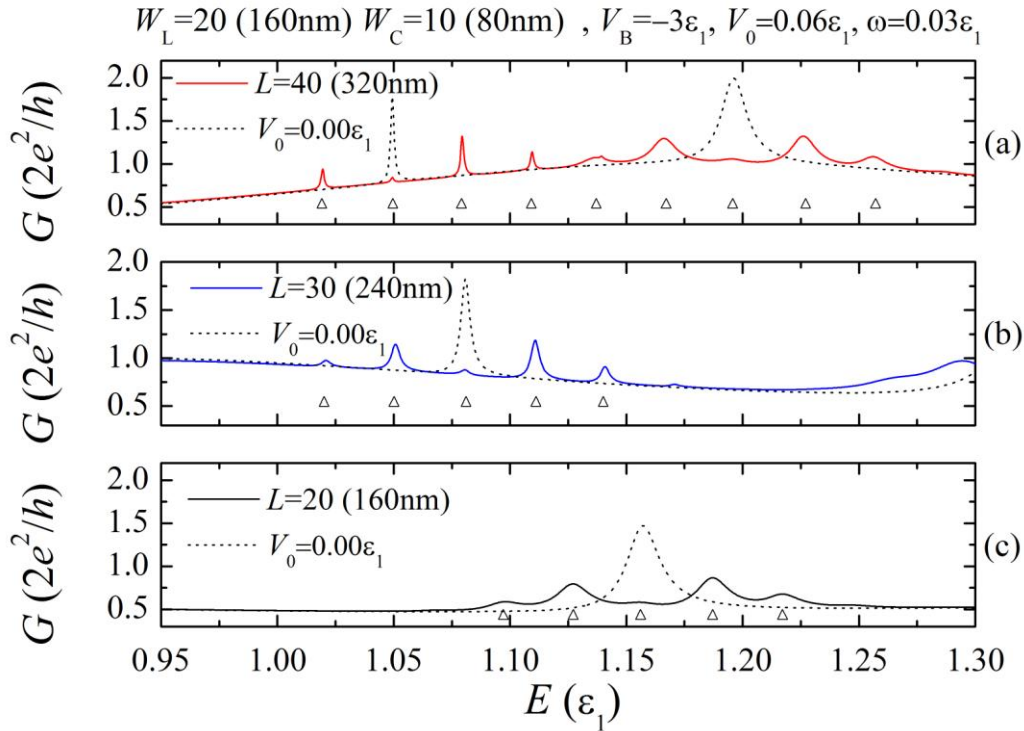


圖 4.26 寬窄比為 2 時，改變 L 之電導和入射電子能量的關係。黑色點線為未加交流電壓位能時。三條實線分別為窄通道長度 $L=20$ 、 30 和 40 時的電導和入射電子能量的關係。黑色小三角為邊峰出現的位置。

圖 4.26 為固定交流電壓位能頻率和強度並改變窄通道長度 L 的電導結果。黑色點線為無交流電壓位能下的對照結果。黑色小三角為邊峰出現的位置為，即 $E = E_{n_x, n_y}^{bs}(V_B) \pm m\omega$ 。當時窄通道長度 L 越長時，第一個束縛態出現的能量越低，且束縛態的能量間距越小。除此之外，比較第一個束縛態的半高寬可發現，窄通道長度 L 越長，半高寬越小，也就是說生命期(life time)越長。

第五章 總結與未來工作

在這份工作中，我們一開始探討數種量子傳輸的計算方式，其中模態匹配法和轉移矩陣法為我們所用。模態匹配法是一種解析的方法，其優點為容易對其結果進行分析。轉移矩陣法屬於數值的方法，其優點為可處理任意位能分佈的問題。

瞭解計算量子傳輸的一些方式後，我們開始針對幾個感興趣的系統做討論。首先，在一維與準一維系統中考慮一個 δ 散射位能。這個系統使我們對電子在奈米線中的傳輸有基本的認識。其次，寬窄寬系統為我們討論的重點，這裡又包含了靜態傳輸和動態傳輸兩大部分。靜態傳輸部分我們利用模態匹配法考慮子帶間的躍遷。由導引的寬度效應及窄通道的長度效應，得知電子若通過一非緩變界面時，電導將有明顯的背向散射發生，若系統存在兩個以上的非緩變界面時(即局域位能變化兩次以上時)，電子可在特定區域內發生建設性干涉或破壞性干涉。動態傳輸為在寬窄寬系統的窄通道上考慮額外的時變場。在此非彈性散射的環境中，電子有吸放多個光子的可能。我們使用模態匹配法同時考慮子帶間與邊帶間的躍遷。動態傳輸的部分經由數值的模擬得到三個重要的結果-急降結構、Fano 干涉效應和光電耦合效應。急降結構發生在電子放出一個光子跳至準束縛態而反射回入射端的情形。Fano 干涉效應為真實束縛態與廣延態(extended state)之

間的干涉現象。光電耦合效應發生在電子經邊帶躍遷跳至束縛態而始電導提升的現象。

為了之後研究實際奈米線加上偏壓後 $I-V$ 關係，我們簡單的用四種不同的偏壓分佈模擬奈米線中的電位能分佈，並分別討論之。在討論偏壓的同時，我們也利用費米狄拉克分佈討論有限溫度的電性傳輸。由本篇論文的討論可知，當加入有限偏壓後，量化電導從子帶底端算起會出現一段線性區，此線性區大小即偏壓位能大小。而有限溫度效應則使電導趨於平滑化。

在這篇論文中，我們模擬了時變寬窄寬系統的量子傳輸。其中急降結構、Fano 結構、邊帶結構皆被討論。在未來工作裡，我們希望用轉移矩陣法計算寬窄寬結構下，考慮有限偏壓的量子傳輸。除此之外，我們還可以考慮因照光所產生的電磁波和電子的耦合效應。或者考慮真實材料的奈米線能帶分佈。甚至是加入自旋軌道交互作用下的量子傳輸。

参考文献：

- [1] B. J. van Wees, et al. "Quantized Conductance of Point Contacts in a Two-Dimensional Electron Gas", PRL, **60**, 848 , February (1988)
- [2] C. S. Tang, Y. H. Tan, and C. S. Chu "Transport spectroscopy in a time-modulated open quantum dot", PRB, **67**, 205324 , May (2003)
- [3] T. H. Oosterkamp, et al. "Microwave spectroscopy of a quantum-dot molecule", NATURE, **395**, 873 , October (1998)
- [4] Yuri M. Galperin "Quantum Transport Lecture Notes", Lund University , Chapter 1 (1998)
- [5] Y.Kawano, et al. "Terahertz photon-assisted tunneling in Carbon nanotube quantum dots ", JAP, **103**, 034307 , February (2008)
- [6] L. P. Kouwenhoven, et al. "Photon-assisted tunneling through a quantum dot ", PRB, **50**, 2019 , July (1994)
- [7] L. P. Kouwenhoven, et al. "Observation of Photon-Assisted Tunneling through a Quantum Dot ", PRL, **73**, 3443 , December (1994)
- [8] B. J. Keay, et al. "Photon-Assisted Electric Field Domains and Mutiphoton-Assisted Tunneling in Semiconductor Superlattices ", PRL, **75**, 4098 , December (1995)
- [9] B. J. Keay, et al. "Dynamic Localization, Absolute Negative Conductance, and Stimulated, Multiphoton Emission in Sequential Resonant Tunneling Semiconductor Superlattices ", PRL, **75**, 4102 , November (1995)
- [10] C. A. Stafford and Ned S. Wingreen "Resonant Photon-Assisted Tunneling through a Double Quantum Dot: An Electron Pump from Spatial Rabi Oscillations ", PRL, **76**, 1916 , March (1996)
- [11] T. H. Oosterkamp, et al. "Photon Sidebands of the Ground State and Firsst Excited State of a Quantum Dot ", PRL, **78**, 1536 , February

(1997)

- [12] C. M. Marcus, et al. "Conductance Fluctuations and Chaotic Scattering in Ballistic Microstructures ", PRL, **69**, 506 , July (1992)
- [13] A.P.S. de Moura, et al. "Tunneling and Nonhyperbolicity in Quantum Dots ", PRL, **88**, 236804 , June (2002)
- [14] J.G.G.S. Ramos, et al. "Conductance Peaks in Open Quantum Dots", PRL, **107**, 176807 , October (2011)
- [15] Wenjun Li and L. E. Reichl "Floquet scattering through a time-periodic potential", PRB, **60**, 15732 , December (1999)
- [16] Wenjun Li and L. E. Reichl "Transport in strongly driven heterostructures and bound-state-induced dynamic resonances", PRB, **62**, 8269 , September (2000)
- [17] J. A. Stevneng and E. H. Hauge "The Buttiker-Landauer Model Generalized", JSP, **57**, 841 , January (1989)
- [18] Phillip F. Bagwell and Roger K. Lake "Resonances in transmission through an oscillating barrier", PRB, **46**, 15329 , December (1992)
- [19] Mathias Wagner "Strongly Driven Quantum Wells: An Analytical Solution to the Time-Dependent Schrodinger Equation", PRL, **76**, 4010 , May (1996)
- [20] A. F. J. Levi "*Applied Quantum Mechanics*", Cambridge University Press , Chapter 4 (2003)
- [21] Philip F. Bagwell and Terry P. Orlando "Landauer's conductance formula and its generalization to finite voltages", PRB, **40**, 1456 , July (1989)
- [22] Supriyo Datta "*Electronic Transport in Mesoscopic systems*", Cambridge University Press , Chapter 2 (1999)

- [23] Paul Harrison "*Quantum Wells, Wires and Dots*", John Wiley & Sons, LTD , Chapter 3 (2005)
- [24] John H. Davies "*The Physics of Low-Dimensional Semiconductors*", Cambridge University Press , Chapter 5 (1998)
- [25] Eleuterio Castano and George Kirczenow "Theory of nonlinear transport in narrow ballistic constrictions", PRB, **41**, 3874 , February (1990)
- [26] Chong-Shian Wen, et al. "Observation of resonance conductance in a quantum point contact with a tunable channel potential", PRB, **82**, 115416 , September (2010)
- [27] Aaron Szafer and A. Douglas Stone "Theory of Quantum Conduction through a Constriction", PRL, **62**, 330 , January (1989)
- [28] K. Yakubo "Transfer matrix method for a dynamical mesoscopic system ", PRE, **57**, 3602 , March (1998)
- [29] D. Sokolovski "Resonance tunneling in a periodic time-dependent external field ", PRB, **37**, 4201 , March (1988)
- [30] C. S. Kim, A. M. Satanin "Tunneling through discrete levels in the continuum ", JETP, **88**, 118 , January (1999)
- [31] M. Mendoza and P. A. Schulz "Imaging and switching of Fano resonances in open quantum cavities ", PRB, **71**, 245303 , June (2005)
- [32] David Griffiths "*Introduction to electrodynamics*", Prentice Hall International, Inc. , Chapter 3 (1999)

附錄 A：時間反轉不變 (time reversal invariant) 和電流守恆對計算穿透係數的影響

首先討論時間反轉不變。實數的散射位能代表漢米爾頓(Hamiltonian)在時間反轉算

符作用後不變，即

$$[H, \theta] = 0 \quad (\text{A.1})$$

其中我們引進反正交歸一化 (anti-unitary) 的時間反轉運算子 θ 。

以上方程式表示如果 $\psi(x)$ 是 Schrodinger 方程式的一解，則 $\psi^*(x)$ 也為同一個方程式的解，即

$$H\psi^*(x, -t) = E\psi^*(x, -t) \quad (\text{A.2})$$

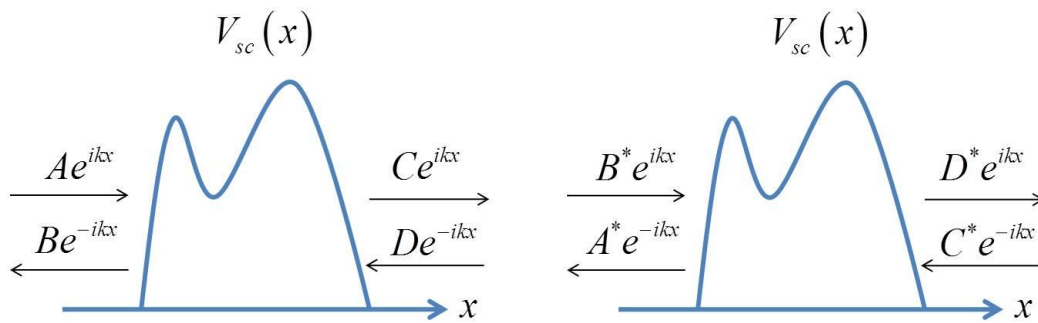


圖 A.1 左圖為原本的波函數，右圖為時間反轉後的波函數。

圖 A.1 中，時間反轉在物理上的意義為交換入射 (incoming) 和出射 (outgoing) 波的方向。所以轉移矩陣與波函數振幅的關係為

$$\begin{bmatrix} D^* \\ C^* \end{bmatrix} = M_i \begin{bmatrix} B^* \\ A^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B^* \\ A^* \end{bmatrix} \quad (\text{A.3})$$

兩邊同取共厄複數

$$\begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{22}^* & M_{21}^* \\ M_{12}^* & M_{11}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} \quad (\text{A.3})$$

和原本未經時間反轉的矩陣做比較為

$$\begin{cases} M_{11} = M_{22}^* \\ M_{12} = M_{21}^* \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

根據”Introduction to Quantum Mechanics”，一維平面波所構成的機率

密度流 (probability current) 為

$$J(x,t) = \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2) \quad (\text{A.3})$$

考慮向右的機率密度流為

$$k_2 (|C|^2 - |D|^2) \quad (\text{A.4})$$


此時可用轉移矩陣法將向右的機率密度流以波函數振幅 C 和 D 換成

以 A 和 B 表示

$$k_2 [|C|^2 - |D|^2] = k_2 [|M_{11}A + M_{12}B|^2 - |M_{21}A + M_{22}B|^2] \quad (\text{A.5})$$

展開後得到

$$k_2 [|C|^2 - |D|^2] = k_2 \left[\begin{aligned} & (|M_{11}A|^2 + |M_{12}B|^2 + M_{11}AM_{12}^*B^* + M_{11}^*A^*M_{12}B) \\ & - (|M_{21}A|^2 + |M_{22}B|^2 + M_{21}AM_{22}^*B^* + M_{21}^*A^*M_{22}B) \end{aligned} \right] \quad (\text{A.6})$$

代入時間反轉不變，得到

$$k_2 [|C|^2 - |D|^2] = k_2 [(|M_{11}|^2 - |M_{21}|^2) (|A|^2 - |B|^2)] \quad (\text{A.7})$$

若考慮電流守恆，則波函數振幅 C 和 D 以及 A 和 B 的關係為

$$k_2(|C|^2 - |D|^2) = k_1(|A|^2 - |B|^2) \quad (\text{A.8})$$

比較(A.8)式和(A.7)式可知

$$\det(\mathbf{M}) = |M_{11}|^2 - |M_{21}|^2 = \frac{k_1}{k_2} \quad (\text{A.9})$$

若散射位能的兩邊波的群速度 (group velocity) 相同，則轉移矩陣的行列式為 $\det(\mathbf{M}) = 1$ 。

附錄 B：源極與汲極的費米能量差，用泰勒式展開後，取一次項做近似[31]

$$f_s(E, \mu_l) - f_d(E, \mu_r) = \left[f_s(E, \mu) + (\mu_l - \mu) \frac{\partial}{\partial \mu_l} f_s(E, \mu_l) \Big|_{\mu_l = \mu} + \dots \right] - \left[f_d(E, \mu) + (\mu_r - \mu) \frac{\partial}{\partial \mu_r} f_d(E, \mu_r) \Big|_{\mu_r = \mu} + \dots \right] \quad (\text{B.1})$$

取一階近似得到

$$f_s(E, \mu_l) - f_d(E, \mu_r) \approx \mu_l \frac{\partial}{\partial \mu_l} f_s(E, \mu_l) \Big|_{\mu_l = \mu} - \mu_r \frac{\partial}{\partial \mu_r} f_d(E, \mu_r) \Big|_{\mu_r = \mu} \quad (\text{B.2})$$

將對費米能量的偏微分改成對入射電子能量偏微分

$$f_s(E, \mu_l) - f_d(E, \mu_r) = -\mu_l \frac{\partial}{\partial E} f_s(E, \mu) + \mu_r \frac{\partial}{\partial E} f_d(E, \mu) \quad (\text{B.3})$$

將汲極和源極的費米能量差整理成以 V_{ds} 表示

$$f_s(E, \mu_l) - f_d(E, \mu_r) = -eV_{ds} \frac{\partial f(E, \mu)}{\partial E} \quad (\text{B.4})$$

附錄 C：奈米線之偏壓位能 $U_{bias}(x, V_{sd})$ 分佈 [32]

將奈米線簡化成一維問題後的偏壓位能分佈，並解一維 Poisson's equation

$$\frac{d^2 U_{bias}(x, V_{sd})}{dx^2} = \frac{\rho(x)}{\varepsilon} \quad (C.1)$$

其中 ε 為材料介電常數。

若考慮單電子系統，奈米線內無電荷分佈，即 $\rho(x)=0$ ，則問題簡化

為一維 Laplace's equation

$$\frac{d^2 U_{bias}(x, V_{sd})}{dx^2} = 0 \quad (C.2)$$

其通解為

$$U_{bias}(x, V_{sd}) = ax + b \quad (C.3)$$

其中 a 和 b 為二階微分方程的兩個未定系數，需由邊界條件決定之。

寫下奈米線的偏壓位能邊界條件：

邊界條件一：在源極端偏壓位能大小為 U_{sd} 。

$$U_{bias}(x_s, V_{sd}) = U_{sd} \quad (C.4)$$

邊界條件二：在源極端偏壓位能大小為 0。

$$U_{bias}(x_d, V_{sd}) = 0 \quad (C.5)$$

利用邊界條件求得偏壓位能分佈為

$$U_{bias}(x_d, V_{sd}) = U_{sd} \left[1 - \frac{(x - x_s)}{L} \right] \quad (C.6)$$

其中偏壓位能 $U_{bias}(x, V_{sd})$ 的分佈範圍 $L_{bias} = x_d - x_s$ 。

此結果即為論文第二章提及的偏壓位能 U_{bl} 。

附錄 D：矩形位能在長度極小時的 delta 近似

參考 2.1.3 小節的矩形位能結果，當 $E < V_{sq}$ ，且 E 和 V_{sq} 皆為有限值，

則穿透係數為

$$Tran(E) = \frac{1}{\left[1 + \frac{V_{sq}^2}{4E(V_{sq} - E)} \sinh^2(\sqrt{V_{sq} - E}L) \right]} \quad (D.1)$$

其中矩形位能長度為 L 。此時討論矩形位能的長度 $L \rightarrow 0$ 的極限情形，

則穿透係數改寫為

$$\begin{aligned} \lim_{L \rightarrow 0} Tran(E) &= \lim_{L \rightarrow 0} \frac{1}{\left[1 + \frac{V_{sq}^2}{4E(V_{sq} - E)} \sinh^2(\sqrt{V_{sq} - E}L) \right]} \\ &= \frac{1}{\left[1 + \frac{V_{sq}^2}{4E(V_{sq} - E)} (\sqrt{V_{sq} - E}L)^2 \right]} = \frac{1}{\left[1 + \frac{V_{sq}^2}{4E} L^2 \right]} \end{aligned} \quad (D.2)$$

當 $E > V_{sq}$ ，且 E 和 V_{sq} 皆為有限值，則穿透係數為

$$Tran(E) = \frac{1}{\left[1 + \frac{V_{sq}^2}{4E(E - V_{sq})} \sin^2(\sqrt{E - V_{sq}}L) \right]} \quad (D.3)$$

此時討論矩形位能的長度 $L \rightarrow 0$ 的極限情形，則穿透係數改寫為

$$\begin{aligned} \lim_{L \rightarrow 0} Tran(E) &= \lim_{L \rightarrow 0} \frac{1}{\left[1 + \frac{V_{sq}^2}{4E(E - V_{sq})} \sin^2(\sqrt{E - V_{sq}}L) \right]} \\ &= \frac{1}{\left[1 + \frac{V_{sq}^2}{4E(E - V_{sq})} (\sqrt{E - V_{sq}}L)^2 \right]} = \frac{1}{\left[1 + \frac{V_{sq}^2}{4E} L^2 \right]} \end{aligned} \quad (D.4)$$

由(D.2)式和(D.4)式可知當矩形位能長 $L \rightarrow 0$ 時，穿透係數和電子相對於矩形位能的動能 $E - V_{sq}$ 無關。與 2.1.1 的一個 delta 的模態匹配法結果，即(2.6)式，做比較

$$Tran(E) = \frac{1}{1 + \frac{V_{d0}^2}{4E}} \quad (D.5)$$

得知 delta 位能的強度 V_{d0} 與矩形位能的強度 V_0 有如下關係時，矩形位能有和 delta 位能相同的穿隧情形。

$$V_{d0} = V_{sq} \times L \quad (D.6)$$

附錄 E：重疊積分 (overlap integral)

在這裡我們將參數 a_{ln} 表示成：

$$\begin{aligned} a_{nl} &= \int_{-\frac{W_C}{2}}^{\frac{W_C}{2}} dy \varphi_n(y) x_l(y) \\ &= \frac{2}{\sqrt{W_L W_C}} \int_{-\frac{W_C}{2}}^{\frac{W_C}{2}} dy \sin\left[\frac{n\pi}{W_C} y + \frac{n\pi}{2}\right] \sin\left[\frac{l\pi}{W_L} y + \frac{l\pi}{2}\right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{W_L W_C}} \int_{-\frac{W_C}{2}}^{\frac{W_C}{2}} dy \left\{ \cos\left[\frac{(n-l)\pi}{2} + \frac{(nW_L - lW_C)\pi}{W_L W_C} y\right] - \cos\left[\frac{(n+l)\pi}{2} + \frac{(nW_L + lW_C)\pi}{W_L W_C} y\right] \right\} \end{aligned} \quad (E.1)$$

$$\text{定義 } u_{nl} = \frac{W_L W_C}{(nW_L - lW_C)\pi}, \quad v_{nl} = \frac{W_L W_C}{(nW_L + lW_C)\pi}$$

在邊界上有兩種子帶匹配的方式。

首先，我們考慮兩個子帶能量不同的情形，即 $nW_L \neq lW_C$ 。重疊積分為

$$a_{nl} = \frac{1}{\sqrt{W_L W_C}} \int_{-\frac{W_C}{2}}^{\frac{W_C}{2}} dy \left\{ \cos \left[\frac{(n-l)\pi}{2} + \frac{1}{u_{nl}} y \right] - \cos \left[\frac{(n+l)\pi}{2} + \frac{1}{v_{nl}} y \right] \right\} \quad (\text{E.2})$$

積分後得到

$$a_{nl} = \frac{2}{\sqrt{W_L W_C}} \left\{ u_{nl} \cos \left[\frac{(n-l)\pi}{2} \right] \sin \left[\frac{W_C}{2u_{nl}} \right] - v_{nl} \cos \left[\frac{(n+l)\pi}{2} \right] \sin \left[\frac{W_C}{2v_{nl}} \right] \right\} \quad (\text{E.2})$$

將 u_{nl} 和 v_{nl} 代入(E.2)式

$$a_{nl} = \frac{2}{\sqrt{W_L W_C}} \left\{ \begin{array}{l} \frac{W_L W_C}{(nW_L - lW_C)\pi} \cos \left[\frac{(n-l)\pi}{2} \right] \sin \left[\frac{W_C}{2 \frac{W_L W_C}{(nW_L - lW_C)\pi}} \right] \\ - \frac{W_L W_C}{(nW_L + lW_C)\pi} \cos \left[\frac{(n+l)\pi}{2} \right] \sin \left[\frac{W_C}{2 \frac{W_L W_C}{(nW_L + lW_C)\pi}} \right] \end{array} \right\} \quad (\text{E.3})$$

或

$$a_{nl} = \frac{2}{\pi} \sqrt{W_L W_C} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{(nW_L - lW_C)} \cos \left[\frac{(n-l)\pi}{2} \right] \sin \left[\frac{(nW_L - lW_C)\pi}{2W_L} \right] \\ - \frac{1}{(nW_L + lW_C)} \cos \left[\frac{(n+l)\pi}{2} \right] \sin \left[\frac{(nW_L + lW_C)\pi}{2W_L} \right] \end{array} \right\} \quad (\text{E.4})$$

考慮奇偶對稱性：

如果 $(n = \text{even}, l = \text{odd})$ 或 $(n = \text{odd}, l = \text{even})$ ，則

$$a_{nl} = 0 \quad (\text{E.5})$$

如果 $(n = \text{even}, l = \text{even})$ ，則

$$a_{nl} = \frac{2}{\pi} \sqrt{W_L W_C} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{(nW_L - lW_C)} (-1)^{\frac{(n-l)}{2}} \sin \left[\frac{n\pi}{2} - \frac{lW_C \pi}{2W_L} \right] \\ - \frac{1}{(nW_L + lW_C)} (-1)^{\frac{(n+l)}{2}} \sin \left[\frac{n\pi}{2} + \frac{lW_C \pi}{2W_L} \right] \end{array} \right\} \quad (\text{E.6})$$

n 與 l 皆為偶數，則化簡正弦與餘弦函數後得到

$$a_{nl} = \frac{2}{\pi} \sqrt{W_L W_C} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{(nW_L - lW_C)} (-1)^{\frac{(n-l)}{2}} (-1)^{\frac{n}{2}+1} \sin \left[\frac{lW_C \pi}{2W_L} \right] \\ - \frac{1}{(nW_L + lW_C)} (-1)^{\frac{(n+l)}{2}} (-1)^{\frac{n}{2}} \sin \left[\frac{lW_C \pi}{2W_L} \right] \end{array} \right\} \quad (\text{E.7})$$

利用 n 為偶數的性質，化簡 (-1) 的次方

$$a_{nl} = \frac{2}{\pi} \sqrt{W_L W_C} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{(nW_L - lW_C)} (-1)^{-\frac{l}{2}+1} \sin \left[\frac{lW_C \pi}{2W_L} \right] \\ - \frac{1}{(nW_L + lW_C)} (-1)^{\frac{l}{2}} \sin \left[\frac{lW_C \pi}{2W_L} \right] \end{array} \right\} \quad (\text{E.8})$$

統一 (-1) 的次方數

$$a_{nl} = \frac{2}{\pi} \sqrt{W_L W_C} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{(nW_L - lW_C)} (-1)^{\frac{l}{2}+1} \sin \left[\frac{lW_C \pi}{2W_L} \right] \\ + \frac{1}{(nW_L + lW_C)} (-1)^{\frac{l}{2}+1} \sin \left[\frac{lW_C \pi}{2W_L} \right] \end{array} \right\} \quad (\text{E.9})$$

合併兩項

$$a_{nl} = \frac{2}{\pi} \sqrt{W_L W_C} (-1)^{\frac{l}{2}+1} \frac{2nW_L}{[(nW_L)^2 - (lW_C)^2]} \sin \left[\frac{lW_C \pi}{2W_L} \right] \quad (\text{E.10})$$

合併常數項

$$a_{nl} = \frac{4}{\pi} (-1)^{\frac{l}{2}+1} \sqrt{W_L W_C} \frac{nW_L}{[(nW_L)^2 - (lW_C)^2]} \sin \left[\frac{lW_C \pi}{2W_L} \right] \quad (\text{E.11})$$

如果 $(n = \text{odd}, l = \text{odd})$ ，則

$$a_{nl} = \frac{2}{\pi} \sqrt{W_L W_C} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{(nW_L - lW_C)} (-1)^{\frac{(n-l)}{2}} \sin \left[\frac{n\pi}{2} - \frac{lW_C \pi}{2W_L} \right] \\ - \frac{1}{(nW_L + lW_C)} (-1)^{\frac{(n+l)}{2}} \sin \left[\frac{n\pi}{2} + \frac{lW_C \pi}{2W_L} \right] \end{array} \right\} \quad (\text{E.12})$$

n 與 l 皆為奇數，則化簡正弦與餘弦函數後得到

$$a_{nl} = \frac{2}{\pi} \sqrt{W_L W_C} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{(nW_L - lW_C)} (-1)^{\frac{(n-l)}{2}} (-1)^{\frac{(n-1)}{2}} \cos \left[\frac{lW_C \pi}{2W_L} \right] \\ - \frac{1}{(nW_L + lW_C)} (-1)^{\frac{(n+l)}{2}} (-1)^{\frac{(n-1)}{2}} \cos \left[\frac{lW_C \pi}{2W_L} \right] \end{array} \right\} \quad (\text{E.13})$$

化簡 (-1) 的次方數

$$a_{nl} = \frac{2}{\pi} \sqrt{W_L W_C} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{(nW_L - lW_C)} (-1)^{\frac{(2n-l-1)}{2}} \cos \left[\frac{lW_C \pi}{2W_L} \right] \\ - \frac{1}{(nW_L + lW_C)} (-1)^{\frac{(2n+l-1)}{2}} \cos \left[\frac{lW_C \pi}{2W_L} \right] \end{array} \right\} \quad (\text{E.14})$$

統一 (-1) 的次方數

$$a_{nl} = \frac{2}{\pi} \sqrt{W_L W_C} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{(nW_L - lW_C)} (-1)^{\frac{(2n+l+1)}{2}} \cos \left[\frac{lW_C \pi}{2W_L} \right] \\ + \frac{1}{(nW_L + lW_C)} (-1)^{\frac{(2n+l+1)}{2}} \cos \left[\frac{lW_C \pi}{2W_L} \right] \end{array} \right\} \quad (\text{E.15})$$

合併兩項

$$a_{nl} = \frac{2}{\pi} \sqrt{W_L W_C} \frac{2nW_L}{[(nW_L)^2 - (lW_C)^2]} \cos \left[\frac{lW_C \pi}{2W_L} \right] (-1)^{\frac{(2n+l+1)}{2}} \quad (\text{E.16})$$

合併常數項

$$a_{nl} = \frac{4}{\pi} \sqrt{W_L W_C} \frac{nW_L}{[(nW_L)^2 - (lW_C)^2]} \cos \left(\frac{lW_C}{2W_L} \pi \right) (-1)^{\frac{2n+l-3}{2}} \quad (\text{E.17})$$

將 (-1) 的次方簡化成跟導引的模態 l 有關

$$a_{nl} = \frac{4}{\pi} \sqrt{W_L W_C} \frac{nW_L}{[(nW_L)^2 - (lW_C)^2]} \cos\left(\frac{lW_C}{2W_L} \pi\right) (-1)^{\frac{l-1}{2}} \quad (\text{E.18})$$

另一種情形，我們考慮兩個子帶能量相同的情形，即 $nW_L = lW_C$ 。重疊

積分為

$$a_{nl} = \frac{1}{\sqrt{W_L W_C}} \int_{-\frac{W_C}{2}}^{\frac{W_C}{2}} dy \left\{ \begin{array}{l} \cos\left[\frac{(n-l)\pi}{2} + \frac{(nW_L - lW_C)\pi}{W_L W_C} y\right] \\ -\cos\left[\frac{(n+l)\pi}{2} + \frac{(nW_L + lW_C)\pi}{W_L W_C} y\right] \end{array} \right\} \quad (\text{E.19})$$

利用前面的變數 v_{nl} 簡化

$$a_{nl} = \frac{1}{\sqrt{W_L W_C}} \int_{-\frac{W_C}{2}}^{\frac{W_C}{2}} dy \left\{ \cos\left[\frac{(n-l)\pi}{2}\right] - \cos\left[\frac{(n+l)\pi}{2} + \frac{1}{v_{nl}} y\right] \right\} \quad (\text{E.20})$$

第一項和 y 無關，積分後得到

$$a_{nl} = \frac{1}{\sqrt{W_L W_C}} \left\{ \cos\left[\frac{(n-l)\pi}{2}\right] W_C - \int_{-\frac{W_C}{2}}^{\frac{W_C}{2}} dy \cos\left[\frac{(n+l)\pi}{2} + \frac{1}{v_{nl}} y\right] \right\} \quad (\text{E.21})$$

積分第二項

$$a_{nl} = \frac{1}{\sqrt{W_L W_C}} \left\{ \cos\left[\frac{(n-l)\pi}{2}\right] W_C - v_{nl} \sin\left[\frac{(n+l)\pi}{2} + \frac{1}{v_{nl}} y\right] \Big|_{-\frac{W_C}{2}}^{\frac{W_C}{2}} \right\} \quad (\text{E.22})$$

展開得到

$$a_{nl} = \frac{1}{\sqrt{W_L W_C}} \left\{ \begin{array}{l} \cos\left[\frac{(n-l)\pi}{2}\right] W_C \\ -v_{nl} \left\{ \sin\left[\frac{(n+l)\pi}{2} + \frac{1}{v_{nl}} \frac{W_C}{2}\right] - \sin\left[\frac{(n+l)\pi}{2} - \frac{1}{v_{nl}} \frac{W_C}{2}\right] \right\} \end{array} \right\} \quad (\text{E.23})$$

利用和差化積整理成

$$a_{nl} = \frac{1}{\sqrt{W_L W_C}} \left\{ \cos \left[\frac{(n-l)\pi}{2} \right] W_C - 2v_{nl} \cos \left[\frac{(n+l)\pi}{2} \right] \sin \left[\frac{W_C}{2v_{nl}} \right] \right\} \quad (\text{E.24})$$

考慮奇偶對稱性：

如果 $(n = \text{even}, l = \text{odd})$ 或 $(n = \text{odd}, l = \text{even})$ ，則

$$a_{nl} = 0 \quad (\text{E.25})$$

如果 $(n = \text{even}, l = \text{even})$ ，則

$$a_{nl} = \frac{1}{\sqrt{W_L W_C}} \left\{ (-1)^{\frac{n-l}{2}} W_C - \frac{W_C}{n\pi} (-1)^{\frac{n+l}{2}} \sin[n\pi] \right\} \quad (\text{E.25})$$

合併係數

$$a_{nl} = (-1)^{\frac{n-l}{2}} \frac{\sqrt{W_C}}{\sqrt{W_L}} \frac{1}{n\pi} (-1)^{\frac{n+l}{2}} \sin[n\pi] \quad (\text{E.26})$$

由於 n 為偶數

$$a_{nl} = (-1)^{\frac{n+l}{2}} \sqrt{\frac{W_C}{W_L}} \quad (\text{E.27})$$

或

$$a_{nl} = (-1)^{\frac{n+l}{2}} \sqrt{\frac{W_C}{W_L}} \quad (\text{E.28})$$

如果 $(n = \text{odd}, l = \text{odd})$ ，則

$$a_{nl} = \frac{1}{\sqrt{W_L W_C}} \left\{ (-1)^{\frac{n-l}{2}} W_C - \frac{W_C}{n\pi} (-1)^{\frac{n+l}{2}} \sin[n\pi] \right\} \quad (\text{E.29})$$

由於 n 為偶數

$$a_{nl} = (-1)^{\frac{n-l}{2}} \sqrt{\frac{W_C}{W_L}} \quad (\text{E.30})$$

或

$$a_{nl} = (-1)^{\frac{n+l-2}{2}} \sqrt{\frac{W_C}{W_L}} \quad (\text{E.31})$$

附錄 F： 轉移矩陣的收斂性

在使用轉移矩陣法解穿隧問題時，我們必需考慮這種方法的適用條件，在合理的誤差內。也就是說，需要以多少個轉移矩陣來描述整個系統的位能。以矩形位能分佈討論轉移矩陣法的收斂性。取矩形位能強度 $V_{s0}=1$ 、長度 $L=10$ 。

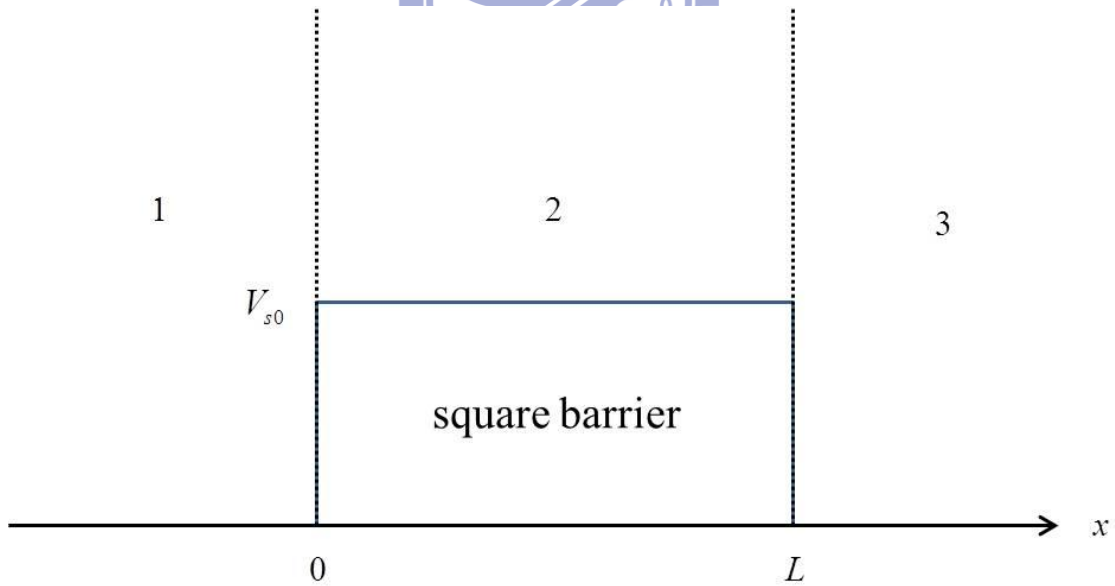


圖 F.1 矩形位能。這裡考慮的矩形位能強度 $V_{s0}=1$ 、矩形位能長度 $L=10$ 。

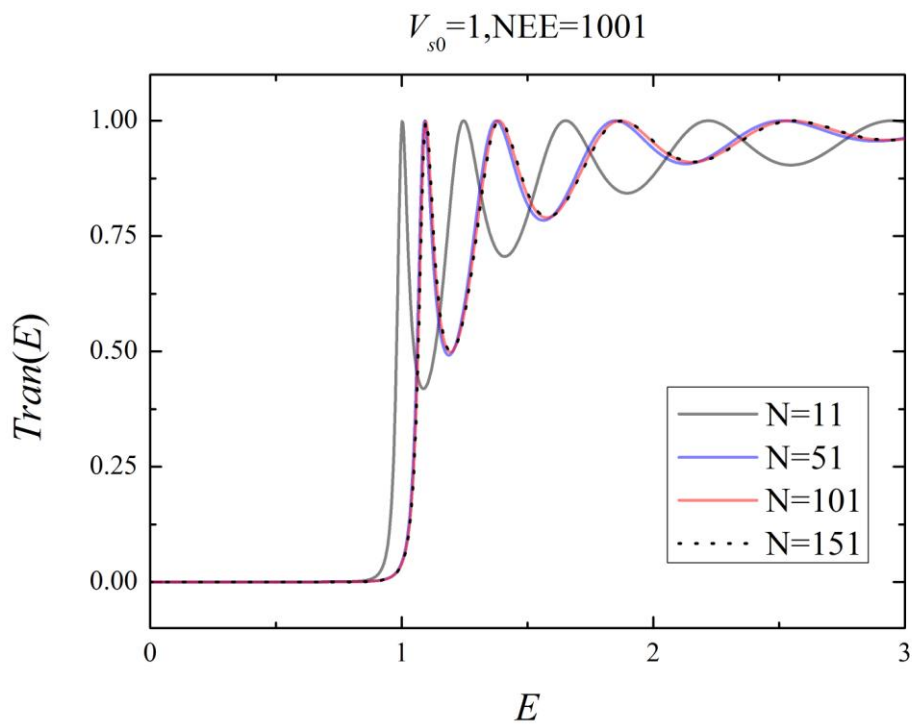


圖 F.2 轉移矩陣的收斂性。矩形位能強度 $V_{s0}=1$ 。電子能量格點數 $NEE=1001$ 。N 為矩形位能的切片數。結果可知 $N>100$ 可收斂。

由 F.2 的結果可知，紅色實線和黑色點線無差異，即當切片數 $N>100$ 時，穿透係數收斂。這裡通常是由於 δ 位能不足以描述我們所想模擬的位能時產生的誤差。若要使誤差在合理範圍內，則每個 δ 位能的間隔必需遠小於電子波長。