

## บทที่ 2 ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

ในบทนี้ได้กล่าวถึงทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว โดยหัวข้อ 2.1 ได้แสดงปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ซึ่งเป็นปรากฏการณ์ที่สำคัญในการควบคุมการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอน ในหัวข้อ 2.2 และ 2.3 ได้แสดงองค์ประกอบของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวและทรานซิสเตอร์แบบอิเล็กตรอนเดี่ยวพร้อมทั้งแสดงผลของปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ที่เกิดขึ้น หัวข้อ 2.4 ได้กล่าวถึงปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวซึ่งเป็นอุปกรณ์ที่ศึกษาจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในงานวิจัยนี้ ด้วยวิธีควอนตัมมอนติคาร์โลดังในหัวข้อ 2.5

### 2.1 ปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์

จากการศึกษาการส่งผ่านอิเล็กตรอนครั้งละหนึ่งตัว ในโครงสร้างที่ประกอบด้วยรอยต่อการทะลุผ่านและเกาะโลหะ พบว่า การส่งผ่านอิเล็กตรอนในระดับดังกล่าวต้องอาศัยปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ [1] ซึ่งเป็นปรากฏการณ์ที่การเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนถูกขัดขวางด้วยอันตรกิริยาคูลอมบ์ (Coulomb interaction) เนื่องจากอิเล็กตรอนส่วนเกิน (excess electron) ที่อยู่บนเกาะโลหะ ดังนั้นเงื่อนไขสำคัญคือเกาะโลหะต้องสามารถกักอิเล็กตรอนส่วนเกินให้อยู่เฉพาะที่ กล่าวคือ ที่เกาะโลหะได้ในช่วงเวลาหนึ่ง หรือกล่าวอีกนัยหนึ่งคืออัตราการทะลุผ่าน ( $\Gamma$ ) ของอิเล็กตรอนส่วนเกินในเกาะโลหะต้องมีค่าน้อย โดยอัตราการทะลุผ่านดังกล่าวสามารถกำหนดได้จากสมการ

$$\Gamma = \frac{\Delta n}{\Delta t} = \frac{V}{eR_T} \quad (2.1)$$

เมื่อ  $\Delta n$  เป็นการเปลี่ยนแปลงจำนวนประจุที่อยู่ในเกาะโลหะ และ  $\Delta t$  คือช่วงเวลาของการทะลุผ่านสองเหตุการณ์ที่เกิดขึ้นติดกัน  $V$  คือแรงดันไฟฟ้าที่ตกคร่อมรอยต่อการทะลุผ่านส่วน  $e$  แทนขนาดประจุของอิเล็กตรอน ( $1.6 \times 10^{-19}$  คูลอมบ์) และ  $R_T$  เป็นความต้านทานของรอยต่อการทะลุผ่าน ดังนั้น ช่วงเวลาของการทะลุผ่านของสองเหตุการณ์ที่เกิดขึ้นติดกันสามารถแสดงได้ดังสมการ

$$\Delta t = \frac{1}{\Gamma} = R_T C_\Sigma \quad (2.2)$$

เมื่อ  $C_\Sigma = \Delta ne / V$  ซึ่งเป็นค่าความจุไฟฟ้ารวมของระบบเมื่อมองออกจากเกาะโลหะ นอกจากนี้ในการเพิ่มอิเล็กตรอนหนึ่งตัวเข้าไปในเกาะโลหะจำเป็นต้องใช้พลังงานอย่างน้อยที่สุดเท่ากับ  $e^2 / 2C_\Sigma = E_C$  ซึ่งถูกเรียกว่าพลังงานการเพิ่มประจุ ดังนั้น ความไม่แน่นอนในการวัดค่าพลังงานของอิเล็กตรอนในเกาะโลหะที่น้อยที่สุดที่เป็นไปได้ คือ  $\Delta E = e^2 / 2C_\Sigma$  จากหลักความไม่แน่นอนของไฮเซนเบิร์ก (Heisenberg's uncertainty principle) ที่กล่าวว่า ผลคูณของความคลาดเคลื่อนในการวัดพลังงานและเวลาของอนุภาค มีค่าเป็นไปตามสมการ

$$\Delta E \Delta t > \frac{h}{4\pi} \quad (2.3)$$

ในกรณีนี้เมื่อแทนค่า  $\Delta E$  และ  $\Delta t$  ลงสมการที่ (2.3) พบว่า

$$R_T \geq \frac{h}{2\pi e^2} \equiv R_Q \approx 25.813 \text{ k}\Omega \quad (2.4)$$

โดยที่  $R_Q$  เรียกว่า ความต้านควอนตัม (quantum resistance) ดังนั้น เงื่อนไขที่เกาะโลหะจะสามารถกักอิเล็กตรอนให้อยู่ภายในเกาะโลหะ ค่าความต้านทานของรอยต่อการทะลุผ่านต้องเป็นไปตามสมการ

$$R_T \gg R_Q \quad (2.5)$$

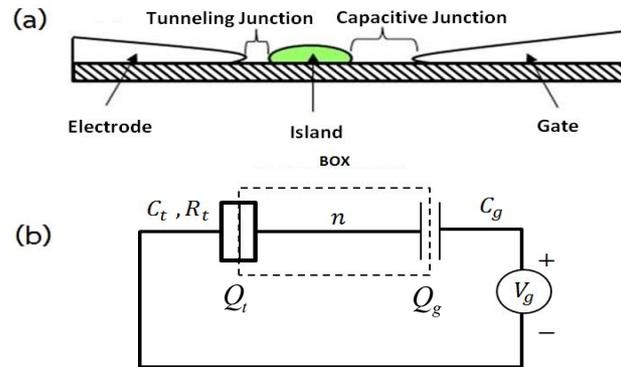
นอกจากนี้ เงื่อนไขที่สำคัญอีกข้อหนึ่งในการเกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์คือ อุณหภูมิ เนื่องจากอุณหภูมิของระบบจะแสดงถึงค่าพลังงานจลน์เฉลี่ยของอิเล็กตรอน ซึ่งถ้าพลังงานจลน์ของอิเล็กตรอนมีค่ามากกว่าพลังงานการเพิ่มประจุ จะทำให้อิเล็กตรอนสามารถเคลื่อนที่ผ่านระบบไปได้อย่างต่อเนื่อง ดังนั้น ในกรณีที่ต้องการควบคุมให้อิเล็กตรอนเคลื่อนที่ผ่านระบบครั้งละหนึ่งตัว พลังงานจลน์ของอิเล็กตรอนต้องมีค่าน้อยกว่าพลังงานการเพิ่มประจุ เงื่อนไขดังกล่าวสามารถแสดงได้ดังสมการ

$$k_B T \ll E_C \quad (2.6)$$

เมื่อ  $k_B$  เป็นค่าคงที่โบลซมันน์ (Boltzman's constant) และ  $T$  คืออุณหภูมิของระบบในหน่วยเคลวิน ดังนั้น เมื่อระบบที่ประกอบด้วยรอยต่อการทะลุผ่านและเกาะโลหะถูกกำหนดให้มีคุณสมบัติเป็นไปตามสมการ (2.5) และ สมการ (2.6) ระบบดังกล่าว จะสามารถแสดงการเกิดขึ้นของปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์และสามารถควบคุมให้อิเล็กตรอนสามารถเคลื่อนที่ผ่านระบบได้ที่ละหนึ่งตัว ในหัวข้อต่อไปจะได้กล่าวถึงอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ผลการทดลองที่เกี่ยวข้องและทฤษฎีที่ใช้อธิบายปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ที่เกิดขึ้นในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว

## 2.2 กล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว

กล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวเป็นอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ที่ประกอบด้วยเกาะโลหะหนึ่งเกาะและมีรอยต่อของการทะลุผ่านหนึ่งรอยต่อคั่นอยู่ระหว่างเกาะโลหะและขั้วไฟฟ้า (electrode) ดังภาพประกอบ 2.1 นอกจากนั้นยังมีตัวเก็บประจุ  $C_g$  คั่นอยู่ระหว่างเกาะโลหะและขั้วเกต (Gate electrode) ซึ่งเมื่อเพิ่มแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตจะทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงของประจุเหนี่ยวนำที่บริเวณรอยต่อและรอยต่อของการทะลุผ่านโดยมีขนาดเท่ากันแต่มีประจุตรงข้ามกัน



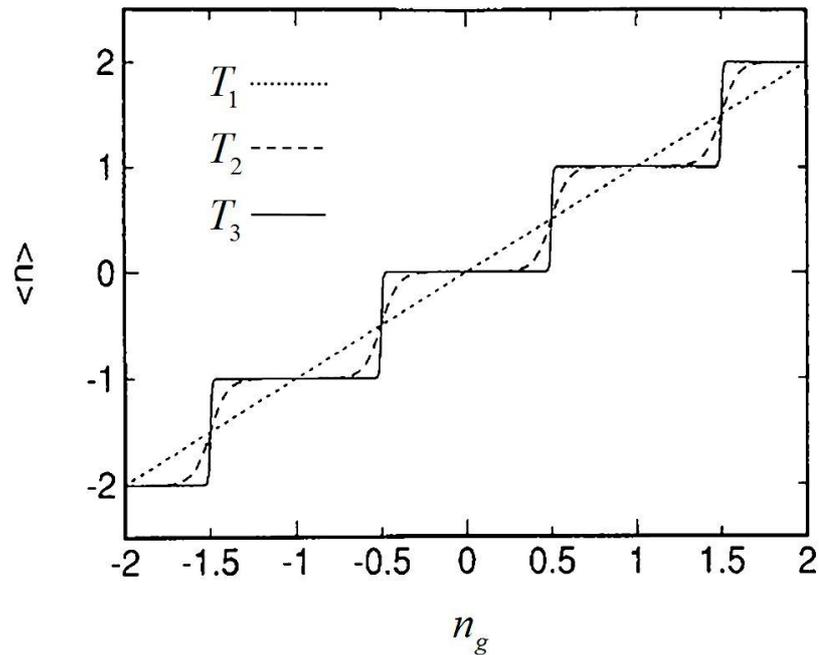
ภาพประกอบ 2.1 (a) แบบจำลองของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งประกอบด้วยรอยต่อของการทะลุผ่านและเกาะโลหะ (b) วงจรสมมูลของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว ภายในเส้นประแสดงบริเวณของเกาะโลหะ จากภาพประกอบ 2.1 (b) จำนวนอิเล็กตรอนส่วนเกิน (excess electron) ในกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว เป็นผลรวมของประจุเหนี่ยวนำที่รอยต่อการทะลุผ่าน  $Q_t$  กับ ประจุที่ถูกเหนี่ยวนำที่ขั้วเกต  $-Q_g$  แสดงได้ดังสมการ

$$n(-e) = Q_t - Q_g \quad (2.7)$$

เมื่อ  $n$  หมายถึงจำนวนอิเล็กตรอนส่วนเกินในกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวซึ่งเกิดจากอิเล็กตรอนที่ทะลุผ่านรอยต่อของการทะลุผ่านเข้ามายังเกาะโลหะ ในการอธิบายปรากฏการณ์การขีดขวางแบบคูลอมบ์ที่ไม่ได้พิจารณาผลของปรากฏการณ์การทะลุผ่านสามารถอธิบายได้จากจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในเกาะโลหะ ซึ่งคำนวณได้ตามสมการ [3] ในกรณี

$$\langle n \rangle = \frac{\sum_{n=-\infty}^{\infty} n e^{-\beta E(n)}}{\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\beta E(n)}} \quad (2.8)$$

เมื่อ  $E(n)$  หมายถึงพลังงานรวมของระบบซึ่งเป็นฟังก์ชันของจำนวนอิเล็กตรอนในระบบ และ  $\beta = 1/k_B T$  ในกรณีที่พิจารณาเฉพาะค่าพลังงานไฟฟ้าสถิตของระบบกล่าวคือ  $E(n) = e^2 (n - n_g)^2 / 2C_\Sigma$  เมื่อ  $C_\Sigma = C_t + C_g$  เป็นความจุไฟฟ้ารวมของระบบที่มองออกจากเกาะโลหะ และ  $n_g = C_g V_g / e$  เป็นจำนวนประจุที่ถูกเหนี่ยวนำจากขั้วเกต ดังนั้นจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยจะมีค่าเพิ่มขึ้นเมื่อค่า  $n_g$  มีค่าเพิ่มขึ้น ดังแสดงในภาพประกอบ 2.2



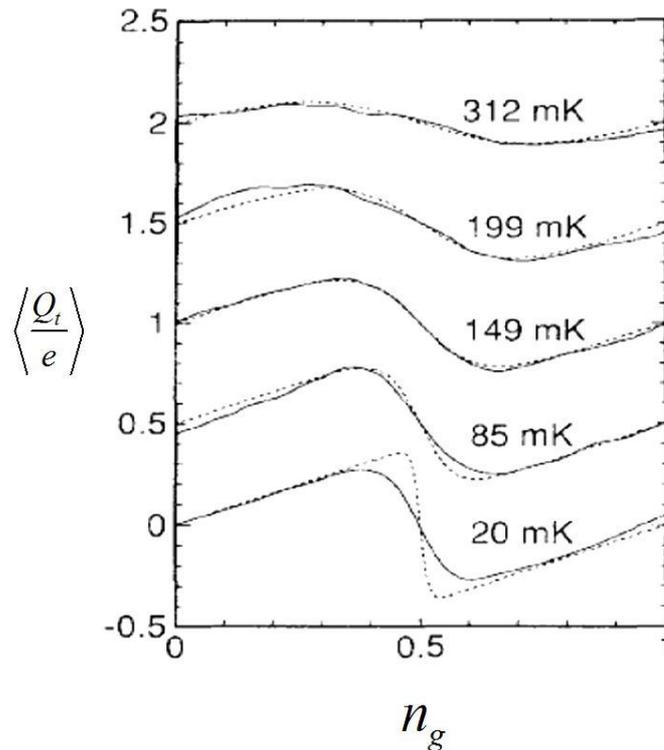
ภาพประกอบ 2.2 ผลการคำนวณจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวจากสมการ (2.8) ที่ อุณหภูมิ  $T_1 > T_2 > T_3$  [3]

ภาพประกอบ 2.2 แสดงจำนวนประจุเฉลี่ยในเกาะโลหะที่เพิ่มหรือลดลงเมื่อค่า  $n_g$  มีการเปลี่ยนแปลง โดยมีค่าบวกเมื่อแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตมีค่าเป็นบวกและมีค่าเป็นลบเมื่อแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตมีค่าเป็นลบ ในกรณีที่อุณหภูมิสูง กล่าวคือ พลังงานจลน์ของอิเล็กตรอนที่เกิดจากความร้อนมีค่ามากกว่าพลังงานการเพิ่มประจุ ในกรณีนี้ระบบจะไม่สามารถกักอิเล็กตรอนให้อยู่ในเกาะโลหะได้ อิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่ผ่านระบบได้อย่างต่อเนื่อง แต่ในกรณีที่  $k_B T < E_C$  ซึ่งเป็นกรณีที่เกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ อิเล็กตรอนจะไม่สามารถทะลุผ่านเข้ามายังเกาะโลหะ จนกว่าจะได้รับพลังงานจากภายนอก ดังแสดงด้วยกราฟเส้นทึบ (—) และเส้นประ (---) ดังนั้น ถ้าต้องการเพิ่มอิเล็กตรอนหนึ่งตัวเข้าไปในเกาะโลหะจำเป็นต้องให้พลังงานอย่างน้อยเท่ากับพลังงานการเพิ่มประจุ เช่น  $n_g = 0.5$  ในทำนองเดียวกัน ถ้าต้องการเพิ่มอิเล็กตรอนอีกหนึ่งตัวเข้าไปในระบบ ก็ต้องให้พลังงานเท่ากับพลังงานการเพิ่มประจุอีกครั้งหนึ่ง ทำให้กราฟมีลักษณะเป็นแบบขั้นบันไดดังภาพประกอบ 2.2 ดังนั้นเมื่อระบบอยู่ในอุณหภูมิต่ำ จำนวนอิเล็กตรอนสามารถควบคุมให้เพิ่มขึ้น (หรือลดลง) ได้ทีละหนึ่งได้โดยการเปลี่ยนแปลงค่าความศักย์ที่ขั้วเกต

นอกจากนี้ ประจุที่รอต่อการทะลุผ่านเฉลี่ย  $\langle Q_i \rangle$  ในกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวสามารถเขียนในพจน์ของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยได้ดังสมการ [3]

$$\langle Q_i \rangle = \frac{C_i}{C_\Sigma} [\langle n \rangle (-e) + C_g V_g] \quad (2.9)$$

โดยผลการคำนวณและผลการทดลองดังกล่าว ได้ถูกเปรียบเทียบในภาพประกอบ 2.3



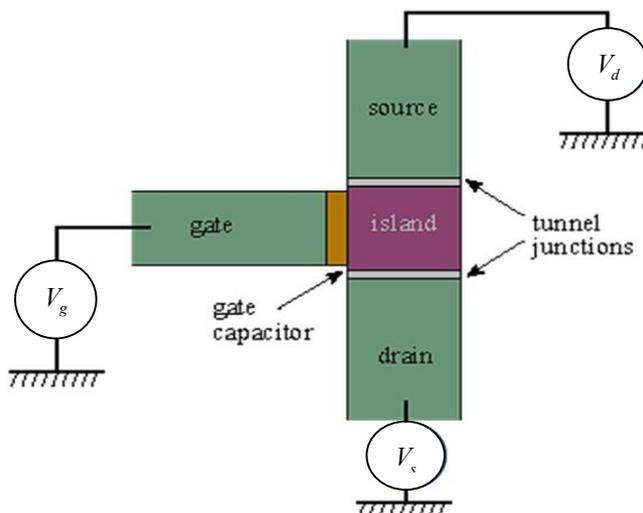
**ภาพประกอบ 2.3** จำนวนประจุที่ร่อยต่อการทะลุผ่าน โดยเส้นทึบแสดงผลการทดลองที่อุณหภูมิค่าต่างๆ และเส้นประแสดงค่าที่คำนวณจากสมการ (2.8) และสมการ (2.9) [3]

จากภาพประกอบ 2.3 เส้นประแสดงผลการคำนวณจากทฤษฎีแบบฉบับในสมการ (2.8) และ (2.9) โดยเมื่อเปรียบเทียบกับผลการทดลอง พบว่าที่บริเวณอุณหภูมิสูง เช่น  $312\text{ mK}$  ผลการคำนวณมีค่าสอดคล้องกับผลการทดลอง แต่ที่อุณหภูมิต่ำ เช่น  $20\text{ mK}$  ผลการคำนวณที่เกิดขึ้นมีค่าแตกต่างจากผลการทดลองอย่างชัดเจน ดังนั้น จึงกล่าวได้ว่าสมการดังกล่าวไม่สามารถอธิบายผลการทดลองที่เกิดขึ้นในกรณีของอุณหภูมิต่ำได้ จากที่กล่าวมาข้างต้นได้แสดงให้เห็นว่าจากการเปลี่ยนแปลงความต่างศักย์ที่ขั้วเกตสามารถควบคุมให้อิเล็กตรอนเพิ่มขึ้นทีละหนึ่งตัว แต่อย่างไรก็ตาม เนื่องจากในระบบนี้ มีร่อยต่อการทะลุผ่านเพียงหนึ่งร่อยต่อ อิเล็กตรอนจึงไม่สามารถเคลื่อนผ่านระบบออกไปได้ ทำให้อุปกรณ์นี้มีข้อจำกัดในการประยุกต์ใช้งาน หัวข้อต่อไปจะกล่าวถึงอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวที่สามารถควบคุมให้อิเล็กตรอนเคลื่อนที่ผ่านระบบไปได้ทีละหนึ่งตัว

### 2.3 ทรานซิสเตอร์แบบอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว

ทรานซิสเตอร์แบบอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวเป็นอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ที่มีความซับซ้อนมากกว่ากล่องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว กล่าวคือ อุปกรณ์ดังกล่าวประกอบด้วยร่อยต่อการทะลุผ่านสองร่อยต่อ โดยมีร่อยต่อการทะลุผ่านคั่นอยู่ระหว่างขั้วซอร์ส (source) กับเกตโลหะ และร่อยต่อการทะลุผ่านคั่นอยู่ระหว่างเกตโลหะกับขั้วเดรน (drain) ดังแสดงในภาพประกอบ 2.4 เมื่อระบบประกอบด้วยสองร่อยต่อการทะลุผ่าน ทำให้อิเล็กตรอนสามารถทะลุผ่านระบบไปยังขั้วไฟฟ้าอีกด้านหนึ่งได้ นอกจากนี้ ร่อยต่อที่อยู่

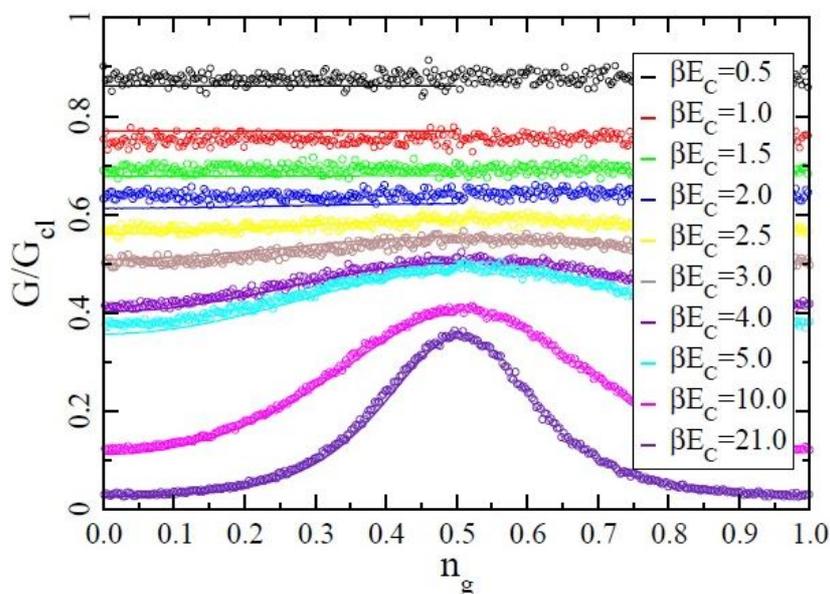
ระหว่างเกาะโลหะกับขั้วเกตเป็นรอยต่อที่ถูกสร้างให้มีขนาดใหญ่มากพอ จนกระทั่งอิเล็กตรอนไม่สามารถเคลื่อนที่ทะลุผ่านไปยังขั้วเกตได้



**ภาพประกอบ 2.4** แบบจำลองของทรานซิสเตอร์แบบอิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งประกอบด้วยสองรอยต่อการทะลุผ่าน โดยมีขั้วเกตทำหน้าที่ควบคุมจำนวนอิเล็กตรอนในเกาะโลหะ

### 2.3.1 การวัดแกว่งของค่าความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์แบบอิเล็กตรอนเดี่ยว

ในปี ค.ศ. 2002 วอล์ลิสเซอร์และคณะ [10] ได้รายงานผลการเปรียบเทียบค่าความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์แบบอิเล็กตรอนเดี่ยวที่ได้จากผลการทดลองและผลการคำนวณด้วยวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล ดังแสดงในภาพประกอบ 2.5



ภาพประกอบ 2.5 ความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว โดย (o) เป็นข้อมูลที่ได้จากการทดลอง และ (—) เป็นข้อมูลที่ได้จากการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล [10]

จากภาพประกอบ 2.5 พบว่า ในกรณีที่อุณหภูมิสูง กล่าวคือ  $\beta E_C \leq 1$  ค่าความนำไฟฟ้าของระบบมีค่าคงที่ไม่ขึ้นอยู่กับค่าพารามิเตอร์ที่แสดงความต่างศักย์ไฟฟ้าที่ขั้วเกต  $n_g = C_g V_g / e$  ซึ่งเป็นผลเนื่องจาก อิเล็กตรอนสามารถเคลื่อนที่ผ่านระบบได้อย่างต่อเนื่อง เพราะในกรณีนี้ไม่เกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ แต่ในกรณีอุณหภูมิต่ำ กล่าวคือ  $\beta E_C > 1$  ระบบได้แสดงการเกิดขึ้นของปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ กล่าวคือ ความนำไฟฟ้ามีค่าขึ้นอยู่กับแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกต เนื่องจากในกรณีนี้ พลังงานจลน์ของอิเล็กตรอนมีค่าน้อยกว่าพลังงานการเพิ่มประจุ ดังนั้น ถ้าต้องการให้อิเล็กตรอนเคลื่อนที่เข้าไปที่เกาะโลหะจำเป็นต้องให้พลังงานกับอิเล็กตรอน หรือลดระดับศักย์เคมี (chemical potential) ของเกาะโลหะให้มีค่าลดลง นอกจากนี้ เมื่อนำผลการคำนวณค่าความนำไฟฟ้าด้วยวิธีควอนตัมมอนติคาร์โลไปเปรียบเทียบกับผลการทดลอง พบว่า ผลการคำนวณของวิธีควอนตัมมอนติคาร์โลมีค่าใกล้เคียงกับผลการทดลองตลอดทุกช่วงอุณหภูมิ ซึ่งผลการทดลองในช่วงนี้ การเกิดปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์ไม่สามารถอธิบายได้ด้วยวิธีการการประมาณแบบกึ่งฉบับ (semiclassical approximation) และทฤษฎีการรบกวน (perturbation theory) [10]

อย่างไรก็ตาม ในการคำนวณด้วยวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล [10] ค่าความนำไฟฟ้างกล่าวไม่สามารถคำนวณได้โดยตรง กล่าวคือ ใช้วิธีควอนตัมมอนติคาร์โลคำนวณในคอร์ริเลชันฟังก์ชัน (correlation function) เพื่อนำไปคำนวณสเปกตรัลฟังก์ชัน (spectral function) [10] ซึ่งปริมาณทั้งสองนี้ไม่สามารถตีความทางฟิสิกส์ได้อย่างโดยตรง จากนั้น จึงนำสเปกตรัลฟังก์ชันไปคำนวณค่าความนำไฟฟ้าด้วยวิธีการแก้ปัญหแบบผกผัน (inverse problem) [10] ทำให้การคำนวณค่าความนำไฟฟ้ามีความซับซ้อน แต่อย่างไรก็ตาม ในงานวิจัยของ ทองสุข [13] ได้ใช้วิธีควอนตัมมอนติคาร์โลในการคำนวณจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในเกาะโลหะเพื่ออธิบายปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ที่เกิดขึ้น

ในทรานซิสเตอร์แบบอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ซึ่งปริมาณดังกล่าวสามารถตีความหมายทางฟิสิกส์ได้โดยตรง ดังรายละเอียดจะได้แสดงไว้ในหัวข้อต่อไป

### 2.3.2 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของทรานซิสเตอร์แบบอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว

จากจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในเกาะโลหะที่นิยามตามสมการ (2.8) แต่ในกรณีที่พิจารณาปรากฏการณ์การทะลุผ่านของอิเล็กตรอนและคำนวณด้วยวิธีควอนตัมมอนติคาร์โลสมการ (2.8) สามารถคำนวณว่าจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในเกาะโลหะในรูปของฟังก์ชันนัลอินทิกรัล (Functional integral) ได้ดังสมการ [17]

$$\langle n \rangle = n_g + \frac{1}{2\beta E_C} \frac{\partial \ln Z}{\partial n_g} \quad (2.10)$$

เมื่อ

$$Z = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_{\varphi(0)}^{\varphi(0)+2\pi k} D\varphi e^{-S[\varphi]} \quad (2.11)$$

โดย  $Z$  เป็นฟังก์ชันแบ่งส่วน (partition function) ของทรานซิสเตอร์แบบอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวและสัญลักษณ์

$$D\varphi \equiv \int_{\varphi(0)}^{\varphi(0)+2\pi k} d\varphi_p \dots \int_{\varphi(0)}^{\varphi(0)+2\pi k} d\varphi_1 \quad (2.12)$$

แอ็กชันของทรานซิสเตอร์แบบอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวเป็นไปตามสมการ

$$S[\varphi] = S_C[\varphi] + S_T[\varphi] \quad (2.13)$$

โดย  $S_C[\varphi]$  เป็นคูลอมบ์แอ็กชัน (Coulomb action) ซึ่งในที่นี้ได้แสดงในหน่วยของค่า  $E_C$  เป็นดังสมการ

$$S_C[\varphi] = \int_0^{\beta E_C} d\tau \left( \frac{\dot{\varphi}^2}{4} + i n_g \dot{\varphi}(\tau) \right) \quad (2.14)$$

และ  $S_T[\varphi]$  เป็นแอ็กชันของการทะลุผ่าน (tunneling action) เป็นดังสมการ

$$S_T[\varphi] = -g \int_0^{\beta E_C} d\tau \int_0^{\beta E_C} d\tau' \alpha(\tau - \tau') \cos(\varphi(\tau) - \varphi(\tau')) \quad (2.15)$$

เมื่อ  $g = 2\pi G_c / e^2$  โดย  $G_c$  หมายถึงความนำไฟฟ้ารวมของระบบที่อุณหภูมิสูง และ เคอร์เนลการทะลุผ่าน (tunneling kernel) นิยามตามสมการ

$$\alpha(\tau - \tau') = \frac{1}{4(\beta E_C)^2 \sin^2\left(\frac{\pi}{\beta E_C}(\tau - \tau')\right)} \quad (2.16)$$

จากสมการ (2.11) ที่แสดงขอบเขตของการคำนวณค่าปริพันธ์เป็นมีค่าขึ้นอยู่กับค่า  $k$  ที่เรียกว่าเลขไวน์ดิง (winding number) เพื่อความสะดวกในการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลให้เปลี่ยนตัวแปรในสมการ (2.11) ให้เป็นดังต่อไปนี้

$$\varphi(\tau) = \xi(\tau) + \nu_k \tau \quad \text{เมื่อ} \quad \nu_k = \frac{2\pi k}{\beta E_C} \quad (2.17)$$

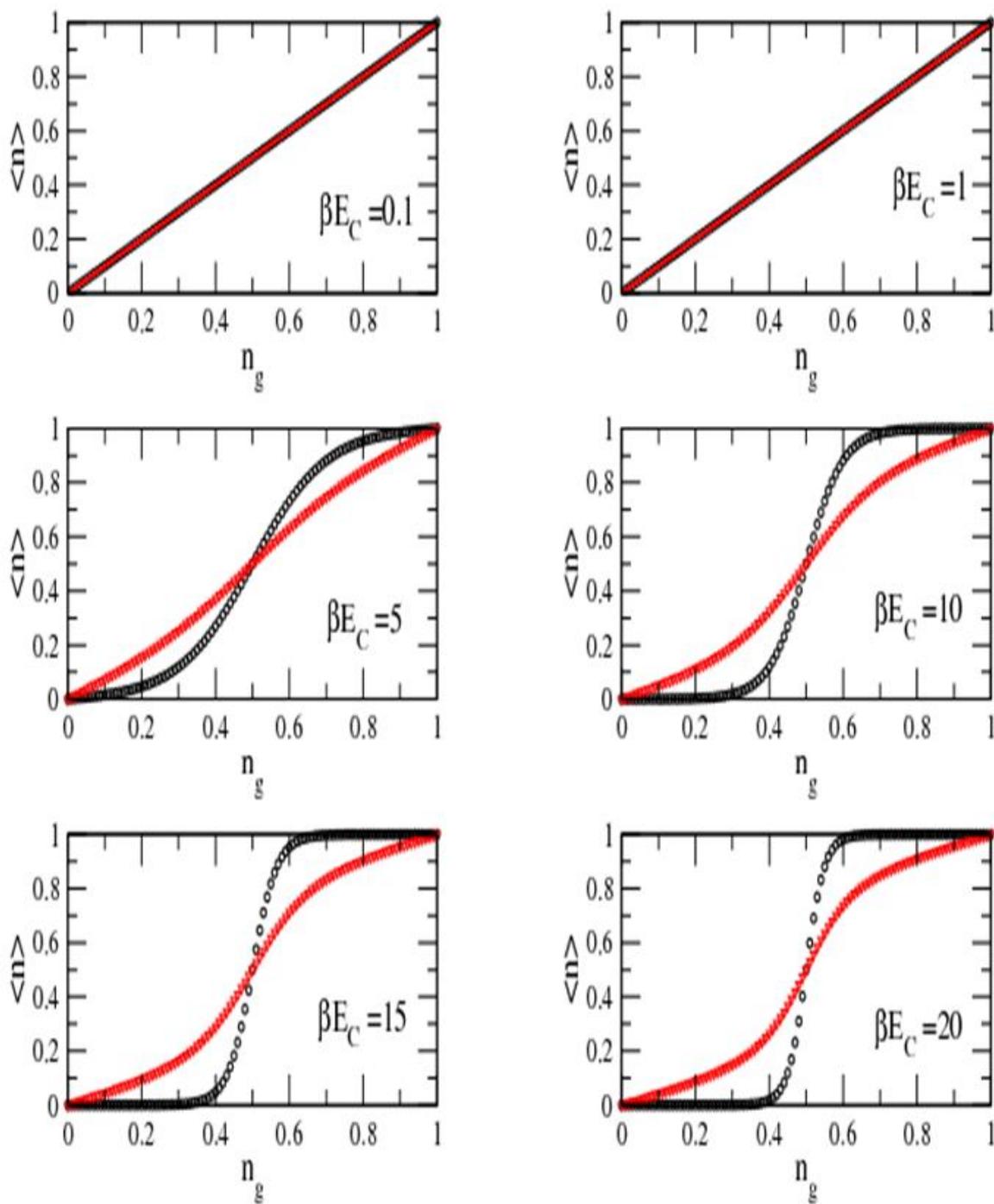
โดยที่เงื่อนไขขอบเขต  $\xi(0) = \xi(\beta E_C) = 0$  ดังนั้นสมการ (2.10) สามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$\langle n \rangle = n_g - \frac{i\pi \langle k \rangle}{\beta E_C} \quad (2.18)$$

เมื่อค่าเฉลี่ยของ  $k$  นิยามตามสมการ

$$\langle k \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_{\xi(0)}^{\xi(\beta E_C)} D\xi k e^{-S[\xi]} \quad (2.19)$$

เมื่อใช้พารามิเตอร์จากการทดลองของวอลลิสเซอร์และคณะ [10] สามารถนำไปคำนวณจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในสมการที่ (2.18) โดยผลการคำนวณได้แสดงในภาพประกอบ 2.6

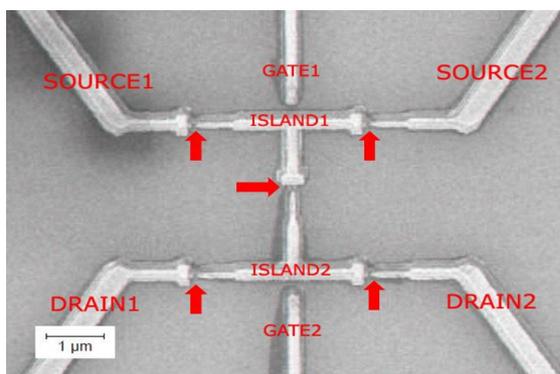


ภาพประกอบ 2.6 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในทรานซิสเตอร์แบบอิเล็กตรอนเดี่ยวโดยกราฟสีดำเป็นค่าที่คำนวณได้จากสมการ (2.10) และกราฟสีแดงเป็นผลการคำนวณจากสมการ (2.18) ด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลตาม [13]

จากภาพประกอบ 2.6 ในกรณีที่  $\beta E_C = 0.1$  และ  $\beta E_C = 1$  ผลการคำนวณที่ได้มีลักษณะเป็นเส้นตรง แสดงว่าจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในทรานซิสเตอร์แบบอิเล็กตรอนเดี่ยวมีค่าแปรผันตรงกับค่า  $n_g$  ซึ่งในกรณีอุณหภูมิต่ำ อิเล็กตรอนมีพลังงานจลน์มากกว่าพลังงานการเพิ่มประจุทำให้อิเล็กตรอนสามารถทะลุผ่านไปยังเกาะโลหะได้โดยตรง ซึ่งในสภาวะนี้ไม่เกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ แต่ในกรณีที่  $\beta E_C = \{5, 10, 15 \text{ และ } 20\}$  เป็นกรณีที่พลังงานจลน์ของอิเล็กตรอนมีค่าน้อยกว่าพลังงานการเพิ่มประจุ กล่าวคือ  $k_B T \ll E_C$  สอดคล้องกับเงื่อนไขการเกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ ดังนั้นเมื่อค่า  $n_g = 0.5$  อิเล็กตรอนจะสามารถทะลุผ่านเข้าไปยังเกาะโลหะ โดยจุดสีดำคือผลจากการคำนวณด้วยทฤษฎีแบบฉบับ ลักษณะของกราฟมีการเปลี่ยนแปลงแบบขั้นที่ที่ ค่า  $n_g = 0.5$  เนื่องจากทฤษฎีดังกล่าวไม่ได้พิจารณาผลของปรากฏการณ์การทะลุผ่าน แต่ในการคำนวณโดยวิธีควอนตัมมอนติคาร์โลเส้นกราฟมีลักษณะคล้ายกัน แต่จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยจะมีการเปลี่ยนแปลงของก่อนที่  $n_g$  จะมากกว่า 0.5 เนื่องจากผลของการเกิดปรากฏการณ์การทะลุผ่านของอิเล็กตรอน จากการพิจารณาการเปลี่ยนแปลงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในภาพประกอบ 2.6 สามารถอธิบายปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ได้และสอดคล้องกับงานวิจัยของวอลลิสเซอร์และคณะ ที่ศึกษาการเกิดปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์จากค่าความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์แบบอิเล็กตรอนเดี่ยว ดังนั้น ในงานวิจัยนี้จึงมีวัตถุประสงค์ที่จะประยุกต์ใช้วิธีการดังกล่าวไปศึกษาปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ในบีมอิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งเป็นอุปกรณ์ที่มีความซับซ้อนมากกว่าทรานซิสเตอร์แบบอิเล็กตรอนเดี่ยว ดังจะกล่าวถึงรายละเอียดในหัวข้อต่อไป

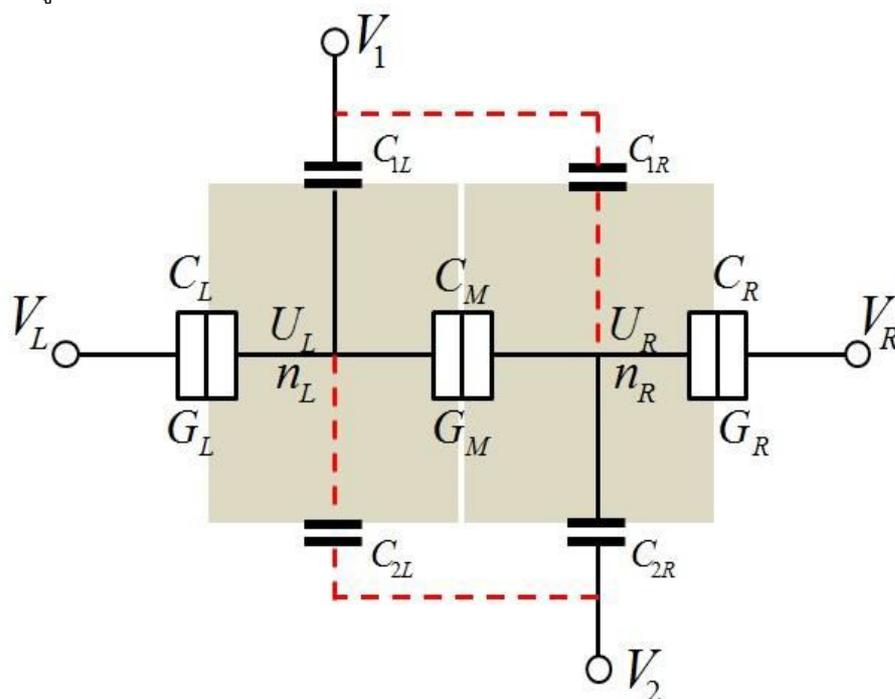
## 2.4 บีมอิเล็กตรอนเดี่ยวชนิดโลหะ

ในหัวข้อนี้จะกล่าวถึงบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวซึ่งประกอบด้วยเกาะโลหะสองเกาะและมีรอยต่อการทะลุผ่านภายใน (inner tunneling contact) คั่นอยู่ตรงกลางระหว่างเกาะโลหะทั้งสอง ดังแสดงในภาพประกอบ 2.7 นอกจากนี้ระบบมีขั้วเกต 2 ขั้ว ทำหน้าที่ควบคุมให้อิเล็กตรอนเคลื่อนที่ผ่านเกาะโลหะแต่ละเกาะโลหะ



ภาพประกอบ 2.7 โครงสร้างของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยว ที่ถูกสร้างจากจากระบวนการอิเล็กตรอนบีมลิโทกราฟีและกระบวนการซาโดอีวาพอเรชัน [11]

โดยทั่วไปปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวประกอบด้วยรอยต่อการทะลุผ่าน 3 รอยต่อ แต่ในโครงสร้างนี้ได้ออกแบบให้ประกอบด้วยรอยต่อการทะลุผ่าน 5 รอยต่อ เพื่อให้สามารถวัดค่าความจุไฟฟ้าและค่าความนำไฟฟ้าของแต่ละรอยต่อได้ แต่ในการศึกษาปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ ขั้วซอร์สหมายเลข 1 กับ 2 และขั้วเดรนหมายเลข 1 กับ 2 จะถูกรวมเข้าด้วยกัน ดังนั้นระบบดังกล่าวสามารถเขียนวงจรสมมูลได้ดังภาพประกอบ 2.8



ภาพประกอบ 2.8 วงจรสมมูลของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว [11] โดยขั้วซอร์สหมายเลข 1 กับ หมายเลข 2 และขั้วเดรนหมายเลข 1 กับ หมายเลข 2 ได้ถูกรวมเข้าด้วยกันเพื่อใช้ในการศึกษาปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมบ์ พารามิเตอร์ต่างๆ ในภาพประกอบ 2.8 ได้แสดงไว้ในตารางที่ 2.1

ตาราง 2.1 ค่าพารามิเตอร์ในวงจรสมมูลของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว  $g_j$  เป็นค่าความนำไฟฟ้าที่แต่ละรอยต่อการทะลุผ่าน  $j \in \{L, M, R\}$  โดยนิยามจาก  $g_j = G_j / G_K$  และ  $G_K = e^2 / h$  และ  $G_0$  เป็นค่าความนำไฟฟ้าที่อุณหภูมิสูงของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว [11]

Parameters	$C_L$	$C_M$	$C_R$	$C_{1L}$	$C_{1R}$	$C_{2L}$	$C_{2R}$	$g_L$	$g_M$	$g_R$	$G_0$
หมายเลข 1	181	173	236	50.5	18.0	21.5	58.6	0.52	1.32	0.83	10.0
หมายเลข 2	244	43	242	50.9	18.6	18.5	53.6	0.73	0.026	0.57	0.95
Units	(aF)	(aF)	(aF)	(aF)	(aF)	(aF)	(aF)	-	-	-	( $\mu S$ )

#### 2.4.1 พลังงานศักย์ไฟฟ้าสถิตของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว

พลังงานไฟฟ้าสถิตของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวสามารถแสดงดังสมการ [12]

$$E_C(n_L, n_R) = E_{CL}(n_L - n_{L0})^2 + E_{CR}(n_R - n_{R0})^2 + 2E_{CM}(n_L - n_{L0})(n_R - n_{R0}), \quad (2.20)$$

โดยที่

$$E_{CL} = \frac{e^2 C_{\Sigma R}}{2(C_{\Sigma L} C_{\Sigma R} - C_M^2)} \quad (2.21)$$

$$E_{CR} = \frac{e^2 C_{\Sigma L}}{2(C_{\Sigma L} C_{\Sigma R} - C_M^2)} \quad (2.22)$$

$$E_{CM} = \frac{e^2 C_M}{2(C_{\Sigma L} C_{\Sigma R} - C_M^2)} \quad (2.23)$$

$$C_{\Sigma i} = C_i + C_M + C_{Vi} + C_{2i} \quad (2.24)$$

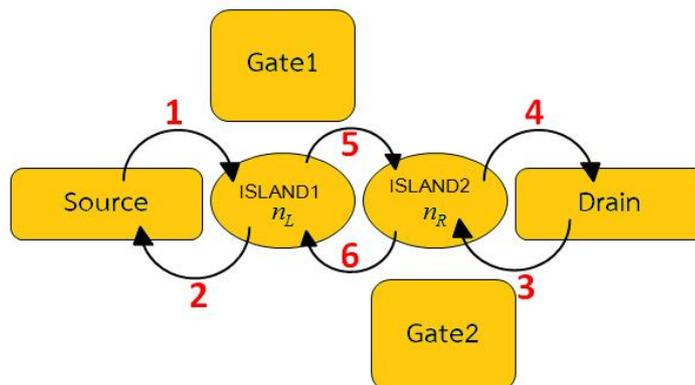
และ

$$n_{i0} = \frac{C_i V_i}{e} + \frac{C_{Vi} V_1}{e} + \frac{C_{2i} V_2}{e} \quad (2.25)$$

เมื่อ  $i \in \{L, R\}$  ค่า  $E_{CL}$  และ  $E_{CR}$  เป็นพลังงานศักย์ไฟฟ้าสถิตของเกาะโลหะทางซ้ายและทางขวาตามลำดับ  $E_{CM}$  เป็นพลังงานที่เชื่อมโยงระหว่างเกาะโลหะทั้งสอง ส่วนค่า  $n_L$  และ  $n_R$  เป็นจำนวนประจุที่อยู่บนเกาะโลหะทางซ้ายและทางขวาตามลำดับ เมื่อ  $n_{L0}$  และ  $n_{R0}$  เป็นจำนวนประจุที่ถูกเหนี่ยวนำจากสนามไฟฟ้าที่ขั้วเกตทางซ้ายและทางขวาตามลำดับ

#### 2.4.2 แผนภาพเสถียร

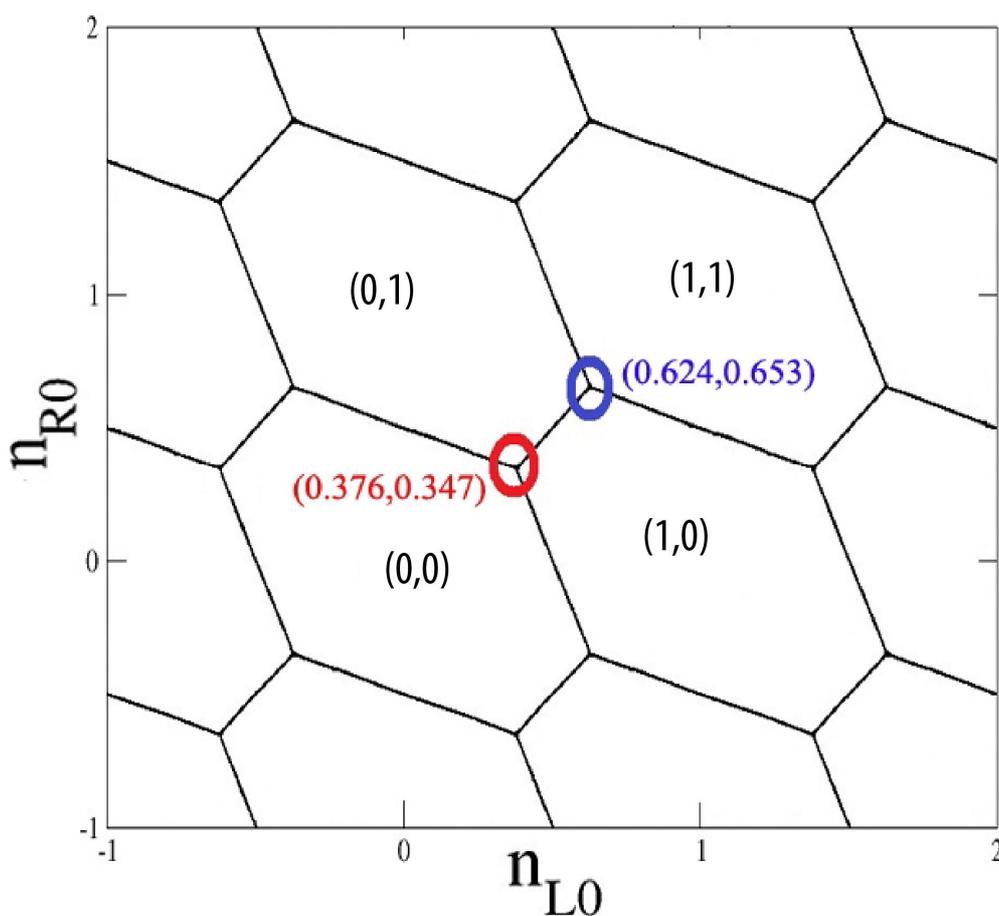
แผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวถูกสร้างขึ้นเพื่ออธิบายสถานะของประจุที่อยู่ในแต่ละเกาะโลหะและเงื่อนไขเบื้องต้นของการส่งผ่านประจุ โดยแผนภาพดังกล่าวสามารถสร้างได้จากการพิจารณาการส่งผ่านของอิเล็กตรอนในปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวซึ่ง สามารถเกิดขึ้นได้ 6 กรณี แสดงดังภาพประกอบ 2.9



ภาพประกอบ 2.9 ลักษณะการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนทั้ง 6 กรณี กล่าวคือ กรณีที่ 1 อิเล็กตรอนหนึ่งตัวเคลื่อนที่จากขั้วซอร์สไปยังเกาะโลหะหนึ่ง กรณีที่ 2 อิเล็กตรอนหนึ่งตัวเคลื่อนที่จากเกาะโลหะหนึ่งไปยังขั้วซอร์ส กรณีที่ 3 อิเล็กตรอนหนึ่งตัวเคลื่อนที่จากขั้วเดรนไปยังเกาะโลหะสอง กรณีที่ 4 อิเล็กตรอน

หนึ่งตัวเคลื่อนที่จากเกาะโลหะสองไปยังขั้วแคตโอด กรณีที่ 5 อิเล็กตรอนเคลื่อนที่หนึ่งตัวที่จากเกาะโลหะหนึ่งไปยังเกาะโลหะสอง กรณีที่ 6 อิเล็กตรอนหนึ่งตัวเคลื่อนที่จากเกาะโลหะสองไปยังเกาะโลหะหนึ่ง

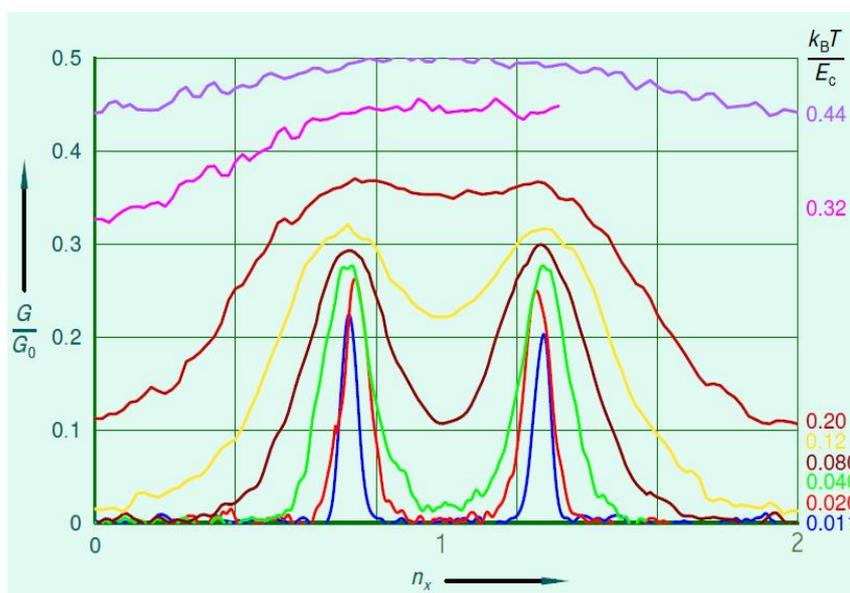
รายละเอียดในการคำนวณแผนภาพเสถียรของปฏิกิริยาอิเล็กตรอนเดี่ยวได้ถูกแสดงไว้ในงานวิจัยของฟูจิซาวะและคณะ (Fujisawa et al) [14] และรังสีและคณะ [15] ในงานวิจัยนี้ได้แสดงตัวอย่างของแผนภาพเสถียรของปฏิกิริยาอิเล็กตรอนเดี่ยวของหมายเลข 1 ดังภาพประกอบ 2.10



ภาพประกอบ 2.10 แผนภาพเสถียรของปฏิกิริยาอิเล็กตรอนเดี่ยวหมายเลข 1 ซึ่งถูกคำนวณโดยรังสีและคณะ [15]

จากภาพประกอบ 2.10 แผนภาพเสถียรมีลักษณะรูปหกเหลี่ยมคล้ายกับหนึ่งหน่วยของรังผึ้ง (honeycomb unit) และคู่อันดับที่อยู่ข้างในแสดงตัวเลขที่บอกจำนวนเท่าของประจุ  $|e|$  ในแต่ละเกาะโลหะ เมื่อพิจารณาที่สถานะเริ่มต้น กล่าวคือที่ตำแหน่ง  $n_{L0} = n_{R0} = 0$  อิเล็กตรอนไม่สามารถเคลื่อนที่จากขั้วแคตโอดไปในเกาะโลหะทางซ้าย หรือเคลื่อนที่จากขั้วแคตโอดเข้าไปในเกาะโลหะทางขวา หรือการเคลื่อนย้ายอิเล็กตรอนระหว่างเกาะโลหะ ดังนั้นบริเวณนี้จึงไม่มีอิเล็กตรอนเพิ่มขึ้น (หรือลดลง) ซึ่งแสดงสถานะในเซลล์หกเหลี่ยมได้เป็น  $(0,0)$  แต่ในกรณีที่มิอิเล็กตรอนในเกาะโลหะฝั่งซ้ายหนึ่งตัวสามารถแสดงสถานะในเซลล์หกเหลี่ยมเป็น  $(1,0)$  เมื่อพิจารณาจุดทริปเปิ้ลพอยท์ (วงกลมสีแดงและวงกลมสีน้ำ

เงิน) ซึ่งเป็นเงื่อนไขที่เกิดการส่งผ่านอิเล็กตรอน ในกรณีที่ไม่พิจารณาผลของการทะลุผ่าน เมื่อปรับแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทั้งสองให้มีค่าเท่ากับจุดทรูปเปลวพอยท์ ส่งผลให้อิเล็กตรอนหนึ่งตัวสามารถส่งผ่านจากขั้วซอร์สไปยังขั้วเดรน ดังนั้นจุดทรูปเปลวพอยท์จึงเป็นเงื่อนไขที่ทำให้เกิดค่าความนำไฟฟ้าสูงสุด ( $G_{\max}$ ) จากภาพประกอบ 2.10 จุดทรูปเปลวพอยท์ในวงกลมสีแดงและสีน้ำเงินอยู่ที่ตำแหน่ง  $(n_{L0}, n_{R0}) = (0.376, 0.347)$  และ  $(n_{L0}, n_{R0}) = (0.623, 0.625)$  ซึ่งเมื่อนำค่าดังกล่าวไปเปรียบเทียบกับผลการวัดค่าความนำไฟฟ้าที่ขึ้นกับแรงดันไฟฟารวมที่ขั้วเกตรวม กล่าวคือ  $n_x = n_{L0} + n_{R0}$  ดังภาพประกอบ 2.11 พบว่า ค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดปรากฏขึ้นที่  $n_x \approx 0.7$  และ  $n_x \approx 1.3$  มีค่าใกล้เคียงกับจุดทรูปเปลวพอยท์ที่อยู่ในแผนภาพเสถียร แต่อย่างไรก็ตาม ในการสร้างแผนภาพเสถียรไม่ได้พิจารณาผลของการทะลุผ่านและอุณหภูมิตัวรวมด้วย ดังนั้น แผนภาพเสถียรของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวจึงไม่สามารถระบุตำแหน่งของค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดได้แม่นยำทุกค่าของอุณหภูมิ



ภาพประกอบ 2.11 ผลการทดลองวัดค่าความนำไฟฟ้าของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวของตัวอย่างหมายเลข 1 [12]

จากภาพประกอบ 2.11 ในกรณีอุณหภูมิสูง  $k_B T / E_C = 0.44$  เช่น เส้นกราฟสีม่วง ค่าความนำไฟฟ้าในช่วงดังกล่าวมีค่าเปลี่ยนแปลงน้อย เมื่อพารามิเตอร์แรงดันไฟฟ้าของขั้วเกตทั้งสอง  $n_x$  มีค่าเปลี่ยนแปลงซึ่งเป็นผลเนื่องจากอิเล็กตรอนมีพลังงานจลน์ที่เกิดจากความร้อนใกล้เคียงกับค่าพลังงานการเพิ่มประจุ และเมื่อศักย์ไฟฟ้าภายในควอนตัมดอททั้งสองเปลี่ยนแปลงไปจึงเกิดการถ่ายโอนประจุได้อย่างต่อเนื่อง แต่ในกรณีของอุณหภูมิต่ำ เช่น เส้นสีเขียว พลังงานจลน์ที่เกิดจากความร้อนเมื่อเทียบพลังงานการเพิ่มประจุ  $k_B T / E_C = 0.04$  ซึ่งมีค่าน้อยมาก ดังนั้นเมื่อแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตเปลี่ยนแปลงไป ค่าความนำไฟฟ้าของระบบจึงขึ้นอยู่กับค่า  $n_x$  นอกจากนี้ในภาพประกอบ 2.11 ค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดเกิดขึ้นบริเวณที่พารามิเตอร์  $n_x$  มีค่าประมาณ 0.7 และ 1.3 เนื่องจากที่ตำแหน่งดังกล่าวเป็นสถานะที่อุปกรณ์ได้รับแรงดันไฟฟ้าจากขั้วเกตทั้งสองอย่างเหมาะสม กล่าวคือ เท่ากับพลังงานการเพิ่มประจุของระบบ ทำให้อิเล็กตรอนสามารถเคลื่อนที่จากขั้วซอร์สไปยังขั้วเดรนได้ แต่ช่วงที่แรงดันไฟฟ้าที่

ข้อเท็จจริงที่ค่าน้อยกว่าค่าดังกล่าว อิเล็กตรอนจะมีพลังงานไม่เพียงพอที่จะเคลื่อนที่จากขั้วซอร์สไปยังขั้วเดรน ทำให้ค่าความนำไฟฟ้ามีค่าน้อยกว่าค่าความนำไฟฟ้าสูงสุด ซึ่งผลการทดลองที่เกิดขึ้นดังกล่าวสะท้อนผลของปรากฏการณ์การขัดขวางแบบคูลอมป์ภายในป้อนอิเล็กตรอนเดี่ยว

### 2.4.3 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในป้อนอิเล็กตรอนเดี่ยว

จากแฮมิลโทเนียน (Hamiltonian) ของระบบป้อนอิเล็กตรอนเดี่ยวเป็นไปตามสมการ [12]

$$\hat{H} = \hat{H}_B + \hat{H}_C + \hat{H}_T \quad (2.26)$$

โดย  $\hat{H}_B$  เป็นพจน์ที่บรรยายอิเล็กตรอนที่อยู่ในขั้วไฟฟ้าและเกาะโลหะเป็นไปตามสมการ

$$\hat{H}_B = \sum_{J=S,D} \sum_{k,\sigma} \varepsilon_{Jk\sigma} c_{Jk\sigma}^\dagger c_{Jk\sigma} + \sum_{I=L,R} \sum_{k,\sigma} \varepsilon_{Ik\sigma} d_{Ik\sigma}^\dagger d_{Ik\sigma} \quad (2.27)$$

เมื่อ  $\varepsilon_{Jk\sigma}$  เป็นพลังงานของอิเล็กตรอนที่มีเลขคลื่น  $k$  ในช่องการทะลุผ่าน  $\sigma$  ของขั้วไฟฟ้า  $J \in \{S, D\}$  โดยมี  $c_{Jk\sigma}$  และ  $c_{Jk\sigma}^\dagger$  เป็นตัวดำเนินการลบล้าง (annihilation operator) และตัวดำเนินการสร้าง (creation operator) อิเล็กตรอนในขั้วโลหะ ส่วนอิเล็กตรอนในเกาะโลหะมีพลังงาน  $\varepsilon_{Ik\sigma}$  โดยมี  $k$  เป็นเลขคลื่นในช่องการทะลุผ่าน  $\sigma$  เกาะโลหะ  $I$  ซึ่ง  $I \in \{L, R\}$  โดยมี  $d_{Ik\sigma}$  และ  $d_{Ik\sigma}^\dagger$  เป็นตัวดำเนินการลบล้างและตัวดำเนินการสร้างอิเล็กตรอนในเกาะโลหะ นอกจากนี้กำหนดให้อิเล็กตรอนสามารถทะลุผ่านจากขั้วไฟฟ้าไปยังเกาะโลหะและจากเกาะโลหะไปยังเกาะโลหะ ซึ่งเหตุการณ์การทะลุผ่านนี้ถูกบรรยายด้วยสมการ

$$\hat{H}_T = \sum_{k,q,\sigma} (t_{LSkq\sigma} e^{-i\hat{\phi}_L} d_{Lk\sigma}^\dagger c_{Sq\sigma} + t_{RLkq\sigma} e^{i(\hat{\phi}_L - \hat{\phi}_R)} d_{Rk\sigma}^\dagger d_{Lq\sigma} + t_{DRkq\sigma} e^{i\hat{\phi}_R} c_{Dk\sigma}^\dagger d_{Rq\sigma} + h.c.) \quad (2.28)$$

โดย  $t_{LSkq\sigma}$   $t_{RLkq\sigma}$  และ  $t_{DRkq\sigma}$  เป็นสัมประสิทธิ์การทะลุของแต่ละรอยต่อ ยกตัวอย่างเช่น  $t_{LSkq\sigma}$  เป็นขนาดของสัมประสิทธิ์การทะลุผ่านของอิเล็กตรอนในสถานะ  $|q\sigma\rangle$  ในขั้วไฟฟ้า  $S$  ที่ผ่านไปยังเกาะโลหะ  $L$  และมีสถานะสุดท้ายเป็น  $|k\sigma\rangle$  ตัวดำเนินการ  $\hat{\phi}_I$  เป็นสังยุคของตัวดำเนินการจำนวนอิเล็กตรอน  $\hat{n}_I$  บนเกาะโลหะ  $I$  กล่าวคือ  $[\hat{n}_I, \hat{\phi}_I] = i$

จากกลศาสตร์ควอนตัมเชิงสถิติที่อธิบายคุณสมบัติของระบบด้วยฟังก์ชันแบบแบ่งส่วน ดังนั้นฟังก์ชันแบบแบ่งส่วนของป้อนอิเล็กตรอนเดี่ยวสามารถเขียนได้ดังสมการ

$$Z = \sum_j e^{-\beta E_j} \quad (2.29)$$

โดย  $E_j = E_C + E_B + E_T$  แทนพลังงานรวมของระบบที่สถานะ โดย  $E_C$   $E_B$  และ  $E_T$  สอดคล้องกับสมการ (2.20) (2.27) และ (2.28) จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะนิยามได้จาก

$$\langle n_l \rangle = \frac{1}{Z} \sum_j n_l e^{-\beta E_j} \quad (2.30)$$

โดย  $n_l \in \{n_L, n_R\}$  พิจารณาการคำนวณ

$$\begin{aligned} \sum_j \frac{\partial}{\partial n_{0L}} e^{-\beta E_j} &= \sum_j e^{-\beta E_j} \frac{\partial}{\partial n_{0L}} E_C(n_L, n_R) \\ &= -\sum_j e^{-\beta E_j} [-2\beta E_{CL}(n_L - n_{0L}) - 2E_{CM}(n_R - n_{0R})] \end{aligned} \quad (2.31)$$

จากสมการ (2.31) สามารถเขียนให้อยู่ในพจน์ของ  $\langle n_L \rangle$  ได้ดังสมการ

$$\sum_j n_L e^{-\beta E_j} = \frac{1}{2\beta E_{CL}} \sum_j \frac{\partial}{\partial n_L} e^{-\beta E_j} + \sum_j \frac{\partial}{\partial n_L} e^{-\beta E_j} n_{0L} - \sum_j \frac{\partial}{\partial n_L} e^{-\beta E_j} \frac{E_{CM}}{E_{CL}} (n_R - n_{0R}) \quad (2.32)$$

เมื่อแทนสมการ (2.32) ลงในสมการ (2.30) จะได้

$$\begin{aligned} \langle n_L \rangle &= \frac{1}{Z} \frac{1}{2\beta E_{CL}} \sum_j \frac{\partial}{\partial n_{0L}} e^{-\beta E_j} + \sum_j \frac{\partial}{\partial n_{0L}} e^{-\beta E_j} n_{0L} \\ &\quad - \frac{1}{Z} \frac{1}{2\beta E_{CL}} \sum_j \frac{\partial}{\partial n_{0L}} e^{-\beta E_j} \frac{E_{CM}}{E_{CL}} (n_R - n_{0R}) \\ &= n_{0L} - \frac{E_{CM}}{E_{CL}} (\langle n_R \rangle - n_{0R}) + \frac{1}{2\beta E_{CL}} \frac{\partial}{\partial n_{0L}} \ln Z \end{aligned} \quad (2.33)$$

ในทำนองเดียวกันจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในเกาะโลหะฝั่งขวา

$$\langle n_R \rangle = n_{0R} - \frac{E_{CM}}{E_{CR}} (\langle n_L \rangle - n_{0L}) + \frac{1}{2\beta E_{CR}} \frac{\partial}{\partial n_{0R}} \ln Z \quad (2.34)$$

จากสมการ (2.33) และ (2.34) ไม่สามารถหาผลเฉลยแบบแม่นยำตรงได้เนื่องจากฟังก์ชันแบ่งส่วน ( $Z$ ) ไม่สามารถคำนวณได้โดยตรง ดังนั้นในงานวิจัยนี้จึงได้ประยุกต์ใช้วิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลเพื่อคำนวณสมการ (2.33) และ (2.34) โดยในหัวข้อต่อไปจะได้กล่าวถึงวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลเพื่อเป็นพื้นฐานในการคำนวณ

## 2.5 วิธีควอนตัมมอนติคาร์โล

โดยในปี ค.ศ. 1949 อูลาม (Ulam) และ เมโทรโพลิส (Metropolis) ได้เสนอวิธีการคำนวณแบบมอนติคาร์โล (Monte Carlo method) [18] ซึ่งต่อมาวิธีการดังกล่าวได้ถูกนำไปประยุกต์ใช้อย่างกว้างขวางในการแก้ปัญหาทางฟิสิกส์ เช่น กลศาสตร์เชิงสถิติ (statistic mechanics)

และกลศาสตร์ควอนตัม (quantum mechanics) เพื่อแสดงวิธีการคำนวณแบบมอนติคาร์โล ในหัวข้อนี้ ได้กล่าวถึงการคำนวณค่าปริพันธ์ด้วยวิธีการมอนติคาร์โลและแสดงการคำนวณค่าคาดหวัง (expectation value) ในกลศาสตร์ควอนตัม ด้วยวิธีการคำนวณปริพันธ์ตามวิถีแบบมอนติคาร์โล (path integral Monte Carlo method)

### 2.5.1 การคำนวณค่าปริพันธ์ด้วยวิธีการมอนติคาร์โล

การคำนวณค่าปริพันธ์ด้วยวิธีการเชิงตัวเลข (numerical methods) สามารถทำได้หลายวิธี เช่น วิธีแบบนิวตันโคตส์ (Newton Cotes formula) [19] ซึ่งวิธีการดังกล่าวมีข้อจำกัดคือ ค่าความคลาดเคลื่อนของการคำนวณจะมีค่าเพิ่มขึ้นเมื่อตัวแปรของการหาปริพันธ์มีค่าเพิ่มมากขึ้น ดังนั้นวิธีดังกล่าวจึงไม่เหมาะสมที่จะนำมาประยุกต์ใช้ในการคำนวณปริพันธ์ตามวิถี แต่การคำนวณค่าปริพันธ์ด้วยวิธีการมอนติคาร์โล ค่าความคลาดเคลื่อนจะไม่ขึ้นอยู่กับจำนวนตัวแปรของการหาค่าปริพันธ์ [20] ดังนั้นงานวิจัยนี้จึงได้เลือกใช้วิธีการมอนติคาร์โลในการคำนวณค่าคาดหวังทางควอนตัม เพื่ออธิบายการคำนวณค่าปริพันธ์ด้วยวิธีการมอนติคาร์โล ให้พิจารณาตัวอย่างการหาค่าปริพันธ์ตามสมการ

$$I = \int_0^1 dx f(x) \quad (2.35)$$

สมการ (2.35) สามารถคำนวณด้วยวิธีการมอนติคาร์โล โดยการกำหนดให้  $\rho(x)$  เป็นฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น ดังนั้นสมการ (2.35) สามารถเขียนใหม่ได้ ดังสมการ

$$I = \int_0^1 dx \frac{f(x)}{\rho(x)} \rho(x) \equiv \left\langle \frac{f}{\rho} \right\rangle_{\rho} \quad (2.36)$$

โดยค่าคาดหวังหมายถึง  $\left\langle f / \rho \right\rangle_{\rho}$  สามารถคำนวณด้วยวิธีการมอนติคาร์โลค่าสมการ

$$\left\langle \frac{f}{\rho} \right\rangle_{\rho} \approx \frac{1}{M} \sum_{x_i \in \rho(x)} \frac{f(x_i)}{\rho(x_i)} \quad (2.37)$$

เมื่อ สัญลักษณ์  $x_i \in \rho(x)$  แสดงการสุ่มตัวอย่างจากฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น  $\rho(x)$  และ  $M$  เป็นจำนวนของตัวอย่าง โดยค่าความคลาดเคลื่อนที่เกิดจากการสุ่มสามารถพิจารณาได้จากทฤษฎีแนวโน้มเข้าสู่ส่วนกลาง (central limit theorem) [20] ซึ่งกล่าวว่า ค่าความแปรปรวนของค่าเฉลี่ยสามารถคำนวณได้จากสมการ

$$\sigma^2 = \frac{1}{M} \left( \left\langle \frac{f^2}{\rho^2} \right\rangle_{\rho} - \left\langle \frac{f}{\rho} \right\rangle_{\rho}^2 \right) \quad (2.38)$$

โดยทั่วไปค่าความคลาดเคลื่อนเชิงสถิติ (statistic error) ที่เกิดขึ้นในการคำนวณด้วยวิธีมอนติคาร์โลสามารถกำหนดได้จากค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน (standard deviation)  $\sigma$  ดังนั้น การคำนวณค่าคาดหวังในสมการที่ (2.36) สามารถเขียนใหม่ ในพจน์ของค่าความคลาดเคลื่อนดังสมการ

$$\left\langle \frac{f}{\rho} \right\rangle_{\rho} = \frac{1}{M} \sum_{x_i \in \rho(x)} \frac{f(x_i)}{\rho(x_i)} \pm \frac{1}{\sqrt{M}} \left( \left\langle \left( \frac{f}{\rho} \right)^2 \right\rangle_{\rho} - \left\langle \frac{f}{\rho} \right\rangle_{\rho}^2 \right)^{1/2} \quad (2.39)$$

จากสมการที่ (2.39) พบว่าค่าความคลาดเคลื่อนของการหาปริพันธ์ด้วยวิธีมอนติคาร์โลขึ้นอยู่กับจำนวนของตัวอย่างสุ่ม  $M$  ซึ่งค่าความคลาดเคลื่อนแปรผันตรงกับค่าส่วนกลับของรากที่สองของจำนวนของตัวอย่างสุ่ม ยกตัวอย่างเช่น ถ้าต้องการให้ค่าตอบมีความละเอียดเพิ่มขึ้นทศนิยมหนึ่งตำแหน่งจำเป็นต้องใช้ตัวอย่างสุ่มเพิ่มขึ้นร้อยเท่าของตัวอย่างสุ่มเดิม นอกจากนี้ ในการลดค่าความคลาดเคลื่อนของการคำนวณด้วยวิธีการมอนติคาร์โลสามารถทำได้อีกหนึ่งวิธีคือการเลือกค่า  $\rho(x)$  ที่เหมาะสมซึ่งจะได้กล่าวในหัวข้อต่อไป

### 2.5.2 การสุ่มตัวอย่างตามความสำคัญ

การสุ่มตัวอย่างตามความสำคัญ (importance sampling) เป็นวิธีการเลือกสุ่มตัวอย่าง ในบริเวณที่สำคัญ เพื่อให้การคำนวณค่าเข้าสู่คำตอบอย่างมีประสิทธิภาพ โดยการสุ่มตัวอย่างตามความสำคัญ ได้กล่าวถึงการเลือกฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น โดยการพิจารณาจากค่าความคลาดเคลื่อนที่นิยามได้จากค่าความแปรปรวน ในกรณีนี้สามารถคำนวณได้ตามสมการ

$$\begin{aligned}\sigma_{(f/\rho)_\rho}^2 &= \left\langle \left( \frac{f(x)}{\rho(x)} \right)^2 \right\rangle_\rho - \left\langle \frac{f(x)}{\rho(x)} \right\rangle_\rho^2 \\ &\approx \left\langle \left( \frac{f(x)}{\rho(x)} - I \right)^2 \right\rangle\end{aligned}\tag{2.40}$$

จากสมการ (2.40) ค่าความคลาดเคลื่อนจะมีค่าเป็นศูนย์เมื่อใช้ค่า  $\rho(x) = f(x)/I$  แต่เนื่องจากค่า  $I$  เป็นพารามิเตอร์ที่ไม่ทราบค่า เพราะค่าดังกล่าวเป็นคำตอบของค่าปริพันธ์ที่ต้องการคำนวณ ดังนั้นจึงไม่สามารถเลือก  $\rho(x)$  เพื่อให้ค่าความคลาดเคลื่อนเท่ากับศูนย์ได้ ก่อนการคำนวณค่าปริพันธ์ แต่อย่างไรก็ตาม เพื่อลดค่าความคลาดเคลื่อนที่เกิดขึ้นควรเลือกฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น  $\rho(x)$  ให้มีรูปร่างใกล้เคียงกับ  $f(x)$  มากที่สุด เพื่อให้ค่าความคลาดเคลื่อนที่เกิดขึ้นมีค่าน้อยที่สุด นอกจากนี้ ฟังก์ชันแจกแจงความน่าจะเป็น  $\rho(x)$  ที่เลือกต้องมีคุณสมบัติต่อไปนี้

- 1) ความน่าจะเป็นของทุกค่า  $x$  ต้องมีค่ามากกว่าหรือเท่ากับศูนย์

$$\rho(x) \geq 0\tag{2.41}$$

- 2) ผลรวมของความน่าจะเป็นทั้งหมดทุกค่า  $x$  ต้องมีค่าเท่ากับหนึ่ง

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = 1\tag{2.42}$$

ซึ่งทั้งสองข้อเป็นคุณสมบัติของฟังก์ชันแจกแจงความน่าจะเป็น ด้วยเหตุนี้วิธีการเลือกฟังก์ชันแจกแจงความน่าจะเป็นในแบบที่คล้ายคลึงกับฟังก์ชันที่ต้องการหาค่าปริพันธ์ จึงเรียกว่าวิธีการสุ่มตัวอย่างตามความสำคัญ

### 2.5.3 ระเบียบวิธีของเมโทรโพรลิส

ในการสร้างกลุ่มตัวอย่างให้เป็นไปตามกับฟังก์ชันแจกแจงความน่าจะเป็นสามารถทำได้โดยอาศัยระเบียบวิธีของเมโทรโพรลิส เมื่อกำหนดฟังก์ชันแจกแจงความน่าจะเป็น  $\rho(x)$  และสถานะเริ่มต้น  $x_1$  ค่าความน่าจะเป็นในการเลือกสถานะถัด  $x_2$  ไปสามารถคำนวณได้จากเงื่อนไขของเมโทรโพรลิส

$$A(x_1 \rightarrow x_2) = \min \left[ 1, \frac{\rho(x_2)}{\rho(x_1)} \right] \quad (2.43)$$

โดย  $A(x_1 \rightarrow x_2)$  หมายถึงความน่าจะเป็นของการเปลี่ยนจากสถานะ  $x_1$  ไปยังสถานะ  $x_2$  เมื่อ  $\rho(x_2)$  และ  $\rho(x_1)$  เป็นความน่าจะเป็นของเหตุการณ์  $x_2$  และ  $x_1$  ตามลำดับ จากสัญลักษณ์ในสมการ (2.35) สามารถแบ่งออกได้เป็น 2 กรณี

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

ในกรณีที่ 1) ค่า  $\rho(x_2)/\rho(x_1)$  มีค่ามากกว่าหนึ่ง สถานะ  $x_2$  จะถูกยอมรับทันที แต่ในกรณีที่ 2) ค่า  $\rho(x_2)/\rho(x_1)$  มีค่าน้อยกว่าหนึ่งสถานะ  $x_2$  จะยังไม่ถูกยอมรับทันที แต่จะต้องกำหนดให้ความน่าจะเป็นในการยอมรับหรือไม่ยอมรับสถานะ  $x_2$  มีค่าเท่ากัน เมื่อใช้วิธีของ เมโทรโพรลิสในการสร้างเซตตัวอย่างสุ่ม  $\{x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_M\}$  เมื่อ  $i$  มีค่ามากพอจะทำให้เซตของตัวอย่างสุ่ม  $\{x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, \dots, x_M\}$  กระจายตัวเป็นไปตามฟังก์ชันแจกแจงความน่าจะเป็น  $\rho(x)$  ซึ่งถูกกำหนดไว้ในเบื้องต้น โดยวิธีการนี้ตัวอย่างตั้งแต่  $x_i$  เป็นต้นไปสามารถนำไปใช้คำนวณตามสมการ (2.37)

### 2.6 การคำนวณฟังก์ชันนัลอินทิกรัลด้วยวิธีการมอนติคาร์โล

ฟังก์ชันแบ่งส่วนเป็นปริมาณที่สำคัญในการบรรยายระบบทางกลศาสตร์เชิงสถิติ เพราะเป็นปริมาณที่แจกแจงสถานะที่เป็นไปได้ทั้งหมดของระบบ ซึ่งสามารถอยู่เขียนอยู่ในรูปของฟังก์ชันนัลอินทิกรัลได้ดังสมการ [21]

$$Z(\beta) = \oint D[\phi] e^{-S[\phi(\tau)]} \quad (2.44)$$

โดยสัญลักษณ์  $\oint D[\phi] \equiv \oint d\phi_{N-1} \dots \oint d\phi_2 \oint d\phi_1$  หมายถึง ผลรวมของทุกเส้นทางปิดที่เป็นไปได้ทั้งหมด ตามเงื่อนไข  $\phi(0) = \phi(\beta)$  และ ค่าแอกชัน  $S[\phi(\tau)]$  หมายถึง แอกชันของเส้นทางที่เขียนอยู่ในพจน์ของเวลาจินตภาพ นิยามตามสมการ

$$S[\phi(\tau)] = \int_0^\beta d\tau \left[ \frac{m}{2} \dot{\phi}^2(\tau) + V(\phi(\tau)) \right] \quad (2.45)$$

เมื่อ  $\phi(\tau)$  หมายถึง เส้นทางของอนุภาคในเวลาจินตภาพ  $\tau$  และ  $\dot{\phi}(\tau) \equiv d\phi(\tau)/d\tau$  จากฟังก์ชันแบ่งส่วนสามารถนำมาใช้ในการคำนวณค่าคาดหวัง (expectation value) หรือค่าเฉลี่ย (mean value) ในกลศาสตร์ควอนตัม ได้ดังสมการ

$$\begin{aligned} \langle \hat{O} \rangle &= \frac{\oint D[\phi] \hat{O}[\phi(\tau)] \exp(-S[\phi(\tau)])}{\oint D[\phi] \exp(-S[\phi(\tau)])} \\ &= \frac{1}{Z} \oint D[\phi] \hat{O}[\phi(\tau)] \exp(-S[\phi(\tau)]) \\ &= \oint D[\phi] \hat{O}[\phi(\tau)] \rho[\phi(\tau)] \end{aligned} \quad (2.46)$$

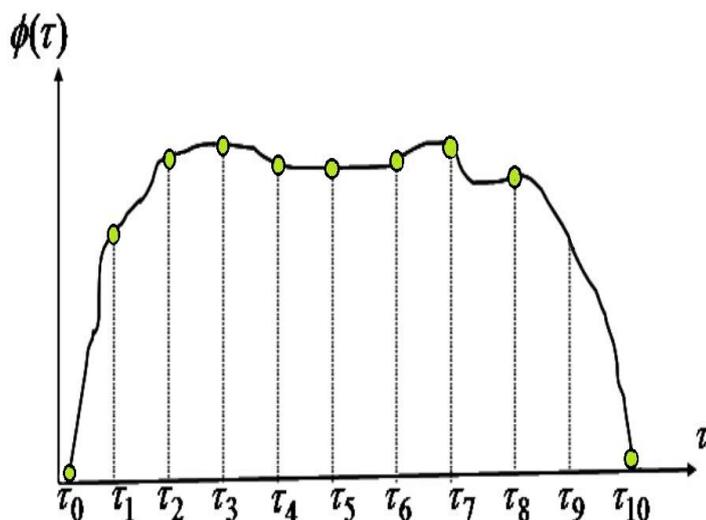
เมื่อ  $\rho[\phi(\tau)]$  เป็นฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็นซึ่งในสมการ (2.46) นิยามเป็น

$$\rho[\phi(\tau)] = \frac{1}{Z} e^{-S[\phi(\tau)]} \quad (2.47)$$

และในกรณีที่  $S[\phi(\tau)]$  เป็นจำนวนจริงบวก พบว่า  $\rho[\phi(\tau)]$  มีคุณสมบัติเป็นไปตามสมการ (2.41) และ สมการ (2.42)

### การสุ่มตัวอย่างของเส้นทางจินตภาพ

เส้นทางที่ต่อเนื่อง (continuous path) ในเวลาจินตภาพ สามารถแบ่งออกเป็นช่วงที่ไม่ต่อเนื่อง (discretized path) ได้ ยกตัวอย่างเช่น เส้นทางต่อเนื่องถูกประมาณโดยการแบ่งออกเป็น 10 ช่วงเท่าๆ ดังภาพประกอบ 2.12



ภาพประกอบ 2.12 ตัวอย่างการแบ่งเส้นทางที่ไม่ต่อเนื่องออกเป็น 10 ช่วงเท่าๆ กัน ซึ่งเมื่อ  $N$  มีค่ามากๆ ความคลาดเคลื่อนในการประมาณก็จะมีค่าน้อยลงตามไปด้วย

จากภาพประกอบ 2.12 พบว่า เส้นทางที่ไม่ต่อเนื่องสามารถประมาณด้วยจุดจำนวนมากคล้ายกับการร้อยลูกปัดต่อกัน ดังนั้นในการคำนวณค่าคาดหวังในสมการ (2.46) สามารถประมาณได้จากผลรวมทุกเส้นทาง ดังสมการ

$$\langle \hat{o} \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \hat{o}[\phi_j] \quad (2.48)$$

โดยที่  $\phi_j$  หมายถึงจำนวนเส้นทางในลำดับที่  $j$  เมื่อ  $j = \{1, 2, 3, \dots, M\}$  และ  $M$  คือ จำนวนตัวอย่างของเส้นทางที่สุ่มทั้งหมด ซึ่งเส้นทางดังกล่าวได้จากการสุ่มจากฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น  $\rho(\phi)$  เมื่อประยุกต์ใช้ระเบียบวิธีของเมโทรโพลิซิสในสมการ (2.43) ในการเลือกเส้นทางใหม่ ในกรณีนี้สมการ (2.43) สามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$A(\phi_{\text{int}} \rightarrow \phi_{\text{new}}) = \frac{\rho[\phi_{\text{new}}]}{\rho[\phi_{\text{int}}]} = \frac{e^{-S[\phi_{\text{new}}]}/Z}{e^{-S[\phi_{\text{int}}]}/Z} = \frac{e^{-S[\phi_{\text{new}}]}}{e^{-S[\phi_{\text{int}}]}} = e^{-\Delta S} \quad (2.49)$$

โดย  $\rho[\phi_{\text{int}}]$  และ  $\rho[\phi_{\text{new}}]$  คือความน่าจะเป็นของสถานะของเส้นทางเริ่มต้นและเส้นทางใหม่ตามลำดับ จากสมการ (2.49) พบว่าในการเลือกเส้นทางใหม่ ไม่จำเป็นต้องทราบค่าฟังก์ชันแบ่งส่วน ซึ่งเป็นปริมาณที่ไม่สามารถคำนวณได้ในระบบที่มีความซับซ้อน ทำให้เงื่อนไขของเมโทรโพลิซิสในสมการ (2.43) สามารถเขียนใหม่ได้ตามสมการ

$$A(\phi_{\text{int}} \rightarrow \phi_{\text{new}}) = \min[1, e^{-\Delta S}] \quad (2.50)$$

จากสมการ (2.50) บรรยายถึงเงื่อนไขในการคัดเลือกเส้นทางใหม่ กล่าวคือ เมื่อเปรียบเทียบผลต่างของ  $\Delta S = S[\phi_{\text{new}}] - S[\phi_{\text{int}}]$  แล้ว

1) ถ้า  $\Delta S \leq 0$  เส้นทางใหม่จะถูกยอมรับทันที

2) ถ้า  $\Delta S > 0$  ให้ทำการสร้างตัวเลขสุ่มที่อยู่ในช่วง 0 ถึง 1 กล่าวคือ  $r \in (0, 1)$

ขึ้นมาค่าหนึ่ง แล้วนำไปเปรียบเทียบกับค่า  $e^{-\Delta S}$  ถ้า  $e^{-\Delta S} \geq r$  แล้วเส้นทางใหม่จะถูกยอมรับ แต่ถ้า  $e^{-\Delta S} < r$  แล้วเส้นทางใหม่จะถูกปฏิเสธและให้คงสถานะเดิมไว้ จากนั้นทำซ้ำโดยการสุ่มเส้นทางใหม่และตรวจสอบเส้นทางใหม่ตาม ข้อ 1) และ 2) จนกว่าจะได้ชุดตัวอย่าง  $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_M\}$  ตามจำนวนตัวอย่างที่ต้องการ จากที่กล่าวมาข้างต้น ได้แสดงวิธีการคำนวณค่าคาดหวัง ด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ซึ่งวิธีการดังกล่าวนี้จะถูกนำไปประยุกต์ใช้ในการคำนวณจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในป้อมอิเล็กตรอนเดี่ยวในบทต่อไป