# การศึกษาคุณสมบัติเทอร์โมอิเล็กตริกของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว ชนิดโลทะด้วยวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล THE STUDY OF THERMOELECTRIC PROPERTIES OF THE METALLIC SINGLE ELECTRON TRANSISTOR USING QUANTUM MONTE CARLO METHOD

.....

ประธาน ศรีวิไล<sup>1</sup>\* เฉลิมวงศ์ ดอกประทุม<sup>2</sup> Prathan Srivilia<sup>1</sup>\*, Chalermwong Dokpratoom<sup>2</sup>

<sup>1</sup>หน่วยวิจัยฟิสิกส์ทฤษฎีสสารควบแน่น ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหาสารคาม <sup>1</sup>Theoretical Condensed Matter Physics Research Unit, Department of Physics, Faculty of Science, Mahasarakham University. <sup>2</sup>คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหาสารคาม <sup>2</sup>Faculty of Science, Mahasarakham University.

\*Corresponding author, e-mail: prathansrivilai27@gmail.com

#### บทคัดย่อ

งานวิจัยนี้ได้คำนวณกำลังความร้อนของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวในช่วงการทะลุผ่าน แบบแข็ง (Strong Tunneling) ด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล พร้อมทั้งเปรียบเทียบ ผลการคำนวณที่ได้จากวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลกับผลการคำนวณที่ได้จากทฤษฎีการรบกวน ในกรณีที่พารามิเตอร์แสดงความแรงของการทะลุผ่าน  $g \le 1$  ผลการคำนวณจากวิธีการ ควอนตัมมอนติคาร์โลมีค่าสอดคล้องกับผลการคำนวณจากทฤษฎีการรบกวนลำดับที่สอง แต่ในกรณี พารามิเตอร์ g = 1 ผลการคำนวณของทั้งสองวิธีมีค่าแตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญ ดังนั้น งานวิจัยนี้ได้ นำเสนอวิธีการอธิบายคุณสมบัติเทอร์โมอิเล็กตริกของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวตลอดทุกช่วง ของการเกิดปรากฏการณ์การทะลุผ่าน

คำสำคัญ: กำลังความร้อน ปรากฏการณ์การทะลุผ่าน วิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล

#### Abstract

We calculated the thermopower of the single electron transistor for a region of strong tunneling using the quantum Monte Carlo method. Moreover, the quantum Monte Carlo results were compared with results obtained from  $2^{nd}$  order perturbation theory. In the case of the strength tunneling parameter being  $g \leq 1$ , the Monte Carlo results agreed with the perturbation results. However, for g = 1 the Monte Carlo results were significantly different from the perturbation results. Therefore, we proposed this method to describe the thermoelectric properties of the single electron transistor for all tunneling regimes.

Keywords: Thermopower, Tunneling Phenomena, Quantum Monte Carlo Method

การทดลองได้ถูกต้อง ทั้งในกรณีการเกิด ปรากฏการณ์การทะลุผ่านแบบแข็งและแบบอ่อน (Strong and Weak Tunneling Effect)

นอกจากนี้ คุณสมบัติทางเทอร์โมอิเล็กตริก ของอุปกรณ์อิเล็กตรอนเดี่ยวก็ได้รับความ สนใจอย่างกว้างขวาง [9-19] โดยในงานวิจัย ของดูบาลา (Kubala) และโคนิก (König) [9] ได้ศึกษาคุณสมบัติเทอร์โมอิเล็กตริกของ ทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวโดยใช้ทฤษฎีการ รบกวน (Perturbation Theory) เพื่อคำนวณกำลัง ความร้อน (Thermopower) ของทรานซิสเตอร์ อิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งปริมาณดังกล่าวเป็นอัตราส่วน ระหว่างความน้ำความร้อนต่อความนำไฟฟ้า ของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว จากผลการ คำนวณพบว่าในช่วงที่เกิดปรากฏการณ์การทะลุ ผ่านแบบอ่อน กำลังความร้อนมีการแกว่งกวัด ขึ้นอย่กับแรงดันไฟฟ้าขั้วเกต แต่ในช่วงการเกิด ปรากฏการณ์การทะลุผ่านแบบแข็ง งานวิจัยของ ดูบาลาและโคนิกไม่สามารถคำนวณกำลัง ความร้อนของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว ได้ เนื่องจากทฤษฎีการรบกวนสามารถอธิบาย การส่งผ่านของอิเล็กตรอนได้เฉพาะในกรณีที่เกิด ปรากฏการณ์การทะลุผ่านแบบอ่อนเท่านั้น [9-111

ดังนั้น เพื่อศึกษาคุณสมบัติเทอร์โมอิเล็กตริก ของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวให้สมบูรณ์ยิ่ง ขึ้น ในงานวิจัยนี้จึงได้คำนวณกำลังความร้อน ของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว ในช่วงของ ปรากฏการณ์การทะลุผ่านแบบแข็ง ซึ่งต้องอาศัย การคำนวณความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์ อิเล็กตรอนเดี่ยวด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล และการแก้ปัญหาแบบผันกลับ (Inverse Problem) [20] โดยวิธีการคำนวณดังกล่าว จะทำให้สามารถอธิบายคุณสมบัติทางเทอร์โม อิเล็กตริกของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว ได้ทุกช่วงของการเกิดปรากฏการณ์การทะลุผ่าน

### บทนำ

ในปัจจุบันนักวิทยาศาสตร์สามารถสร้าง อุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ให้มีขนาดเล็กในระดับ นาโนเมตร ซึ่งการลดขนาดในระดับดังกล่าวส่งผล ให้พฤติกรรมทางไฟฟ้าของอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ มีความหลากหลายมากยิ่งขึ้น [1-3] อุปกรณ์ อิเล็กทรอนิกส์ที่กำลังได้รับความสนใจอย่างกว้าง ขวางประเภทหนึ่ง คือ อุปกรณ์อิเล็กตรอนเดี่ยว (Single Electron Devices) [1-6] เนื่องจาก สามารถควบคุมให้อิเล็กตรอนเคลื่อนที่ได้ทีละ หนึ่งตัว และสามารถประยุกต์ใช้งานได้อย่าง หลากหลาย [1-6]

ในปี ค.ศ. 1991 ลาฟารกและคณะ [7] ได้ประดิษฐ์กล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว (Single Electron Box) ที่ทำจากอะลูมิเนียมเพื่อศึกษา ปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์ (Coulomb Blockade Effect) ซึ่งเป็นปัจจัยสำคัญในการ อธิบายพฤติกรรมทางไฟฟ้าที่เกิดขึ้นในกล่อง อิเล็กตรอนเดี่ยว งานวิจัยดังกล่าวได้เป็นจุดเริ่มต้น ในการพัฒนาอุปกรณ์อิเล็กตรอนเดี่ยว ต่อมาในปี ค.ศ. 2002 วอลลิเซอร์ และคณะ [8] ได้ทำการ ์ศึกษาทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว (Single Electron Transistor) ซึ่งเป็นอุปกรณ์ที่มีความ ชับซ้อนมากกว่ากล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว กล่าวคือ ทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวประกอบด้วย เกาะโลหะหนึ่งเกาะและรอยต่อของการทะลุผ่าน สองรอยต่อคั้นอยู่ระหว่างเกาะโลหะและขั้วไฟฟ้า ทั้งสอง นอกจากนั้น ระบบดังกล่าวยังประกอบด้วย ขั้วเกต (Gate Electrode) ทำหน้าที่ควบคุม จำนวนอิเล็กตรอนภายในเกาะโลหะ ในการอธิบาย การส่งผ่านอิเล็กตรอนและปรากฏการณ์ขัดขวาง แบบคูลอมบ์ที่เกิดขึ้นของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอน เดี่ยว วอลลิเซอร์และคณะได้ศึกษาค่าความ นำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว จากผลการทดลองและผลการคำนวณด้วยวิธีการ ควอนตัมมอนติคาร์โล พบว่าผลการคำนวณที่ได้จาก วิธีการควอนตัมมอนติดาร์โลสามารถอธิบายผล

## วัตถุประสงค์ของการวิจัย

 เพื่อคำนวณกำลังความร้อนของ ทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว ในช่วงของการทะลุ ผ่านแบบแข็ง

 เพื่อศึกษาผลปรากฏการณ์ขัดขวาง แบบดูลอมบ์ที่มีผลต่อค่ากำลังความร้อนของ ทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวในช่วงของการทะลุ ผ่านแบบแข็ง

## วิธีดำเนินการวิจัย

กำลังความร้อนของทรานซิสเตอร์
 อิเล็กตรอนเดี่ยว

พิจารณาโครงสร้างของทรานซิสเตอร์ อิเล็กตรอนเดี่ยวดังภาพที่ 1 ซึ่งประกอบด้วย เกาะโลหะ (Island) หนึ่งเกาะที่คั่นกลางอยู่ ระหว่างขั้วซอร์ส (Source) และขั้วเดรน (Drain) โดยที่ขั้วซอร์สมีความต่างศักย์ไฟฟ้าเป็น V<sub>S</sub> อุณหภูมิ T<sub>S</sub> และขั้วเดรนมีความต่างศักย์ไฟฟ้า เป็น V<sub>D</sub>อุณหภูมิ T<sub>D</sub> ตามลำดับ



# **ภาพที่ 1** แบบจำลองของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งประกอบด้วยเกาะโลหะหนึ่งเกาะ ขั้วซอร์สและขั้วเดรน โดยขั้วเกตทำหน้าที่ควบคุมการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอน

กระแสไฟฟ้าที่เกิดขึ้นในระบบสามารถคำนวณได้ตามสมการ

$$I = G_V V_E + G_T \Delta T \tag{1}$$

เมื่อ  $G_V$  เป็นความนำไฟฟ้า  $V_E$  เป็นความต่างศักย์ไฟฟ้าระหว่างขั้วซอร์สกับขั้วเดรน กล่าวคือ  $V_E = V_S - V_D$  สำหรับ  $G_T$  เป็นความนำความร้อน และ  $\Delta T = T_S - T_D$  เป็นความแตกต่าง ของอุณหภูมิระหว่างขั้วซอร์สและขั้วเดรน พิจารณาเมื่อระบบเข้าสู่สภาวะสมดุล (Thermal Equilibrium) กล่าวคือ I = 0 สมการ สามารถเขียนใหม่ได้เป็น [9-11]

$$\frac{G_T}{G_V} = -\lim_{\Delta T \to 0} \frac{V_E}{\Delta T} \Big|_{I=0} \equiv S$$
<sup>(2)</sup>

โดยนิยามให้อัตราส่วนระหว่างความนำความร้อนต่อความนำไฟฟ้าที่ระบบเข้าสู่สภาวะสมดุลเรียกว่า กำลังความร้อน *S* เพื่อความสะดวกในการคำนวณเชิงตัวเลข ปริมาณดังกล่าวสามารถเขียนใหม่ได้เป็น [9–10]

$$S\left(\frac{e}{k_B}\right) = \frac{-g_T}{g_V} \tag{3}$$

เมื่อ  $g_T = -G_T e / (G_{cl}k_B)$  เป็นความนำความร้อนที่ไม่มีหน่วย และ  $g_V = G_V / G_{cl}$  โดยที่  $G_{cl} = (R_S + R_D)^{-1}$ เป็นความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวที่อุณหภูมิสูง เมื่อ  $R_s$  และ  $R_D$  เป็นความต้านทานของรอยต่อของขั้วซอร์สและขั้วเดรน  $k_B$  เป็นค่าคงที่โบลท์ซมันซ์ (Boltzmann's Constant) และ e เป็นขนาดของประจุอิเล็กตรอน ในกรณีของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว  $g_T$  สามารถคำนวณได้จากสมการ [9-10]

$$g_T = -\frac{e}{k_B} \frac{G_T}{G_{cl}} = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\left(\beta \omega/2\right)^2}{\sinh \beta \omega} C(\omega)$$
(4)

เมื่อ  $\beta = 1/(k_B T)$  โดยที่ T เป็นอุณหภูมิของระบบ  $C(\omega)$  เป็นฟังก์ชันความหนาแน่นของ สเปคตรัล (Spectral Density Function) เมื่อ  $\omega$  เป็นความถี่ที่เขียนอยู่ในหน่วยของพลังงาน โดยในที่ นี้กำหนดให้  $\hbar = 1$  และ  $g_V$  เป็นความนำไฟฟ้าแบบไม่มีหน่วยที่ขึ้นกับอุณหภูมิสามารถคำนวณได้ตาม สมการ [9-10]

$$g_V = \frac{G_V}{G_{cl}} = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\beta \omega / 2}{\sinh \beta \omega} C(\omega)$$
(5)

ในการคำนวณกำลังความร้อนของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวตามสมการ จำเป็นต้องคำนวณ ค่าความนำความร้อนและค่าความนำไฟฟ้าตามสมการ (4) และ (5) ซึ่งขึ้นอยู่กับฟังก์ชัน ความหนาแน่นของสเปคตรัล โดยค่าดังกล่าวสามารถคำนวณโดยการประมาณจากทฤษฏีการรบกวน ดังรายละเอียดในเอกสารอ้างอิง [9-10] แต่ในงานวิจัยนี้จะนำเสนอวิธีการคำนวณความนำไฟฟ้า จากทฤษฏีการตอบสนองเชิงเส้น (Linear Response Theory) โดยใช้วิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ซึ่งได้ประยุกต์วิธีการคำนวณปริมาณดังกล่าวจากเอกสารอ้างอิง [20-21] ดังมีรายละเอียดต่อไปนี้

 การคำนวณความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล จากทฤษฎีการตอบสนองเชิงเส้น ความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวสามารถคำนวณได้ ตามสมการ [20-21]

$$G_{V} = \frac{\beta E_{C} G_{cl}}{2\pi} \int_{0}^{\infty} d\omega \frac{\omega^{2}}{\cosh(\beta E_{C} \omega) - 1} A^{s}(\omega)$$
(6)

เมื่อ  $E_C = e^2 / 2C_{\Sigma}$  เป็นพลังงานการเพิ่มประจุ (Charging Energy) โดยที่  $C_{\Sigma} = C_G + C_S + C_D$ เป็นผลรวมของดัวเก็บประจุที่มองออกจากเกาะโลหะ และ  $A^s(\omega)$  เป็นสเปคตรัลฟังก์ชันแบบสมมาตร (Symmetric Spectral Function) ซึ่งสามารถคำนวณได้ตามสมการ

$$A(\tau) = \int_0^\infty d\omega \frac{\omega \cosh\left(\left[\frac{\beta E_C}{2} - \tau\right]\omega\right)}{2\pi \sinh\left(\frac{\beta E_C}{2}\omega\right)} A^s(\omega)$$
(7)

โดยที่ A( au) เป็นออโตคอร์รีเลชันฟังก์ชัน (Auto-Correlation Function) และ t เป็นเวลา ในจินตภาพ (Imaginary Time) กล่าวคือ t = *it* ออโตคอร์รีเลชันฟังก์ชันสามารถคำนวณได้ตามสมการ

$$A(\tau) = \frac{1}{Z} \sum_{k} \int_{\varphi(0)=0}^{\varphi(\beta E_{C})=2\pi k} D\varphi \cos(\varphi(\tau) - \varphi(0)) e^{-S\left[\varphi(\tau)\right]}$$
(8)

เมื่อ Z เป็นฟังก์ชันแบ่งส่วน (Partition Function) ของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวสามารถเขียน ในรูปฟังก์ชันนัลอินทริกรัล (Functional Integral) ได้ตามสมการ

$$Z = \sum_{k} \int_{\varphi(0)}^{\varphi(\beta E_{C}) = 2\pi k} D\varphi e^{-S[\varphi(\tau)]}$$
(9)

โดยที่  $\varphi(\tau)$  เป็นตัวแปรเฟส (Phase Variable) ซึ่งเป็นสังยุค (Conjugate) ของตัวดำเนินการของ จำนวนอิเล็กตรอน  $\hat{n}$  บนเกาะโลหะ กล่าวคือ  $[\hat{n},\hat{\varphi}]=1$  และกำหนดให้สัญลักษณ์

$$\int_{\varphi(0)}^{\varphi(\beta E_{C})=2\pi k} D\varphi \equiv \lim_{N \to \infty} \int_{\varphi^{N}(0)}^{\varphi^{N-1}(\beta E_{C})=2\pi k} D\varphi^{N-1} \cdots \int_{\varphi^{N}(0)}^{\varphi^{N-1}(\beta E_{C})=2\pi k} D\varphi^{1}$$
(10)

เมื่อ k เป็นตัวเลขไวน์ดิง (Winding Number) และ  $S[\varphi(\tau)] = S_C[\varphi(\tau)] + S_T[\varphi(\tau)]$  เป็นกริยา (Action) ของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งประกอบด้วยกริยาคูลอมบ์ (Coulomb Action;  $S_C[\varphi(\tau)]$ ) เป็นไปตามสมการ

$$S_T\left[\varphi(\tau)\right] = -g \int_0^{\beta E_C} d\tau \int_0^{\beta E_C} d\tau' \alpha(\tau - \tau') \cos(\varphi(\tau) - \varphi(\tau')) \quad (11)$$

โดยที่  $n_G = V_G C_G / e$  และกริยาการทะลุผ่าน (Tunneling Action;  $S_T \left[ \varphi(\tau) \right]$ ) เป็นไปตามสมการ

$$S_T\left[\varphi(\tau)\right] = -g \int_0^{\beta E_C} d\tau \int_0^{\beta E_C} d\tau' \alpha \left(\tau - \tau'\right) \cos\left(\varphi(\tau) - \varphi(\tau')\right)$$
(12)

เมื่อ  $g = G_d / G_o$  เป็นความนำไฟฟ้าแบบไม่มีหน่วยของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวที่อุณหภูมิสูง ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ที่แสดงความแรงของการเกิดปรากฏการณ์การทะลุผ่าน (Strength Tunneling Phenomena) เมื่อ  $G_o = e^2 / h$  เป็นความนำไฟฟ้าควอนตัม โดยที่ h เป็นค่าคงที่ของพลังค์ (Planck's Constant) [20] และเคอร์เนลการทะลุผ่าน (Tunneling Kernel) เป็นไปตามสมการ

$$\alpha(\tau - \tau') = \frac{1}{4(\beta E_C)^2 \sin^2\left(\frac{\pi}{\beta E_C}(\tau - \tau')\right)}$$
(13)

สมการ (7) แสดงถึงความสัมพันธ์ของออโต คอร์รีเลชันฟังก์ชันกับสเปคตรัลฟังก์ชันแบบ สมมาตร ซึ่งเป็นผลของการแปลงฟูเรียร์ (Fourier Transform) ระหว่างสองฟังก์ชัน และในสมการ (8) พบว่า ออโตคอร์รีเลชันฟังก์ชัน  $A(\tau)$  ไม่สามารถ คำนวณได้โดยตรง เนื่องจากไม่สามารถจัดพจน์ ของการคำนวณปริพันธ์ให้อยู่ในรูปการคำนวณ ปริพันธ์แบบเกาส์เซียน (Gaussian Integral) ดังนั้น ในงานวิจัยนี้จึงใช้วิธีการควอนตัมมอนติ คาร์โลในการคำนวณค่าออโตคอร์รีเลชันฟังก์ชัน ในสมการ (8) จากนั้น นำค่าออโตคอร์รีเลชันฟังก์ชัน ไปคำนวณค่าสเปคตรัลฟังก์ชันแบบสมมาตร ตามสมการ (7) ด้วยวิธีซิงค์กูลาร์วาลูดีคอมโพสิชัน (Singular Value Decomposition) [20] ซึ่งเป็น วิธีการหนึ่งที่นิยมใช้ในการหาผลเฉลยปัญหา แบบผันกลับ (Inverse Problem) จากนั้นนำค่า สเปคตรัลฟังก์ชันไปแทนในสมการ (6) ก็จะได้ค่า ความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว เมื่อนำค่าความนำไฟฟ้าตามสมการ (6) และความนำความร้อนของทรานซิสเตอร์ อิเล็กตรอนเดี่ยวตามสมการ (4) แทนลงในสมการ (3) จะได้ค่ากำลังความร้อนของทรานซิสเตอร์ อิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งผลการวิจัย จะได้แสดง ในหัวข้อต่อไป

## ผลการวิจัย

# ความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์ อิเล็กตรอนเดี่ยว

ในลำดับแรก เพื่อตรวจสอบผลการคำนวณ เบื้องต้น งานวิจัยนี้ได้เปรียบเทียบผลการคำนวณ ความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว ที่ได้จากวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลและทฤษภู การรบกวนลำดับที่สอง ดังแสดงในภาพที่ 2 ซึ่งสามารถแบ่งการพิจารณาออกได้เป็นสอง กรณีดังต่อไปนี้ ในกรณีของพารามิเตอร์  $g \leq 1$ ค่าความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอน เดี่ยวที่ได้จากทั้งสองวิธีมีค่าใกล้เคียงกันแสดงดังใน ภาพที่ 2 (ก) และ (ข) ดังนั้น สามารถกล่าว ได้ว่า ในช่วงการทะลุผ่านแบบอ่อน ผลการคำนวณ ทั้งสองวิธีให้ผลเช่นเดียวกัน แต่อย่างไรก็ตาม ในภาพที่ 2 (ค) (ง) (จ) และ (ฉ) ซึ่งเป็น กรณีของการทะลุผ่านแบบแข็ง พบว่า ผลการ เปรียบเทียบค่าความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์ อิเล็กตรอนเดี่ยวที่คำนวณได้จากทั้งสองวิธีมีค่า แตกต่างกันอย่างชัดเจน ซึ่งสอดคล้องกับงานวิจัย ของวอลลิเซอร์ และคณะ [8] ที่ได้แสดงให้เห็นว่า ทฤษฎีการรบกวนไม่สามารถอธิบายผลการทดลอง ในกรณีที่พารามิเตอร์ g≫1 แต่วิธีการควอน ตัมมอนติคาร์โลสามารถอธิบายผลการทดลองได้

ต่อค่ากำลังความร้อนของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งรายละเอียดได้แสดงดังต่อไปนี้

ตลอดทุกช่วงของพารามิเตอร์ g ผลการคำนวณ ความนำไฟฟ้าที่เปลี่ยนแปลงไปนี้จะส่งผลโดยตรง



ภาพที่ 2 ความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวที่ βE<sub>c</sub> = 10.0
ซึ่งคำนวณจากวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล (□) และทฤษฎีการรบกวนลำดับที่สอง (-)
เมื่อ (ก) พารามิเตอร์ g = 0.5 (ข) g = 1.0 (ค) g = 3.0 (ง) g = 5.0
(จ) g = 7.0 และ (ฉ) g = 9.0 ตามลำดับ

อิเล็กตรอนเดี่ยวขึ้นอยู่กับพารามิเตอร์ n<sub>G</sub> และสามารถเป็นได้ทั้งค่าลบและค่าบวก ซึ่งเป็น ผลเนื่องมาจากชนิดของพาหะข้างมาก (Majority Carrier) ของระบบ กล่าวคือ เมื่อกำลังความร้อน มีค่าเป็นลบแสดงว่าชนิดของพาหะข้างมาก ที่ถูกส่งผ่านระบบ คือ อิเล็กตรอน แต่เมื่อกำลัง ความร้อนมีค่าเป็นบวก ชนิดของพาหะข้างมาก ที่ถูกส่งผ่านระบบ คือ โฮล นอกจากนี้ ในกรณี ของพารามิเตอร์ g < 1 ค่ากำลังความร้อนของ ทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวที่คำนวณได้จาก

# 2. กำลังความร้อนของทรานซิสเตอร์ อิเล็กตรอนเดี่ยว

เมื่อนำค่าความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์ อิเล็กตรอนเดี่ยวที่คำนวณได้จากวิธีการควอนตัม มอนติคาร์โลตามสมการ (6) ไปแทนลงในสมการ (3) พบว่า ค่ากำลังความร้อนของทรานซิสเตอร์ อิเล็กตรอนเดี่ยวขึ้นอยู่กับพารามิเตอร์ g และ βE<sub>c</sub> จากภาพที่ 3 ที่ได้แสดงกำลังความร้อน ในกรณีที่พารามิเตอร์ g มีค่าแตกต่างกัน พบว่า ค่ากำลังความร้อนของทรานซิสเตอร์

ลิมิตที่ g มีค่าน้อยกว่าหนึ่ง กล่าวคือ มีขอบเขต
ในช่วงการทะลุผ่านแบบอ่อน แสดงได้ดังภาพที่
3 (ค) (ง) (จ) และ (ฉ) ตามลำดับ
และเมื่อพารามิเตอร์ g มีค่าเพิ่มขึ้น ค่าของกำลัง
ความร้อนของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวมีค่า
ลดต่ำลง ซึ่งลักษณะดังกล่าวเกิดจากพารามิเตอร์
g ส่งผลอย่างเด่นชัดต่อการเกิดปรากฏการณ์การ
ทะลุผ่าน ด้วยเหตุผลนี้ พารามิเตอร์ g จึงเป็น
พารามิเตอร์ที่ใช้แสดงความแรงของการทะลุผ่าน
(Strength Tunneling)

วิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลมีค่าใกล้เคียงกับการ คำนวณที่ได้จากทฤษฎีการรบกวนลำดับที่สอง แสดงได้ดังภาพที่ 3 (ก) และ (ข) ตามลำดับ ซึ่งสามารถกล่าวได้ว่า ในช่วงการทะลุผ่านแบบอ่อน วิธีการคำนวณทั้งสองสามารถคำนวณค่ากำลัง ความร้อนของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว ได้ผลเช่นเดียวกัน แต่ในกรณีของพารามิเตอร์ g>1 จากผลการเปรียบเทียบพบว่า ทั้งสอง วิธีมีค่าแตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญ เนื่องจาก ทฤษฎีการรบกวนเป็นผลที่ได้จากการประมาณใน



ภาพที่ 3 กำลังความร้อนของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวที่อุณหภูมิ βE<sub>c</sub> = 10.0
 ซึ่งคำนวณจากวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล (□) และทฤษฏีการรบกวนลำดับที่สอง (-)
 เมื่อ (n) พารามิเตอร์ g = 0.5 (ข) g = 1.0 (ค) g = 3.0
 (ง) g = 5.0 (จ) g = 7.0 และ (ฉ) g = 9.0 ตามลำดับ

ทั้งสองวิธีมีค่าแตกต่างอย่างชัดเจน นอกจากนี้ กำลังความร้อนมีความสมมาตรรอบจุด  $n_G = 0.5$ เนื่องจากจุดดังกล่าวเป็นตำแหน่งการเปลี่ยน ชนิดของพาหะข้างมากที่เกิดการส่งผ่านในระบบ และเมื่อ  $\beta E_C$  มีค่าเพิ่มขึ้น ขนาดของกำลังความ ร้อนของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวมีค่าเพิ่มขึ้น ตามไปด้วย ซึ่งลักษณะดังกล่าวเกิดจาก เมื่ออุณหภูมิมีค่าลดต่ำลงจะส่งผลให้ค่าความนำไฟฟ้า ของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวมีค่าลดต่ำลง ทำให้ค่ากำลังความร้อนมีค่าเพิ่มขึ้น

จากภาพที่ 4 แสดงผลการคำนวณกำลัง ความร้อนในช่วงการเกิดปรากฏการณ์การทะลุ ผ่านแบบแข็งที่อุณหภูมิมีค่าแตกต่างกัน พบว่า เมื่อ  $\beta E_c = 1$  กำลังความร้อนที่ได้จากการคำนวณ ทั้งสองวิธีมีค่าเท่ากัน กล่าวคือ มีค่าเท่ากับศูนย์ และกำลังความร้อนมีค่าไม่ขึ้นกับแรงดันไฟฟ้า ขั้วเกต แสดงว่าภายใต้เงื่อนไขดังกล่าวตามภาพที่ 4 (ก) ไม่มีปรากฏการณ์ขัดขวางแบบดูลอมบ์ เกิดขึ้นในระบบ แต่เมื่อ  $\beta E_c \gg 1$  กำลังความร้อน มีค่าขึ้นกับแรงดันไฟฟ้าขั้วเกตอย่างเด่นชัด และค่ากำลังความร้อนที่ได้จากการคำนวณ



**ภาพที่ 4** กำลังความร้อนของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวที่พารามิเตอร์ g = 5.0 ซึ่งคำนวณจากวิธีการควอนตัมมอน-ติคาร์โล (□) และทฤษฎีการรบกวนลำดับที่สอง (-) เมื่อ (ก) βE<sub>c</sub>=1.0 (ข) βE<sub>c</sub>=10.0 (ค) βE<sub>c</sub>=15.0 และ (ง) βE<sub>c</sub>=20.0 ตามลำดับ

ทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวสามารถนำผล การคำนวณดังกล่าว ไปใช้คริบายการเกิด ปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์ได้ กล่าวคือ ค่ากำลังความร้อนมีค่าเป็นศูนย์ที่ตำแหน่ง *n<sub>G</sub>* = 0 ซึ่งเป็นผลเนื่องมาจากระดับศักย์ไฟฟ้า เคมี (Chemical Potential) ของขั้วไฟฟ้ากับ ระดับพลังงานที่ว่างบนเกาะโลหะมีค่ามากกว่า พลังงานการเพิ่มประจุ ทำให้ไม่เกิดการส่งผ่าน ประจุ แต่เมื่อแรงดันไฟฟ้าขั้วเกตมีค่าเพิ่มขึ้น กล่าวคือ  $0 < n_G < 0.5$ ระดับพลังงานที่ว่าง านเกาะโลหะจะมีค่าลดต่ำลงและเข้าใกล้ระดับ ศักย์ไฟฟ้าเคมีของขั้วไฟฟ้า ทำให้อิเล็กตรอน สามารถทะลุผ่านระบบได้มากขึ้นโดยลำดับ และเมื่อ n<sub>G</sub> = 0.5 กำลังความร้อนจะมีค่าเป็นศูนย์ ซึ่งเป็นผลเนื่องมาจาก ระดับพลังงานที่ว่างบน เกาะโลหะมีค่าเท่ากับระดับศักย์ไฟฟ้าเคมีของขั้ว ใฟฟ้า ทำให้อิเล็กตรอนและโฮลมีโอกาสแพร่เข้า และออกจากระบบได้เท่ากัน แต่เมื่อ 0.5 < n<sub>G</sub> < 1 ค่ากำลังความร้อนมีค่าเป็นบวก ซึ่งเป็นผลเนื่องมาจาก ระดับพลังงานที่ว่างบนเกาะโลหะมีค่าต่ำกว่า ระดับศักย์ไฟฟ้าเคมีของขั้วไฟฟ้า ทำให้โฮลกลายเป็น พาหะข้างมากที่เกิดการทะลุผ่านส่งผลให้กำลัง ความร้อนมีค่าเป็นบวก

## สรุปและอภิปรายผล

จากผลการคำนวณกำลังความร้อนของ ทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวด้วยวิธีการควอนตัม มอนติคาร์โลสามารถสรุปผลการคำนวณได้ ดังต่อไปนี้ ในกรณีของการทะลุผ่านแบบอ่อน กล่าวคือ g≤1 ผลการคำนวณกำลังความร้อน ที่ได้จากวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลมีค่าใกล้เคียง กับค่าที่คำนวณได้จากทฤษฎีการรบกวน ลำดับสอง แต่ในกรณีของช่วงการทะลุผ่านแบบแข็ง กล่าวคือ g > 1 ค่าของกำลังความร้อนที่คำนวณ ได้จากวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โลมีค่าแตกต่าง จากการคำนวณที่ได้จากทฤษฎีการรบกวน ลำดับที่สองอย่างมีนัยสำคัญ เนื่องจากทฤษฎี การรบกวนอธิบายได้เฉพาะในกรณีของการ ทะลูผ่านแบบอ่อน นอกจากนี้ ในช่วงการเกิด ปรากฏการณ์การทะลุผ่านแบบแข็ง พบว่า เมื่อ  $\beta E_{c} = 1$  กำลังความร้อนของทรานซิสเตอร์ อิเล็กตรอนเดี่ยวมีค่าไม่ขึ้นกับแรงดันไฟฟ้าขั้วเกต แต่เมื่อ  $\beta E_c \gg$ ่า กำลังความร้อนมีค่าขึ้น กับแรงดันไฟฟ้าขั้วเกต ซึ่งน่าจะเกิดเนื่องจาก ปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์ นอกจากนี้ เมื่อ βE<sub>c</sub> มีค่าเพิ่มขึ้น ขนาดของกำลังความร้อน ของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวมีค่าเพิ่มขึ้น จากผลการคำนวณค่ากำลังความร้อนของ

### เอกสารอ้างอิง

- [1] Grabert, H.; and Devoret M. (1992). Single Charge Tunneling. New York: Plenum Press.
- [2] Selberherr S. (2001). Computational Microelectronics. New York: Springer-Verlag Wien.
- [3] Tero, T. (2013). The Physics of Nanoelectronics Transport and Fluctuation Phenomena at Low Temperatures. United Kingdom: Oxford.
- [4] Fulton, T. A.; and G. J. Dolan. (1987). Observation of Single-Electron Charging Effects in Small Tunnel Junctions. *Phys. Rev. Lett.* 59(1): 109-112.
- [5] Kakade, S. (2012). Supersensitive Electrometer and Electrostatic Data Storage using Single Electron Transistor. International Journal of Electronics and Communication Engineering. 591-596.

- [6] Likharev, K. (1999). Single-Electron Devices and Their Applications. Proceedings of the IEEE. 87(4): 606-632.
- [7] Lafarge, P., Pothier, H., Williams, E., Esteve, D., Urbina, C.; and Devoret, M. (1991).
   Direct Observation of Macroscopic Charge Quantization. *Zeitschrift fur Physik B* Condensed Matter. 85(3): 327-332.
- [8] Wallisser, C., Limbach, B., Stein, P.V, Schäfer, R., Theis, C., Göppert, G.; and Grabert, H. (2002). Conductance of the Single-Electron Transistor: a Comparison of Experimental Data with Monte Carlo Calculations. *Physical Review B*. 66(12): 1-8.
- [9] Kubala, Björn.; and Jürgen König. (2006). Quantum-Fluctuation Effects on the Thermopower of a Single-Electron Transistor. *Physical Review B.* 19(73): 195316.
- [10] Kubala, Björn, Jürgen König.; and Jukka Pekola. (2008). Violation of the Wiedemann-Franz
   Law in a Single-Electron Transistor. *Physics. Review. Letters.* 6(100): 066801.
- [11] Matveev, K. A.; and A. V. Andreev. (2002). Thermopower of a Single-Electron Transistor in the Regime of Strong Inelastic Cotunneling. *Physical Review B.* 4(66): 045301.
- [12] Hicks, L. D.; and M. S. Dresselhaus. (1993). Effect of Quantum-Well Structures on the Thermoelectric Figure of Merit. *Physical Review B.* 19(47): 12727-12731.
- [13] Ramos, E.; et al. (2014). The Thermoelectric Figure of Merit for the Single Electron Transistor. International Journal of Thermal Sciences. (86): 387-393.
- [14] Xu, Wei-Ping; et al. (2016). Thermoelectric Effects in Triple Quantum Dots Coupled to a Normal and a Superconducting Leads. *Physics Letters A.* 8(380): 958-964.
- [15] Dóra, Baluzs. (2006). Wiedemann-Franz Law in the SU(N) Wolff Model. Physical Review B. 16(74).
- [16] Vineis, Christopher J.; et al. (2010). Nanostructured Thermoelectrics: Big Efficiency Gains from Small Features. Advanced Materials. 36(22): 3970-3980.
- [17] Chi, Feng; et al. (2011). Thermoelectric Effect in a Serial Two-Quantum-Dot. Physics Letters A. 10(375): 1352-1356.
- [18] Patton, Bruce R. (2001). Solid State Physics: Physics Today. 10(54): 70-72.
- [19] Tauc J. (1954). Theory of Thermoelectric Power in Semiconductors. *Physics. Review.* 6(95): 1394-1394.
- [20] Christoph Theis. (2004). Conductance of Single Electron Devices from Imaginary-Time Path Integrals. Dissertation, Ph.D. (Mathematics and Physics). Freiburg: Albert Ludwigs University Freiburg.
- [21] Metropolis N.; and Ulam S. (1949). The Monte Carlo Method. Journal of the American Statistical Association. 44(247): 335-341.