

LATVIJAS UNIVERSITĀTE  
FIZIKAS UN MATEMĀTIKAS FAKULTĀTE  
FIZIKAS NODAĻA

**NELĪDZSVARA ELEKTRONU ENERĢIJAS SADALĪJUMA  
FUNKCIJAS MODELĒŠANA PERIODISKI MODULĒTAJAM  
KVANTU PUNKTAM**

MAĢISTRA DARBS

Autors: **Antons Baronovs**

Studenta apliecības Nr.: ab11400

Darba vadītājs: asociētais profesors Dr.phys.Vjačeslavs Kaščejevs

RĪGA 2017

# Anotācija

Nanoelektroniskās ierīcēs ir plaši izmantojams kvantu punkts, kura īpašības ir atkarīgas no elektronu sadalījuma pa kvantu punkta enerģētiskajiem līmeņiem. Tunelēšanas procesi kvantu punktā bieži vien notiek režīmā, kurā elektroni nespēj relaksēt līdzsvara stāvoklī, kas var ietekmēt darbības efektivitāti. Otrais nozīmīgs faktors, ko mēs gribam ņemt vērā, ir elektronisko līmeņu spektra diskrēta daba, kas ietekmē sadalījuma formu. Šo divu efektu ietekme tiek izpētīta mūsu darbā, modelējot kvantu punkta-tunelbarjeras-kontakta sistēmu ar Kinētisko Montekarlo metodi. Tiek simulēti elektronu nelīdzsvarotie sadalījumi kvantu punktā ar diskrēto līmeņu spektru, kas ļauj pētīt šo faktoru ietekmi uz nanoelektronisko ierīču darbības precizitāti.

## **Atslēgvardi:**

Kvantu punkts, tunelēšana, elektronu uzlādes kontrasts, nelīdzsvara elektronu sadalījums, Fermī-Diraka sadalījuma q-analogs, Kinētiskā Montekarlo metode.

# Annotation

Quantum dot is a widely used part of various nanoelectronic devices. Properties of the dot are dependent on the distribution of electrons amongst its energy levels. Tunneling processes to and from the dot often happen so fast that this distribution is unable to relax into its equilibrium form, which can lower the effectiveness of device. Second effect, which we would like to take into consideration, is discreteness of dot energy spectrum, which affects electron distribution. We use Kinetic MonteCarlo method to get an insight on how these effects operate in the quantum dot-tunnel barrier-lead model. We simulate non-equilibrium electronic distribution in the quantum dot with discrete spectrum, which gives an opportunity to study how those factors affect precision of nanoelectronic devices.

**Keywords:**

Quantum dot, tunneling, contrast of electron loading, non-equilibrium electronic distribution, q-analog of Fermi-Dirac distribution, Kinetic Monte Carlo method

# Saturs

<b>Apzīmējumu saraksts</b> . . . . .	<b>6</b>
Konstantes . . . . .	6
Kontakts . . . . .	6
Kvantu punkts . . . . .	6
Tunelēšana . . . . .	7
Modelēšana . . . . .	7
<b>Ievads</b> . . . . .	<b>9</b>
Pētījuma mērķis . . . . .	9
Uzdevumi . . . . .	11
Darba struktūra . . . . .	11
<b>1 Teorija</b> . . . . .	<b>13</b>
1.1 Kvantu punkts . . . . .	14
1.2 Tunelēšana . . . . .	16
1.2.1 Laika raksturīgie mērogi . . . . .	16
1.2.2 Kinētiskie vienādojumi . . . . .	17
1.2.3 Tunelēšanas ātrumi individuālajiem līmeņiem . . . . .	19
1.3 Kvantu punkta uzlādes efektivitātes ierobežojumi . . . . .	22
1.4 Fermī-Diraka funkcijas q-analogs . . . . .	24
1.5 Kinētiskā Montekarlo metode . . . . .	26
<b>2 Modelēšana un rezultāti</b> . . . . .	<b>28</b>
2.1 Kinētiskā Montekarlo metodes implementācija mūsu modelī . . . . .	28
2.1.1 Līmeņu ķīmisko potenciālu un apdzīvotību inicializācija . . . . .	28
2.1.2 Stāvokļu pārejas ātrumi . . . . .	30
2.1.3 Pārejas laika noteikšana . . . . .	31
2.1.4 Rezultātu iegūšana . . . . .	32
2.2 Vienkāršs robežgadījums . . . . .	33
2.2.1 Analītiskais atrisinājums . . . . .	34
2.2.2 Skaitliskais atrisinājums . . . . .	36
2.3 Kvantu punkta apdzīvotība . . . . .	38
2.3.1 Rezultātu periodiskums . . . . .	38

2.3.2 Kontrasta ierobežojumi . . . . .	40
2.4 Kvantu punkta elektronu sadalījuma funkcija . . . . .	43
2.4.1 Mazas temperatūras . . . . .	43
2.4.2 Lielas temperatūras . . . . .	47
<b>Secinājumi . . . . .</b>	<b>48</b>
<b>Pateicības . . . . .</b>	<b>51</b>
<b>Literatūra . . . . .</b>	<b>51</b>
<b>Pielikumi . . . . .</b>	<b>53</b>
Pielikums A . . . . .	54
Pielikums B . . . . .	55
Pielikums C . . . . .	57

# Apzīmējumu saraksts

## Konstantes

- $k_B$  - Bolcmaņa konstante
- $h$  - Planka konstante
- $q_e$  - elektrona lādiņš

## Kontakts

- $\mu$  - kontakta ķīmiskais potenciāls
- $T$  - kontakta temperatūra
- $f(\epsilon)$  - elektronu sadalījuma funkcija kontaktā (Fermī-Diraka funkcija)

## Kvantu punkts

- $n$  - elektronu skaits punktā
- $E_n$  - kvantu punkta ar  $n$  elektroniem enerģija
- $U_n$  - vidēja lauka elektrostatiskā enerģija kvantu punktam ar  $n$  elektroniem
- $C$  - kvantu punkta kapacitāte
- $E_C = \frac{q_e^2}{C}$  - uzlādes enerģija
- $\nu_i^\alpha$  - līmeņa  $i$  apdzīvotība stāvoklī  $\alpha$  (0 vai 1)
- $\epsilon_i$  -  $i$ -ta līmeņa enerģija, mērot no kvantu punkta pirmā līmeņa enerģijas -  $\epsilon_1 = 0$
- $\delta\epsilon$  - starplīmeņu attālums kvantu punktā
- $\mu_i^n$  -  $i$ -ta līmeņa ķīmiskais potenciāls  $n$ tā elektronu pievienošanai kvantu punktam

- $P_n(t)$  - varbūtība, ka kvantu punktā ir  $n$  elektroni
- $K_n(\tau_l) = \max[\{P_n(t \in \tau_l)\}] - \min[\{P_n(t \in \tau_l)\}]$  -  $n$ tā elektrona ielādes kvantu punktā kontrasts
- $Z_n$  - kanoniskā statistiskā summa  $n$  elektroniem
- $T_{QD}(t)$  - elektronu gāzes temperatūra Kvantu punktā

## Tunelēšana

- $G$  - tunelbarjeras vadāmība
- $V(t)$  - pieliktais spriegums
- $A$  - sprieguma amplitūda (eV)
- $\tau$  - sprieguma modulācijas periods
- $\gamma$  - vienelektrona līmeņa stāvokļa sabrukšanas ātrums
- $w_i^\pm(t)$  - ielādes/izlādes tunelēšanas ātrums *tunneling rate* līmenim  $i$
- $W_n^\pm(t)$  - ielādes/izlādes ātrums *tunneling rate* kvantu punktā  $n$ -tajam elektronam

## Modelēšana

- $k$  - simulācijas solis
- $k_f$  - simulācijas pēdējais solis
- $t_k$  - laiks simulācijā, kad sākas simulācijas solis  $k$
- $\Delta t_k$  - simulācijas soļa  $k$  garums, simulācijas laika skalā
- $\alpha_k$  - sistēmas stāvoklis simulācijas soļa  $k$  sākumā
- $s$  - simulācijas numurs
- $S$  - simulāciju skaits. Par standartu simulāciju skaitu izvēlamies  $S = 1000$
- $r$  - gadījuma skaitlis
- $P_\alpha(t)$  - sistēmas varbūtība atrasties stāvoklī  $\alpha$
- $P_\alpha^{KMK}(t)$  - sistēmas varbūtība palikt stāvoklī  $\alpha$  pēc laika  $t$ .  $P_\alpha^{KMK}(0) \equiv 1$

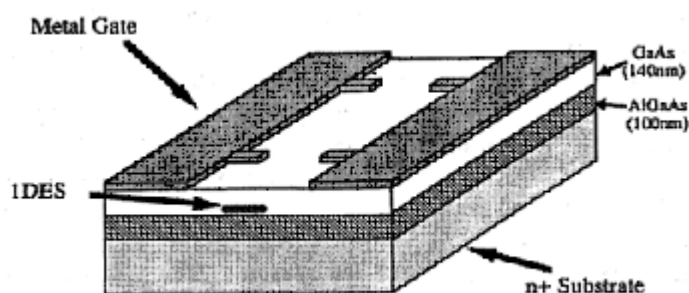
- $W_{\alpha\beta}$  - pārejas ātrums no stāvokļa  $\beta$  uz stāvokli  $\alpha$
- $W_{\alpha}$  - stāvokļa  $\alpha$  sabrukšanas ātrums
- $m$  - simulēto līmeņu skaits

# Ievads

## Pētījuma mērķis

Kvantu punkts ir viens no nanotehnoloģiju pamatelementiem - objekts, kura raksturīgie izmēri visās telpiskās dimensijās ir pietiekami mazi, lai atļauto elektronu enerģētisko līmeņu spektrs būtu diskrets (nodaļa 1.1). To ir iespējams izmantot kā avotu elektroniem un fotoniem ar noteiktu enerģiju. No pārējiem elementiem kvantu punkts ir atdalīts ar izolatora slāņiem, kas, ja tie ir pietiekami plāni, var kalpot par tunelēšanas barjerām.

Tiek izdalīti divi kvantu punktu tipi: pusvadītāju un metāliskie. Pusvadītāju kvantu punktos elektronu skaits ir mazs, un ir iespēja "izsmelt" visus elektronus. Viens no veidiem kā realizēt tādu kvantu punktu ir izmantot tādu pusvadītāju slāņu kombināciju, kurā vienā no robežām veidojas divdimensionāla elektronu gāze, kura iespējams izveidot kvantu punktu ar litogrāfijas palīdzību (2)(Att.1). Metālos lādiņu koncentrācija ir krietni lielāka (katrs atoms ir elektrona donors), tāpēc kvantu punktā ir vienmēr daudz elektronu. Šo kvantu punktu izpētē veicina lielu interesi, jo to izveide var būt ļoti vienkārša - metāliskas nanodaļiņas tiktu pārklātas ar izolējošo slāni. Šobrīd tiek pētīta iespēja veidot no stohastiski izvietotām dažāda izmēra metāliskām daļiņām loģiskas ierīces, apmācot tos ar ģenētiskiem algoritmiem (14).



Att. 1: Pusvadītāja kvantu punkta realizācijas piemērs. Attēls no (5)

Pie pietiekami mazas ierīces temperatūras un lielas tunelēšanas barjeru elektriskās pretestības (nodaļa 1.2) kvantu punkts atrodas Kulona blokādes režīmā. Šī režīmā papildus elektrona pievienošana prasa papildus enerģiju, kas ir pietiekami liela, lai punkta uzlādēšanu ar papildus elektronu varētu kontrolēt, modulējot kvantu punkta ķīmisko potenciālu ar pielikto spriegumu.

Tas ļauj ar lielu precizitāti zināt elektronu skaitu kvantu punktā katrā laika brīdī, kas dod iespēju taisīt ierīces ar ļoti precīzi kontrolētām strāvām:

$$I = Nq_e/\tau \quad (1)$$

Kur  $\tau$  ir sprieguma modulācijas periods, bet  $N$  ir elektronu skaits, kas iziet cauri kvantu punktam vienā modulācijas periodā.

Lai šīs strāvas būtu izmantojamas (piemēram kā Ampēra etalons), tām jābūt pietiekami lielām (simtiem pA), lai tos būtu iespējams reģistrēt. Tajā pašā laikā ir jā saglabā uzlādēšanas precizitāti ap 0.01 ppm (11) jeb viena uzlādēšanas kļūda uz 100 miljonu cikliem.

Modulācijas frekvences palielinājums ir loģisks solis, lai palielinātu strāvu, toties var radīt problēmas ar elektrona ielādes/izlādes precizitāti. Viens no šīs neprecizitātes iespējamiem iemesliem ir nelīdzsvara elektronu sadalījums kvantu punktā.

Līdzsvarā elektronu sadalījums kvantu punktā, kas ir savienots ar elektronu rezervuāru ar tunelēšanas barjeru, pakļaujas lielā kanoniskā ansambļa statistikai, kas paredz noteikto sadalījuma formu (6). Pie augstām frekvencēm, kad elektronu gāzē nav iespējas iestāties līdzsvaram, šis sadalījums neizpildās, kas var ietekmēt uzlādes efektivitāti.

Lai apzinātos, kā nelīdzsvara sadalījums ietekmē procesus jāatrod metodes, kas ļautu pētīt atsevišķo līmeņu kvantu punktā apdzīvotības. Šo uzdevumu var risināt izmantojot kinētiskus vienādojumus (nodaļa 1.2.2), bet to izmantošana kļūst neiespējama pie liela līmeņu skaita, jo uzdevuma sarežģītība dramatiski pieaug. Vienādojumu skaits ir vienāds ar visam iespējamam elektronu-caurumu konfigurācijām pa kvantu punkta līmeņiem, kas ļoti ātri kļūst par pārāk sarežģīto uzdevumu.

Viena no izmantotām metodēm, ir pielietot kinētisko vienādojumu nevis atsevišķiem stāvokļiem, bet visai sadalījuma funkcijai, kā tiek parādīts nesen izdotajā rakstā (8). Aprakstot dažādus relaksācijas procesus (paši procesi aprakstīti nodaļā 1.2.1), kur katrs no tiem cenšas par savu sadalījuma funkcijas formu, mēs varam iegūst rezultējošo sadalījuma funkciju. Mainot procesu raksturīgo laiku attiecības, ir iespējams iegūt vairākus robežgadījumus. Šī pieeja ļauj pētīt kvantu punktu un izšķirt dažādus darbības režīmus attiecība pret raksturīgiem laikiem. Tā ir ierobežota ar to, ka raksts "fokusējas uz lieliem kvantu punktiem"(8) jeb uz gadījuma, kad starplīmeņu enerģētiskais attālums ir daudz mazāks par termiskām fluktuācijām. Kaut līmeņu spektrs fizikāli saglabā diskrēto struktūru, tā neietekmē gala rezultātus un tiek uzskatīta par efektīvi nepārtraukto.

Rakstā (15) ir aprakstīta metode, kas dod iespēju pētīt temperatūras fluktuācijas kvantu punkta elektronu sadalījumam, izmantojot skaitīšanas lauku (*counting fields*) matemātisku aparātu. Aprakstot kinētisko vienādojumu sistēmu ar skaitīšanas laukiem, ir iespējams iegūt sistēmas atrisinājumu un zemākas kārtas kumulāntus enerģijas pārnesei. Kvantu punkta elektronu gāze šajā rakstā vienmēr atradās iekšējā līdzsvarā (Fermī-Dīraka sadalījumā), kas nozīmē, ka pārnese-

ta enerģija liek elektronu gāzes temperatūrai mainīties. Tāda veidā tiek iegūta informācija par elektronu sadalījuma temperatūru, ar kuru var iegūt ieskatu līmeņu apdzīvotības statistikā.

Abas metodes apskatā situācijas, kad starplīmeņu attālums kvantu punktā ir krietni mazāks par jebkuru citu enerģiju sistēma. Tas nozīmē, ka nav iespējas pētīt efektus, kas izritētu no kvantu punkta diskrētas dabas, jo rakstos izmantots sadalījums ir efektīvi nepārtraukts. Šajā darbā mēs gribam izstrādāt metodi, kas ļautu pētīt šos diskrētus efektus, un ar tās palīdzību izpētīt elektronu nelīdzsvara sadalījumus kvantu punktā.

## Uzdevumi

1. Formulēt uzlādes-izlādes procesa matemātisko modeli. Aprakstīt modelī ietvertus elementus: kvantu punkts, kontakts, tuneļbarjera; aprakstīt tunelēšanas procesus starp punktu un kontaktu un to atbilstību Markova procesiem.
2. Ar kinētisko vienādojumu aparātu iegūt atrisinājumus vienkāršajā robežgadījumā (divi līmeņi, viens elektrons) un pārlicināties, ka līdzsvara atrisinājumi atbilst lielajām kanoniskajām ansamblim.
3. Pielietot šim modelim Kinētisko Montekarlo metodi, lai skaitliski aprakstīt sarežģītākus modeļus. Pārbaudīt šīs metodes realizācijas korektumu vienkāršā robežgadījumā, salīdzinot ar kinētisko vienādojumu atrisinājumiem.
4. Izmantojot Kinētisko Montekarlo metodi, izpētīt dažādu faktoru (modulācijas amplitūda, temperatūra utt.) ietekmi uz uzlādes-izlādes efektivitāti
5. Izpētīt elektronu sadalījuma relaksāciju dažādos ierīces darbības režīmos. Pārbaudīt, ka pie pietiekami liela starplīmeņu attāluma kvantu punktā, līdzsvara funkcija ir Fermī sadalījuma  $q$ -analog (q-funkcija).

## Darba struktūra

Teorētiska darba daļa sākas ar nodaļu 1.1, kur mēs aprakstam vairāku līmeņu kvantu punkta matemātisko modeli un, savienojot to ar kontaktu ar tunelēšanas procesu aprakstu nodaļā 1.2 izveidojam matemātisko modeli mūsu problēmai, ka arī aprakstam kinētisko vienādojumu sistēmas metodi un ierobežojumus tās pielietošanai mūsu darbā. Nodaļā 1.3 tiek ieviesti bezdimensionāli parametri, kas ļauj aprakstīt ierīces darbības režīmus; izmantojot tos, tiek aprakstīti efekti, kas ierobežo izlādes/uzlādes kontrastu robežgadījumā, kad modulācijas amplitūda ir daudz mazāka par starplīmeņu attālumu. Nodaļā 1.4 tiek pārstāstīts Vjačeslava Kaščejeva raksts, kurā tiek ieviests Fermī funkcijas  $q$ -analog (q-funkcija), fermionu gāzes ar fiksēto daļiņu skaitu sadalījums uz līmeņiem ar galīgi lielu starplīmeņu attālumu. Nodaļā 1.5, pēc A.P.J.Jansen

raksta, tiek aprakstīta Kinētiskā Montekarlo metode, kuras implementāciju mūsu darbā mēs at-  
runājam nodaļā 2.1 ar kuru sākas darba modelēšanas un rezultātu daļa.

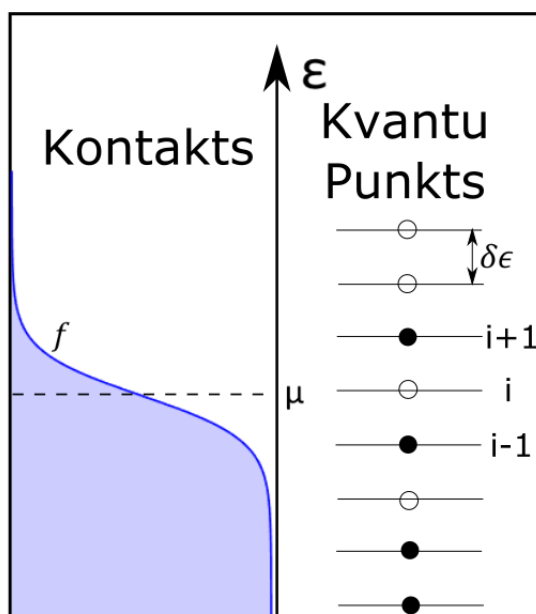
Nodaļā 2.2 mēs pielietojam Montekarlo metodi vienkāršajām robežgadījumam, kurā varam pār-  
liecināties gan par kinētisko vienādojumu analītisko atrisinājumu sakritību ar lielo kanonisko  
ansambli, gan par skaitliskās metodes rezultātu ekvivalenci kinētisko vienādojumu rezultātiem.

Nodaļā 2.3 mēs izpētām, kā tiek ierobežots uzlādes/izlādes kontrasts robežgadījumā, kad tu-  
nelēšana efektīvi piedalās viens elektronu līmenis, un kas mainās, samazinot  $\delta\epsilon$  līdz līdzīgas  
enerģijas kārtai. Pēdējā nodaļā 2.4, izmantojot simulāciju datus, mēs apskatām sadalījuma fun-  
kcijas pie mazām ( $\delta\epsilon \sim k_B T$ ) un lielām ( $\delta\epsilon \ll k_B T$ ) temperatūrām, kas ļauj izpētīt relaksācijas  
uz atbilstošiem sadalījumiem, un, mazo temperatūru gadījumā, arī ieskātu kā ar sprieguma mo-  
dulācijām tiek ierosināti nelīdzsvara elektronu sadalījumi.

# Nodaļa 1

## Teorija

Mūsu modelis sastāv no 3 sastāvdaļām: kvantu punkta, kontakta un tunelēšanas barjeras. Matemātiski kontakts un kvantu punkts tiek aprakstīti, ka elektronu līmeņu kopas, kur katrā līmenī ar noteikto varbūtību var atrasties elektrons. Šie varbūtības sadalījumi, kā arī ārējie faktori (pieliktais spriegums, temperatūra) pilnībā apraksta šos elementus. Tunelēšanas barjera tiek ieviesta modelī, ka elements, kas regulē tunelēšanas procesu ātrumu.



*Att. 1.1:* Mūsu modeļa skīce: kreisajā pusē kontakts ar elektronu sadalījumu  $f$  pie ķīmiska potenciāla  $\mu$ . Labajā pusē kvantu punkts ar gadījuma elektronu konfigurāciju

## 1.1 Kvantu punkts

Kvantu punkta ar  $n$  elektroniem konfigurācijas enerģija  $E_n(t)$  sastāv no vidēja lauka elektrostatiskās enerģijas  $U_n(t)$  un elektronu spektra enerģijas, kas ir atkarīga no līmeņu apdzīvotības skaitļu konfigurācijas  $\nu_i$ :

$$E_n(t) = U_n(t) + \sum_{i=1}^{\infty} \nu_i \epsilon_i \quad (1.1)$$

$$\sum_{i=1}^{\infty} \nu_i = n \quad (1.2)$$

Vidēja lauka enerģija  $U_n(t)$  ir atkarīga gan no elektronu mijiedarbības, gan no ārējiem faktoriem, ko varam sadalīt trīs daļās:

- Atgrūšanas spēki starp  $n$  elektroniem kvantu punktā
- Pielikta ārēja sprieguma daļa, kas tiek modulēta laikā -  $V(t)$
- Konstants spriegums  $U_0$ , kas sastāv no pielikta ārēja sprieguma konstantas daļas un paša materiāla potenciāla

$$U_n(t) = \frac{(nq_e)^2}{2C} - nq_e(V(t) + U_0) \quad (1.3)$$

kur pirmais loceklis (kurā  $C$  ir kvantu punkta kapacitāte) atbilst elektronu mijiedarbībai, bet otrais spriegumam un potenciālam.

Lai pievienotu papildus  $n$ to elektronu punktā, ir vajadzīga papildus (neskaitot paša elektrona) enerģija. Tā ir izmaiņa elektrostatiskajā enerģijā  $\Delta U_n(t) = U_n(t) - U_{n-1}(t)$ :

$$\Delta U_n(t) = 2\frac{nq_e^2}{2C} - q_e V(t) - \left(\frac{q_e^2}{2C} + q_e U_0\right) \quad (1.4)$$

Tā ir izmaiņa vidēja lauka enerģija, pievienojot vienu elektronu  $\Delta U/\Delta n$ , tāpēc tas ir kvantu punkta enerģētiska pamatlīmeņa ķīmiskais potenciāls. Tas ir līmenis, no kura tiek mērītas visas pārējās kvantu punkta līmeņu spektra enerģijas  $\epsilon_i$ . Kvantu punktam ir diskrēta enerģijas līmeņu kopa ( $i$ ), ko raksturo starplīmeņu attālums  $\delta\epsilon$ . Mēs pieņemam, ka mūsu modelī  $\delta\epsilon$  ir konstants laika un neatkarīgs no līmeņa enerģijas :

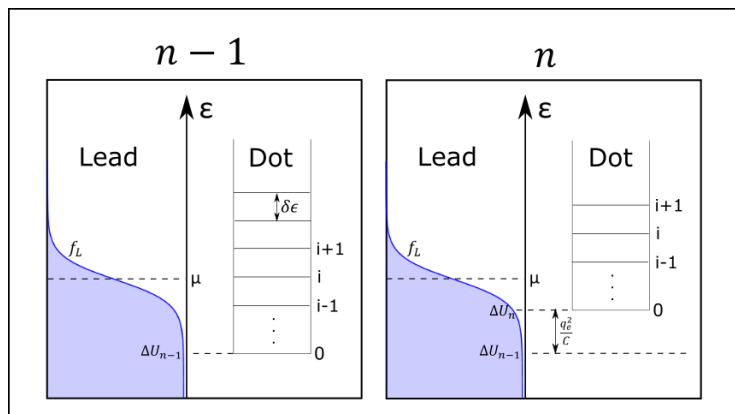
$$\mu_i^n(t) \equiv \Delta U_n(t) + \epsilon_i \quad (1.5)$$

$$\epsilon_i = (i - 1)\delta\epsilon \quad (1.6)$$

Ķīmiskie potenciāli kvantu punkta elektronu pieejamiem līmeņiem atšķiras, ja salīdzinām pārējās starp  $n - 1 \leftrightarrow n$  un  $n \leftrightarrow n + 1$  elektroniem kvantu punktā, jo papildus elektrona dēļ pieaug mijiedarbības enerģija. Lielums, par kuru pieaug līmeņu ķīmiskie potenciāli, saucas par uzlādes enerģiju  $E_C$  (2, lpp.24), kas ir atkarīga tikai no kvantu punkta pilnās kapacitātes

C. Dažos literatūras avotos šīm lielumam atbilstoša formula var atšķirties (10, lpp.212) par reizinātāju 2, ja par uzlādes enerģiju sauc nepieciešamo enerģiju, lai pievienotu vienu elektronu:

$$E_C = \Delta U_n(t) - \Delta U_{n-1}(t) = \frac{q_e^2}{C} \quad (1.7)$$



Att. 1.2: Elektroķīmisko potenciālu starpība  $n$ tā un  $n - 1$ mā elektronu ielādēm.

## 1.2 Tunelēšana

Šajā modelī ierīce strādā Kulona blokādes režīmā, kas ļauj ierobežot iespējamo elektronu skaitu kvantu punktā. Kvantu punktam ir pieejami divi stāvokļi: ar  $n - 1$  un  $n$  elektroniem tajā. Lai nodrošinātu šo režīmu, ir jāizpildās diviem nosacījumiem:

1. Termiskām fluktuācijām jābūt krietni mazākām par uzlādes enerģiju. Pretējā gadījumā,  $n + 1$  elektrona ielādei būs neniecīga varbūtība (10, lpp.214):

$$k_B T \ll E_c \quad (1.8)$$

kas izpildās, piemēram pie femtofarādu kapacitātēm un Kelvina miligrādiem (1).

2. Līdzīgi arī modulācijas amplitūdai  $A$  jābūt mazākai par uzlādes enerģiju:

$$A \ll E_c \quad (1.9)$$

Tas aizliedz iespēju uzlādēt elektronu  $n + 1$  vai pazaudēt elektronu  $n - 1$  palielinot vai samazinot spriegumu.

3. Tuneļbarjeras vadāmībai  $G$  ir jābūt mazākai nekā vadāmības kvantam  $G_Q$  (10, lpp.216), lai elektrons būtu lokalizēts kvantu punktā kādā laika brīdī. Citādāk nebūs iespējams nomērīt elektrona esamību kvantu punktā, un pazudīs lādiņa kvantizācija. Šis lielums tiek izvests no Heizenberga nenoteiktības principa (10, lpp.216):

$$G \ll \frac{q_e^2}{h} \simeq G_Q \quad (1.10)$$

### 1.2.1 Laika raksturīgie mērogi

Pieliktais spriegums ir parametrs, ar kuru mēs varam kontrolēt kvantu punkta enerģētisko līmeņu ķīmisko potenciālu attiecībā pret kontakta ķīmisko potenciālu. Lai iegūtu periodisku uzlādi-izlādi, ir vajadzīga arī sprieguma periodiska modulēšana. Šīs sprieguma modulēšanas perioda  $\tau = 1/f$  izmaiņa ir visefektīvākais veids kā darbināt vienu un to pašu ierīci dažādos darbības režīmos.

Ierīcē konkurē 3 procesi, kas ietekmē elektronu sadalījuma funkciju kvantu punktā, katrs ar tam raksturīgo laika mērogu:

- Elektron-fononu izkliede: Elektroniem un fononiem mijiedarbojoties, notiek enerģijas izkliede, un elektronu gāze nonāk termodinamiskajā līdzsvarā ar materiāla kristālisko režģi. Pēc elektron-fononu izklijes raksturīga laika  $\tau_{eph}$  elektronu gāzes temperatūra ir vienāda ar režģa temperatūru(9).
- Elektron-elektronu izkliede: Lai elektronu gāzei būtu iespējams definēt temperatūru, elektroniem, no kuriem sastāv gāze, jāatrodas termodinamiskajā līdzsvarā. Tas ir sasniedzams

pēc raksturīga laika  $\tau_{ee}$ , elektroniem mijiedarbojoties sava starpā. Elektronu gāzes iekšējais līdzsvara sadalījums ir Fermī-Diraka funkcija(9). Parasti elektron-elektronu izkliede notiek ātrāk par elektron-fononu izkliedi (3).

- Tunelēšana (ar raksturīgu laiku  $\tau_f$ ) ietekmē elektronu sadalījumu, jo vairāki elektronu tunelēšanas notikumi tiecinā to uz kaut kādu statistisku funkciju(8), ja pārējie efekti ir niecīgi. Viens no mūzu uzdevumiem būs noteikt šo funkciju ka arī to atkarību no modulācijas amplitūdas  $A$ , kontakta temperatūras  $T$  un kvantu punkta starplīmeņu attāluma  $\delta\epsilon$ .

Mēs strādāsim režīmā, kurā spriegums tiek modulēts ar periodu  $\tau$  daudz mazāku par  $\tau_{eph}$  un  $\tau_{ee}$ . Tas nozīmē, ka šo izkliežu procesu ietekme ir niecīga. Vienīgais efektīvs relaksācijas process ir tunelēšana no un uz kvantu punktu. Tas nozīmē, ka mainot  $\tau$  un  $\tau_f$  attiecību, varam izšķirt divus režīmus, ko mēs modelēsim:

1.

$$\tau_{eph} \gg \tau_{ee} \gg \tau \gg \tau_f \quad (1.11)$$

$\tau_f$  daudz mazāks par  $\tau$ , kas pakāpiena funkcijas gadījumā nozīmē, ka katrā pusperiodā, elektronu sadalījuma funkcijai paspēj relaksēt līdzsvarā. Tas ļauj meklēt atrisinājumu sadalījuma funkcijai atsevišķi katram pusperiodam.

2.

$$\tau_{eph} \gg \tau_{ee} \gg \tau \simeq \tau_f \quad (1.12)$$

$\tau_f$  ir līdzīgs modulācijas periodam  $\tau$ , kas nozīmē, ka sadalījuma funkcija nepaspēj sasniegt līdzsvaru vienā pusperiodā. Pusperiodu apdzīvotības sākumnosacījumi atšķiras, kamēr nav sasniegts periodisks atrisinājums.

## 1.2.2 Kinētiskie vienādojumi

Kinētisko vienādojumu (*Master Equation*) metode tiek plaši pielietota Markova procesu aprakstam gan klasiskajos, gan kvantu gadījumos(13). Tie ir tādi procesi, kuriem sistēmas evolūcija ir pilnībā aprakstāma ar pašreizējo stāvokli. Mūsu modelī tunelēšanas procesa iespējamība starp kontakta un kvantu punkta attiecīgajiem līmeņiem ir atkarīga no:

- Šo divu līmeņu ķīmisko potenciālu attiecības.
- Iespējas atrast elektronu tunelēšanas sākumpunktā un elektronisko caurumu tunelēšanas beigu punktā.

Tas nozīmē, ka sistēmas stāvokļu evolūcija ir atkarīga tikai no sistēmas pašreizēja stāvokļa, no šī stāvokļa nav iespējams uzzināt sistēmas trajektoriju stāvokļu telpā pagātnē. Tas dod iespēju sistēmas evolūciju aprakstīt ar matricu vienādojumu:

$$\frac{dP}{dt} = W(t) \cdot P(t) \quad (1.13)$$

kur  $dP/dt$  un  $P$  ir vektori kas ietver visu iespējamo sistēmas stāvokļu  $\{\alpha, \beta, \dots\}$  varbūtības  $\{P_\alpha, P_\beta, \dots\}$ , bet matrica  $W$  apraksta visu iespējamo pāreju  $\alpha \rightarrow \beta$  tunelēšanas ātrumus  $W_{\beta\alpha}$ .

Mūsu darbā ietvaros, kad mēs runājam par tunelēšanas ātrumu, mēs domājam par lielumu, kas raksturo tunelēšanas notikumu skaitu laikā intervālā, kas angļu valodā atbilst jēdzienam *tunneling rate* nevis *tunneling speed/velocity*, kas raksturo, cik ātri elektrons šķērso tunelbarjeru. Šo *tunneling speed* mēs pieņemām par daudz ātrāku par visiem citiem procesiem, kas nozīmē ka elektrons šķērso barjeru mūsu laika mērogos momentāni.

Kad mēs runājam par elektrona uzlādes efektivitāti, mūs interesē varbūtības tam, ka uz elektrona ir  $n$  vai  $n-1$  elektroni - atbilstoši  $P_n$  vai  $P_{n-1}$ . Citi elektronu skaita stāvokļi nav iespējami, ja izpildās Kulona blokādes nosacījumi 1.8-1.10. Tāpēc  $P_n$  un  $P_{n-1}$  veido pilnu varbūtību kopu  $P_{n-1}(t) + P_n(t) = 1$ . Varbūtība, ka kvantu punktā ir  $n$  elektroni samazinās proporcionāli tam, ka punkts jau atrodas šajā stāvoklī un palielinās proporcionāli otra stāvokļa varbūtībai:

$$\frac{dP_n}{dt} = P_{n-1}(t)W_{n-1}^+(t) - P_n(t)W_n^-(t) \quad (1.14)$$

kur proporcionalitātes koeficienti ir tunelēšanas ātrumi elektronam no kontakta uz punktu ( $W_{n-1}^+$ ), ja punktā ir  $n-1$  elektroni, vai no punkta uz kontaktu ( $W_n^-$ ), ja kvantu punktā atrodas  $n$  elektroni. Varbūtības  $P_n$  un  $P_{n-1}$  nav vektora  $P$  elementārie elementi, jo stāvokļus  $n$  un  $n-1$  ir iespējams realizēt, izkārtējot elektronus pa līmeņiem dažādos veidos. Tāpēc varbūtības  $P_n$  un  $P_{n-1}$  atbilst mikroskopisko stāvokļu, kuros kvantu punktā ir  $n$  vai  $n-1$  elektroni, varbūtību summai:

$$P_n(t) = \sum_{\alpha} P_{\alpha}(t) \cdot \delta_{n, \sum_i \nu_i^{\alpha}} \quad (1.15)$$

$$\frac{dP_n}{dt} = \sum_{\alpha} \frac{dP_{\alpha}}{dt} \cdot \delta_{n, \sum_i \nu_i^{\alpha}} \quad (1.16)$$

kur Kronekera delta funkcijas tiek izmantotas, lai aprakstītu elektronu skaita nosacījumus. No tā, ka  $P_n$  un  $P_{n-1}$  neatbilst atsevišķiem  $P$  vektora elementiem izriet arī, ka tunelēšanas ātrumi  $W_{n-1}^+$  un  $W_n^-$  nav matricas  $W$  elementārie elementi.

Atsevišķa mikroskopiskā stāvokļa  $\alpha$  varbūtības kinētiskais vienādojums apraksta šī stāvokļa varbūtības izmaiņu laikā. Tā pieaug proporcionāli tādu stāvokļu  $\beta$  varbūtībai, no kuriem var nokļūt uz stāvokli  $\alpha$ , un samazinās proporcionāli paša  $\alpha$  stāvokļa varbūtībai:

$$\frac{dP_{\alpha}}{dt} = \sum_{\beta} P_{\beta}(t)W_{\alpha\beta}(t) - P_{\alpha}(t)W_{\beta\alpha}(t) \quad (1.17)$$

Pāreja uz stāvokli  $\beta$  saistīta ar tunelēšanas notikumu noteiktajā līmenī  $i$ , tāpēc šī vienādojumā stāvokļu pārejas ātrumus  $W_{\alpha\beta}$  un  $W_{\beta\alpha}$  var aizstāt ar tunelēšanas ātrumiem individuālajiem līmeņiem:  $w_i^+$  un  $w_i^-$ , pārveidojot summēšanu pa iespējamiem  $\beta$  stāvokļiem uz summēšanu pa

līmeņiem  $i$ . Zinot, ka sistēmai ir tikai divi iespējamie elektronu skaita stāvokļi  $n$  un  $n-1$ , varam pārrakstīt vienādojumu 1.17, izmantojot individuālus tunelēšanas ātrumus:

$$\frac{dP_\alpha}{dt} = \begin{cases} \sum_i P_{\beta(i)}(t)(1 - \nu_i^\beta)\nu_i^\alpha w_i^+(t) - P_\alpha(t) \sum_i \nu_i^\alpha w_i^-(t), & \text{ja } \sum_i \nu_i^\alpha = n \\ \sum_i P_{\beta(i)}(t)\nu_i^\beta(1 - \nu_i^\alpha)w_i^-(t) - P_\alpha(t) \sum_i (1 - \nu_i^\alpha)w_i^+(t), & \text{ja } \sum_i \nu_i^\alpha = n - 1 \end{cases} \quad (1.18)$$

kur ar  $\nu_i$  un  $(1 - \nu_i)$  mēs aprakstām nosacījumus atbilstošo stāvokļu līmeņu apdzīvotībām.  $P_\beta$  nav iespējams iznest no summēšanas pa līmeņiem  $i$ , jo katram enerģijas līmenim atbilst noteikts stāvoklis  $\beta$ , uz kuru notiktu parēja ar šīm līmeņiem atbilstošo ātrumu  $w_i^\pm$ . Lai atzīmētu šo atkarību, es izmantoju apzīmējumu  $\beta(i)$ . Varbūtība tam stāvoklim  $\alpha$ , kura varbūtību mēs meklējam ar attiecīgo kinētisko vienādojumu nav atkarīga no līmeņa  $i$  un ir iznesama ārā no summēšanas.  $W_\alpha$  ir visu tunelēšanas ātrumu, kas atbilst pārejai no stāvokļa  $\alpha$  uz jebkuru citu summa:

$$W_\alpha = \begin{cases} \sum_i \nu_i^\alpha w_i^-, & \text{ja } \sum_i \nu_i^\alpha = n \\ \sum_i (1 - \nu_i^\alpha)w_i^+, & \text{ja } \sum_i \nu_i^\alpha = n - 1 \end{cases} \quad (1.19)$$

Izmantojot šo  $W_\alpha$  formulu, uzrakstam makroskopiskā stāvokļa kinētisko vienādojumu kā mikroskopisku līmeņu kinētisko vienādojumu summu:

$$\begin{aligned} \frac{dP_n}{dt} &= \sum_\alpha \delta_{n, \sum_i \nu_i^\alpha} \sum_i \left( P_{\beta(i)}(t)(1 - \nu_i^\beta)\nu_i^\alpha w_i^+(t) - P_\alpha(t)\delta_{1, \nu_i^\alpha} w_i^-(t) \right) \delta_{n, \sum_i \nu_i^\alpha} + \\ &+ \left( P_{\beta(i)}(t)\nu_i^\beta(1 - \nu_i^\alpha)w_i^-(t) - P_\alpha(t)\delta_{0, \nu_i^\alpha} w_i^+(t) \right) \delta_{n-1, \sum_i \nu_i^\alpha} = \\ &= \sum_\alpha \delta_{n, \sum_i \nu_i^\alpha} \left( \sum_i P_{\beta(i)}(t)(1 - \nu_i^\beta)\nu_i^\alpha w_i^+(t) - P_\alpha(t) \sum_i \delta_{1, \nu_i^\alpha} w_i^-(t) \right) = \\ &= \sum_\alpha \delta_{n, \sum_i \nu_i^\alpha} \left( \sum_i P_{\beta(i)}(t)(1 - \nu_i^\beta)\nu_i^\alpha w_i^+(t) \right) - \sum_\alpha \delta_{n, \sum_i \nu_i^\alpha} P_\alpha(t) W_\alpha(t) \end{aligned} \quad (1.20)$$

varam redzēt, ka mēs nevaram izteikt  $dP_n/dt$  caur  $P_n$  un  $P_{n-1}$  varbūtībām, izņemot gadījumu, kad  $\forall(i, j) : w_i^+ = w_j^+ = w^+ \ \& \ w_i^- = w_j^- = w^-$ . Tas nozīme, ka kvantu punktam, kuru var efektīvi aprakstīt ar  $n \leftrightarrow n-1$  elektroniem  $m$  līmeņos, mums ir nepieciešami risināt  $\binom{m}{n} + \binom{m}{n-1} - 1$  kinētiskus vienādojumus ar  $n+1$  komponentēm priekš  $n$ -elektronu stāvokļiem un  $m-n-1$  komponentēm priekš  $n-1$ -elektronu stāvokļiem. Tas nozīmē, ka modelim pieaugot, notiek kombinatoriskais sprādziens un precīzas risināšanas metodes nav pielietojamas. Tā parādās motivācija skaitlisko metožu pielietošanai, vienu no kurām mēs apskatīsim šajā darbā.

### 1.2.3 Tunelēšanas ātrumi individuālajiem līmeņiem

Iepriekšējā nodaļā mēs ieviešam tunelēšanas ātrumus kā no laika atkarīgus koeficientus kinētiskos vienādojumos mikroskopiskiem stāvokļiem. Lai iegūtu izteiksmes tunelēšanas ātrumiem, pielieto Fermī zelta likumu tunelēšanas hamiltonianam. Individuāla līmeņa tunelēšanas

ātrumam (jeb vienelektrona līmeņa stāvokļa sabrukšanas ātrumam) pietiek apskatīt tikai divu stāvokļu koherenci:

$$\gamma_{i \rightarrow f} = \frac{4\pi}{h} |\langle f | H_T | i \rangle|^2 \rho = \frac{4\pi}{h} |\nu_T|^2 \delta(E_i - E_f - \Delta F) \quad (1.21)$$

kur  $i$  un  $f$  ir sākuma un beigu stāvokļi,  $\nu_T$  - tiem atbilstošais tunelēšanas matricas elements,  $F$  - brīva enerģija. Šajā modelī mēs apskatīsim elastīgo tunelēšanu, kas nozīmē, ka tunelēšanās laikā elektronam nav enerģijas zudumu. Tas nozīmē, ka  $\Delta F = 0$ , un tunelēšana notiek starp līmeņiem punktā un kontaktā ar vienādiem ķīmiskiem potenciāliem. Pieņemsim, ka tunelēšanas hamiltonians ir hermīta saistītais (*Hermitian*), tad  $|\langle f | H_T | i \rangle|^2 = |\langle i | H_T | f \rangle|^2$  un ātrums ir vienāds abos tunelēšanas virzienos.

Nepieciešamais nosacījums tunelēšanas notikumam ir ne tikai elektrona esamība/trūkums kvantu punkta līmenī, bet arī tā trūkums/esamība kontaktā līmenī, uz kuru var aizsūtīt elektronu kvantu punkts. Varbūtība atrast elektronu ar enerģiju  $\epsilon$  kontaktā ir aprakstītas ar elektronu sadalījuma funkciju  $f(\epsilon)$ . Kontaktā atrodas daudz vairāk elektronu nekā kvantu punktā, kā arī kontakta enerģija ir daudz lielāka par punkta enerģiju, tāpēc pieņemam, ka vairāki tunelēšanas notikumi nav pietiekami, lai izmainītu elektronu sadalījumu kontaktā. Tas arī nozīmē, sadalījums ir līdzsvarots jebkurā laika momentā. Līdzsvara sadalījums fermioniem ir Fermī-Diraka funkcija:

$$f(\epsilon) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}\right]} \quad (1.22)$$

Nemainīgs sadalījums atbilst konstantiem laikā kontakta ķīmiskajam potenciālam  $\mu$  un temperatūrai  $T$ .

Tunelēšanas ātrumi elektrona izlādei no kvantu punkta ir proporcionāli varbūtībai atrast tukšo vietu kontaktā. Līdzīgi, tunelēšanas ātrumi elektrona ielādei kvantu punktā ir proporcionāli varbūtībai atrast elektronu atbilstošā kontakta līmenī. Mēs nosakām šīs varbūtības kontaktā pie enerģijas vienādas ar atbilstoša kvantu punkta līmeņa ķīmisko potenciālu:

$$w_i^-(t) = \gamma_i^-(t) [1 - f(\mu_i^n(t))] \quad (1.23)$$

$$w_i^+(t) = \gamma_i^+(t) f(\mu_i^n(t)) \quad (1.24)$$

kur  $\gamma_i^\pm$  ir vienelektrona līmeņa stāvokļa sabrukšanas ātrums  $i$  tajam līmenim, kas atbilst elektrona tunelēšanai uz/prom no kvantu punkta. Jau iepriekš pieņēmām, ka tunelēšana ir simetriskā abos virzienos:

$$\gamma_i^+(t) = \gamma_i^-(t) = \gamma_i(t) \quad (1.25)$$

Mēs izmantojam tuvinājumu, kurā tunelēšanas barjerai ir nemainīgs platums, kas nozīmē, ka sabrukšanas ātrumi nav atkarīgi no elektrona enerģijas. Tas nozīmē, ka sabrukšanas ātrumi nav atkarīgi no sprieguma modulācijas un ir konstanti laikā:

$$\gamma_i = \gamma_{i+1} = \gamma \quad (1.26)$$

No tā izriet, ka ir iespējams vienkāršot notāciju vienādojumos 1.23 un 1.24 :

$$w_i^-(t) = \gamma[1 - f(\mu_i^n(t))] \quad (1.27)$$

$$w_i^+(t) = \gamma \cdot f(\mu_i^n(t)) \quad (1.28)$$

$$\forall i : \gamma = w_i^- + w_i^+ \quad (1.29)$$

### 1.3 Kvantu punkta uzlādes efektivitātes ierobežojumi

Mūsu ierīces darbības efektivitāte ir atkarīga no vairāku parametru attiecības. Tie ir enerģijas lielumi:  $A$  - modulācijas amplitūda,  $k_B T$  - termiskās fluktuācijas kontaktā,  $\delta\epsilon$  - starplīmeņu attālums kvantu punktā. Un laika lielumi:  $\tau$  - modulācijas periods,  $\gamma^{-1}$  - apgrieztais vienelektrona stāvokļa sabrukšanas ātrums. Tas nozīmē, ka ar trim bezdimensionāliem lielumiem, mēs varam pilnībā aprakstīt ierīces darbības režīmu:

- $\gamma\tau$  apraksta to, cik tunelēšanas notikumu, var notikt vienā periodā. Ja  $\gamma\tau \gg 1$ , elektronu sadalījums kvantu punktā spēj relaksēt uz līdzsvara sadalījumu tunelēšanas notikumu dēļ pirms spriegums tiek pārslēgts.
- $A/\delta\epsilon$  raksturo to, cik tālu no līdzsvara mēs novirzām kvantu punkta līmeņus, jeb cik papildus kvantu punkta elektronu līmeņi tiek iesaistīti tunelēšanas procesos. Ja  $k_B T \ll \delta\epsilon$ , tad šis ir precīzs papildus rezonanšu skaits.
- $\delta\epsilon/k_B T$  nosaka to, cik papildus kvantu punkta enerģijas līmeņi ir iesaistīti tunelēšanā dēļ tā, ka elektronu sadalījuma funkcija kontaktā ir izsmērēta ap  $\mu$  termisko fluktuāciju dēļ. Ja  $A < \delta\epsilon$  šis ir vienīgais faktors, kas palielina līmeņu, kas ir iesaistīti tunelēšanā, skaitu.

Par kvantu punkta  $n$ tā elektron uzlādes/izlādes efektivitātes raksturojošo lielumu, mēs izmantojam kontrastu  $K_n$ :

$$K_n(\tau_l) = \max\{P_n(t \in \tau_l)\} - \min\{P_n(t \in \tau_l)\} \quad (1.30)$$

kur  $\tau_l$  ir laika intervāls, kas atbilst  $l$ tām modulācijas periodam. Kontrasts ir maksimāla sasniegtā varbūtība ielādēt elektronu mīnuss maksimāla sasniegtā varbūtība izlādēt elektronu viena perioda laikā. Robežgadījumā, kad  $A \ll \delta\epsilon$ , tunelēšana efektīvi piedalās tikai viens enerģijas līmenis, tāpēc  $\delta\epsilon$  nevar ietekmēt uzlādes/izlādes efektivitāti. Šajā darbības režīmā ir divi iespējamie ierobežojumi(12)(7) (ja netiek ņemti vērā kvantu efekti), kas dod ieguldījumu mūsu modeļa ietvaros:

- Ja modulācijas amplitūda  $A$  ir mazāka par termisko fluktuāciju enerģijām kontaktā  $k_B T$ , tad mēs nevaram kontrolēt ar pielikto spriegumu tunelēšanas procesu virzienu. Sadalījuma funkcija kontaktā ir izsmērēta ap tā ķīmisko potenciālu  $\mu$ , un tunelēšana notiek apmēram ar vienādiem ātrumiem abos virzienos, kas neļauj uzlādēt kvantu punktu vienā pusperiodā un izlādēt otrā ar pietiekamo efektivitāti. Palielinot spriegumu, mēs varam sasniegt režīmu, kurā termiskās fluktuācijas ir niecīgas, un mēs varam kontrolēt procesu. Ja pārēji efekti ir niecīgi, mēs varam pieņemt, ka uzlādes efektivitāte, ir proporcionāla tikai šo lielumu attiecībai:

$$\gamma\tau \gg 1 : K_n \sim 1 - \exp[-A/k_B T] \quad (1.31)$$

- Ja  $A/kT \gg 1$ , tad process ir orientēts viena virzienā, bet uzlādes efektivitāti var ierobežot tas, ka viena pusperiodā laikā tunelēšanas notikums var nepaspēt notikt. Šo efektu raksturo lielums  $\gamma\tau$ .  $\gamma$  ir sabrukšanas ātrums vienelektrona stāvoklim (Sk. nodaļu 1.2.3), no kura mūsu modelī ir lineāri atkarīgs tunelēšanas ātrums vienam līmenim. Palielinot  $\gamma$ , mēs palielinām iespēju tunelēšanas notikumam realizācijai laika posmā  $\Delta t$ . Ja  $\gamma\tau \ll 1$ , tad varbūtība tam, ka pusperiodā notika tunelēšana un punkts ir uzlādēts vai izlādēts ir minimāla, kas neļauj iegūt lielu kontrasta vērtību. Ja temperatūras fluktuāciju ierobežojošs efekts ir minimāls, tad nepietiekama tunelēšanas ātruma/perioda garuma efekts ir dominējošs:

$$A/k_B T \gg 1 : K_n \sim 1 - \exp[-\gamma\tau] \quad (1.32)$$

Viens no mūsu pētījuma mērķiem ir izstrādāt metodi, kas ļautu pētīt uzlādes/izlādes efektivitāti arī, kad  $A \sim \delta\epsilon$ , un izmantot to, lai noskaidrotu  $\delta\epsilon$  ietekmi uz kvantu punkta uzlādes kontrastu.

## 1.4 Fermī-Diraka funkcijas q-analogs

Šajā darbā mēs gribam apskatīt situāciju, kad tunelēšana piedalās vairāki līmeņi jeb  $A \sim \delta\epsilon$ . Līdzsvara sadalījuma funkcija ir vienāda ar Fermī-Diraka funkcija tikai, ja  $\delta\epsilon \ll k_B T$ . Tas izpildās kontaktam, tā izmēru dēļ, jo objektam ar makroskopiskiem izmēriem  $\delta\epsilon$  ir tik mazs, ka tos nav iespējami izšķirt. Kvantu punktam  $\delta\epsilon$  tāda ierobežojuma nav, un dažādos apstākļos mēs varam novērot dažādus sadalījumus. Fiksētam daļiņu skaitam sadalījums pakļaujas kanoniskām ansamblim, un iespējamās sistēmas enerģijas veido diskrešu spektru. Šī spektra līmeņu vidējo apdzīvotību ir iespējams aprakstīt, izmantojot Fermī funkcijas q-analogu. Šis q-funkcijas īss apskats ir balstīts uz Vjačeslava Kaščejeva 2011. gada rakstu "Exact canonical occupation number in a Fermi gas with finite level spacing and a q-analog of Fermi-Dirac distribution" (6).

$n$  elektronu kanoniskā statistiskā summa  $Z_n$  ir kanoniskā ansambļa varbūtību normējošs faktors, kas ir viegli aprēķināms pie  $n = 1$ :

$$Z_n = \sum_{\{\nu_i\}} \delta_{n, \sum_i \nu_i} \exp\left(-\frac{1}{k_B T} \sum_i \epsilon_i \nu_i\right) \quad (1.33)$$

$$Z_1 = \frac{1}{1 - \exp(\delta\epsilon/k_B T)} \quad (1.34)$$

Izmantojot sakarības starp lielo kanonisku statistisko summu  $Y$  un  $Z_n$  kā arī Bella polinomus, var iegūt formulu  $Z_n$  aprēķināšanai:

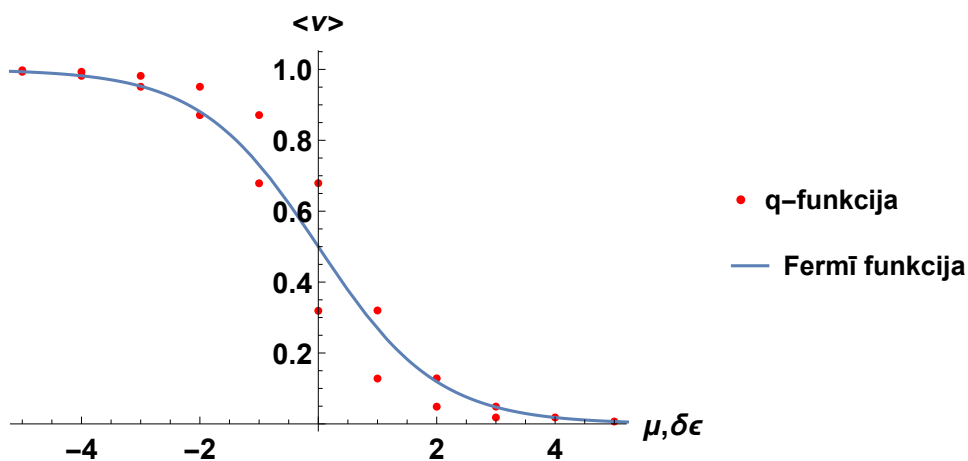
$$Z_n = \frac{1}{n} \sum_{m=1}^n (-1)^{m+1} Z_1\left(\frac{m}{k_B T}\right) Z_{n-m} \quad (1.35)$$

$$Z_1\left(\frac{m}{k_B T}\right) = \sum_i \exp\left(-\frac{m\epsilon_i}{k_B T}\right) \quad (1.36)$$

Izmantojot termodinamisku sakarību starp vidējo līmeņu apdzīvotību, sistēmas temperatūru un statistisko summu  $\langle \nu_i \rangle_n = -k_B T / Z_n \cdot \partial Z_n / \partial \epsilon_i$  varam iegūt vidējas apdzīvotības formulu:

$$\langle \nu_i \rangle_n = \frac{1}{Z_n} \sum_{m=1}^n (-1)^{m+1} \exp\left(-\frac{m\epsilon_i}{k_B T}\right) Z_{n-m} \quad (1.37)$$

Šis sadalījums atšķiras dažādiem enerģijas līmeņu spektriem  $\{\epsilon_i\}$ . Mūsu gadījumā spektrs ir ekvidistants. Šī sadalījuma forma ir līdzīga Fermī funkcijai un tiecas uz to, ja starplīmeņu attālums ir mazs  $\delta\epsilon \ll k_B T$ .



*Att. 1.3: Fermī un q-funkcijas salīdzinājums. Zila līnija - Fermī funkcija; sarkanie punkti: augšēja līnija atbilst q-funkcijai 6 elektroniem, apakšēja - 5 elektroniem. Funkcijas tiek aprēķinātas pie vienādas temperatūras  $k_B T = \delta\epsilon$*

Mēs sagaidām, ka mūsu modelī līdzsvarotie elektronu sadalījumi sakrītīs ar q-funkcijām, kas tiek aprēķinātas ekvidistantam spektram pie kontakta temperatūras  $T$ . Izmantojot rezultātus ne-līdzsvarotiem sadalījumiem, ceram ieraudzīt kā, ielādējot elektronu, notiek pāreja no q-funkcijās  $n - 1$  elektroniem uz q-funkciju  $n$  elektroniem, kā arī pretējais process.

## 1.5 Kinētiskā Montekarlo metode

Montekarlo metodes ir plašs skaitlisko metožu klāsts, kas ir balstītas uz vairākām gadījuma procesu realizācijām, kuru varbūtību sadalījums atbilst fizikālai problēmai. Mums ir nepieciešams tāds skaitlisks modelis, kas attēlotu elektronu pārejas uz un prom no kvantu punkta. Jāņem vērā, ka tas, kurā brīdī notiek pāreja un kurā kvantu punkta līmenī tā notiek, ir gadījuma lielumi.

Mūsu darbā izmantota Montekarlo metodes ir Kinētiskā Montekarlo metode. Tā tiek izmantota, kad ir jāmodelē sistēmu, kuras stāvokļi ir savienoti ar pārejas ātrumiem, kuru vērtības ir zināmas. Mūsu gadījumā dažādi stāvokļi ir dažādas elektronu konfigurācijas  $\{\nu_i\}$ , bet pārejas ātrumi ir tunelēšanas ātrumi  $w_i^\pm$ . Metodes pielāgošana modelim it aprakstīta apakšnodaļās 2.1, šeit aprakstīsim pašu metodi, kas tiek plaši pielietota stohastisko pāreju modelēšanai. Šis apraksts ir balstīts uz A.P.J Jansen 1995.gada rakstu "Monte Carlo simulations of chemical reactions on a surface with time-dependent reaction-rate constants" (4).

Sistēma, kas tiek modelēta, sastāv no vairākiem sistēmas stāvokļiem, ko apzīmējam ar grieķu burtiem  $\{\alpha, \beta, \dots\}$  ar tiem atbilstošām varbūtībām  $\{P_\alpha, P_\beta, \dots\}$ . Pārejas ātrums no stāvokļa  $\alpha$  uz stāvokli  $\beta$  ir apzīmēts, ka  $W_{\beta\alpha}$ .

Sistēmas uzvedība arī ir aprakstīta ar kinētiskiem vienādojumiem, bet citiem nekā 1.2.2 apakšnodaļās. Līdz šīm mēs esam veidojuši vienādojumus varbūtībām  $P_\alpha$ , ka sistēma atrodas stāvoklī  $\alpha$ . Tagad mēs pieņemam, ka laika momentā  $t_k$  sistēma atrodas noteiktajā stāvoklī  $\alpha_k$ , un mūs interesē, kāda ir varbūtība  $P_{\alpha_k}^{KMKK}$  sistēmai palikt tajā pašā stāvoklī pēc laika  $\Delta t_k$ ? Atšķirība starp  $P_{\alpha_k}^{KMKK}$  un  $P_{\alpha_k}$  ir tāda, ka  $P_{\alpha_k}^{KMKK}$  ir varbūtība, ka neviena pāreja nenotika, bet  $P_{\alpha_k}$  saņem ieguldījumu arī no  $\alpha_k \rightarrow \beta \rightarrow \alpha_k$  tipa procesiem, kur  $\beta$  ir kāds sistēmas stāvoklis ar nenulles  $W_{\beta\alpha_k}$  un  $W_{\alpha_k\beta}$ . Savu ieguldījumu var ienest arī augstākas kārtas procesi.

Varbūtība, ka pāreja nav notikusi samazinās laika proporcionāli visu atļauto pāreju ātrumu summai, kas ļauj mums pierakstīt kinētisko vienādojumu priekš  $P_{\alpha_k}^{KMKK}$  vienkāršā formā:

$$\frac{dP_{\alpha_k}^{KMKK}}{dt}(t) = -W_{\alpha_k}(t)P_{\alpha_k}^{KMKK}(t) \quad (1.38)$$

$$P_{\alpha_k}^{KMKK}(t_k) \equiv 1 \quad (1.39)$$

$$W_{\alpha_k}(t) \equiv \sum_{\beta} W_{\beta\alpha_k}(t) \quad (1.40)$$

Atrisinot šo problēmu, mēs iegūstam:

$$P_{\alpha_k}^{KMKK}(t_k + \Delta t_k) = \exp \left[ - \int_{t_k}^{t_k + \Delta t_k} W_{\alpha_k}(t) dt \right] \quad (1.41)$$

Ja  $W_{\alpha_k}(t)$  ir konstants laikā, atrisinājuma izteiksme vienkāršojas:

$$P_{\alpha_k}^{KMKK}(t_k + \Delta t_k) = \exp [-W_{\alpha_k} \Delta t_k] \quad (1.42)$$

un no tās ir iespējami atklātā veidā iegūt izteiksmi priekš  $\Delta t_k$ :

$$\Delta t_k = -\frac{1}{W_{\alpha_k}} \ln [P_{\alpha_k}^{KMKK}(t_k + \Delta t_k)] \quad (1.43)$$

$1 - P_{\alpha_k}^{KMK}(t)$  raksturo to, kāda ir varbūtība, ka sistēmā, kas atrodas noteiktā konfigurācijā  $\alpha_k$ , notiks stohastiska pāreja uz citu stāvokli laika momentā  $t$ . Tāpēc lielums  $P_{\alpha_k}^{KMK}(t)$  ir vienmērīgi sadalīts intervālā  $[0; 1]$ . Tas nozīmē, ka ģenerējot gadījuma skaitli  $r_1$ , kas atbilstu šim sadalījumam (vienmērīgs, intervālā  $[0; 1]$ ), un ievietojot to  $P_{\alpha_k}^{KMK}(t)$  vietā vienādojumā 1.43, mēs iegūstam veidu, ka ģenerēt stohastiskas pārejas notikšanas brīdi:

$$\Delta t_k = -\frac{1}{W_{\alpha_k}} \ln[r_1] \quad (1.44)$$

Ar otro gadījuma skaitļa ģenerēšanu, tiek noteikts, kurā stāvoklī pāriet sistēma. Lai to izdarītu, katram stāvoklim  $\beta$ , tiek atvēlēts intervāls, kura lielums atbilst pārejas ātruma  $W_{\beta\alpha_k}$  lielumam. Tādā veidā tiek izveidots liels intervāls  $[0; W_{\alpha_k}]$ , kurā ir atvēlēta vieta katram stāvoklim, un tā īpatsvars ņemts vērā kā tā intervāla lielums. Tāpēc, ģenerējot otro gadījuma skaitli  $r_2$  intervālā  $[0; W_{\alpha_k}]$  un atrādot kurā intervālā tas iekrist, ir iespējams noteikt arī kurā sistēmas stāvoklī ( $\alpha_{k+1}$ ) notika pāreja.

Ar šo beidzās simulācijas solis un nākamais sākuma laika momentā  $t_{k+1} = t_k + \Delta t_k$ , izmantojot to pašu algoritmu, bet pie jaunajiem sākuma nosacījumiem:

$$P_{\alpha_{k+1}}^{KMK}(t_{k+1}) = 1 \quad (1.45)$$

## Nodaļa 2

# Modelēšana un rezultāti

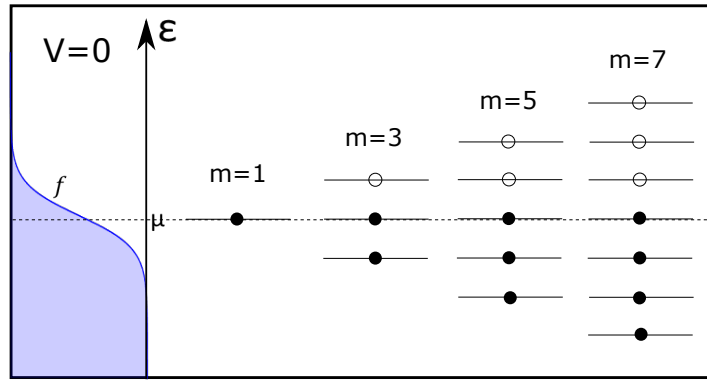
## 2.1 Kinētiskā Montekarlo metodes implementācija mūsu modelī

### 2.1.1 Līmeņu ķīmisko potenciālu un apdzīvotību inicializācija

Mēs modelējam sistēmu, kuras dažādi stāvokļi ir realizējami kā dažādas elektronu konfigurācijas kvantu punktā. Kvantu punktam ir bezgalīgs līmeņu skaits, ko nav iespējams aprakstīt ar mūsu skaitlisko pieeju. Mēs modelēsim  $m$  līmeņus, kuros atradīsies  $n$  vai  $n - 1$  elektroni. Elektronu skaits pieaugs, palielinot līmeņu skaitu, tā, lai būtu apdzīvota apmēram puse no līmeņiem:

$$n = \begin{cases} (m + 1)/2, & \text{ja } m \text{ ir nepāra skaitlis} \\ m/2, & \text{ja } m \text{ ir pāra skaitlis} \end{cases} \quad (2.1)$$

Līmeņu ķīmiskie potenciāli  $\mu_i^n(t)$  un  $\mu_i^{n-1}(t)$ , atradās kontakta ķīmiskā potenciāla  $\mu$  apkārtnē. Tas ir motivēts ar to, ka pārsvarā tunelēšanas notikumi notiek ap kontakta ķīmisko potenciālu. Ja līmeņa ķīmiskais potenciāls ir daudz zemāks par kontakta ķīmisko potenciālu  $\mu_i^n \ll \mu$ , tad parasti gan šis punkta līmenis, gan tam atbilstošais līmenis kontaktā būs aizpildīti ar elektronu ar varbūtību apmēram 1, kas nedot iespēju tunelēšanas notikumam jebkurā no virzieniem. Līdzīga ir situācija ar tukšiem līmeņiem, ja  $\mu_i^n \gg \mu$ .



Att. 2.1: Kvantu punkta elektronu līmeņu ķīmiskie potenciāli pie sprieguma  $V = 0$  dažādam līmeņu skaitam  $m$  simulācijas sākumā.

Mēs novietosim sistēmu tā, lai elektronu līmeņu potenciāli atrastos simetriski pret kontakta ķīmisko potenciālu:

$$\mu_n^n(V = 0) = \mu \quad (2.2)$$

Izmantojot iegūto nodaļā 1.1 formulu 1.5, mēs varam iegūt nepieciešamo nosacījumu bāzes spriegumam  $U_0$ , kas paliek konstants simulācijas laikā:

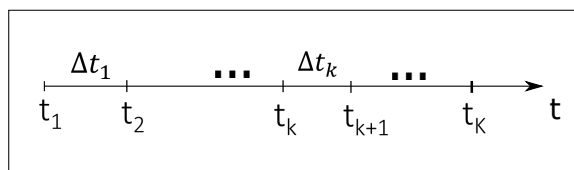
$$q_e U_0 = 2E_C(2n - 1) + \delta\epsilon(n - 1) + \mu \quad (2.3)$$

Izvēlēts līmeņu skaits modelī arī uzliek ierobežojumus sprieguma modulācijas amplitūdai  $A + kT < m \cdot \delta\epsilon$ , ja mēs vēlamies modelēt kvantu punktu ar bezgalīgu līmeņu skaitu. Šajā gadījumā augšējo modelēto līmeņu apdzīvotība ir ļoti tuvu nullei un nav atšķirības vai augšā ir vēl vairāki pieejamie līmeņi. Līdzīgi arī apakšējo līmeņu apdzīvotība asimptotiski tuvojas vieniniekam neatkarīgi no tā, vai zem tiem tiek modelēti vēl līmeņi. Ja nosacījums neizpildās, tad modelī netiek ņemtas vērā vairākas pārejas, kurām ir neniecīga varbūtība, un līmeņi, kuru apdzīvotība nav ekvivalenta nullei vai vieniniekam.

Lai pielietotu Kinētisko Montekarlo metodi, ir nepieciešami aprakstīt mūsu sistēmas stāvokļus un pārejas ātrumu starp tiem. Lai aprakstītu vienu kvantu punkta iespējamo konfigurāciju jeb stāvokli  $\alpha$  izmantosim  $m$ -dimensionālu vektoru, kur katra dimensija atbilst viena līmeņa apdzīvotībai ar divām iespējamām vērtībām 0 un 1 :

$$\alpha = \underbrace{\{\nu_1^\alpha, \nu_2^\alpha, \dots, \nu_i^\alpha, \dots, \nu_m^\alpha\}}_m \quad (2.4)$$

Kvantu punkta stāvokļa evolūcija laikā vienas simulācijas ietvaros tiek aprakstīta ar diskrētiem soļiem  $k$ :



Att. 2.2: Laika ass apzīmējumi simulācijā

Katrā simulācijas soļa  $k$  sākumā sistēma atrodas stāvoklī  $\alpha_k$ , ko nosāka iepriekšējais solis. 0-tais solis ir sākotnēja inicializācija, kur mēs paši izvēlamies kvantu punkta konfigurāciju  $\alpha_1$ . Kā sākotnējo konfigurāciju mēs izmantojam kvantu punktu, kurā ir  $n$  elektroni, kas aizpilda pēc iespējas zemākus līmeņus jeb situāciju, kad elektronu gāzes termiskas fluktuācijas kvantu punktā ir daudz mazākas par starplīmeņu attālumu  $k_B T_{QD} \ll \delta\epsilon$ :

$$\alpha_1 = \begin{cases} \left\{ \begin{array}{l} \{ \underset{\uparrow}{1}, 1, \dots, 1, \underset{\uparrow}{1}, 0, \dots, 0, \underset{\uparrow}{0} \}, & \text{ja } m \text{ ir nepāra skaitlis} \\ \nu_1^{\alpha_1} & \nu_{(m+1)/2}^{\alpha_1} & \nu_m^{\alpha_1} \end{array} \right\}, \\ \left\{ \begin{array}{l} \{ \underset{\uparrow}{1}, 1, \dots, 1, \underset{\uparrow}{1}, \underset{\uparrow}{0}, 0, \dots, 0, \underset{\uparrow}{0} \}, & \text{ja } m \text{ ir pāra skaitlis} \\ \nu_1^{\alpha_1} & \nu_{m/2}^{\alpha_1} & \nu_{m/2+1}^{\alpha_1} & \nu_m^{\alpha_1} \end{array} \right\}, \end{cases} \quad (2.5)$$

### 2.1.2 Stāvokļu pārejas ātrumi

No visiem iespējamiem  $W_{\beta\alpha}$  tikai daži nebūs vienādi ar 0. Ir atļautas tikai tādas pārejas, kas izmainīs:

- tikai vienu  $\nu_i$  no 1 uz 0, ja soļa sākumā punktā bija  $n$  elektroni
- tikai vienu  $\nu_i$  no 0 uz 1, ja soļa sākumā punktā bija  $n - 1$  elektroni

Šie nosacījumi ļauj mums izteikt nenulles  $W$  matricas locekļus. Kur pirmais un otrais nosacījumi ierobežo elektronu skaitu; trešais to, ka notika tikai viena pāreja; ceturtais un piektais nosaka to, kurā līmenī notika pāreja un vai tajā līmenī varēja notikt pāreja.

$$W_{\beta\alpha} = \begin{cases} w_i^-, & \text{ja } \sum_i \nu_i^\alpha = n \ \& \ \sum_i \nu_i^\beta = n - 1 \ \& \ \sum_i \nu_i^\alpha \nu_i^\beta = n - 1 \ \& \ \nu_i^\alpha = 1 \ \& \ \nu_i^\beta = 0 \\ w_i^+, & \text{ja } \sum_i \nu_i^\alpha = n - 1 \ \& \ \sum_i \nu_i^\beta = n \ \& \ \sum_i \nu_i^\alpha \nu_i^\beta = n - 1 \ \& \ \nu_i^\alpha = 0 \ \& \ \nu_i^\beta = 1 \\ 0, & \text{pārējos gadījumos.} \end{cases} \quad (2.6)$$

To ir iespējams pierakstīt matemātiski korekti ar Kronekera delta funkcijām, jo to reizinājums un saskaitīšana atbilst loģiskiem AND un OR operatoriem:

$$W_{\beta\alpha} = \sum_i \sum_{\{\nu_i^\alpha\}} \sum_{\{\nu_i^\beta\}} w_i^- \delta_{n, \sum_i \nu_i^\alpha} \delta_{n-1, \sum_i \nu_i^\beta} \delta_{n-1, \sum_i \nu_i^\alpha \nu_i^\beta} \delta_{1, \nu_i^\alpha} \delta_{0, \nu_i^\beta} + w_i^+ \delta_{n-1, \sum_i \nu_i^\alpha} \delta_{n, \sum_i \nu_i^\beta} \delta_{n-1, \sum_i \nu_i^\alpha \nu_i^\beta} \delta_{0, \nu_i^\alpha} \delta_{1, \nu_i^\beta} \quad (2.7)$$

Lai implementētu algoritmu no nodaļas 1.5 ir arī jāizvērtina  $W_\alpha$  vērtības  $W$  matricai.  $W_\alpha$  nav vienāds ar 0 tikai, ja uz kvantu punktā ir  $n$  vai  $n - 1$  elektroni - pārējie stāvokļi ir aizliegti ar Kulona blokādi.  $W_\alpha$  ir summa no  $w_i^+$ , ja punktā ir  $n$  elektroni, un  $w_i^-$ , ja  $n - 1$ . Atbilstoši procesam tunelēšanas ātrumi tiek saskaitīti tukšiem vai aizpildītiem līmeņiem:

$$W_\alpha = \begin{cases} \sum_i w_i^- \delta_{1, \nu_i^\alpha}, & \text{ja } \sum \nu_i^\alpha = n \\ \sum_i w_i^+ \delta_{0, \nu_i^\alpha}, & \text{ja } \sum \nu_i^\alpha = n - 1 \\ 0, & \text{pārējos gadījumos.} \end{cases} \quad (2.8)$$

jeb ar Kronekera delta funkcijām:

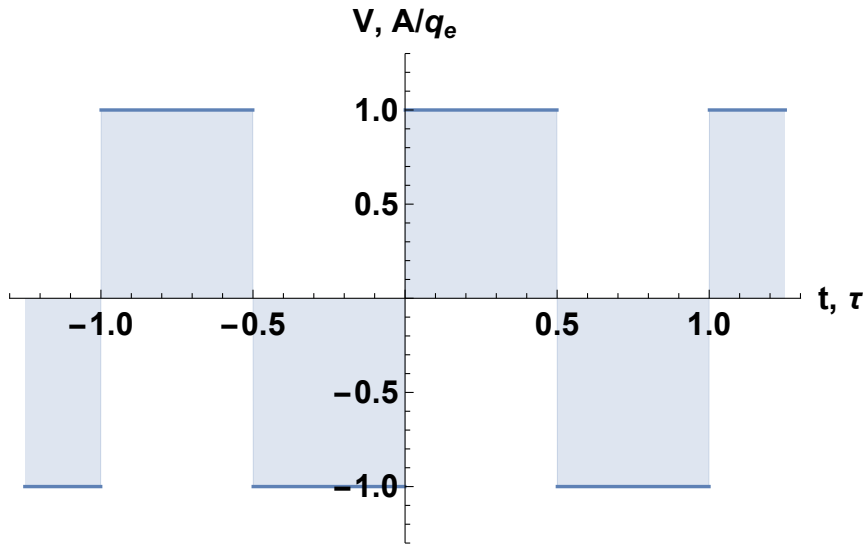
$$W_\alpha = \sum_i \sum_{\{\nu_i^\alpha\}} w_i^- \delta_{n, \sum_i \nu_i^\alpha} \delta_{1, \nu_i^\alpha} + w_i^+ \delta_{n-1, \sum_i \nu_i^\alpha} \delta_{0, \nu_i^\alpha} \quad (2.9)$$

### 2.1.3 Pārejas laika noteikšana

Veids, ka atrast laiku  $\Delta t_k$  starp diviem notikumiem pie konstanta sprieguma, ir aprakstīts nodaļā 1.5 (vienādojums 1.43), toties mēs modelēsim šīs sistēmas uzvedību pie sprieguma, kas tiek modulēts ar pakāpiena funkciju. Sprieguma formas izvēle atvieglos Kinētiskās Montekarlo metodes implementāciju, jo tā ir konstanta katrā pusperioda laikā, kas ļauj izmantot metodi konstantiem pārejas ātrumiem (vispārīgi, metodi var pielietot arī mainīgiem pārejas ātrumiem(4)). Tāpēc spriegums tiek modelēts kā pakāpiens ar periodu  $\tau$  un amplitūdu  $A/q_e$ :

$$V(t) = V(t + l\tau) = \begin{cases} +A/q_e, & \text{ja } 0 < t < \tau/2 \\ -A/q_e, & \text{ja } \tau/2 < t < \tau, \end{cases} \quad (2.10)$$

$$l \in \mathcal{Z} \quad (2.11)$$



Att. 2.3: Spriegums kā funkcija no laika

Tas nozīmē, ka  $w_i^\pm$  ir konstanti tikai laika posmā  $\tau/2$ , kurā pārejai nav obligāti jānotiek. Pirmais ģenerētais gadījuma skaitlis  $r_1$ , nosaka varbūtības  $P_\alpha^{KMK}(t)$  skaitlisko vērtību, pie kuras sistēmā notiek pāreja. Bet tagad izrēķinātais ar vienādojumu 1.44  $\Delta t_k$  var būt lielāks par laiku, kas ir palicis līdz sprieguma pārslēgšanai. Tad mēs zinām, ka sistēma ir palikusi sākotnējā stāvoklī, un varam atkārtot procesu pie jaunām  $w_i^\pm$  vērtībām, turpinot tā līdz nenotiks pāreja. Šo procesu varam aprakstīt algoritmu ar četriem soļiem:

1. Soļa sākumā  $t = t_k$ ,  $P_\alpha^{KMK}(t_k) = 1$ , bet  $\Delta t_k = 0$ .
2. Aprēķinām  $W_{\beta\alpha}(t_k + \Delta t_k)$  un  $W_\alpha(t_k + \Delta t_k)$ .

3. Ģenerējam gadījuma skaitli  $r_1$  un aprēķinam laiku, kad pāreja notiks pie pašreizējiem nosacījumiem  $-\frac{1}{W_\alpha(t_k+\Delta t_k)} \ln[r_1]$ . Salīdzinām to ar laiku, kas ir palicis līdz sprieguma pārslēgšanai  $\tau/2 - ((t_k + \Delta t_k) \bmod \tau/2)$ .

4. Izvēlamies mazāko no tiem, jo šim laikam attiecīgais notikums būs pirmais.

(a) Ja  $\tau/2 - ((t_k + \Delta t_k) \bmod \tau/2)$  ir mazākais, jeb pirmā notiek sprieguma pārslēgšana, pieskaitām šo laiku pie  $\Delta t_k$ . Sistēma paliek sākumstāvoklī -  $P_\alpha^{KMK}(t_k + \Delta t_k) = 1$ . Atgriežamies solī "2" ar jauno, lielāko  $\Delta t_k$ . Solī "3" tiek ģenerēts jaunais  $r_1$ !

(b) Ja  $-\frac{1}{W_\alpha} \ln \left[ \frac{r_1}{P_\alpha^{KMK}} \right]$  ir mazākais, tad pieskaitām to pie  $\Delta t_k$ . Pie šī  $\Delta t_k$  notiek pāreja.

Kad ir zināms pārejas laiks izmantojam aprakstīto nodaļā 1.5 metodi, lai noteiktu kurā stāvoklī notiek pāreja. No  $W_{\beta\alpha}$ , aprēķinātiem laikā  $t_k + \Delta t_k$ , tiek veidots intervāls. Tas sastāv no apakšintervāliem, kuru garums atbilst tam cik liels ir atbilstošs tam  $W_{\beta\alpha}$ . Ģenerējam otro gadījuma skaitli  $r_2$ , skatāmies kurā intervālā iekrīt skaitlis un izvēlamies tam atbilstošo stāvokli kā nākamo.

## 2.1.4 Rezultātu iegūšana

Katras simulācijas  $s$  rezultāta tiek iegūts datu masīvs, kurā tiek fiksēta katra līmeņa apdzīvotība laikā:

$$\begin{aligned} \{\nu_i(t)\}^1 &: \{ \{ \nu_i(t_1) \}, \Delta t_1 \}^1, \dots, \{ \{ \nu_i(t_k) \}, \Delta t_k \}^1, \dots, \{ \{ \nu_i(t_{k_f}) \}, \Delta t_{k_f} \}^1, \} \\ &\vdots \\ \{\nu_i(t)\}^s &: \{ \{ \nu_i(t_1) \}, \Delta t_1 \}^s, \dots, \{ \{ \nu_i(t_k) \}, \Delta t_k \}^s, \dots, \{ \{ \nu_i(t_{k_f}) \}, \Delta t_{k_f} \}^s, \} \\ &\vdots \\ \{\nu_i(t)\}^S &: \{ \{ \nu_i(t_1) \}, \Delta t_1 \}^S, \dots, \{ \{ \nu_i(t_k) \}, \Delta t_k \}^S, \dots, \{ \{ \nu_i(t_{k_f}) \}, \Delta t_{k_f} \}^S, \} \end{aligned} \quad (2.12)$$

kur  $k_f$  ir soļu skaits simulācijā, bet  $S$  - simulāciju skaits.

Vairākās simulācijās iegūtos rezultātus novidējojam pa simulāciju ansambli  $\{s\}$ , lai iegūtu vidējo apdzīvotību laikā  $t$ :

$$\langle \nu_i(t) \rangle_s = \frac{\sum_{s=1}^S \nu_i^s(t)}{S} \quad (2.13)$$

$$\nu_i^s(t) = \nu_i(t_k) \in \{ \{ \nu_i(t_k) \}, \Delta t_k \}^s : t \in \Delta t_k \quad (2.14)$$

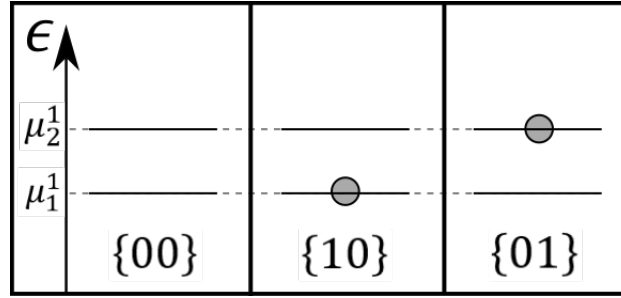
kur  $k$  nebūs vienāds dažādiem  $s$ , bet nav ierobežojumu tam, lai tas būtu vienāds dažādiem  $s$ .

Uzrakstīto Montekarlo koda daļu priekš *Wolfram Mathematica* var apskatīt pielikumā B.

## 2.2 Vienkāršs robežgadījums

Lai pārbaudītu mūsu skaitlisko metodi, mēs izmantosim robežgadījumu, ko varam aprēķināt arī analītiski. Tas ir kvantu punkts, kuram ir 2 līmeņi un uz kura var atrasties 0 vai 1 elektrons. Tas nozīmē, ka sistēma var atrasties vienā no trīs pieejamiem stāvokļiem: bez elektrona  $\{00\}$ , ar elektronu apakšējā līmenī  $\{10\}$  vai ar elektronu augšējā līmenī  $\{01\}$ :

$$P_{00}(t) + P_{10}(t) + P_{01}(t) = 1 \quad (2.15)$$



Att. 2.4: Iespējamie kvantu punkta stāvokļi vienkāršotajā divu līmeņu modeli

2 līmeņu modelī ir atļautas tikai četras pārejas:  $\{00\} \leftrightarrow \{10\}$  un  $\{00\} \leftrightarrow \{01\}$ . Tam atbilstošo kinētisko vienādojumu sistēmu, kas apraksta sistēmas stāvokļu varbūtību izmaiņas, varam iegūt izmantojot formulu 1.18:

$$\frac{dP_{00}}{dt} = w_1^-(t)P_{10}(t) + w_2^-(t)P_{01}(t) - (w_1^+(t) + w_2^+(t))P_{00}(t) \quad (2.16)$$

$$\frac{dP_{10}}{dt} = w_1^+(t)P_{00}(t) - w_1^-(t)P_{10}(t) \quad (2.17)$$

$$\frac{dP_{01}}{dt} = w_2^+(t)P_{00}(t) - w_2^-(t)P_{01}(t) \quad (2.18)$$

Šajā vienkāršotajā modelī stāvokļu varbūtības sakrīt ar līmeņu apdzīvotības varbūtībām, jo uz punkta maksimāli var atrasties 1 elektrons, kas nav spēka lielākām sistēmām:

$$P_{10}(t) = \langle \nu_1 \rangle(t) \quad (2.19)$$

$$P_{01}(t) = \langle \nu_2 \rangle(t) \quad (2.20)$$

$$P_{00}(t) = 1 - (\langle \nu_1 \rangle(t) + \langle \nu_2 \rangle(t)) \quad (2.21)$$

Apskatīsim ierīces darbības režīmu, kad  $\tau_f \ll \tau$ , kas nozīmē ka katrā sprieguma modulācijas pusperiodā sadalījuma funkcijai iestājas līdzsvars (sk. nodaļu 1.2.1 izteiksmes 1.11 aprakstu). No tā izriet, ka  $w_i^\pm$  nav atkarīgi no laika, jo  $\mu_i^n$  nemainās pie konstanta sprieguma.

## 2.2.1 Analītiskais atrisinājums

Kinētisko vienādojumu sistēma 2.16-2.18 atvieglojas, jo laika mainās tikai stāvokļu varbūtības:

$$\frac{dP_{00}}{dt} = w_1^- P_{10}(t) + w_2^- P_{01}(t) - (w_1^+ + w_2^+) P_{00}(t) \quad (2.22)$$

$$\frac{dP_{10}}{dt} = w_1^+ P_{00}(t) - w_1^- P_{10}(t) \quad (2.23)$$

$$\frac{dP_{01}}{dt} = w_2^+ P_{00}(t) - w_2^- P_{01}(t) \quad (2.24)$$

Šo vienādojumu sistēmu ir iespējams analītiski atrisināt izmantojot *Wolfram Mathematica* paketes *DSolve* komandu, pie dažādiem parametriem un sākuma nosacījumiem. Par sākotnējo konfigurāciju mēs izvēlēsimies stāvokli  $\{10\}$ , kas atbilst stāvoklim  $\alpha_1$ :  $P_{10}(0) = 1, P_{01}(0) = 0, P_{00}(0) = 0$ .

Apskatītas kinētisko vienādojumu sistēmas atrisinājumu korektumu var pārbaudīt, izmantojot statistiskas fizikas apsvērumus. Ja starp kvantu punktu un kontaktu iestājas līdzsvars, tad tās stāvokļu sadalījums pakļaujas atbilstoša ansambļa sadalījumam. Šajā gadījumā sistēmas stāvokli veido lielo kanonisko ansambli (LKA), jo gan enerģijas daudzums, gan daļiņu skaits kvantu punktā nav fiksēts:

$$P_\alpha^{GC} = \frac{1}{Z} \exp \left[ \frac{\mu n(\{\nu_i\}) - E(\{\nu_i\})}{k_B T} \right] \quad (2.25)$$

$$Z = \sum_{\{\nu_i\}} \exp \left[ \frac{\mu n(\{\nu_i\}) - E(\{\nu_i\})}{k_B T} \right] \quad (2.26)$$

Šie lielumi ir viegli aprēķināmi šim vienkāršotām modelim. Līdzsvars iestājas, kad ķīmiskie potenciāli kļūst vienādi; kontakta potenciāls nav mainīgs laikā, tāpēc kvantu punkta ķīmiskais potenciāls līdzsvara gadījumā ir vienāds ar kontakta potenciālu. Kvantu punktā var atrasties tikai viens elektrons, tāpēc sistēmas enerģija ir vienāda ar elektrona enerģiju:

$$Z^{\text{toy}} = 1 + \exp \left[ \frac{\mu - \mu_1^1}{k_B T} \right] + \exp \left[ \frac{\mu - \mu_2^1}{k_B T} \right] \quad (2.27)$$

$$P_{00}^{GC} = \frac{1}{Z^{\text{toy}}} \quad (2.28)$$

$$P_{10}^{GC} = \frac{1}{Z^{\text{toy}}} \exp \left[ \frac{\mu - \mu_1^1}{k_B T} \right] \quad (2.29)$$

$$P_{01}^{GC} = \frac{1}{Z^{\text{toy}}} \exp \left[ \frac{\mu - \mu_2^1}{k_B T} \right] \quad (2.30)$$

$$(2.31)$$

Šie vienādojumi ļauj pārbaudīt to, vai kinētisko vienādojumu risinājumi, tiecas uz lielā kanoniskā ansambļa vērtībām kad  $\gamma\tau \rightarrow \infty$ .

Ar *Wolfram Mathematica* iegūtos atrisinājumus stāvokļu varbūtībām var sadalīt 2 daļās: stacionārā un nestacionārā. Stacionāra daļa ekvivalenti sakrīt ar lielā kanoniskā ansambļa atrisinājumiem. Nestacionāra daļa eksponenciāli samazinās ar diviem raksturīgiem ātrumiem  $\gamma_1$  un

$\gamma_2$ :

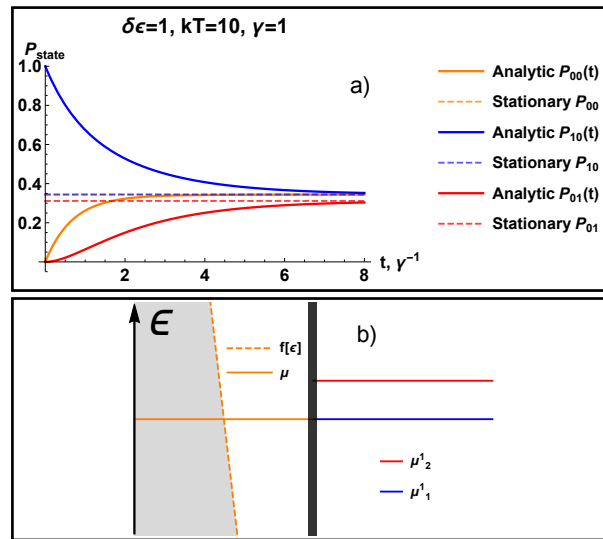
$$P_{\nu_1\nu_2}(t) = P_{\nu_1\nu_2}^{GC} + \phi_{\nu_1\nu_2} \exp[-\gamma_1 t] + \psi_{\nu_1\nu_2} \exp[-\gamma_2 t] \quad (2.32)$$

$$\gamma_1 = \gamma \left( 1 + \sqrt{f(\mu_1^1)f(\mu_2^1)} \right) \quad (2.33)$$

$$\gamma_2 = \gamma \left( 1 - \sqrt{f(\mu_1^1)f(\mu_2^1)} \right) \quad (2.34)$$

kur  $\phi_{\nu_1\nu_2}$  un  $\psi_{\nu_1\nu_2}$  ir polinoma funkcijas no  $f(\mu_1^1)$  un  $f(\mu_2^1)$  (Sk.pielikumā A).

Iegūtus atrisinājumus pārbaudām robežgadījumos pie lielām un mazām temperatūrām. Ar nepārtrauktām līnijām zīmējumos ir uzzīmēti *Mathematica DSolve* atrisinājumi stāvokļu varbūtībām laikā. Ar svītru līnijām ir uzzīmētas vērtības, kas ir iegūtas līdzsvara varbūtībām no lielā kanoniskā ansambļa. Izvēlējamies tādu  $k_B T$  vērtību, lai būtu redzamas atsevišķo stacionāro atrisinājumu līnijas, palielinot  $k_B T$ , tās kļūst neizšķiramas:

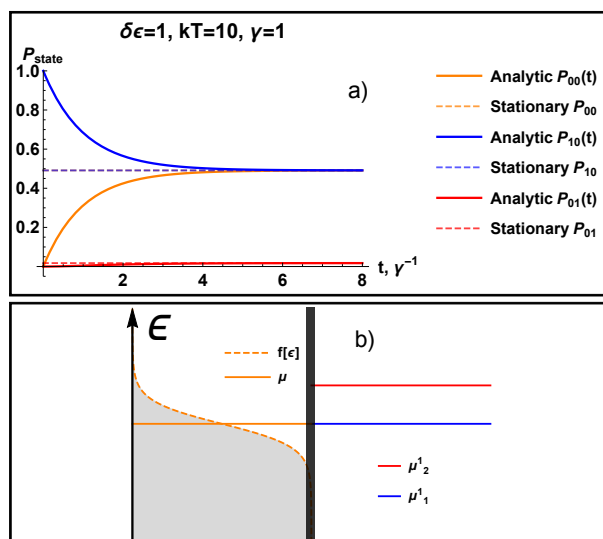


Att. 2.5: a) Stāvokļu varbūtību dinamika laikā pie lielām temperatūrām. Raustītas līnijas - stacionārie LKA atrisinājumi. Nepārtrauktas līnijas - kinētisko vienādojumu atrisinājumi.

b) Atrisinājumam atbilstošas sistēmas enerģētiska diagramma: kreisajā daļā - kontakts (raustīta līnija - Fermī sadalījums ar iekrāsoto elektronu apdzīvotību, nepārtrauktā līnija - ķīmiskais potenciāls), labajā daļa - kvantu punkta līmeņu potenciāli.

Att. 2.5 b) daļā var redzēt, ka pie termiskām fluktuācijām  $k_B T$  daudz lielākām par  $\delta\epsilon$  elektronu apdzīvotība kontaktā pie enerģijām, kas atbilst kvantu punkta līmeņu potenciāliem, atšķiras par niecīgu vērtību. Tas visas ir apmēram vienādas ar 0.5, kas pie nemainīga tuneļbarjeras biezuma noved pie:  $P_{00}(t \rightarrow \infty) = P_{10}(t \rightarrow \infty) = P_{01}(t \rightarrow \infty) = 1/3$ .

Mazo temperatūru gadījumam izvēlējamies tādu  $k_B T$ , lai otra līmeņa apdzīvotība atšķirtos no nulles pietiekami, lai atšķirtu tai atbilstošo līniju no x ass:

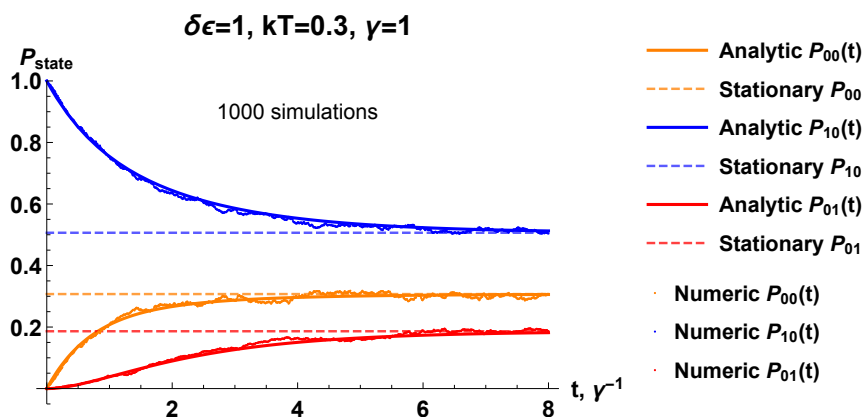


Att. 2.6: a) Stāvokļu varbūtību dinamika laikā pie mazām temperatūrām. Raustītas līnijas - stacionārie LKA atrisinājumi. Nepārtrauktas līnijas - kinētisko vienādojumu atrisinājumi. b) Atrisinājumam atbilstošas sistēmas enerģētiska diagramma: kreisajā daļā - kontakts (raustīta līnija - Fermī sadalījums ar iekrāsoto elektronu apdzīvotību, nepārtrauktā līnija - ķīmiskais potenciāls), labajā daļā - kvantu punkta līmeņu potenciāli.

Robežgadījumā  $T \ll \delta\epsilon$  (Att.2.6) apdzīvotība kontaktā virs ķīmiska potenciāla strauji krīt uz nulles vērtību. Apskatītajā situācijā kontakta potenciāls  $\mu$  ir rezonansē ar kvantu punkta apakšējo līmeņa potenciālu  $\mu_1^1$ . Tāpēc stāvokļu  $\{00\}$  un  $\{10\}$  līdzsvara varbūtības ir vienādas, bet stāvoklis  $\{01\}$  realizējas ar niecīgo varbūtību, jo kontaktā nav elektronu ar atbilstošu enerģiju, lai tunelētu otrajā līmenī.

## 2.2.2 Skaitliskais atrisinājums

Pielietojot Kinētisko Montekarlo metodi šai problēmai, mēs varam pārbaudīt vai mūsu aprakstīta skaitliskā metode atbilst analītiskajam atrisinājumam. Šeit un turpmāk lietosim 1000 simulācijas rezultātu iegūšanai:



Att. 2.7: Analītiski iegūta atrisinājuma un Montekarlo simulācijas salīdzinājums pie 1000 simulācijām

Varam redzēt, ka rezultātiem ir liela sakritība. Skaitlisko rezultātu precizitātes zemākais iespējamais novērtējums izriet no vienādojuma 2.13. Ņemot vērā to, ka iegūtais rezultāts ir vidējais aritmētiskais no vieniniekiem un nullēm, var secināt, ka mēs nevaram iegūt rezultātu ar kļūdu mazāku par  $1/S$ , kas pie 1000 simulācijām ir  $10^{-3}$ .

Rezultāti sakrīt, kas nozīmē ka skaitliska metode dod rezultātus paredzamus no analītiskiem apsvērumiem. Mēs secīgi pārbaudījām kvantu punktam ar diviem līmeņiem un vienu elektronu, ka:

- Kinētisko vienādojumu līdzsvara atrisinājums sakrīt ar Lielo Kanonisko ansambli.
- Skaitliskā metode dod rezultātus ekvivalentus kinētiskiem vienādojumiem, kas nozīmē, ka mēs varam mēģināt to izmantot arī sarežģītākiem gadījumiem.

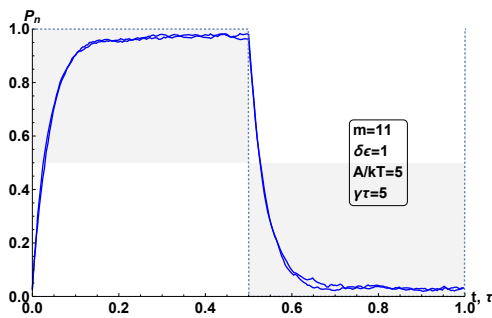
## 2.3 Kvantu punkta apdzīvotība

Izmantojot mūsu skaitlisko metodi, mēs varam iegūt rezultātus atsevišķo līmeņu vidējai apdzīvotībai  $\langle \nu_i \rangle$  laikā. Individuālas apdzīvotības ļauj iegūt vidējo kvantu punkta apdzīvotību  $\sum_i \langle \nu_i \rangle$ , kas atrodas intervālā  $(n - 1, n)$ . Kvantu punkta uzlādes/izlādes efektivitātes aprakstam mūs interesē tikai varbūtība, ka kvantu punktā ir  $n$  elektroni. Tā ir vienāda ar nulli, kad  $\sum_i \langle \nu_i \rangle = n - 1$ , un ir vienāda ar vieninieku, kad  $\sum_i \langle \nu_i \rangle = n$ , tāpēc varam to aprēķināt pēc formulas:

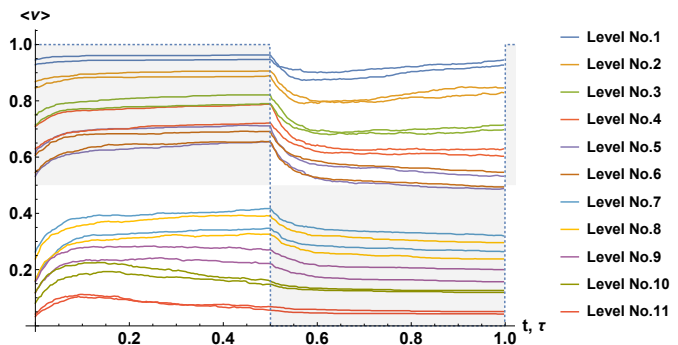
$$P_n = \sum_i \langle \nu_i \rangle - (n - 1) \quad (2.35)$$

### 2.3.1 Rezultātu periodiskums

Visas simulācijas sākas no vienāda sākuma stāvokļa ar  $n$  elektroniem pie ļoti atdzesēta kvantu  $k_B T_{QD} \ll \delta\epsilon$ , kas nozīmē, ka gan līmeņu, gan punkta apdzīvotībām ir nepieciešams laiks, lai relaksētu uz periodisko atrisinājumu. Pārbaudīsim vai punkta apdzīvotības relaksācijas un atsevišķo līmeņu apdzīvotību relaksācijas notiek ar dažādiem ātrumiem. Attēlosim viena un tā paša mērījuma rezultātus priekš punkta apdzīvotības un līmeņu apdzīvotības.

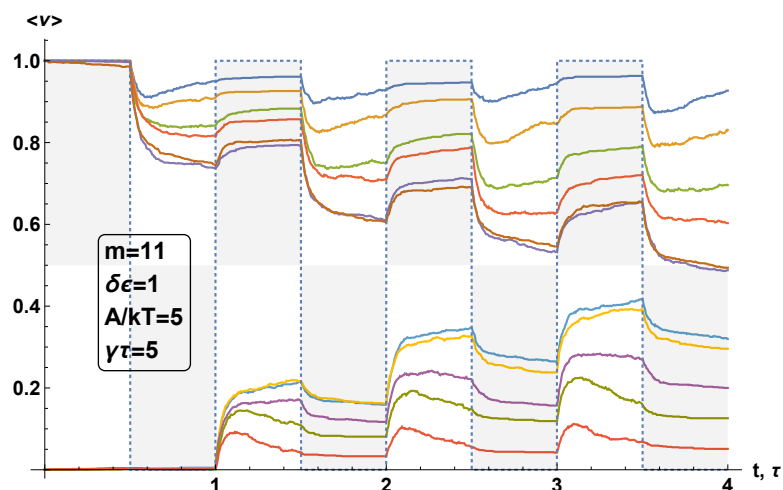


Att. 2.8: Punkta apdzīvotība laikā trešajam un ceturtajam periodiem. Abas līnijas ir apzīmētas ar vienu krāsu. Punktēta zila līnija - sprieguma modulācija.



Att. 2.9: Punkta līmeņu apdzīvotība laikā trešajam un ceturtajam periodiem. Ar dažādām krāsām atzīmēti dažādi līmeņi, ar vienādas krāsas - tas pats līmenis dažādos periodos. Punktēta zila līnija - sprieguma modulācija.

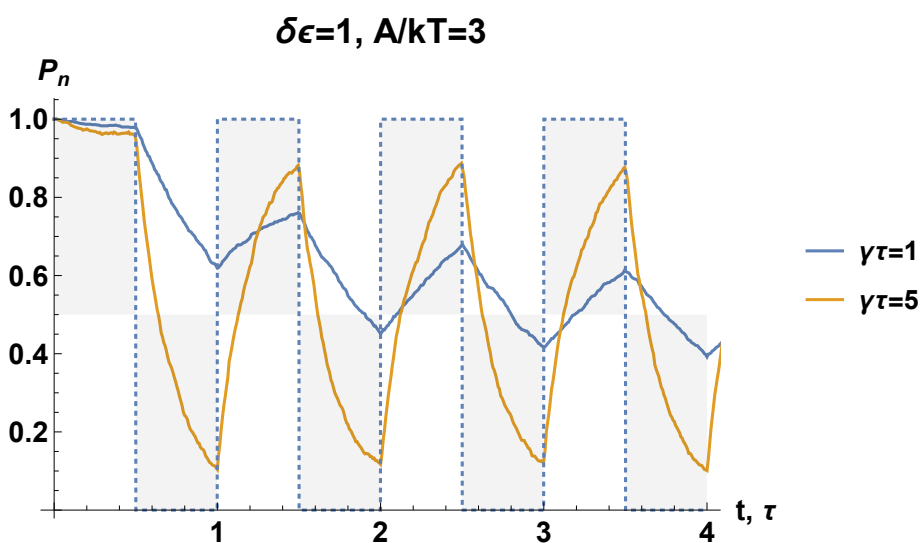
Varam redzēt, ka punkta apdzīvotībai var novērot tikai fluktuācijas, bet punkta centrālie līmeņi turpina relaksēt. To apdzīvotības turpina kustību prom no vērtībām  $\nu(t_1) = 1$  vai  $\nu(t_1) = 0$ , kas atbilst to sākotnējai konfigurācijai. Šo procesu varam novērot apskatot līmeņu apdzīvotības izmaiņu no paša sākumā:



Att. 2.10: Kvantu punkta līmeņu apdzīvotībā laikā. Ar dažādām krāsām tiek apzīmēti dažādi līmeņi. Punktēta zila līnija - sprieguma modulācija.

Varam redzēt kā apdzīvotību vērtības pašiem centrāliem līmeņiem (piemēram dzeltena un zila līnijas, kas atbilst līmeņiem 7. un 8. atdalās tikai pēc dažiem periodiem.

Relaksācijas ātrums gan punktam, gan līmeņiem ir atkarīgs no lieluma  $\gamma\tau$ , kas raksturo, cik daudz tunelēšanas notikumu var vidēji notikt vienā modulācijas periodā. Attēlosim periodiskas modulācijas ietekmi uz viena līmeņa kvantu punktu dažādām  $\gamma\tau$  vērtībām:



Att. 2.11: Kvantu punkta apdzīvotības relaksācija periodiskām sprieguma modulācijām dažādām  $\gamma\tau$  vērtībām. Punktēta zila līnija - sprieguma modulācija.

Varam redzēt, ka pie mazākas  $\gamma\tau$  vērtības atrisinājums lēnāk relaksē uz periodisku atrisinājumu, ko arī sagaidījām, jo vienīgais relaksācijas process mūsu modelī ir izraisīts ar tunelēšanas procesiem.

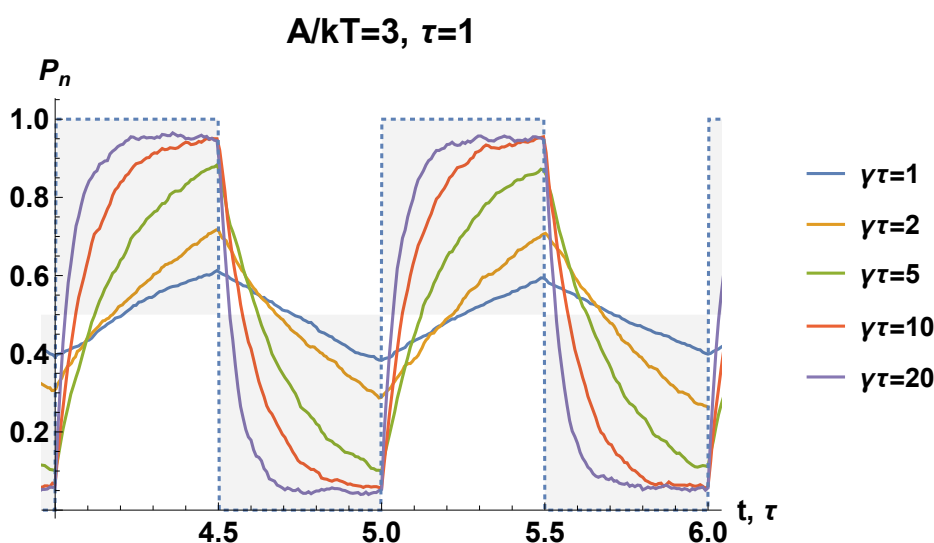
## 2.3.2 Kontrasta ierobežojumi

Mēs pārbaudījām, ka mūsu metode dot pareizus rezultātus pie nemainīga sprieguma. Tagad pārbaudīsim, vai tā dod uzticamus rezultātus arī punkta uzlādei pie mainīga sprieguma. Nodaļā 1.3 mēs paredzējām, ka kvantu punkta uzlādes kontrastam ir divi ierobežojošie faktori:

$$K \sim 1 - \max[\exp(-\gamma\tau), \exp(-A/k_B T)] \quad (2.36)$$

### Galīga tunelēšanas ātruma ierobežojums

Lai izpētītu, kā  $\exp(-\gamma\tau)$  ierobežojums ietekmē kontrastu, simulēsim mūsu sistēmu pie konstanta  $A/k_B T$  lieluma, kad  $\delta\epsilon \gg A$  jeb  $m = 1$ .



*Att. 2.12: Kvantu punkta apdzīvotība (laikā no  $4\tau$  līdz  $6\tau$ ) atkarība no pielikta sprieguma. Dažādas krāsas līnijas atbilst dažādām  $\gamma\tau$  vērtībām. Punktēta zila līnija - sprieguma modulācija.*

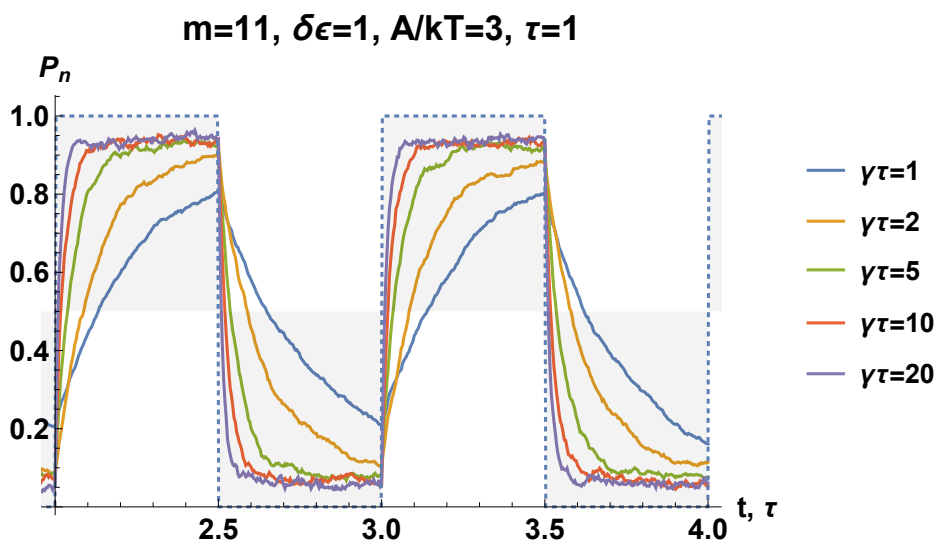
Varam redzēt, ka pieaugot  $\gamma\tau$  vērtībai, apdzīvotības funkcijas maksimāla vērtība tiek sasniegta arvien ātrāk. Tas arī tiek sagaidīts, jo ir iespējami divi varianti, kā palielināt  $\gamma\tau$ :

- Palielinām  $\gamma$ , un pie  $\gamma \rightarrow \infty$  elektrons tunelē tiklīdz spriegums tiek pārslēgts.
- Palielinām  $\tau$  bet, zīmējot laiku  $\tau$  vienības, tunelēšanas punkts pie tā paša laika vizuāli pārbīdās pa kreisi.

Varam redzēt, ka maksimāla kontrasta vērtība tiek piesātināta pie  $\gamma\tau$  vērtības starp  $\gamma\tau = 10$  un  $\gamma\tau = 20$ , bet nesasniedz maksimālo vērtību, jo termisko fluktuāciju efekti sāk spēlēt noteicošo lomu kontrasta ierobežojumā.

Pie izvēlēta pakāpienveida sprieguma attēlojuma, mēs sagaidām, ka pie  $\gamma\tau \rightarrow \infty$  un  $A/k_B T \rightarrow \infty$ , punkta apdzīvotības funkcija pilnīgi sakrītīs ar sprieguma funkcijas profilu. Tāda gadījumā tunelēšana notiktu tiklīdz tika pārslēgts spriegums un termiskas fluktuācijas nevarētu veikt tunelēšanu pretēja virzienā ar kaut cik iespējamu varbūtību.

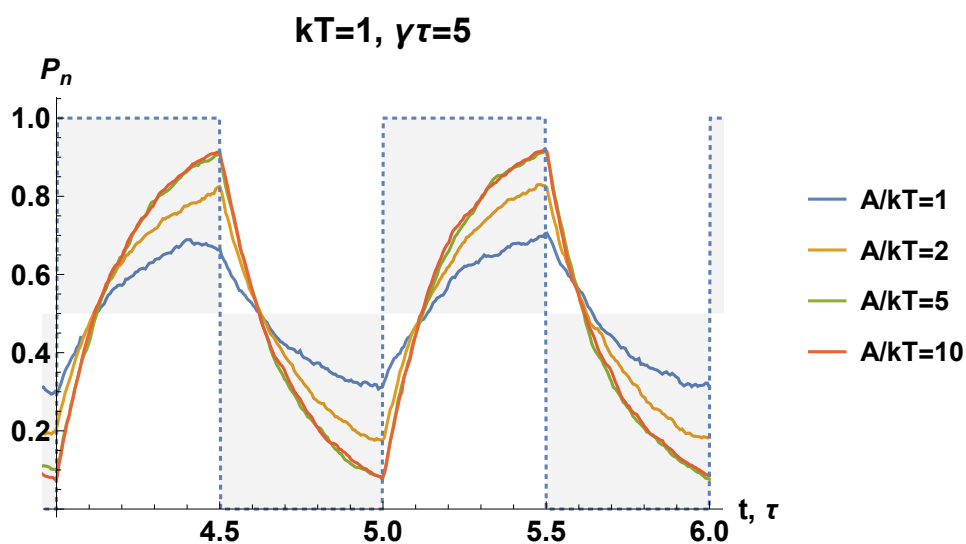
Samazinot  $\delta\epsilon$ , līdz tas ir parametrs ar līdzīgu kārtu kā  $A$  un  $k_B T$ , mēs ļaujam piedalīties tunelēšanas procesos arī pārējiem līmeņiem. Veicot līdzīgu simulāciju sēriju kā grafikā 2.12, mēs iegūstam:



Varam redzēt, ka izmaiņas vienādām  $\gamma\tau$  vērtībām grafikos 2.12 un 2.13, piemēram zilai līnijai  $\gamma\tau = 1$ , atbilst tunelēšana ātruma palielināšanai. Tas liecina par papildus līmeņu iesaisti tunelēšanā.

### Termiskais ierobežojums

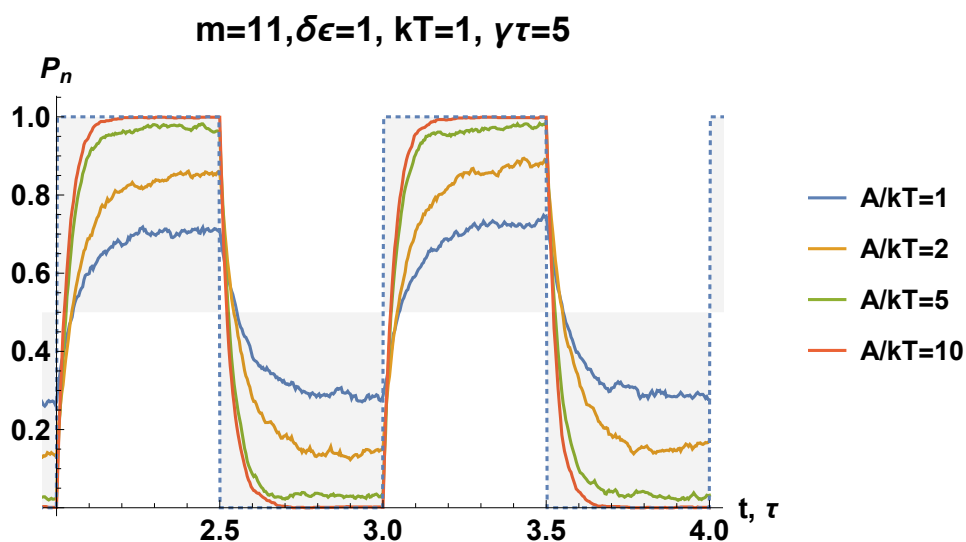
Līdzīgi sāksim pētīt  $A/k_B T$  ietekmi uz rezultātiem ar vienlīmeņa kvantu punktu ( $m = 1$ ) simulāciju, kas atbilst situācijai  $\delta\epsilon \gg A$ . Simulēsim šo modeli pie dažādām  $A/kT$  vērtībām fiksētai  $\gamma\tau$  vērtībai:



*Att. 2.14:* Kvantu punkta apdzīvotība laikā no  $4\tau$  līdz  $6\tau$  atkarība no pielikta sprieguma. Dažādas krāsas līnijas atbilst dažādām  $A/k_B T$  vērtībām. Punktēta zila līnija - sprieguma modulācija.

Varam redzēt, ka palielinot sprieguma amplitūdu  $A/q_e$  mēs varam panākt līmeņa uzlādes efektivitātes uzlabošanu. Mazāka termisko fluktuāciju ietekme ļauj sasniegt lielāku kontrastu, līdz tas tiek ierobežots ar  $\exp[-\gamma\tau]$  starp  $A/k_B T = 5$  un  $A/k_B T = 10$ . Varam redzēt ka visas apdzīvotības sasniedz vienādu "nepiesātinājuma" līmeni, jo  $\gamma\tau$  paliek nemainīgs dažādam simulācijām.

Palielinot līmeņu skaitu, varam redzēt izmaiņas līdzīgas tam, kas tika aprakstītas iepriekšējā apakšnodaļā - grafiks priekš  $m = 11$  atbilst lielākām tunelēšanas ātrumam, lielāka pieejamo tunelēšanai līmeņu skaita dēļ:



*Att. 2.15:* Kvantu punkta apdzīvotība laikā no  $2\tau$  līdz  $4\tau$  atkarība no pielikta sprieguma. Dažādas krāsas līnijas atbilst dažādām  $A/k_B T$  vērtībām. Punktēta zila līnija - sprieguma modulācija.

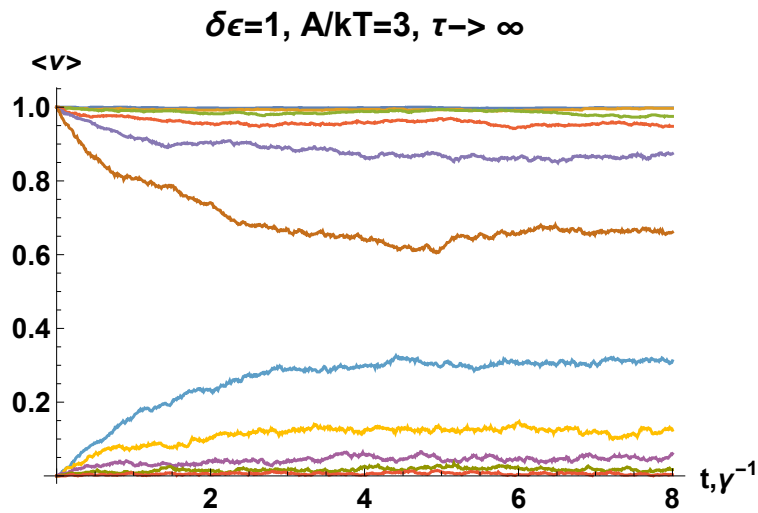
## 2.4 Kvantu punkta elektronu sadalījuma funkcija

### 2.4.1 Mazas temperatūras

Pie temperatūrām  $k_B T \sim \delta\epsilon$  sagaidām, ka līdzsvara sadalījums  $n$  elektroniem atbilst  $q$ -funkcija  $n$  elektroniem. Šī apakšnodalā apskatīsim relaksācijas procesus uz līdzsvara sadalījumu un arī to, kā notiek pārejas starp līdzsvara sadalījumiem, kas atbilst dažādām elektronu skaita.

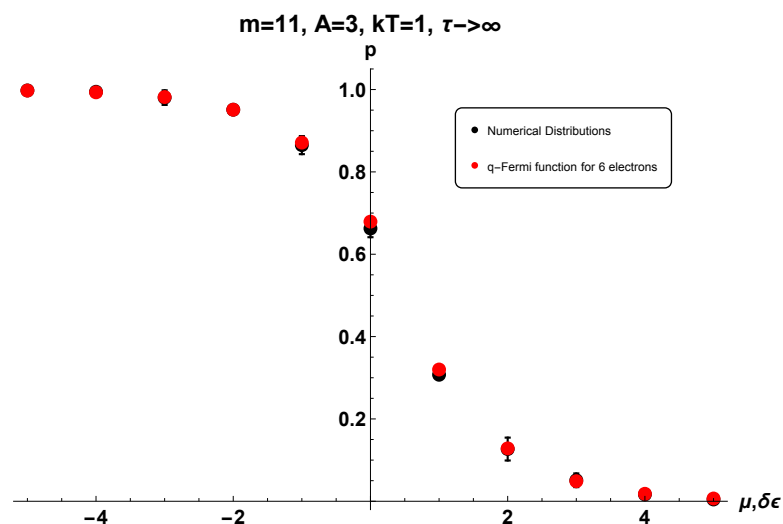
#### Stacionārs spriegums

Apskatīsim robežgadījumu  $\tau_f \ll \tau$ , kas atbilst stacionāra sprieguma gadījumam. Tad, izvēloties vienu no pusperiodiem, mēs ar efektivitāti, kas ir ierobežota ar  $\exp(-A/k_B T)$ , varam kontrolēt to, lai kvantu punktā būtu  $n$  vai  $n - 1$  elektroni. Simulēsim kvantu punktu ar 11 līmeņiem pirmajā sprieguma pusperiodā ( $V = +A/q_e$ ), kas nozīmē kā punktā visu laiku (sākuma nosacījumu dēļ arī momentā  $t = 0$ ) atrodas 6 elektroni. Pie mūsu izvēlētiem parametriem ( $m = 11, \delta\epsilon = 1, A/k_B T = 3$ ), šī varbūtība ir lielāka par 95%.



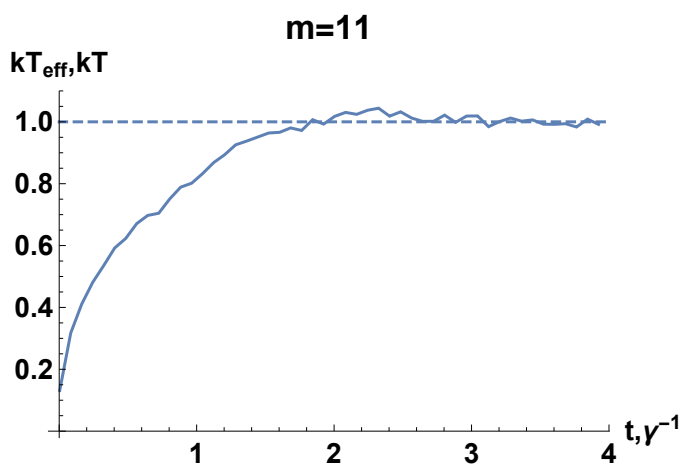
Att. 2.16: Kvantu punkta līmeņu vidējās apdzīvotības atkarībā no laika stacionāram spriegumam  $V = A/q_e$ .

Varam redzēt, ka laika momentā  $t = 6/\gamma$  līmeņu apdzīvotības norelaksēja uz līdzsvara vērtībām. Mēs uzņēmām un novidējojām datus elektronu sadalījuma piecos laika momentos no  $t = 6/\gamma$  līdz  $t = 8/\gamma$ :  $t = 6, 6.496, 6.992, 7.448, 8 \gamma^{-1}$ :



**Att. 2.17: Elektronu līdzsvara sadalījuma funkcija pie stacionāra sprieguma 6 elektroniem. Melnie punkti - simulācijas dati, sarkanie punkti - teorētiski izrēķināta q-funkcija 6 elektroniem.**

Kļūdu diapazons tika aprēķināts kā datu statistiskās izkliedes diapazons ap vidējo vērtību ar uzticamību 95%, kas pakļaujas Stjudenta sadalījumam. Varam redzēt, ka simulācijas dati sakrīt ar q-Funkciju. Mēs varam aproksimēt sadalījumu ar q-Funkciju, lai noteiktu kāda ir šī elektronu sadalījuma efektīva temperatūra  $T_{eff}$ . Mēs sagaidām, ka, elektronu sadalījumam tiecoties uz līdzsvara q-funkciju, efektīva temperatūra tieksies uz kontakta temperatūru  $t \rightarrow \infty : T_{eff} \rightarrow T$ .

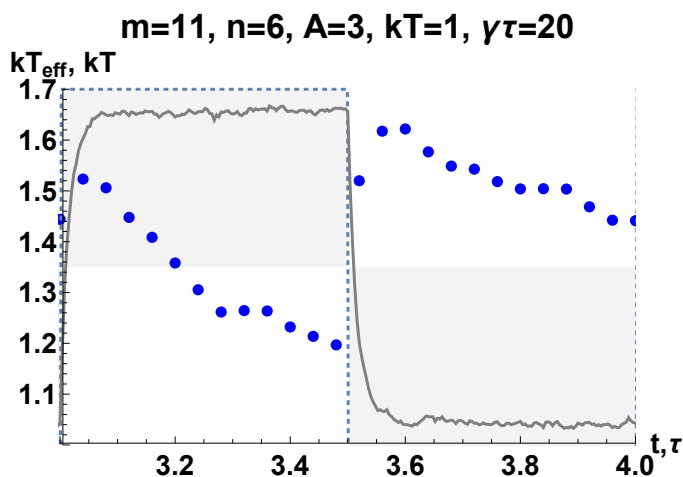


**Att. 2.18: Efektīvas temperatūras izmaiņa 6 elektronu q-funkcijas aproksimācijai stacionāra sprieguma gadījumā.**

Mēs varam redzēt, ka grafikā temperatūra palielinās līdz sasniedz vērtību, kas atbilst kontakta temperatūrai, jeb notika līdzsvara iestāšanās. Turpmāk varēsim izmantot šo parametru, lai raksturotu cik tuvu, sadalījums ir līdzsparam. Sākotnēja punkta konfigurācija atbilst efektīvai temperatūrai  $T_{eff} = 0$ , kas nozīmē, ka šī grafikā vērtība pie  $t = 0$  tiecas uz pareizo vērtību.

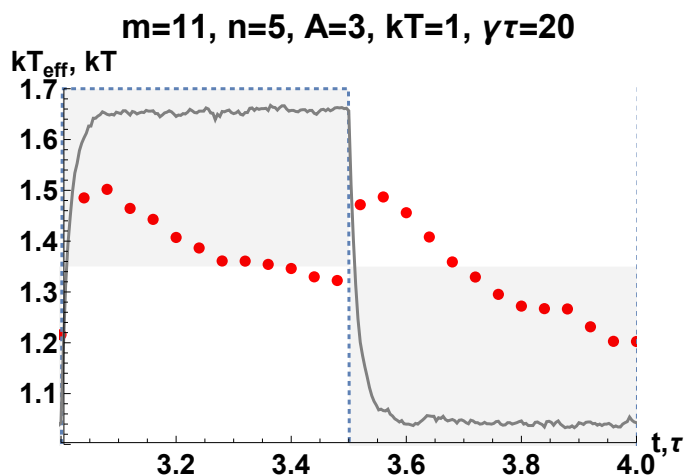
## Modulēts spriegums

Modulēta sprieguma režīmā, sadalījuma funkcija tieksies attiecīgi uz  $n$  elektronu sadalījumu pirmajā pusperiodā un  $n - 1$  elektroniem otrajā pusperiodā. Atšķirībā no iepriekšējās apakšnodalās notiks ne tikai temperatūras, bet arī lādiņa relaksācija. Situācija ar divām funkcijām, kas atbilst dažādam elektronu skaitam, pieprasa simulācijas datu aproksimāciju pēc abām funkcijām.



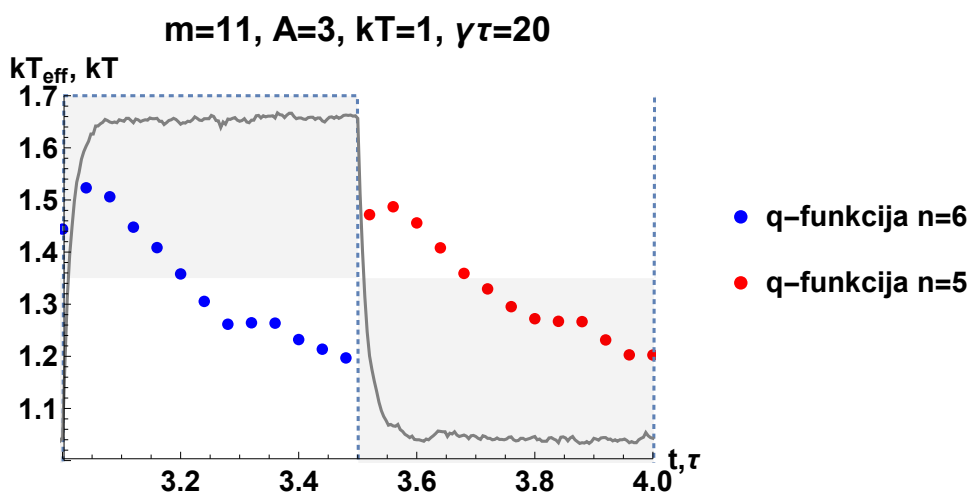
*Att. 2.19:* Efektīvas temperatūras izmaiņa viena modulācijas perioda laikā  $q$ -funkcijas aproksimācijai 6 elektroniem. Zilie punkti - simulāciju dati efektīvai temperatūrai; zila punktēta līnija - spriegums; pelēka līnija - kvantu punkta apdzīvotība. Apdzīvotības un sprieguma absolūtas vērtības neatbilst  $y$  koordinātēm.

Mēs izvēlējamies simulāciju ar lielu  $\gamma\tau = 20$  vērtību. Tas nozīmē, ka elektrona ielāde/izlāde notiek gandrīz uzreiz pēc sprieguma pārslēgšanas, ko var redzēt pēc pelēkas līnijas. Efektīva temperatūra pieaug pēc katras elektronu skaita izmaiņas, gan uz to stāvokli, ko aproksimē  $q$ -funkcija (piemēram uz 6 elektroniem priekš Att.2.19), gan uz "nepareizo" pretējo (6 elektroni priekš Att.2.20), kas raksturo kopējo sadalījuma nelīdzsvaru pēc elektrona ielādes/izlādes. Toties "pareizajā" pusperiodā efektīva temperatūra spēj sasniegt vērtību tuvāku līdzsvara sadalījumam.



*Att. 2.20:* Efektīvas temperatūras izmaiņa viena modulācijas perioda laikā  $q$ -funkcijas aproksimācijai 5 elektroniem. Zilie punkti - simulāciju dati efektīvai temperatūrai; zila punktēta līnija - spriegums; pelēka līnija - kvantu punkta apdzīvotība. Apdzīvotības un sprieguma absolūtas vērtības neatbilst  $y$  koordinātēm.

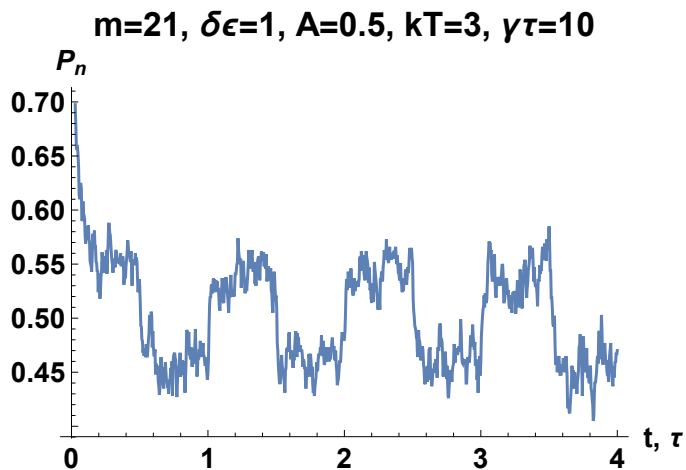
Salīdzinot tikai "pareizas" aproksimāciju daļas, redzam, ka relaksācijas procesi notiek ar līdzīgiem ātrumiem, līdzīgā diapazonā. Taču, lai izvirzītu hipotēzi par sadalījuma funkcijas relaksācijas procesu simetriskumu ir vajadzīgi turpināt pētījumus. Paredzami lādiņš relaksē ātrāk par temperatūru, jo lādiņa relaksācija ir saistīta ar notikumu vienā kvantu punktā līmenī, bet temperatūra apraksta visu kvantu punkta līmeņu vidējās apdzīvotības



*Att. 2.21:* Efektīvas temperatūras izmaiņa viena modulācijas perioda laikā  $q$ -funkcijas aproksimācijai 6 (pirmā pusperiodā) un 5 (otrā pusperiodā) elektroniem. Zilie un sarkanie punkti - simulāciju dati efektīvai temperatūrai; zila punktēta līnija - spriegums; pelēka līnija - kvantu punkta apdzīvotība. Apdzīvotības un sprieguma absolūtas vērtības neatbilst  $y$  koordinātēm.

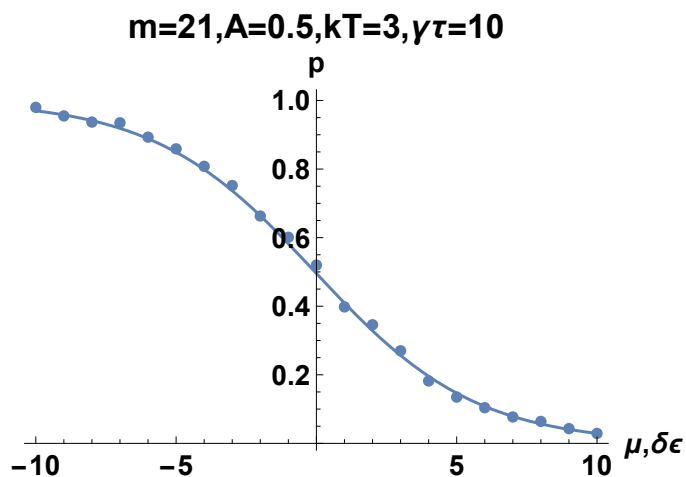
## 2.4.2 Lielas temperatūras

Robežgadījumā, kad termiskās fluktuācijas ir krietni lielākas par starplīmeņu attālumu  $k_B T \gg \delta\epsilon$ , q-funkcija tiecas uz Fermī funkciju. Apskatīsim kvantu punkta simulāciju pie tādiem nosacījumiem:



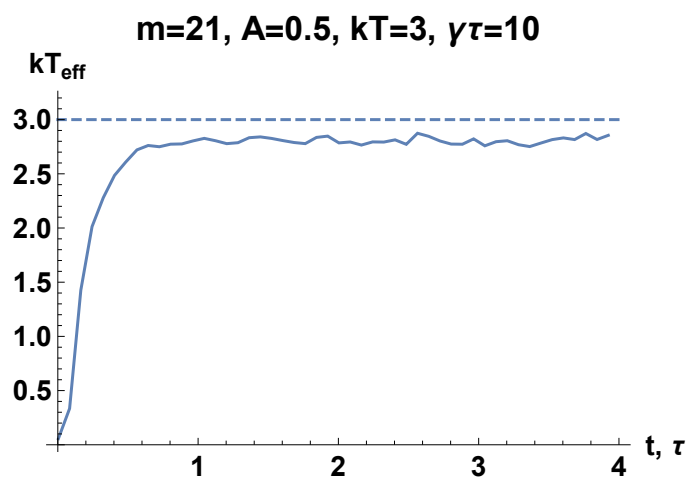
*Att. 2.22: Kvantu punkta apdzīvotība atkarībā no laika pie modulēta sprieguma lielo temperatūru gadījumā.*

Varam redzēt ka lielas temperatūras dēļ nav iespējams efektīvi uzlādēt kvantu punktu. Apskatīsim sadalījuma funkciju simulācijas beigās ( $t = 4\tau$ ), kad jau kādu laiku ir iestājies līdzsvars:



*Att. 2.23: Elektronu sadalījuma funkcija kvantu punktā pie lielām temperatūrām un modulēta sprieguma laikā  $t = 4\tau$ . Līnija - Fermī funkcija, kuras parametri tika piemeklēti labākai sakrītībai ar simulācijas datiem (punkti). Rezultāts:  $\mu_{eff} = -0.050, k_B T_{eff} = 2.86$*

Aproksimējot šos datus ar Fermī funkciju, mes varam pārbaudīt, vai q-funkcija tiecas uz Fermī funkciju pie lielām temperatūrām, kā arī kādi ir šī sadalījuma efektīvie parametri: temperatūra  $T_{eff}$  un ķīmiskais potenciāls  $\mu_{eff}$ .



*Att. 2.24: Elektronu sadalījuma Fermī funkcijas aproksimācijas efektīva temperatūra laikā modulēta sprieguma un lielu temperatūru robežgadījumā.*

Sprieguma modulācijas mazas amplitūdas dēļ nevar redzēt periodisku sadalījuma temperatūru maiņu kā mazo temperatūru gadījumā. Toties sadalījuma efektīva temperatūra tiecas uz temperatūru, kas ir mazliet zemāka par kontakta temperatūru. Iespējamais skaidrojums ir tomēr šo mazo modulāciju ietekmē, kuras dēļ punkts nobīdās uz enerģijām kurās vieglāk, iegūt papildus elektronu, bet lai izvirzītu hipotēzi, ir vajadzīga pētījuma turpināšana.

# Secinājumi

- Tika formulēts matemātiskais modelis (nodaļas 1.1 un 1.2), kas apraksta kvantu punkta ar vairākiem līmeņiem mijiedarbību ar kontaktu caur tunelēšanas procesiem. Tika aprakstīti elementi un procesi, kas saista šos elementus.
- Izmantojot modelī aprakstītu procesu markovitāti, tika pielietota kinētisko vienādojumu sistēma(1.2.2), lai analītiski aprakstītu procesu norisi. Tas korektums tika pārbaudīts vienkāršajā robežgadījumā(2.2), salīdzinot stacionārus kinētisko vienādojumu sistēmas rezultātus ar lielā kanoniskā ansambļa paredzētām vērtībām. Tika apzināti kinētisko vienādojumu sistēmas ierobežojumi pielietošanai uzdevumiem, kas prasa aprakstu kvantu punktam ar vairākiem elektronu līmeņiem.
- Programmā *Wolfram Mathematica* tika izstrādāta programmatūra, kas balstoties uz Kinētisko Montekarlo metodi (1.5 un 2.1) ļauj aprēķināt kvantu punkta ar vairākiem līmeņiem stāvokļu evolūciju laikā. Tas ļauj aprēķināt gan atsevišķo līmeņu, gan kopējo kvantu punkta vidējo apdzīvotību, kas ļauj pētīt dažādu parametru ietekmi uz kvantu punkta uzlādes/izlādes efektivitāti un elektronu sadalījuma funkciju punktā. Ir iespēja mainīt gan punkta (starplīmeņu attālums  $\delta\epsilon$ ), gan tuneļbarjeras (vienelektrona stāvokļa sabrukšanas ātrums  $\gamma$ ), gan ārējus (sprieguma amplitūda  $A/q_e$ , kontakta temperatūra  $T$ , modulācijas periods  $\tau$ ) parametrus. Mainot simulēta kvantu punkta līmeņu skaitu, ir iespēja modelēt reālas sistēmas ar precizitāti, kas var būt pieskaņota uzdevuma prasībām.
- Metodes un modeļa korektums tika pārbaudīts, salīdzinot iegūtu simulāciju rezultātus ar kinētisko vienādojumu metodes iegūtiem analītiskiem rezultātiem vidējam apdzīvotībām vienkāršajā robežgadījumā (2.2). Tika iegūta arī sadalījuma funkcijas sakritība ar Fermī funkciju  $k_B T \gg \delta\epsilon$  gadījumā (2.4).
- Saskaņā ar citu pētījumu rezultātiem priekš robežgadījumā  $A \ll \delta\epsilon$ , tika novērota termisko fluktuāciju un galīga tunelēšanas ātruma ierobežojošs efekts uz kvantu punkta uzlādes kontrastu (2.3).
- Izmantojot simulācijas datus, tika novērots, ka kvantu punkta elektronu sadalījuma funkcijas līdzsvarā sakrīt ar Fermī funkcijas q-analogu (q-funkciju)(2.4). Izmantojot q-funkcijas aproksimācijas efektīvu temperatūru ir iespējams pētīt sadalījuma funkcijas relaksāciju uz

līdzsvaru, vairāku līmeņu kvantu punktam pie mazām temperatūrām. Modulējot spriegumu var novērot nelīdzsvara elektronu sadalījumu ierosinājumu, ko var efektīvi ar divu  $q$ -funkciju aproksimāciju.

Diemžēl pētījuma laikā netika iegūts iecerēts rezultāts par nelīdzsvara sadalījuma ietekmi uz uzlādes kontrastu kvantu punktā, kad  $\delta\epsilon \sim A$ . Tas arī būtu turpmākais pētījuma virziens. Toties ir izstrādāti instrumenti, lai veiktu šo pētījumu un ir analizēta sadalījuma funkcijas izmaiņa modulētajā kvantu punktā.

Par pētījuma galveno rezultātu, es uzskatu raksta (6) teorētisko rezultātu pārbaudi, izmantojot izstrādāto skaitlisko metodi, kas ļauj pētīt daudz plašāko sadalījumu funkcijas klāstu.

# Pateicības

Es gribu pateikt paldies savam darba vadītājam, Vjačeslavam Kaščejevam, kas deva man priekšstatu par to, kas nozīmē būt zinātniekam, kāda ir zinātnieka atbildība pret viņa izteiktām domām un vārdiem, to skaidrību un korektumu, par viņa mentora lomu manā dzīvē šo gadu garumā.

Paldies manai ģimenei un draugiem, kas vienmēr sniedza atbalstu neskatoties uz to, cik egoistisks dzīvesveids var būt studentam, kuram ir palikusi pāris nedēļas līdz darba nodošanai.

Paldies kolēģiem esošiem un bijušiem, par radošo atmosfēru un kopienas sajūtu, kas saglabājas, pat mūsu skaitam krietni samazinoties. Kolēģiem, kas atgriežas uz grupas sanāksmēm neskatoties uz to, kurā valstī un ar ko nodarbojas.

# Literatūra

1. C. W J Beenakker. Theory of Coulomb-blockade oscillations in the conductance of a quantum dot. *Physical Review B*, 44(4):1646--1656, 1991. ISSN 01631829. doi: 10.1103/PhysRevB.44.1646.
2. Lukas Fricke. *A self-referenced single-electron current source*. PhD thesis, University of Hanover, 2015.
3. Francesco Giazotto, Tero T. Heikkila, Arttu Luukanen, Alexander M. Savin, and Jukka P. Pekola. Opportunities for mesoscopics in thermometry and refrigeration: Physics and applications. *Reviews of Modern Physics*, 78(1):217--274, 2006. ISSN 00346861. doi: 10.1103/RevModPhys.78.217.
4. A. P J Jansen. Monte Carlo simulations of chemical reactions on a surface with time-dependent reaction-rate constants. *Computer Physics Communications*, 86(1-2):1--12, 1995. ISSN 00104655. doi: 10.1016/0010-4655(94)00155-U.
5. Bernd Kaestner and Vyacheslavs Kashcheyevs. Non-adiabatic quantized charge pumping with tunable-barrier quantum dots: a review of current progress. *Reports on Progress in Physics*, 78(10):1--27, 2014. ISSN 0034-4885. doi: 10.1088/0034-4885/78/10/103901. URL <http://arxiv.org/abs/1412.7150><http://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/78/10/103901>.
6. Vyacheslavs Kashcheyevs. Exact canonical occupation numbers in a Fermi gas with finite level spacing and a q-analog of Fermi-Dirac distribution. page 6, 2011. URL <http://arxiv.org/abs/1110.6264>.
7. Vyacheslavs Kashcheyevs and Janis Timoshenko. Modeling of a tunable-barrier non-adiabatic electron pump beyond the decay cascade model. *CPEM Digest (Conference on Precision Electromagnetic Measurements)*, pages 536--537, 2014. ISSN 05891485. doi: 10.1109/CPEM.2014.6898496.
8. I. M. Khaymovich and D. M. Basko. Recovery of SINIS turnstile accuracy in a strongly nonequilibrium regime. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 94(16):165158, 2016. ISSN 1550235X. doi: 10.1103/PhysRevB.94.165158. URL <http://arxiv.org/abs/1607.08800>.

9. Chiu Liu and Qian Niu. Non-equilibrium effects and self-heating in single-electron Coulomb blockade devices, 1997. ISSN 03701573.
10. Y. V. Nazazarov and Blanter Y. M. *Quantum transport*. Cambridge University Press, New York, 2009. ISBN 9780521832465. doi: 9780521832465.
11. Jukka P. Pekola, Olli Pentti Saira, Ville F. Maisi, Antti Kemppinen, Mikko Mottonen, Yuri A. Pashkin, and Dmitri V. Averin. Single-electron current sources: Toward a refined definition of the ampere. *Reviews of Modern Physics*, 85(4):1421--1472, 2013. ISSN 00346861. doi: 10.1103/RevModPhys.85.1421.
12. Elina Potanina. *Kļūdu mehānismi adiabātiska elektronu sūkņa darbībā*. Master thesis, University of Latvia, 2015.
13. Angel Rivas, K. Plato A. Douglas, Susana F. Huelga, and Martin B. Plenio. Markovian master equations: A critical study. *New Journal of Physics*, 12, 2010. ISSN 13672630. doi: 10.1088/1367-2630/12/11/113032. URL <http://arxiv.org/abs/0801.1757>.
14. Ruud Van Damme, Hajo Broersma, Julia Mikhal, Celestine Lawrence, and Wilfred Van Der Wiel. A simulation tool for evolving functionalities in disordered nanoparticle networks. *2016 IEEE Congress on Evolutionary Computation, CEC 2016*, pages 5238--5245, 2016. doi: 10.1109/CEC.2016.7748354. URL <http://ieeexplore.ieee.org/document/7748354/>.
15. Tineke L. Van Den Berg, Fredrik Brange, and Peter Samuelsson. Energy and temperature fluctuations in the single electron box. *New Journal of Physics*, 17(7):075012, 2015. ISSN 13672630. doi: 10.1088/1367-2630/17/7/075012.

# Pielikumi

## Pielikums A

### Divu līmeņu kvantu punkta analītiskais atrisinājums

Aprēķināsim kinētisko vienādojumu sistēmu 2.22-2.24 ar *Wolfram Mathematica* vides *DSolve* ve komandu:

```
In[347]:= systemSol = DSolve[
  {p00Eq /. AnalyticRules,
   pEq[1] /. AnalyticRules,
   pEq[2] /. AnalyticRules,
   p00[0] == 0, p[0, 1] == 1 (*electron start from the bottom level*), p[0, 2] == 0},
  {p[t, 1], p[t, 2], p00[t]}, t];

In[348]:= p00Anal = p00[t] /. systemSol[[1]][[1]];
p10Anal = p[t, 1] /. systemSol[[1]][[2]];
p01Anal = p[t, 2] /. systemSol[[1]][[3]];
```

Att. 2.25: *DSolve* koda piemērs

Tad, atrādot  $\gamma_1$  un  $\gamma_2$  atbilstošas izteiksmes sagrupēsim vienādojumus :

```
SymbSolP00 =
Collect[
  FullSimplify[
    Expand[p00Anal] /. {e-tγ(1+√f[μ1]f[μ2]) → decay1, e2tγ√f[μ1]f[μ2]-tγ(1+√f[μ1]f[μ2]) → decay2,
      etγ(-1-√f[μ1]√f[μ2]) → decay1, etγ(-1+√f[μ1]√f[μ2]) → decay2}, Assumptions → rules],
  {decay1, decay2}] /. {decay1 → e-tγ2, decay2 → e-tγ2}

e-tγ2 (-1 + f[μ1]) (√f[μ1] (-1 + f[μ2]) + √f[μ2] - f[μ1] √f[μ2]) /
  2 √f[μ1] (-1 + f[μ1] f[μ2]) +
e-tγ2 (-1 + f[μ1]) (√f[μ1] (-1 + f[μ2]) - √f[μ2] + f[μ1] √f[μ2]) /
  2 √f[μ1] (-1 + f[μ1] f[μ2]) - (-1 + f[μ1]) (-1 + f[μ2]) /
  -1 + f[μ1] f[μ2]
```

Att. 2.26: Viena līmeņa atrisinājuma grupēšanas piemērs ap  $\gamma_1$  un  $\gamma_2$

kur  $f[\mu_1] = f(\mu_1^1)$  un  $f[\mu_2] = f(\mu_2^1)$ . Trešais saskaitāmais atbilst stacionāram kanoniskām atrisinājumam  $P_{00}^{GC}$ , bet pirmais un otrais - komponentēs, kas norimst ar ātrumiem  $\gamma_1$  un  $\gamma_2$

# Pielikums B

## Kinetiskā Montekarlo metodes realizācija

```
m = 21; (*number of energy levels of quantum dot being modelled*)
n = If[EvenQ[m], m/2, (m+1)/2]; (*number of electrons in this simulation*)
α1 = If[EvenQ[m],
  Table[If[k ≤ m/2, 1, 0], {k, 1, m}],
  Table[If[k ≤ (m+1)/2, 1, 0], {k, 1, m}]];
(*Initialize quantum dot in frozen (T=0) Fermi-Dirac state as m-dimensional vector*)
ParameterRules = {δε → 1, kT → 3, A → 0, U0 → 0, Ec → 0, μ → 0, τ → 1, γ → 10};
rules = {A ≥ 0, τ > 0, δε > 0, kT > 0, m > 0, γ > 0, qe > 0, Ec > 0, Element[U0 | μ, Reals], f[μ1] > 0, f[μ2] > 0,
  t > 0, f[μ1] < 1, f[μ2] < 1};
Gstyle = {ImageSize → 400, LabelStyle → {FontSize → 15, Bold}};
Lstyle = LabelStyle → {Bold, FontSize → 14};
```

*Att. 2.27: Sistēmas parametru inicializācija*

## Program

### Parameters of calculation

```
in[462]- tFin = 4 τ /. ParameterRules;
finalStep = 1 * 10^6;
finalSimulation = 100;
tSlices = 1000;
```

### Program - Modulated Voltage

```
dummyt1 = SessionTime[];
v = Table[0, {i, 1, m}];
K = Table[0, {i, 1, finalStep}];
vInt = Table[0, {s, 1, finalSimulation}];
tPeriod = τ /. ParameterRules;
w$minus$1half = Table[wminus1half[i] /. ParameterRules, {i, m}];
w$minus$2half = Table[wminus2half[i] /. ParameterRules, {i, m}];
w$plus$1half = Table[wplus1half[i] /. ParameterRules, {i, m}];
w$plus$2half = Table[wplus2half[i] /. ParameterRules, {i, m}];
```

*Att. 2.28: Simulācijas parametru inicializācija un fizikālo lielumu aprēķināšana sistēmas parametriem*

```

Do[(* going over simulations*)
  v =  $\alpha$ 1;
  vHistory = Table[0, {k, 1, finalStep}]; (* all data during one simulation *)
  nCounter = 1; (* starting with full dot *)
  tSum = 0;
  Do[(*going over steps*)
    (* Finding time of leaving current state *)
    While[True (*always*), { (* We keep on adding time until transition happens before voltage switch*)
      W = 0;
      If[nCounter == 1, (* setting w[i] to the right value, which depends on number of electrons (fo
        {If[Mod[tSum, tPeriod] < tPeriod/2, w = w$minus$1half, w = w$minus$2half];
          W = v.w},
        {If[Mod[tSum, tPeriod] < tPeriod/2, w = w$plus$1half, w = w$plus$2half];
          W = (1 - v).w}
      ];
      tTrans = -1/W*Log[RandomReal[]];
      tSwitch = (tPeriod/2 - Mod[tSum, tPeriod/2]);
      If[tTrans < tSwitch, {(* finding what happens first - transition or voltage switch*)
        tSum += tTrans; (* if transition first add time and break cycle*)
        Break[]
      }, {
        tSum += tSwitch
      }];
    ];
    (* After cycle is completed tEvent =  $\Delta t_k$  *)
    vHistory[[k]] = {tSum, v}(* For step "k": saves configuration of dot in vHistory[[k]][[1]] and  $\Delta t_k$ 
      (* checking which interval suits the random number*)
      r2 = W*RandomReal[];
      Wsum = 0;
      i = 1;
      While[Wsum < r2, {
        Wsum += If[nCounter == 1, w[[i]]*v[[i]], w[[i]]*(1 - v[[i]])];
        i++;
      }];
      iTrans = i - 1;
      (* loading/unloading an electron & Switch for opposite process in the next iteration *)
      If[nCounter == 1, {v[[iTrans]] = 0, nCounter = 0}, {v[[iTrans]] = 1, nCounter = 1}];
      (*finish simulation at time tFin*)
      If[tSum > tFin, {
        K[[s]] = k;
        Break[];
      }
    ], {k, 1, finalStep}];
  vInt[[s]] = Table[Interpolation[Table[{vHistory[[k]][[1]], vHistory[[k]][[2]][[i]]}, {k, K[[s]]}],
    , {s, 1, finalSimulation}]](* end of simulating *)
  pInt = Total[vInt] / finalSimulation;
  pTotalInt = Total[pInt] - (n - 1);

```

*Att. 2.29: Pamatkods: Cikls pāri simulāciju skaitam ietver ciklu pāri vienas simulācijas soļiem. Iegūtie dati, tiek transformēti interpolācijas funkcijās, lai paātrinātu aprēķinus*

## **Pielikums C**

### **Publicitāte**

A.Baronovs. Nelīdzsvara ierosinājumu ietekme uz lādiņa satveršana kontrastu kvantu punktos, Latvijas Universitātes 75. zinātniskā konferencē (2017), Rīga

Maģistra darbs "Nelīdzsvara elektronu enerģijas sadalģjuma funkcijas modelģšana periodiski modulģtajam kvantu punktam" izstrādģts LU Fizikas un matemģtikas fakultģtģ.

Ar savu parakstu apliecinu, ka pģtģjums ir veikts patstģvģgi, izmantoti tikai norģdģtie informģcijas avoti un iesniegtģ darba elektroniskģ versija atbilst izdrukai.

Autors: Antons Baronovs

*(paraksts, datums)*

Rekomendģju/nerekomendģju darbu aizstģvģšanai.

Vadģtģjs: Dr. fiz. Vjačeslavs Kaščejevs

*(paraksts, datums)*

Recenzents: Dr. fiz. Dmitrijs Bočarovs

*(paraksts, datums)*

Darbs iesniegts Fizikas nodaļas sekretariģtģ. Ar savu parakstu apliecinu, ka darba elektroniskģ versija ir augšupielģdģta LU informatģvajģ sistģmģ.

Dekģna pilnvarotģ persona: metodiķe Dzintra Holsta

*(paraksts, datums)*

Darbs aizstģvģts maģistra gala pģrbaudģjuma komisijas sģdģ

*(datums, prot. nr., vģrtģjums)*

Komisijas sekretģrs:

*(paraksts, atšifrģjums)*