



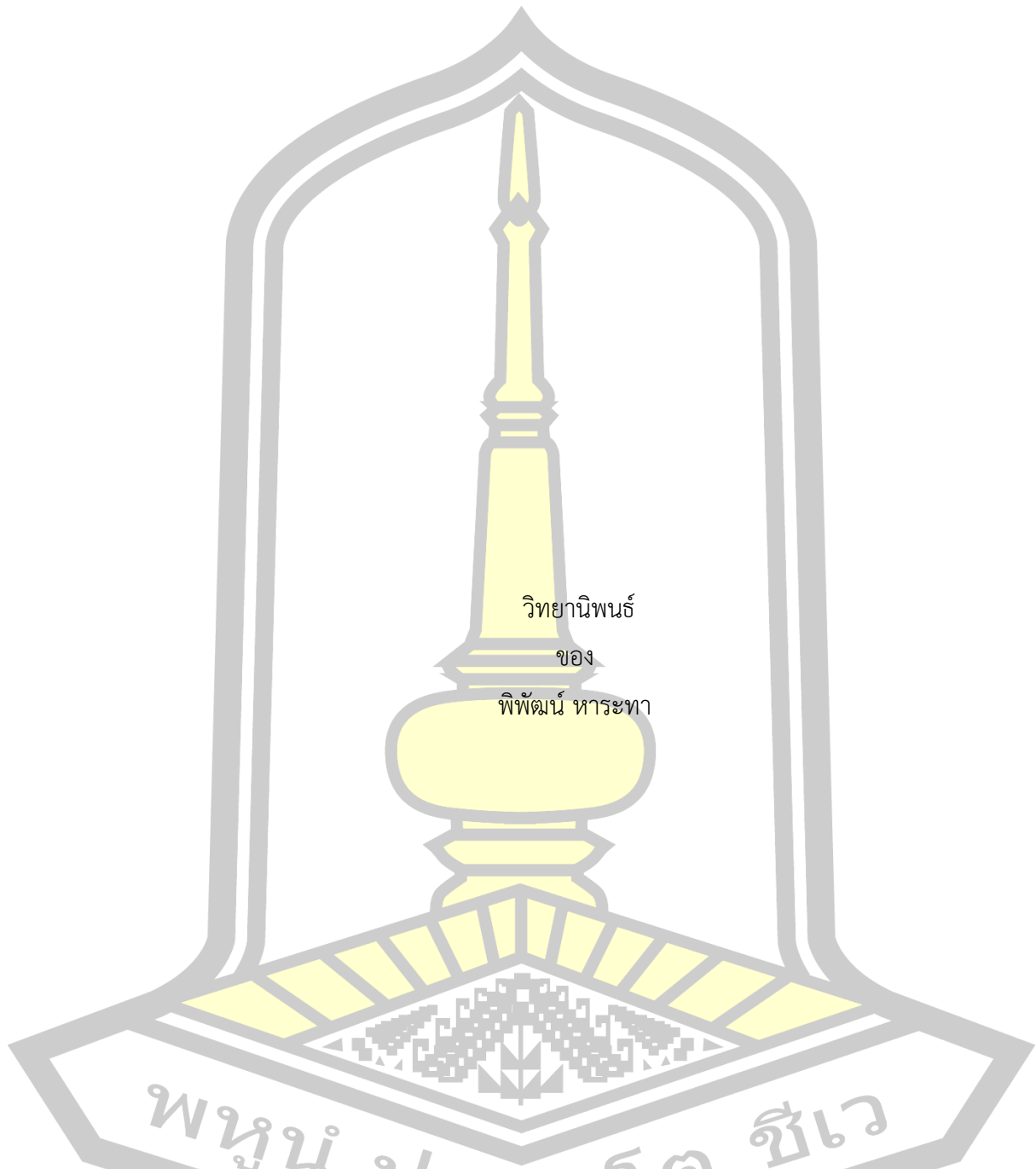
แอกซ์ซันยงผลของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม

วิทยานิพนธ์
ของ
พิพัฒน์ หาระทา

เสนอต่อมหาวิทยาลัยมหาสารคาม เพื่อเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร
ปริญญาปรัชญาดุษฎีบัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์
มิถุนายน 2564

ลิขสิทธิ์เป็นของมหาวิทยาลัยมหาสารคาม

แคะชั้นยั้งผลของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม



วิทยานิพนธ์

ของ

พิพัฒน์ ทหาระทา

พูน บุญเกิด โชเว

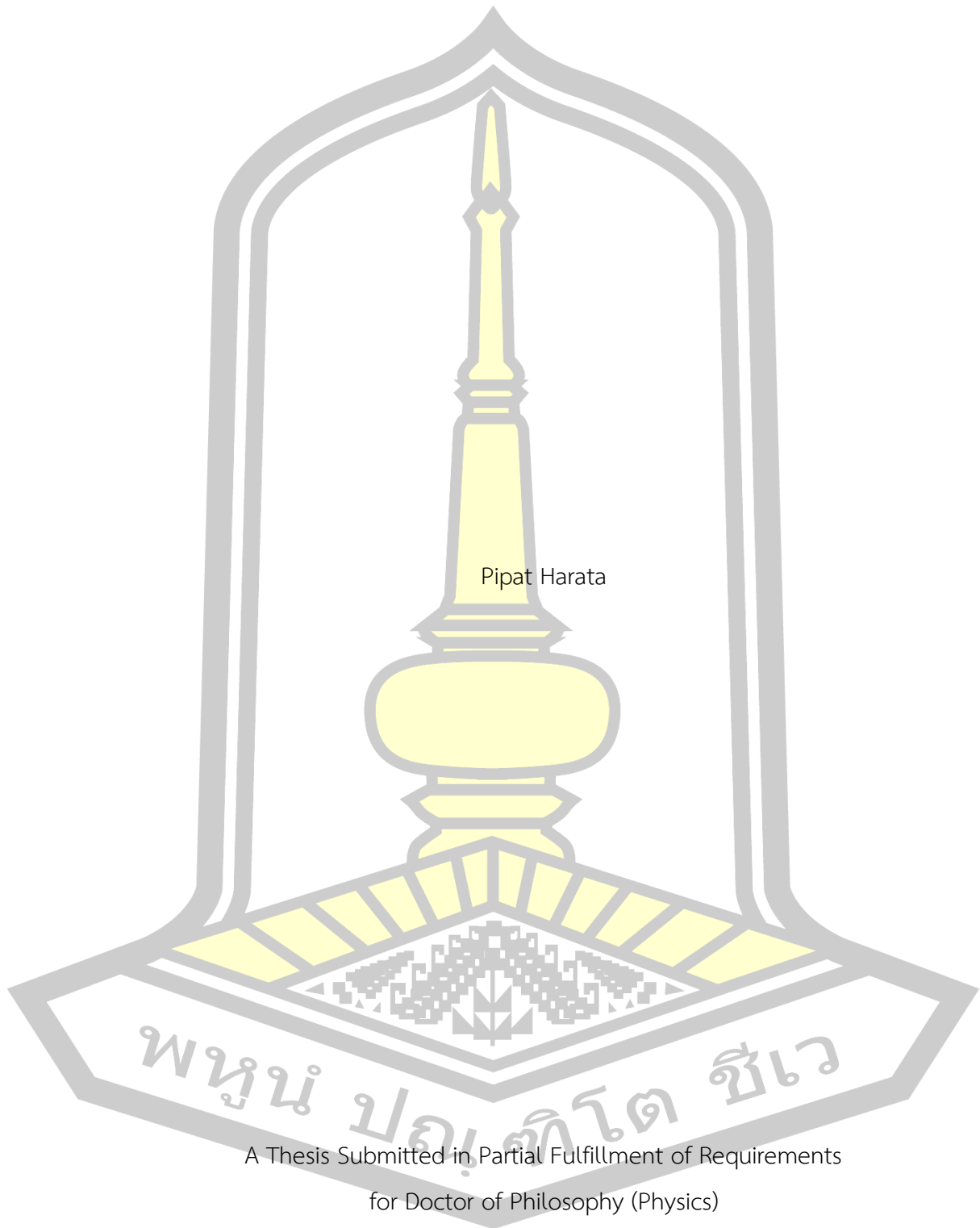
เสนอต่อมหาวิทยาลัยมหาสารคาม เพื่อเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร

ปริญญาปรัชญาดุษฎีบัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์

มิถุนายน 2564

ลิขสิทธิ์เป็นของมหาวิทยาลัยมหาสารคาม

Effective Action of a Finite Serial Metallic Islands System



Pipat Harata

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of Requirements
for Doctor of Philosophy (Physics)

June 2021

Copyright of Mahasarakham University



คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์ ได้พิจารณาวิทยานิพนธ์ของนายพิพัฒน์ ทหาระทา แล้ว เห็นสมควรรับเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาปรัชญาดุษฎีบัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์ ของมหาวิทยาลัยมหาสารคาม

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

..... ประธานกรรมการ

(รศ. ดร. สุธี บุญช่วย)

..... อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก

(ผศ. ดร. ประธาน ศรีวิไล)

..... กรรมการ

(ผศ. ดร. เจษฎา จูรีมาศ)

..... กรรมการ

(รศ. ดร. อรวรรณ ฤทธิเดช)

..... กรรมการ

(ดร. กฤษณพงศ์ ลิ้มตระกูล)

มหาวิทยาลัยขอนแก่นให้รับวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญา ปรัชญาดุษฎีบัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์ ของมหาวิทยาลัยมหาสารคาม

.....
 พหุบัณฑิตศึกษา

(ศ. ดร. ไพโรจน์ ประมวล)

(รศ. ดร. กริสน์ ชัยมูล)

คณบดีคณะวิทยาศาสตร์

คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย

ชื่อเรื่อง แอคชันยังผลของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม
 ผู้วิจัย พิพัฒน์ หาระทา
 อาจารย์ที่ปรึกษา ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ประธาน ศรีวิไล
 ปริญญา ปรัชญาดุษฎีบัณฑิต สาขาวิชา ฟิสิกส์
 มหาวิทยาลัย มหาวิทยาลัยมหาสารคาม ปีที่พิมพ์ 2564

บทคัดย่อ

ในวิทยานิพนธ์นี้ ได้นำเสนอวิธีการคำนวณแอคชันยังผลของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรมด้วยวิธีการคำนวณปริพันธ์ตามวิถีในเวลาจินตภาพ โดยบรรยายอิล็กตรอนที่อยู่ในสถานะถูกกระตุ้นทั้งหมด ที่อยู่ในขั้วไฟฟ้าและในเกาะโลหะด้วยตัวแปรแกรสมันน์ พลังงานการเพิ่มประจุของระบบถูกเขียนให้อยู่ในรูปของตัวแปรเฟสซึ่งเป็นตัวแปรสังยุคของจำนวนอิล็กตรอนที่อยู่ในเกาะโลหะ ในกรณีที่รอยต่อเป็นโลหะออกไซด์ซึ่งมีช่องการทะลุผ่านเป็นจำนวนมาก ทำให้แอคชันของการทะลุผ่านที่ขึ้นอยู่กับตัวแปรเฟสนั้นสามารถคำนวณได้โดยตรง ดังนั้น ฟังก์ชันแบ่งส่วนสามารถเขียนให้อยู่ในรูปปริพันธ์ตามวิถีของตัวแปรเฟส โดยความน่าจะเป็นของเส้นทางถูกเขียนอยู่ในพจน์ของแอคชันยังผลของระบบ นอกจากนี้ ในวิทยานิพนธ์นี้ได้นำเสนอวิธีการคำนวณจำนวนอิล็กตรอนเฉลี่ยของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรมให้อยู่ในพจน์ของแอคชันยังผล พร้อมทั้งได้ยกตัวอย่าง การคำนวณจำนวนอิล็กตรอนเฉลี่ยเพื่อนำไปประยุกต์ใช้ในการอธิบายปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์ที่เกิดขึ้นในระบบสองและสี่เกาะโลหะ

สำหรับระบบสองเกาะโลหะ จากผลการคำนวณจำนวนอิล็กตรอนเฉลี่ยในระบบพบว่า การเพิ่มขึ้นของจำนวนอิล็กตรอนเฉลี่ยมีลักษณะเป็นแบบขั้นบันได โดยความคมชัดของขั้นบันไดจะถูกกลบเลือนไปเมื่ออุณหภูมิเพิ่มสูงขึ้น ซึ่งเป็นผลเนื่องจาก การลดลงของปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์นั่นเอง นอกจากนี้ ได้นำเสนอวิธีการสร้างแผนภาพเสถียรแบบใหม่ของระบบ 2 เกาะโลหะ โดยใช้ภาพฉายของจำนวนอิล็กตรอนเฉลี่ยรวมบนระนาบของตัวแปรแรงดันไฟฟ้าที่ผู้สังเกตพบว่า ภาพฉายดังกล่าวสามารถใช้อธิบายการเกิดขึ้นของปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์ได้เป็นอย่างดี เนื่องจากแผนภาพเสถียรนี้ ได้พิจารณาผลของปรากฏการณ์การทะลุผ่านร่วมด้วย ดังนั้น แผนภาพเสถียรนี้จึงถูกเรียกว่า แผนภาพเสถียรแบบควอนตัม จากนั้น เมื่อพิจารณาการเปลี่ยนแปลงของจำนวนอิล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบเมื่อเทียบกับแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกต พบว่า จุดที่เกิดการเปลี่ยนแปลงสูงที่สุดมีค่าคงที่ ไม่ขึ้นอยู่อุณหภูมิ นอกจากนี้ วิทยานิพนธ์นี้ได้แสดงวิธีการสร้างแผนภาพเสถียรของระบบสี่เกาะโลหะ ในกรณีที่อุณหภูมิมีค่าต่ำๆ จนสามารถละเลยผลของ

ปรากฏการณ์การทะลุผ่านได้ โดยแบ่งการพิจารณาสองกรณี กล่าวคือ กำหนดให้แรงดันไฟฟ้าขั้วเกตที่ 2 และ 3 เท่ากัน มีค่าเป็น 0.0 และ 0.5 ตามลำดับ และเปลี่ยนแปลงเฉพาะแรงดันไฟฟ้าเฉพาะขั้วเกตที่ 1 และ 4 พบว่า แผนภาพเสถียรดังกล่าว สามารถแสดงจุดควอรูโพล์ (quadrupole point) ซึ่งเป็นจุดที่อิเล็กตรอนสามารถมีระดับพลังงานเท่ากัน 4 สถานะ ยิ่งไปกว่านั้น กระบวนการควอนตัมเซลล์ลูลาร์อัตโนมัติ (quantum cellular automata process) ซึ่งเป็นปรากฏการณ์ที่อิเล็กตรอนสองตัวทะลุผ่านไปพร้อมกัน ก็ได้แสดงไว้ในแผนภาพเสถียรนี้ด้วยเช่นกัน

คำสำคัญ : แอคชันยังผล, ระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อกันแบบอนุกรม, ปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมป์



TITLE Effective Action of a Finite Serial Metallic Islands System
AUTHOR Pipat Harata
ADVISORS Assistant Professor Prathan Srivilai , Ph.D.
DEGREE Doctor of Philosophy **MAJOR** Physics
UNIVERSITY Mahasarakham **YEAR** 2021
University

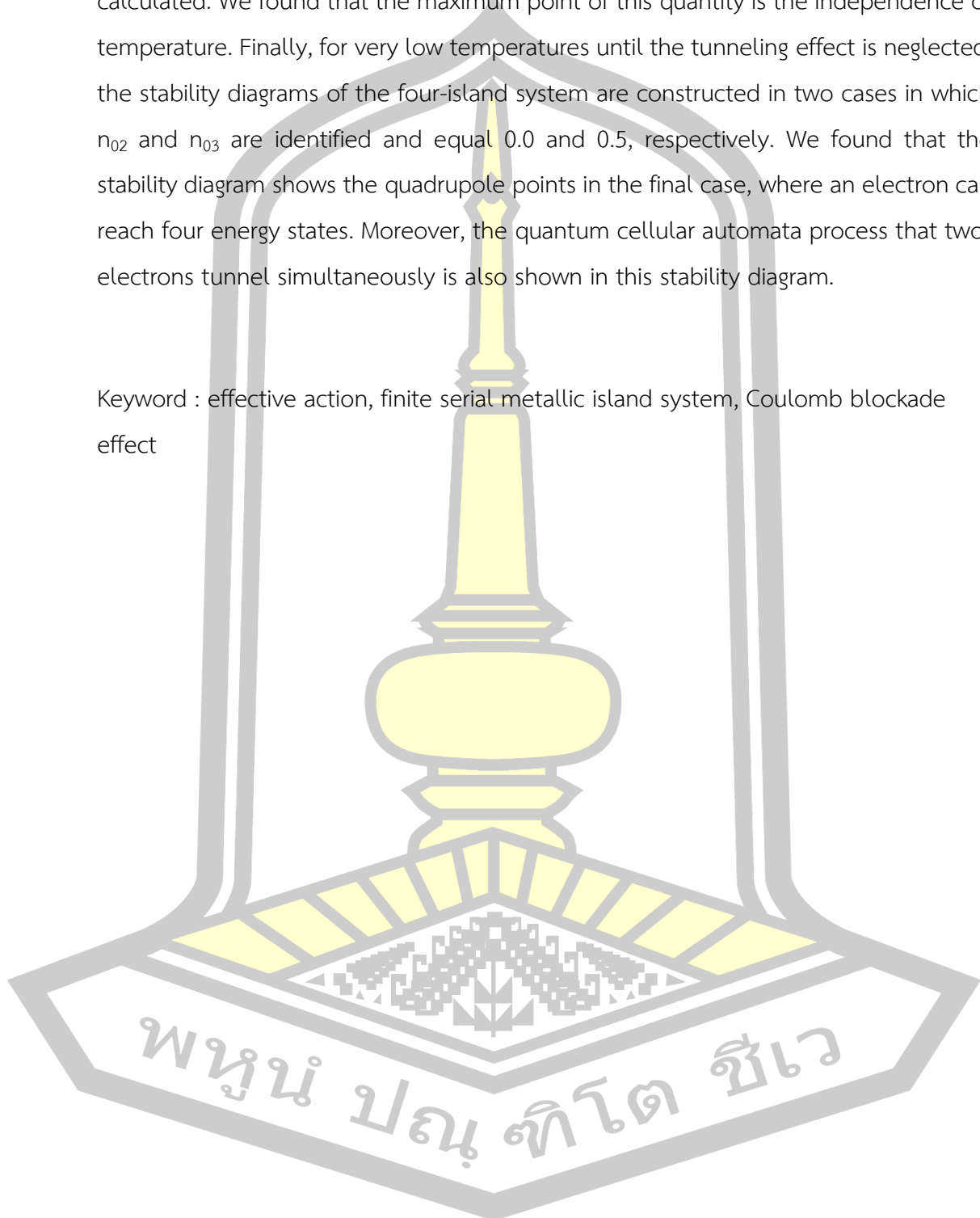
ABSTRACT

In this thesis, we present a calculation of the effective action of a finite serial metallic island system by imaginary-time path integrals formalism. To this purpose, all electronic excitations in the lead and island electrodes are described using Grassmann numbers. Coulomb charging energy of the system is represented in terms of phase fields conjugate to the island charges. For metallic oxide-layer tunnel junctions with many tunneling channels, the tunneling action phase dependence can also be determined explicitly. Therefore, one obtains a representation of the partition function as a path integral over phase fields with a path probability given in terms of an analytically known effective action functional. Furthermore, we propose a calculation of the average electron number on each island in terms of effective action. Finally, as the demonstrations, the Coulomb blockade effect in 2 and 4 island systems are described in terms of the average electron number.

For the two-island system, we have calculated the average electron numbers and found that the average electron numbers increase as a step function with the two gate voltage variables. Due to the reduction of the Coulomb blockade effect, the sharpness of the step function is smeared out by increasing temperature. Furthermore, we propose a new method to construct a stability diagram of the two island system by a projection image of the total average electron number on the gate voltage variables plane. The stability diagram is able to describe the occurring of the Coulomb blockade effect very well. Since the tunneling effect is considered, the stability diagram is called the quantum stability diagram. In addition, the differences

of the average electron number respected with the gate voltage variables are calculated. We found that the maximum point of this quantity is the independence of temperature. Finally, for very low temperatures until the tunneling effect is neglected, the stability diagrams of the four-island system are constructed in two cases in which n_{02} and n_{03} are identified and equal 0.0 and 0.5, respectively. We found that the stability diagram shows the quadrupole points in the final case, where an electron can reach four energy states. Moreover, the quantum cellular automata process that two-electrons tunnel simultaneously is also shown in this stability diagram.

Keyword : effective action, finite serial metallic island system, Coulomb blockade effect



กิตติกรรมประกาศ

ในงานวิจัยนี้ผู้ทำวิจัยขอขอบพระคุณ ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ประธาน ศรีวิไล อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ ที่ได้กรุณาให้คำปรึกษา แนะนำ สั่งสอน อบรมให้มีความมุ่งมั่นพยายามในการทำงานวิจัย และคอยให้โอกาสในหลายๆ เรื่อง พร้อมทั้งคอยให้ความช่วยเหลือในทุกปัญหาทั้งในการทำงาน และการใช้ชีวิต

ขอขอบพระคุณ รองศาสตราจารย์ ดร.สุธี บุญช่วย ที่ได้สละเวลาเพื่อเป็นประธาน คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์ และให้คำปรึกษาและแนะนำการทำงานวิจัยนี้

ขอขอบพระคุณคณะกรรมการสอบ ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.เจษฎา จุริมาศ รองศาสตราจารย์ ดร.อรุณวรรณ ฤทธิเดชและดร.กฤษณพงษ์ ลิ้มตระกูล ที่คอยช่วยเหลือและให้คำแนะนำในการทำวิจัย รวมทั้งเสียสละเวลาในการตรวจสอบและแก้ไขรูปเล่มวิทยานิพนธ์นี้จนเสร็จสมบูรณ์

ขอขอบพระคุณอาจารย์ประจำภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหาสารคาม ทุกท่านที่ให้ความกรุณาอบรมสั่งสอน และความรู้ในการทำงานวิจัยในทุกๆด้าน

ขอบคุณอาจารย์อังคาร อินทนิล(พี่หยก) และอาจารย์ตะวัน ทองสุข(พี่ตะวัน) อาจารย์ประจำมหาวิทยาลัยกาฬสินธุ์ที่ให้คำแนะนำในการเขียนโปรแกรมการคำนวณ

ขอบคุณ Dr.Andrea Meo Postdoc. หน่วยวิจัยแม่เหล็กและวัสดุศาสตร์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหาสารคาม ที่ได้ช่วยเหลือเรื่องติดตั้งระบบคอมพิวเตอร์ประมวลผลความเร็วสูงและที่ปรึกษาเรื่องการคอมพิวเตอร์ตลอดจนการเขียนโปรแกรมในการจำลองระบบในงานวิจัย

ขอขอบพระคุณพี่ๆ เพื่อนๆ น้องๆ ในมหาวิทยาลัยมหาสารคามทุกท่าน ที่คอยให้คำปรึกษา กำลังใจ และการช่วยเหลือในการใช้ชีวิตและการทำวิทยานิพนธ์

ขอขอบพระคุณทุนเรียนดีวิทยาศาสตร์แห่งประเทศไทยที่สนับสนุนทุนในการศึกษาจนจบปริญญาเอก และประสบการณ์ในการเข้าร่วมงานประชุมวิชาการต่างๆตลอดหลักสูตร

สุดท้าย ขอกราบขอบพระคุณ คุณพ่อสำราญ หาระทา และคุณแม่รำพึง หาระทา ที่เป็นกำลังใจในทุกเรื่องของชีวิตนี้ และคอยเป็นห่วง สนับสนุนในทุกๆ เรื่องไม่เคยห่าง

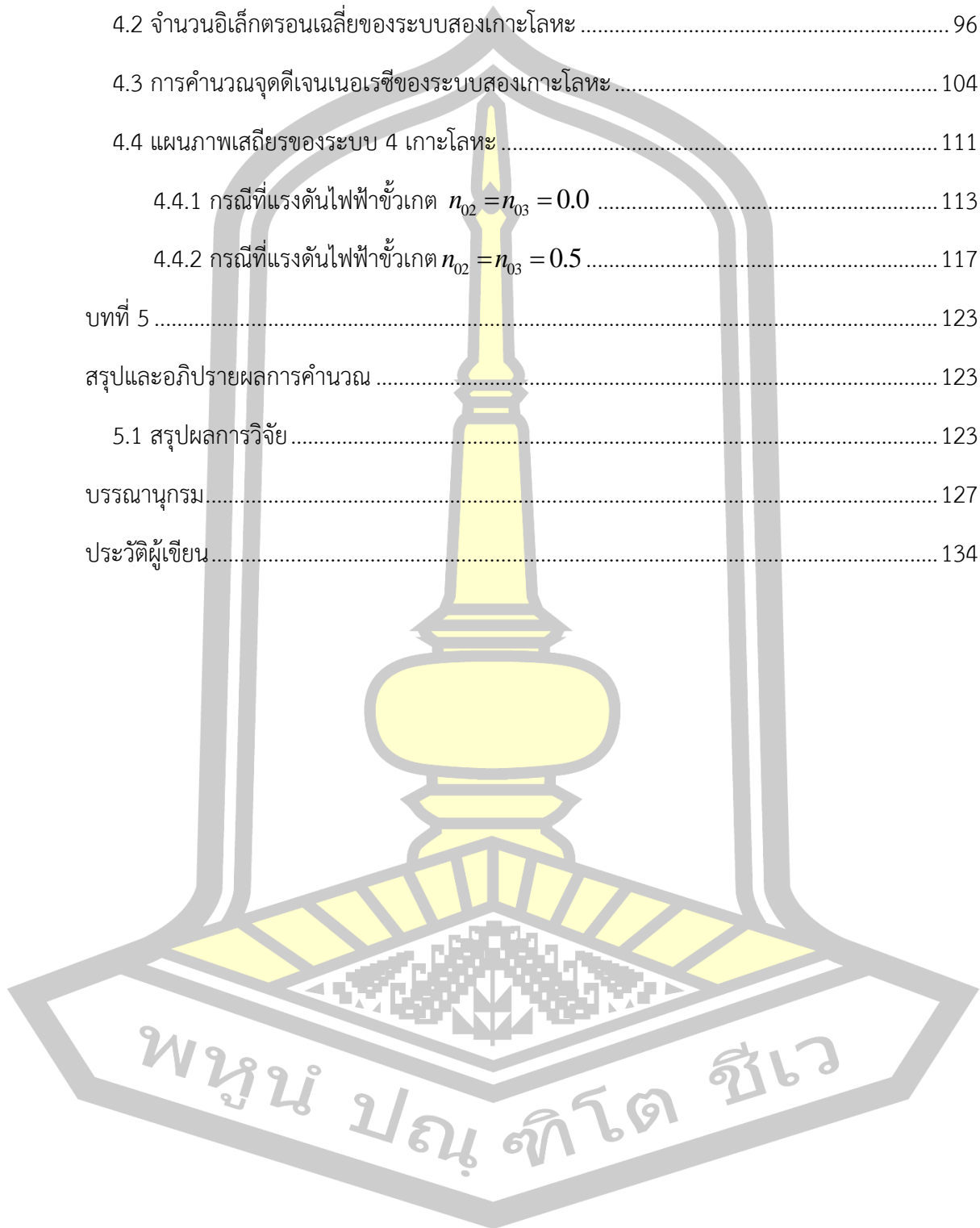
พิพัฒน์ หาระทา

สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อภาษาไทย.....	ง
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ.....	ฉ
กิตติกรรมประกาศ.....	ช
สารบัญ.....	ณ
สารบัญภาพ.....	ฉ
สารบัญตาราง.....	ด
บทที่ 1.....	1
บทนำ.....	1
1.1 ที่มาและความสำคัญ.....	1
1.2 วัตถุประสงค์ของการวิจัย.....	7
1.3 ขอบเขตของงานวิจัย.....	7
1.4 สถานที่ทำการวิจัย.....	8
1.5 ประโยชน์ที่ได้รับ.....	8
บทที่ 2.....	9
ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง.....	9
2.1 ปรากฏการณ์การขีดขวางแบบคูลอมบ์.....	9
2.2 กล้องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว.....	13
2.3 ทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว.....	19
2.4 ป้อนอิเล็กทรอนิกส์ชนิดโลหะ.....	25
2.5 การคำนวณปริพันธ์ตามวิถีของไฟน์แมน.....	29
2.6 การควอนไทส์ลำดับที่สองและพีชคณิตของแกรสมันน์.....	35

2.6.1 การควอนไทส์ลำดับที่สอง.....	36
2.6.2 พิษคณิตของแกรสมันน์.....	39
2.6.2.1 แรงจูงใจและนิยามสำหรับพิษคณิตของแกรสมันน์.....	40
2.6.2.2 แคลคูลัสสำหรับตัวแปรของแกรสมันน์.....	41
2.6.2.3 สมการการคำนวณปริพันธ์ที่สำคัญ.....	45
2.7 สถานะโคเฮเรนต์ของเฟอร์มิออน.....	48
2.8 ปริพันธ์ตามวิถีของสถานะโคเฮเรนต์.....	53
2.9 เฟอร์มิออนที่ไม่มีอันตรกิริยาต่อกัน.....	55
2.10 การคำนวณปริพันธ์ด้วยวิธีมอนติคาร์โล.....	59
2.10.1 การคำนวณค่าปริพันธ์ในหลายมิติ.....	59
2.10.2 การสุ่มตัวอย่างด้วยวิธีมอนติคาร์โล.....	62
2.10.3 การสุ่มตัวอย่างของเส้นทางในจินตภาพ.....	66
2.10.4 การวิเคราะห์เชิงสถิติของข้อมูลมอนติคาร์โล.....	68
บทที่ 3.....	70
วิธีดำเนินการวิจัย.....	70
3.1 ฮามิลโทเนียนของระบบ.....	70
3.2 ฟังก์ชันแบ่งส่วนในรูปของฟังก์ชันนอล.....	72
3.3 แอคชันของคูลอมป์.....	74
3.4 แอคชันของการทะลุผ่าน.....	79
3.5. การเปลี่ยนตัวแปรสำหรับกับวิธีมอนติคาร์โล.....	91
3.5.1 พลังงานที่ไม่มีหน่วย.....	91
3.5.2 ตัวเลขไวน์ดิง.....	93
บทที่ 4.....	95
การนำไปประยุกต์ใช้และผลการคำนวณ.....	95

4.1 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม	95
4.2 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของระบบสองเกาะโลหะ	96
4.3 การคำนวณจุดดีเจนเนอเรซีของระบบสองเกาะโลหะ	104
4.4 แผนภาพเสถียรของระบบ 4 เกาะโลหะ	111
4.4.1 กรณีที่แรงดันไฟฟ้าขั้วเกต $n_{02} = n_{03} = 0.0$	113
4.4.2 กรณีที่แรงดันไฟฟ้าขั้วเกต $n_{02} = n_{03} = 0.5$	117
บทที่ 5	123
สรุปและอภิปรายผลการคำนวณ	123
5.1 สรุปผลการวิจัย	123
บรรณานุกรม	127
ประวัติผู้เขียน	134



สารบัญภาพ

หน้า

ภาพประกอบ 1.1 (ซ้าย) ภาพถ่ายด้วยกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนแบบส่องกราด (scanning electron microscope; SEM) ของทรานซิสเตอร์แบบอิเล็กตรอนเดี่ยวชนิดโลหะ [28] และ (ขวา) ความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวที่อุณหภูมิค่าต่าง ๆ ซึ่งค่าความนำไฟฟ้าที่ได้จากการทดลองแสดงด้วยจุด และเส้นทึบแสดงผลที่ได้จากการคำนวณโดยใช้วิธีควอนตัมมอนติคาร์โล [29]	3
ภาพประกอบ 1.2 (ซ้าย) โครงสร้างของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว ที่ถ่ายด้วยกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนชนิดส่องกราด (scanning electron microscope; SEM) [32] และ (ขวา) ความนำไฟฟ้าสูงสุดของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวที่อุณหภูมิต่างๆ สีดำ เป็นข้อมูลที่ได้จากการทดลอง สีแดง เป็นข้อมูลที่ได้จากการคำนวณด้วยวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล และสีน้ำเงิน เป็นค่าความนำไฟฟ้าที่ได้จากวิธีการประมาณแบบกึ่งฉบับ (semi-classical approximation) [33].....	4
ภาพประกอบ 1.3 อุปกรณ์อิเล็กตรอนเดี่ยวแบบสามเกาะโลหะที่ถ่ายด้วยกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนเดี่ยวแบบส่องกราด สีเหลือง เป็นขั้วไฟฟ้าที่ทำควบคุมพลังงานศักย์สถิตของเกาะโลหะและควอนตัมพอยต์คอนแทค (quantum point contact) โดย A B และ C ที่อยู่ในวงกลมสีดำ เป็นตำแหน่งโดยประมาณของเกาะโลหะ ลูกศร เป็นเส้นทางของกระแสทะลุผ่านที่เป็นไปได้ผ่านเกาะโลหะและควอนตัมพอยต์คอนแทค ตัวเลขโรมัน เป็นโหนดมิกคอนแทค (Ohmic contact) α β และ γ เป็นขั้วเกตที่ใช้ควบคุมเกาะโลหะ A B และ C ตามลำดับ d1 d2 และ d3 เป็นควอนตัมพอยต์คอนแทคซึ่งทำหน้าที่เป็นเซนเซอร์วัดประจุ (charge sensor) [37].....	5
ภาพประกอบ 1.4 (ซ้าย) ผลการคำนวณเชิงตัวเลขของแผนภาพเสถียรของระบบสามเกาะโลหะที่ขึ้นกับศักย์ไฟฟ้าจากขั้วเกตของเกาะโลหะ A และ C กล่าวคือ V_α และ V_γ ตามลำดับ เส้นสีเหลืองเป็นเส้นของพลังงานการเพิ่มประจุ สีชมพู เป็นบริเวณที่มีจำนวนประจุของแต่ละเกาะโลหะคงที่ และจุดตัดของเส้นของพลังงานการเพิ่มประจุ เป็นบริเวณที่เกิดการส่งผ่านของอิเล็กตรอน และ (ขวา) ผลการวัดที่ได้จากการทดลองวัดแผนภาพเสถียรของจำนวนประจุ	5
ภาพประกอบ 1.5 แบบจำลองของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม	7
ภาพประกอบ 2.1 การเพิ่มอิเล็กตรอนหนึ่งตัวเข้าไปในเกาะโลหะ ในภาพประกอบ (ก) และ (ข) แสดงการเพิ่มอิเล็กตรอนเข้าไปในเกาะโลหะ ในกรณีที่มีประจรรวมสุทธิและสนามไฟฟ้า (\vec{E}) เป็นศูนย์ และในกรณีที่ประจรรวมสุทธิและสนามไฟฟ้าไม่เป็นศูนย์ ตามลำดับ.....	10

ภาพประกอบ 2.2 การทะลุผ่านของอิเล็กตรอนผ่านรอยต่อที่มีค่าความประจุไฟฟ้า C และระบบมีค่าความต้านทาน R	11
ภาพประกอบ 2.3 รอยต่อการทะลุผ่านหนึ่งรอยต่อ (ในบริเวณเส้นปะ) สามารถแทนได้ด้วยด้วยความจุไฟฟ้า C ต่อขนานกับตัวต้านทาน R_T กำหนดให้รอยต่อการทะลุผ่านต่ออนุกรมกับสิ่งแวดล้อมที่มีความต้านทาน R	13
ภาพประกอบ 2.4 วงจรสมมูลของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งประกอบไปด้วยรอยต่อการทะลุผ่าน C_r และรอยต่อตัวเก็บประจุ C_g ที่สร้างให้มีความหนาแน่นมากพอจนกระทั่งอิเล็กตรอนไม่สามารถทะลุผ่านไปได้ โดยเส้นประแสดงขอบเขตของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว	14
ภาพประกอบ 2.5 จำนวนประจุมวลสุทธิในกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวจะมีการเปลี่ยนแปลงเพิ่มขึ้นหรือลดลงหนึ่งตัวที่จุดดีเจนเนอเรซี กล่าวคือ $n_g = n \pm 1/2$ โดย n เป็นจำนวนประจุที่อยู่ในกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งบริเวณที่เกิดปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์ เป็นบริเวณที่จำนวนอิเล็กตรอนมีค่าคงที่ [20]	16
ภาพประกอบ 2.6 การเปลี่ยนแปลงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวในกรณีที่เกิดปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์แสดงด้วยเส้นทึบสีแดง และในกรณีที่ไม่เกิดปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์แสดงด้วยเส้นปะ	17
ภาพประกอบ 2.7 ความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวกับค่าความนำไฟฟ้าในช่วง $0 \leq g \leq 0.45$ [44]	18
ภาพประกอบ 2.8 วงจรสมมูลของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว โดยบริเวณเส้นประแสดงขอบเขตของเกาะที่ถูกแยกออกจากแหล่งไฟฟ้าจากภายนอกด้วยรอยต่อการทะลุผ่านและรอยต่อตัวเก็บประจุ	19
ภาพประกอบ 2.9 เงื่อนไขที่ทำให้เกิดกระแสทะลุผ่านทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวจากทางด้านซ้ายไปยังด้านขวาของระบบ	20
ภาพประกอบ 2.10 แผนภาพเสถียรของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว โดยบริเวณสีเทาเป็นบริเวณที่มีจำนวนประจุคงที่ ซึ่งเกิดจากผลของปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์ ตัวเลขที่อยู่ในบริเวณดังกล่าวหมายถึงจำนวนประจุที่อยู่ในเกาะ ซึ่งแสดงในภาพ (ก) และความสัมพันธ์ระหว่างกระแสที่ไหลผ่านทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวกับความต่างศักย์ที่ขั้วเกต ในกรณีที่ความต่างศักย์ระหว่างขั้วซอร์สและเดรน V_{ds} มีค่าน้อยดังแสดงด้วยเส้นประ ซึ่งแสดงในภาพ (ข) [47]	21

ภาพประกอบ 2.11 ความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวที่อุณหภูมิค่าต่าง ๆ โดยค่าความนำไฟฟ้าที่ได้จากผลการทดลองแสดงด้วยจุด และเส้นทึบแสดงผลที่ได้จากการคำนวณโดยใช้วิธีควอนตัมมอนติคาร์โล [48].....	22
ภาพประกอบ 2.12 ผลการคำนวณจำนวนประจุอิเล็กทรอนิกส์ที่รอยต่อการทะลุผ่านของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว โดยข้อมูลสีดำ เป็นผลที่ได้จากการคำนวณโดยใช้กลศาสตร์แบบฉบับ และข้อมูลสีแดง เป็นผลที่ได้จากการคำนวณโดยวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล [46].....	24
ภาพประกอบ 2.13 วงจรสมมูลของบีมอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว [34] ที่รวมขั้วซอร์สหมายเลข 1 กับ 2 และขั้วเดรนหมายเลข 1 กับ 2 เข้าเป็นขั้วไฟฟ้า V_L และ V_R ตามลำดับ ได้ถูกรวมเข้าด้วยกันเพื่อใช้ในการศึกษาปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์ พารามิเตอร์ทั้งหมด ในภาพประกอบ 2.13 ได้แสดงไว้ในตาราง 2.1.....	25
ภาพประกอบ 2.14 ลักษณะการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนที่สามารถเคลื่อนที่ได้ทั้งหมด 6 กรณี ดังแสดงด้วยลูกศร.....	27
ภาพประกอบ 2.15 แผนภาพเสถียรของบีมอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว [51] ที่คำนวณจากพารามิเตอร์ในตาราง 2.1.....	28
ภาพประกอบ 2.16 ผลการทดลองวัดค่าความนำไฟฟ้าของบีมอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว [33] ที่เกิดในช่วงอุณหภูมิ 27 mK ($k_B T/E_C = 0.011$) ถึง 1 K ($k_B T/E_C = 0.44$).....	29
ภาพประกอบ 2.17 ตัวอย่างเส้นทางจินตภาพที่ถูกแบ่งออกเป็น 10 ช่วงเท่า ๆ กันในช่วงเวลาจินตภาพ $\beta = (\tau_{10} - \tau_0)$	67
ภาพประกอบ 4.1 แบบจำลองระบบ 2 เกาะโลหะซึ่งประกอบไปด้วยรอยต่อการทะลุผ่าน 3 รอยรอยต่อ และรอยต่อของตัวเก็บประจุระหว่างเกาะโลหะที่ 1 และ 2 ที่ต่อกับขั้วไฟฟ้าเกต V_{g1} และ V_{g2} โดยมีค่าความจุ C_{g1} , C'_{g1} , C'_{g2} และ C_{g2} ตามลำดับ ซึ่งแบบจำลองดังกล่าวนี้สอดคล้องกับตัวอย่างที่ 2 (sample 2) ในเอกสารอ้างอิง [32].....	97
ภาพประกอบ 4.2 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะโลหะที่ 1 และ 2 ในระบบสองเกาะโลหะแสดงในภาพ (ก) และ (ข) ตามลำดับ โดยพิจารณาที่ $\beta E_C = 21.3$ และใช้ค่าพารามิเตอร์ในตารางที่ 4.1 100	
ภาพประกอบ 4.3 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบสองเกาะโลหะที่ถูกแสดงในกราฟ 3 มิติ บนระนาบ n_{01} และ n_{02} โดยพิจารณาที่ $\beta E_C = 21.3$	101

ภาพประกอบ 4.4 ภาพฉายของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบสองเกาะโลหะบนระนาบ n_{01} และ n_{02} โดยคู่อันดับ (n_1, n_2) แสดงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในเกาะโลหะที่ 1 และ 2 เส้นปะแสดงขอบเขตของแผนภาพเสถียรที่สร้างด้วยวิธีมาตรฐาน (standard method) [50] ที่ $\beta E_C = 21.3$ 102

ภาพประกอบ 4.5 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบ 2 เกาะโลหะ เมื่อระนาบ (n_{01}, n_{02}) มีการเปลี่ยนแปลงอยู่ในช่วง 0-1 ที่ βE_C มีค่าแตกต่างกัน 106

ภาพประกอบ 4.6 การเปลี่ยนของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบ 2 เกาะโลหะ (ซ้าย) และ ภาพฉายของการเปลี่ยนแปลงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบ (ขวา) พิจารณาที่ βE_C มีค่า เป็น 1.94 10.68 และ 21.35 ตามลำดับ 107

ภาพประกอบ 4.7 แสดงจุดที่เกิดการเปลี่ยนแปลงของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยสูงสุด วงกลมสีดำและ สีเหลี่ยมสีแดงเป็นจุดสูงสุดตำแหน่งที่ 1 และ 2 ตามลำดับ 108

ภาพประกอบ 4.8 ภาพฉายจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบ 2 เกาะโลหะเปรียบเทียบกับ แผนภาพเสถียรจากวิธีมาตรฐาน 109

ภาพประกอบ 4.9 แบบจำลองระบบสี่เกาะโลหะ ซึ่งประกอบด้วยรอยต่อการทะลุผ่าน 5 รอยต่อ และ รอยต่อของตัวเก็บประจุระหว่างเกาะโลหะที่ 1 2 3 และ 4 ที่ต่อกับขั้วไฟฟ้าเกต V_{g1} V_{g2} V_{g3} และ V_{g4} ที่คั่นด้วยตัวเก็บประจุ C_{g1} C_{g2} C_{g3} และ C_{g4} ตามลำดับ 111

ภาพประกอบ 4.10 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะโลหะที่ 1 และ 4 ซึ่งแสดงในภาพประกอบ (ก) และ (ข) ตามลำดับ เมื่อกำหนดให้ $n_{02}, n_{03} = 0.0$ และมีการเปลี่ยนแปลง n_{01} และ n_{04} อยู่ในช่วง 0 ถึง 4 โดยพิจารณาที่ $\beta E_C = 20$ 114

ภาพประกอบ 4.11 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะโลหะที่ 2 และ 3 และจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ย รวม ซึ่งแสดงในภาพประกอบ (ก) และ (ข) ตามลำดับ และพิจารณาที่ $\beta E_C = 20$ 115

ภาพประกอบ 4.12 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวม เมื่อกำหนดให้ $n_{02} = n_{03} = 0.0$ และพิจารณาที่ $\beta E_C = 20$ 116

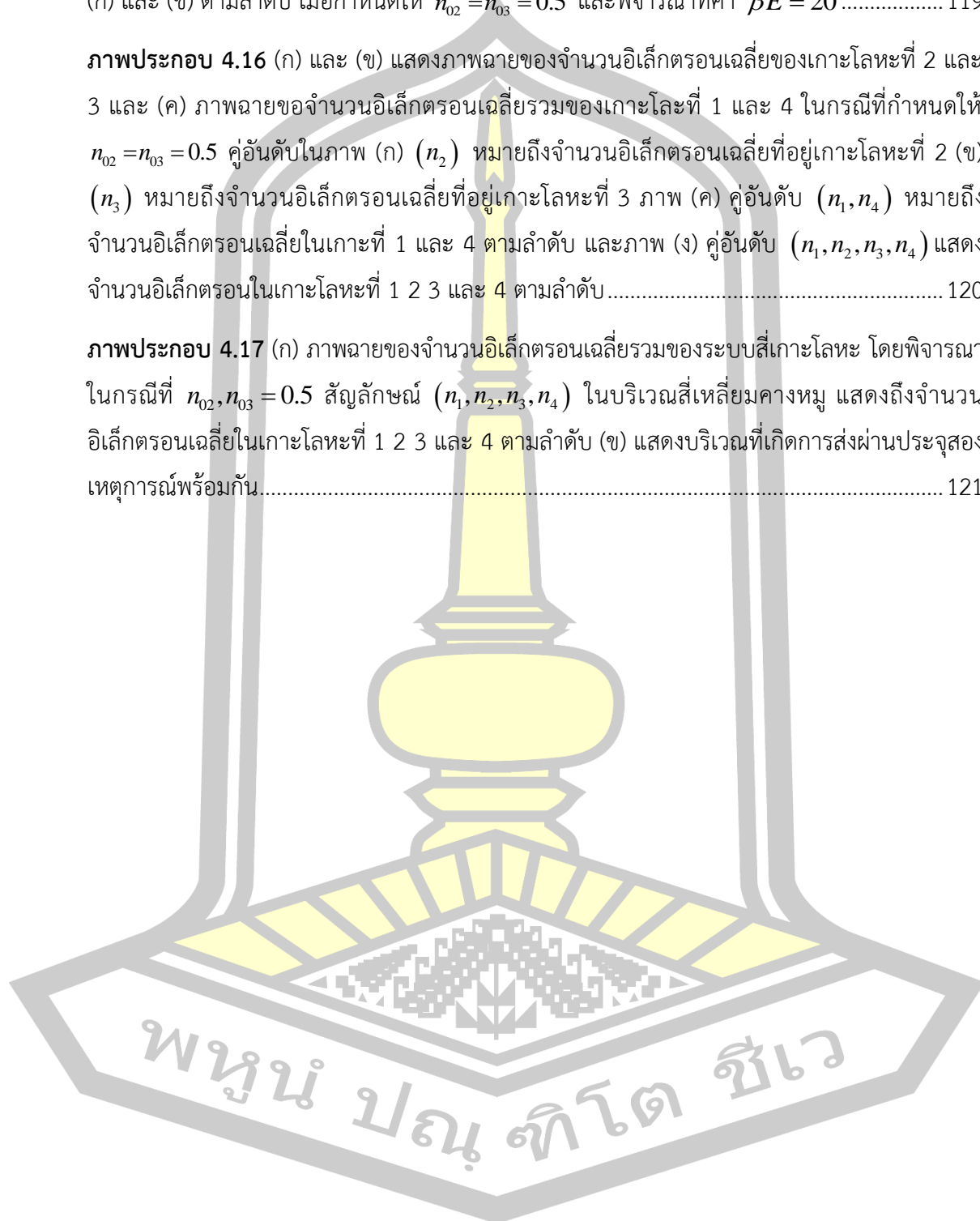
ภาพประกอบ 4.13 ภาพฉายของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบสามโลหะ โดยสัญลักษณ์คู่ อันดับ (n_1, n_2, n_3, n_4) แสดงถึงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในเกาะโลหะที่ 1 2 3 และ 4 ตามลำดับ 116

ภาพประกอบ 4.14 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะโลหะลำดับที่ 1 และ 4 แสดงดังภาพประกอบ (ก) และ (ข) ตามลำดับ เมื่อกำหนดให้ $n_{02} = n_{03} = 0.5$ และพิจารณาที่ค่า $\beta E = 20$ 118

ภาพประกอบ 4.15 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะโลหะลำดับที่ 2 และ 3 แสดงดังภาพประกอบ (ก) และ (ข) ตามลำดับ เมื่อกำหนดให้ $n_{02} = n_{03} = 0.5$ และพิจารณาที่ค่า $\beta E = 20$ 119

ภาพประกอบ 4.16 (ก) และ (ข) แสดงภาพถ่ายของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะโลหะที่ 2 และ 3 และ (ค) ภาพถ่ายของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของเกาะโลหะที่ 1 และ 4 ในกรณีที่กำหนดให้ $n_{02} = n_{03} = 0.5$ คู่อันดับในภาพ (ก) (n_2) หมายถึงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยที่อยู่เกาะโลหะที่ 2 (ข) (n_3) หมายถึงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยที่อยู่เกาะโลหะที่ 3 ภาพ (ค) คู่อันดับ (n_1, n_4) หมายถึงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในเกาะที่ 1 และ 4 ตามลำดับ และภาพ (ง) คู่อันดับ (n_1, n_2, n_3, n_4) แสดงจำนวนอิเล็กตรอนในเกาะโลหะที่ 1 2 3 และ 4 ตามลำดับ 120

ภาพประกอบ 4.17 (ก) ภาพถ่ายของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบสี่เกาะโลหะ โดยพิจารณาในกรณีที่ $n_{02}, n_{03} = 0.5$ สัญลักษณ์ (n_1, n_2, n_3, n_4) ในบริเวณสี่เหลี่ยมคางหมู แสดงถึงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในเกาะโลหะที่ 1 2 3 และ 4 ตามลำดับ (ข) แสดงบริเวณที่เกิดการส่งผ่านประจุสองเหตุการณ์พร้อมกัน 121



สารบัญตาราง

หน้า

ตาราง 2.1 ค่าของพารามิเตอร์ในวงจรมุมของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว g_j เป็นค่าความนำไฟฟ้าของแต่ละรอยต่อการทะลุผ่าน $j \in \{L, M, R\}$ โดยนิยามจาก $g_j = G_j/G_0$ และ $G_0 = e^2/h$ และ G_0 เป็นค่าความนำไฟฟ้าที่อุณหภูมิสูงของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว [34].....	25
ตาราง 4.1 พารามิเตอร์ของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวตัวอย่างที่ 2 [32]	99
ตาราง 4.2 ค่าพารามิเตอร์ที่ใช้ในการคำนวณของระบบ 4 เกาะโลหะ ประกอบด้วยค่าความจุไฟฟ้า โดยกำหนดให้ระบบมีความสมมาตร.....	113



บทที่ 1

บทนำ

1.1 ที่มาและความสำคัญ

อุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว (single electron devices) [1] เป็นอุปกรณ์ที่สามารถควบคุมการส่งผ่านของอิเล็กตรอนได้ที่ละหนึ่งตัว แม้ว่าการควบคุมอิเล็กตรอนที่ละหนึ่งตัวสามารถทำได้ครั้งแรกตั้งแต่ปี ค.ศ. 1909 โดยมิลลิแกน (Milligan) ได้ทำการควบคุมอิเล็กตรอนอิเล็กตรอนให้ลอยอยู่ในสุญญากาศด้วยสนามไฟฟ้า แต่อย่างไรก็ตาม การควบคุมอิเล็กตรอนดังกล่าวไม่สามารถแสดงในระบบที่อยู่ในสถานะของแข็ง (solid state system) เนื่องจากข้อจำกัดของเทคโนโลยีที่ไม่สามารถสร้างอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ให้มีขนาดเล็กอยู่ในระดับไมโครเมตรถึงนาโนเมตรได้ กระทั่งในปี ค.ศ. 1980 อุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวในสถานะของแข็งได้ถูกสร้างขึ้นเป็นครั้งแรกด้วยเทคนิคสมัยใหม่ที่เรียกว่ากระบวนการลิโทกราฟี (lithography process) ทำให้สามารถสร้างเกาะโลหะ (metallic island) ให้มีขนาดในระดับไมโครเมตรถึงนาโนเมตร และยังสามารถกำหนดลักษณะ รูปร่าง และความสมมาตรได้ตามที่ต้องการ เกาะโลหะถูกแยกออกจากขั้วไฟฟ้า (electrode) ด้วยรอยต่อการทะลุผ่าน (tunneling junction) [2] ซึ่งเทคโนโลยีดังกล่าวได้ทำให้เกิดการค้นคว้าและวิจัยในแขนงใหม่ที่เรียกว่า การทะลุผ่านของอิเล็กตรอนหนึ่งตัว (single electron tunneling) ขึ้น [3]–[9]

นักวิทยาศาสตร์มุ่งหวังว่าการวิจัยเกี่ยวกับอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวจะปฏิวัติการออกแบบอุปกรณ์เชิงตรรกะและหน่วยความจำที่ใช้อยู่ในปัจจุบัน [10], [11] เนื่องจากคุณสมบัติหลักที่สามารถเก็บข้อมูลได้หลายสถานะในหนึ่งบิต (bit) ทำให้วงจรรวม (integrated circuit) มีขนาดที่เล็กลงมากเมื่อเทียบกับเทคโนโลยีในปัจจุบันที่สามารถเก็บข้อมูลในหนึ่งบิตได้สองสถานะเท่านั้น การที่จะทำให้อุปกรณ์เชิงตรรกะและหน่วยความจำมีขนาดความจุและความเร็วเพิ่มขึ้นจำเป็นต้องเพิ่มจำนวนทรานซิสเตอร์ในวงจรรวม ซึ่งเป็นที่ทราบกันดีแล้วว่าทรานซิสเตอร์ในปัจจุบันจะไม่สามารถลดขนาดลงได้อีก [12], [13] และเมื่อจำนวนทรานซิสเตอร์มากเกินไปจะทำให้วงจรใช้พลังงานเกินขีดจำกัดของการหล่อเย็น (cooling limit) [14] จึงได้มีการคาดการณ์ว่าเทคโนโลยีในปัจจุบัน จะถูกแทนที่ด้วยเทคโนโลยีของอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว [15]–[18]

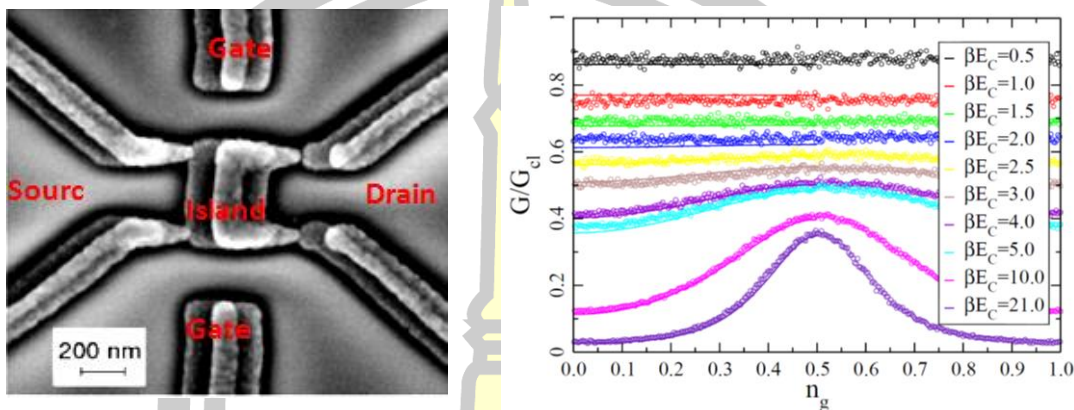
โดยทั่วไป อุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวประกอบไปด้วยรอยต่อการทะลุผ่านที่เชื่อมต่อระหว่างขั้วไฟฟ้ากับเกาะ (เกาะที่สร้างจากโลหะจะถูกเรียกว่าเกาะโลหะแต่ถ้าเกาะที่เป็นสารกึ่งตัวนำจะถูกเรียกว่า ควอนตัมดอท (quantum dot) [19]) การส่งผ่านอิเล็กตรอนที่ละหนึ่งตัวสามารถทำได้โดยอาศัยปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์ (Coulomb blockade phenomena) [2] ในทศวรรษที่ผ่านมาอุปกรณ์ดังกล่าวกำลังได้รับความสนใจและถูกศึกษาอย่างแพร่หลาย เนื่องจากมีการใช้พลังงานที่ต่ำเมื่อเทียบกับเทคโนโลยีแบบดั้งเดิมและมีความไวสูง (ultra-sensitive device) ยิ่งไปกว่านั้น

งานวิจัยได้พัฒนาให้อุปกรณ์ดังกล่าวทำงานได้ที่อุณหภูมิสูง ซึ่งจำเป็นต้องสร้างให้อุปกรณ์มีขนาดอยู่ในระดับ 1 นาโนเมตรและมีความจุไฟฟ้าที่น้อย เพื่อให้พลังงานการเพิ่มประจุ (charging energy) มีค่าสูงเมื่อเทียบกับพลังงานจลน์ของอิเล็กตรอน เพื่อป้องกันไม่ให้อิเล็กตรอนเคลื่อนที่เข้าหรือออกจากเกาะโลหะได้อย่างอิสระ

อุปกรณ์พื้นฐานที่สุดของอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวถูกเรียกว่า กล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว (single electron box) โดยอุปกรณ์ดังกล่าวสามารถควบคุมการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนเข้าหรือออกจากเกาะโลหะได้ที่ละหนึ่งตัว ซึ่งถูกศึกษาเป็นครั้งแรกด้วยลาฟาร์กและคณะ (Lafarge *et al.*) [20] อย่างไรก็ตาม อุปกรณ์ดังกล่าวไม่สามารถให้อิเล็กตรอนเคลื่อนที่ผ่านระบบได้ ทำให้มีการนำไปประยุกต์ใช้งานน้อย ต่อมาได้มีการพัฒนาอุปกรณ์ขึ้นมาใหม่ที่เรียกว่า ทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว (single electron transistors) [1] โดยมีโครงสร้างที่ประกอบไปด้วยรอยต่อการทะลุผ่านสองรอยต่อ กล่าวคือ รอยต่อระหว่างขั้วไฟฟ้าซอร์ส (source electrode) กับเกาะโลหะและรอยต่อระหว่างเกาะโลหะกับขั้วไฟฟ้าเดรน (drain electrode) โดยสามารถควบคุมอิเล็กตรอนเคลื่อนที่ผ่านระบบได้ ซึ่งมีขั้วไฟฟ้าเกต (gate electrode) ทำหน้าที่เพิ่มหรือลดศักย์เคมี (chemical potential) ของเกาะโลหะ ทำให้อิเล็กตรอนสามารถเคลื่อนที่เข้าหรือออกจากเกาะโลหะได้ที่ละหนึ่งตัว เนื่องจากอิเล็กตรอนสามารถถูกควบคุมให้เคลื่อนที่ผ่านทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวได้ ทำให้อุปกรณ์ดังกล่าวสามารถนำไปประยุกต์ใช้งานได้หลากหลาย เช่น อุปกรณ์เชิงตรรกะ (logic devices) [21] อุปกรณ์วัดอิเล็กตรอนที่มีความละเอียดสูง (ultra-sensitive electrometer) [22] วงจรเชิงควอนตัม (quantum circuits) [23] ซึ่งเป็นวงจรที่สามารถเก็บข้อมูลเป็นคิวบิต (qubit) ได้ ทำให้สามารถใช้เป็นหน่วยเก็บข้อมูลพื้นฐานของควอนตัมคอมพิวเตอร์ นอกจากนี้ ยังมีงานวิจัยที่ศึกษาทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวที่สร้างจากวัสดุอื่น ตัวอย่างเช่น ทรานซิสเตอร์อะตอมเดี่ยว (single-atom transistors) [24] ทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวชนิดโมเลกุลเดี่ยว (single-molecule transistors) [25] ทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวชนิดท่อนาโนคาร์บอน (carbon nanotube single electron transistors) [26] หรือที่ทำจากกราฟีน (graphene single electron transistors) [27]

ในปี ค.ศ. 2002 วอลล์ลิสเซอร์และคณะ (Wallisser *et al.*) [28] ได้ศึกษาทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวชนิดโลหะ (metallic-single electron transistors) โดยการศึกษาปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์ทั้งในทางการทดลองและทางทฤษฎี อุปกรณ์ดังกล่าวประกอบไปด้วยรอยต่อการทะลุผ่านระหว่างเกาะโลหะและขั้วไฟฟ้าสรีรอยต่อและรอยต่อระหว่างเกาะโลหะและขั้วเกตสองรอยต่อ ซึ่งแสดงดังภาพประกอบ 1.1 ในการศึกษาได้พิจารณาแอคชันยังผล (effective action) ของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวร่วมกับการประมวลผลแบบควอนตัมมอนติคาร์โล (quantum Monte Carlo method) เพื่อนำไปสู่การคำนวณค่าความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว เพื่ออธิบายปรากฏการณ์การลดลงของกระแสการทะลุผ่าน (tunneling current) ในทรานซิสเตอร์

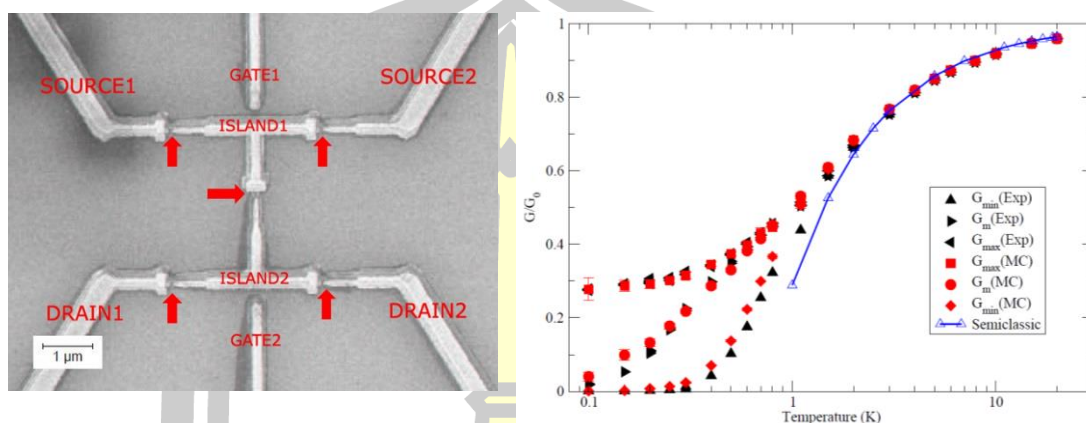
อิเล็กตรอนเดี่ยวหรือที่รู้จักกันโดยทั่วไปคือ ปรากฏการณ์ซัตขวางแบบคูลอมบ์ เมื่อนำผลการคำนวณที่ได้จากวิธีการคำนวณดังกล่าวไปเปรียบเทียบกับผลการทดลอง พบว่า สามารถอธิบายปรากฏการณ์ดังกล่าวได้อย่างถูกต้องทุกช่วงของอุณหภูมิ [29] ดังแสดงในภาพประกอบ 1.1



ภาพประกอบ 1.1 (ซ้าย) ภาพถ่ายด้วยกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนแบบส่องกราด (scanning electron microscope; SEM) ของทรานซิสเตอร์แบบอิเล็กตรอนเดี่ยวชนิดโลหะ [28] และ (ขวา) ความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวที่อุณหภูมิต่าง ๆ ซึ่งค่าความนำไฟฟ้าที่ได้จากการทดลองแสดงด้วยจุด และเส้นทึบแสดงผลที่ได้จากการคำนวณโดยใช้วิธีควอนตัมมอนติคาร์โล [29]

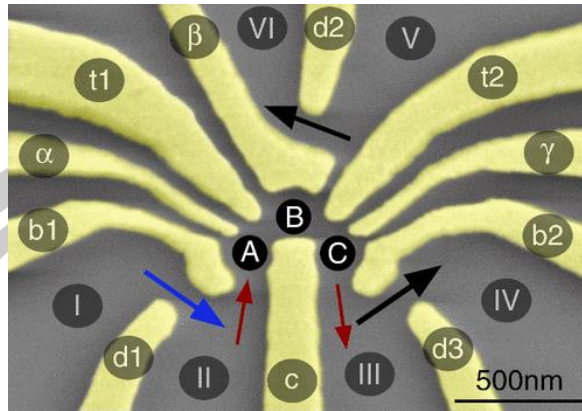
อุปกรณ์ที่มีความซับซ้อนมากกว่าทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวในลำดับต่อมาเรียกว่า ปัมอิเล็กตรอนเดี่ยว (single electron pump) ซึ่งประกอบด้วยเกาะโลหะสองเกาะ [30] เรียงต่อกัน โดยมีรอยต่อการทะลุผ่านคั่นอยู่ระหว่างเกาะโลหะทั้งสอง ปัมอิเล็กตรอนเดี่ยวเป็นอุปกรณ์ที่ถูกนำไปประยุกต์ใช้อย่างหลากหลาย เช่น อุปกรณ์ควบคุมความถี่ด้วยไฟฟ้ากระแสตรงที่มีความแม่นยำสูง (frequency-controlled direct currents of high accuracy) [31] โดยในปี ค.ศ.2005 ลิมบัชและคณะ (Limbach *et al.*) [32] ได้ศึกษาระบบปัมอิเล็กตรอนเดี่ยวชนิดโลหะ (metallic-single electron pumps) ดังแสดงในภาพประกอบ 1.2 โดยได้ทำการทดลองวัดค่าความนำไฟฟ้าของปัมอิเล็กตรอนเดี่ยว พร้อมทั้งได้คำนวณค่าความนำไฟฟ้าของอุปกรณ์ดังกล่าวเพื่อเปรียบเทียบกับผลการทดลอง โดยใช้ทฤษฎีการรบกวน (perturbation theory) ที่ถูกเรียกว่า แบบจำลองแบบซีแควนเชียล (sequential model) เพื่ออธิบายผลการทดลอง จากการศึกษาค้นคว้าพบว่า ผลการคำนวณกับผลการทดลองให้ผลที่สอดคล้องกัน เนื่องจากการปรับเปลี่ยนพารามิเตอร์ที่ใช้ในการคำนวณ ทำให้ในปี ค.ศ. 2012 ศรีวิไล [33] ได้คำนวณแอดชันยังผลของปัมอิเล็กตรอนเดี่ยวชนิดโลหะ เพื่อนำไปคำนวณความนำไฟฟ้าของปัมอิเล็กตรอนเดี่ยว แล้วเปรียบเทียบผลการคำนวณกับผลที่ได้จากการทดลองของลิมบัช

และคณะ พบว่า สามารถอธิบายผลการทดลองได้เป็นอย่างดี [34] โดยการใช้พารามิเตอร์พื้นฐานจากการทดลองเท่านั้น ดังแสดงในภาพประกอบ 1.2

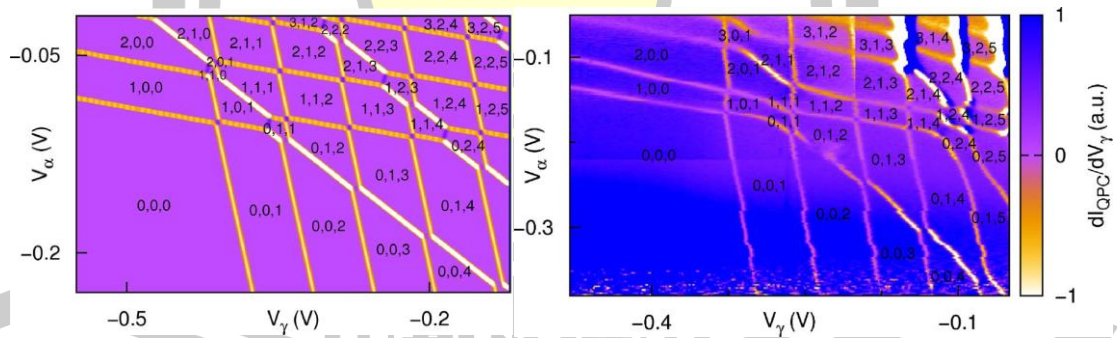


ภาพประกอบ 1.2 (ซ้าย) โครงสร้างของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว ที่ถ่ายด้วยกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนชนิดส่องกราด (scanning electron microscope; SEM) [32] และ (ขวา) ความนำไฟฟ้าสูงสุดของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวที่อุณหภูมิต่างๆ สีดำ เป็นข้อมูลที่ได้จากการทดลอง สีแดง เป็นข้อมูลที่ได้จากการคำนวณด้วยวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล และสีน้ำเงิน เป็นค่าความนำไฟฟ้าที่ได้จากวิธีการประมาณแบบกึ่งฉบับ (semi-classical approximation) [33]

อุปกรณ์อิเล็กตรอนเดี่ยวแบบสามเกาะโลหะ (triple quantum dot system) เป็นอุปกรณ์ที่ประกอบไปด้วยรอยต่อทะลุผ่านสี่รอยต่อ ประกอบไปด้วยรอยต่อระหว่างเกาะโลหะและเกาะโลหะ และรอยต่อระหว่างเกาะโลหะกับขั้วไฟฟ้าสองรอยต่อและรอยต่อระหว่างเกาะโลหะและขั้วเกตสามรอยต่อ ดังแสดงในภาพประกอบ 1.3 ซึ่งเป็นอุปกรณ์ที่ถูกสร้างขึ้นเพื่อศึกษาการควบคุมการส่งผ่านของอิเล็กตรอนผ่านเกาะโลหะ พร้อมทั้งคำนวณแผนภาพเสถียรของระบบโดยใช้ทฤษฎีแบบกึ่งฉบับ (semi-classical theory) ดังแสดงในภาพประกอบ 1.4 (ซ้าย) ซึ่งพบว่าผลการคำนวณมีลักษณะสอดคล้องกับผลที่ได้จากการทดลอง แต่เส้นพลังงานเพิ่มประจุเกิดการเลื่อนตำแหน่งเล็กน้อยเมื่อเปรียบเทียบกับผลที่ตำแหน่งเดียวกันเมื่อเทียบกับผลการวัดที่ได้จากการทดลอง ดังแสดงในภาพประกอบ 1.4 (ขวา) เนื่องจากผลของอุณหภูมิหรือของโฟนอน (phonon) นอกจากนั้นอุปกรณ์อิเล็กตรอนเดี่ยวแบบสามเกาะโลหะยังได้ถูกนำไปประยุกต์ใช้อย่างหลากหลาย เช่น อุปกรณ์เก็บข้อมูลสปินอิเล็กตรอนแบบคิวบิต (electron spin qubits) ที่ทำการวัดจำนวนสปินรวมของอิเล็กตรอนที่อยู่ในแต่ละเกาะโลหะ วงจรเรียงกระแส (triple quantum dot charging rectifier) [35] และอุปกรณ์เชิงตรรกะ ซึ่งนำไปเป็นแนวทางในการพัฒนาอุปกรณ์จัดเก็บข้อมูล [36]



ภาพประกอบ 1.3 อุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวแบบสามเกทโลหะที่ถ่ายด้วยกล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนเดี่ยวแบบส่องกราด สีเหลือง เป็นขั้วไฟฟ้าที่ทำควบคุมพลังงานศักย์สถิตของเกทโลหะและควอนตัมพอยต์คอนแทค (quantum point contact) โดย A B และ C ที่อยู่ในวงกลมสีดำ เป็นตำแหน่งโดยประมาณของเกทโลหะ ลูกศร เป็นเส้นทางของกระแสที่ผ่านไปผ่านเกทโลหะและควอนตัมพอยต์คอนแทค ตัวเลขโรมัน เป็นโอห์มมิกคอนแทค (Ohmic contact) α β และ γ เป็นขั้วเกตที่ใช้ควบคุมเกทโลหะ A B และ C ตามลำดับ d1 d2 และ d3 เป็นควอนตัมพอยต์คอนแทค ซึ่งทำหน้าที่เป็นเซนเซอร์วัดประจุ (charge sensor) [37]



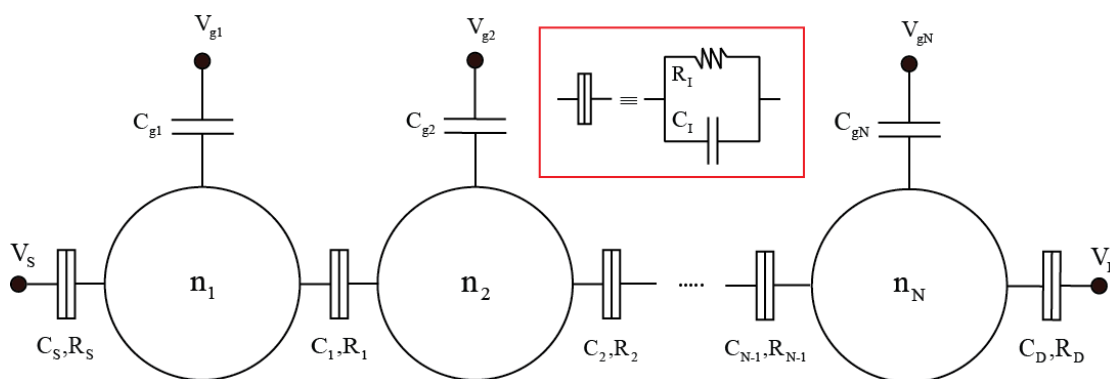
ภาพประกอบ 1.4 (ซ้าย) ผลการคำนวณเชิงตัวเลขของแผนภาพเสถียรของระบบสามเกทโลหะที่ขึ้นกับศักย์ไฟฟ้าจากขั้วเกตของเกทโลหะ A และ C กล่าวคือ V_α และ V_γ ตามลำดับ เส้นสีเหลืองเป็นเส้นของพลังงานการเพิ่มประจุ สีชมพู เป็นบริเวณที่มีจำนวนประจุของแต่ละเกทโลหะคงที่ และจุดตัดของเส้นของพลังงานการเพิ่มประจุ เป็นบริเวณที่เกิดการส่งผ่านของอิเล็กตรอน และ (ขวา) ผลการวัดที่ได้จากการทดลองวัดแผนภาพเสถียรของจำนวนประจุ

จากที่กล่าวมาข้างต้น จะเห็นได้ว่าเมื่อจำนวนเกทโลหะของอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวเพิ่มมากขึ้น การนำไปประยุกต์ใช้งานก็มีความหลากหลายมากยิ่งขึ้น แต่ในขณะเดียวกัน การอธิบาย

ปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นในอุปกรณ์ดังกล่าวก็มีความซับซ้อนมากยิ่งขึ้นตามไปด้วย โดยในการอธิบายปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์ในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวนั้น สามารถอธิบายจากการเปลี่ยนแปลงปริมาณต่างๆ เช่น จำนวนอิเล็กตรอนในเกาะโลหะ ความนำไฟฟ้า หรือพลังงานการเพิ่มประจุของระบบ

จากการศึกษาทางทฤษฎีสำหรับระบบที่มีเกาะโลหะมากกว่าสองเกาะ พบว่า โดยทั่วไปในการอธิบายพฤติกรรมของระบบดังกล่าวในทางทฤษฎีจะใช้ทฤษฎีการรบกวนอันดับที่หนึ่ง (first order perturbation theory) หรือที่เรียกว่า แบบจำลองซีควนเชียล (sequential model) หรือในกรณีที่พิจารณาปรากฏการณ์การทะลุผ่านร่วม (co-tunneling) ร่วมด้วย จะใช้ทฤษฎีการรบกวนอันดับที่สอง (second order perturbation theory) เนื่องจากมีความสะดวกในการคำนวณ ซึ่งนำไปสู่การเขียนโปรแกรมสำเร็จรูปมากมาย เช่น Spite Simon [38] เป็นต้น แต่ทฤษฎีดังกล่าวก็ยังมีขีดจำกัดในการอธิบายเป็นอย่างมาก กล่าวคือ สามารถอธิบายผลการทดลองได้ดีในช่วงที่เกิดปรากฏการณ์การทะลุผ่านน้อย (weak tunneling coupling) หรือ ค่าความนำไฟฟ้าของระบบมีค่าน้อยเท่านั้นหรือ ($g < 1$) แต่อย่างไรก็ตาม มีงานวิจัยที่ได้ศึกษาระบบที่ประกอบ 1 และ 2 เกาะโลหะ โดยการคำนวณผ่านแอกชันยังผลของระบบรวมกับการประมวลผลด้วยวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล [29], [33] พบว่าสามารถอธิบายผลการทดลองทั้งในกรณีที่เกิดปรากฏการณ์การทะลุผ่านน้อยและในช่วงที่เกิดปรากฏการณ์การทะลุผ่านมาก (strong tunneling coupling) หรือ ($g > 1$) ได้เป็นอย่างดี แต่ในระบบที่มีเกาะโลหะมากกว่า 2 เกาะนั้น ยังไม่มีงานวิจัยใดที่ได้ศึกษาการคำนวณแอกชันยังผลดังกล่าว ทำให้งานวิจัยด้านนี้ไม่ได้มีการพัฒนาอย่างต่อเนื่อง

ดังนั้น ในวิทยานิพนธ์นี้จึงมีวัตถุประสงค์ที่จะคำนวณแอกชันยังผลของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม เพื่ออธิบายระบบที่ประกอบด้วยเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม ดังแสดงในภาพประกอบ 1.5 โดยในวิทยานิพนธ์นี้จะเริ่มจากการเขียนฮามิลโทเนียนของระบบ เพื่อนำไปสู่การเขียนฟังก์ชันแบ่งส่วนของระบบดังกล่าว โดยฟังก์ชันแบ่งส่วนที่ได้จะอยู่ในรูปแบบปริพันธ์ของฟังก์ชันนอล (functional integral) ที่ขึ้นกับแอกชันยังผลของระบบ จากนั้น นำรูปแบบของฟังก์ชันแบ่งส่วนและแอกชันยังผลของระบบที่ได้ไปประยุกต์ใช้ในการคำนวณปริมาณทางฟิสิกส์ เช่น จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในระบบ เพื่อใช้ในการอธิบายพฤติกรรมของอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวแบบต่างๆ



ภาพประกอบ 1.5 แบบจำลองของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม

เพื่อตรวจสอบความถูกต้องของการคำนวณ วิทยานิพนธ์นี้ได้นำผลการคำนวณที่ได้ไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองและอธิบายปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมป์ในปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวซึ่งเป็นระบบที่ประกอบไปด้วย 2 เกาะโลหะและอธิบายการเกิดปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมป์ในระบบ 4 เกาะโลหะ ซึ่งจะเป็นแนวทางในการศึกษาอุปกรณ์ที่มีความซับซ้อนมากยิ่งขึ้นและได้เงื่อนไขที่เหมาะสมในการควบคุมอุปกรณ์ดังกล่าวต่อไป

1.2 วัตถุประสงค์ของการวิจัย

1. เพื่อคำนวณแอกชันยังผลของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรมกัน
2. เพื่อนำแอกชันยังผลของระบบที่คำนวณได้ไปอธิบายพฤติกรรมของอุปกรณ์อิเล็กตรอนเดี่ยวที่ประกอบไปด้วยเกาะโลหะจำนวนจำกัดและต่อแบบอนุกรม

1.3 ขอบเขตของงานวิจัย

ในการคำนวณแอกชันยังผลของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม ได้แบ่งขั้นตอนการคำนวณเป็นลำดับดังต่อไปนี้

1. สร้างแบบจำลองของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรมและเขียนฮามิลโทเนียนของระบบดังกล่าว
2. เขียนฟังก์ชันแบ่งส่วน (partition function) และแอกชันยังผลของระบบที่อยู่ในรูปแบบปริพันธ์ของฟังก์ชันนอล
3. ทำการตรวจสอบแอกชันยังผลของระบบดังกล่าวโดยการนำไปอธิบายพฤติกรรมของระบบที่ประกอบไปด้วย 2 เกาะโลหะ

4. ทำการตรวจสอบแอกชันยังผลของระบบดังกล่าวโดยการนำไปอธิบายพฤติกรรมของระบบที่มี 4 เคาะโลหะที่ต่อแบบอนุกรม

1.4 สถานที่ทำการวิจัย

หน่วยวิจัยฟิสิกส์ทฤษฎีสารควบแน่น (Theoretical Condensed Matter Physics Research Unit) ห้อง SC1-203 ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหาสารคาม

1.5 ประโยชน์ที่ได้รับ

1. สามารถนำแอกชันยังผลที่ได้ไปอธิบายผลการทดลองของอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวที่ประกอบไปด้วยเคาะโลหะที่ต่อแบบอนุกรมได้
2. สามารถนำองค์ความรู้ที่ได้ไปออกแบบและประยุกต์ใช้งานอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวที่มีความซับซ้อนได้อย่างมีประสิทธิภาพ



บทที่ 2

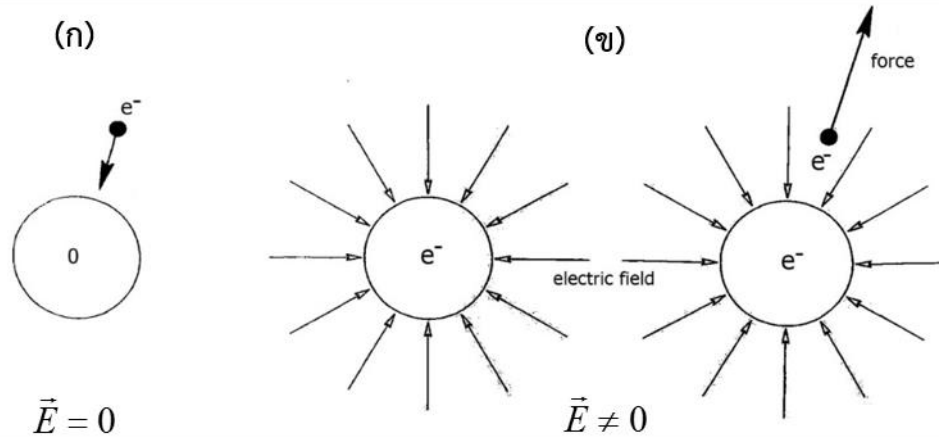
ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

เพื่อศึกษาเกี่ยวกับทฤษฎีที่ใช้ในการคำนวณฟังก์ชันแบ่งส่วนของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรมและการคำนวณเชิงตัวเลขของการคำนวณปริพันธ์ของฟังก์ชันนอล ในบทนี้ได้แบ่งเนื้อหาออกเป็นสามส่วน ในส่วนแรกจะกล่าวถึงทฤษฎีที่เกี่ยวข้องกับการเกิดปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์ในระบบเกาะโลหะ โดยในหัวข้อ 2.1 ได้อธิบายปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์และเงื่อนไขที่สำคัญของการเกิดปรากฏการณ์ดังกล่าว นอกจากนี้ยังได้กล่าวถึงพลังงานเพิ่มประจุซึ่งเป็นพารามิเตอร์ที่สำคัญในการอธิบายการเพิ่มประจุเข้าไปในระบบเกาะโลหะ ในหัวข้อ 2.2 ถึง 2.4 ได้กล่าวถึงอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว เช่น กล่องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ป้อนอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ซึ่งระบบดังกล่าวประกอบด้วยเกาะโลหะ 1 และ 2 เกาะที่ต่อกันแบบอนุกรมตลอดจนการควบคุมการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนในอุปกรณ์ดังกล่าว ตามลำดับ ในส่วนที่สองนั้นได้กล่าวถึงการคำนวณปริพันธ์ของฟังก์ชันนอลสำหรับเฟอร์มิออน ซึ่งได้กล่าวถึงทฤษฎีและเทคนิคทางคณิตศาสตร์ที่ใช้คำนวณแอกชันยังผลของอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว โดยเริ่มจากหัวข้อ 2.5 ได้กล่าวถึงหลักการและวิธีการสำหรับการคำนวณปริพันธ์ของฟังก์ชัน เพื่ออธิบายพื้นฐานทางคณิตศาสตร์และที่มาของสมการที่ใช้ในการคำนวณปริพันธ์ตามวิถีสำหรับระบบของเฟอร์มิออนหลายตัว [39], [40] ในหัวข้อ 2.6 ได้อธิบายเกี่ยวกับการควอนไทส์ลำดับที่สอง (second quantization) ซึ่งประกอบไปด้วยปริภูมิของฟอกซ์ (Fock space) ของระบบอนุภาคหลายตัวและได้กำหนดสัญลักษณ์ที่ใช้ในวิทยานิพนธ์ จากนั้นได้อธิบายเกี่ยวกับเทคนิคคณิตศาสตร์ที่เกี่ยวข้องกับพีชคณิตของแกรสมันน์ (Grassmann algebra) ซึ่งเป็นพื้นฐานที่จำเป็นสำหรับการนิยามสถานะโคเฮเรนต์ของเฟอร์มิออน (fermion coherent states) จากนั้นอธิบายเกี่ยวกับนิยามของสถานะโคเฮเรนต์ในหัวข้อ 2.7 ในหัวข้อ 2.8 ได้แสดงวิธีการคำนวณปริพันธ์ตามวิถีของสถานะโคเฮเรนต์ของระบบเฟอร์มิออนหลายตัว และหัวข้อ 2.9 แสดงตัวอย่างการคำนวณปริพันธ์ของเฟอร์มิออนที่ไม่มีอันตรกิริยาต่อกัน ในส่วนที่สามซึ่งเป็นส่วนสุดท้าย ได้แสดงวิธีการและหลักการเบื้องต้นของการประมวลผลด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล และวิธีการประยุกต์ใช้วิธีการดังกล่าวในการคำนวณฟังก์ชันแบ่งส่วนของระบบ ซึ่งรายละเอียดทั้งหมดได้แสดงไว้ในหัวข้อ 2.10

2.1 ปรากฏการณ์การขีดขวางแบบคูลอมบ์

ปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์เป็นปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นในโครงสร้างที่มีขนาดระดับนาโนเมตร เช่น กล่องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวและทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ที่ถูกสร้างจากโลหะที่มีความหนาแน่นของสถานะ (density of states) สูง ส่งผลให้ระดับช่องว่างพลังงานเฉลี่ย ($\Delta\epsilon$) มีค่าน้อยกว่าพลังงานการเพิ่มประจุ ทำให้อิเล็กตรอนที่มีพลังงานจลน์จากความร้อน ($k_B T$) หรือพลังงาน

เนื่องจากศักย์ไฟฟ้าภายนอก (eV) สามารถทะลุผ่านเข้าไปยังเกาะโลหะได้โดยสามารถควบคุมการส่งผ่านของอิเล็กตรอน จากการเปลี่ยนแปลงศักย์ไฟฟ้าที่ขั้วเกต ซึ่งแยกออกจากเกาะโลหะด้วยรอยต่อตัวเก็บประจุ



ภาพประกอบ 2.1 การเพิ่มอิเล็กตรอนหนึ่งตัวเข้าไปในเกาะโลหะ ในภาพประกอบ (ก) และ (ข) แสดงการเพิ่มอิเล็กตรอนเข้าไปในเกาะโลหะ ในกรณีที่มีประจุมวลสุทธิและสนามไฟฟ้า (\vec{E}) เป็นศูนย์ และในกรณีที่ประจุมวลสุทธิและสนามไฟฟ้าไม่เป็นศูนย์ ตามลำดับ

ภาพประกอบ 2.1 แสดงการเพิ่มอิเล็กตรอนหนึ่งตัวเข้าไปในเกาะโลหะ โดยเริ่มจากภาพ (ก) ในกรณีเริ่มต้นกำหนดให้เกาะโลหะมีประจุสุทธิเป็นศูนย์ ในกรณีนี้สามารถเพิ่มอิเล็กตรอนเข้าไปยังเกาะโลหะได้โดยไม่มีแรงผลักรวม เนื่องจากเกาะดังกล่าวมีสนามไฟฟ้าเป็นศูนย์ แต่ในภาพ (ข) เป็นกรณีที่ต้องการเพิ่มอิเล็กตรอนตัวที่สองเข้าไปยังเกาะโลหะ พบว่า เกาะโลหะที่มีประจุสุทธิไม่เป็นศูนย์มีการสร้างสนามไฟฟ้า เป็นไปตามกฎของเกาส์ ทำให้ไม่สามารถเพิ่มอิเล็กตรอนเข้าไปยังเกาะโลหะได้ทันที จำเป็นต้องให้พลังงานกับอิเล็กตรอนค่าหนึ่ง เพื่อให้อิเล็กตรอนมีพลังงานมากกว่าพลังงานการเพิ่มประจุ ซึ่งหลักการดังกล่าวสามารถนำไปประยุกต์ใช้เพื่อสร้างเป็นเครื่องตรวจจับประจุไฟฟ้าความไวสูง (extremely sensitive detector) [5] แต่ในเกาะที่เป็นสารกึ่งตัวนำ (semiconductor) กราฟีน (graphene) หรือ โครงสร้างเชิงโมเลกุล (molecular structures) โดยทั่วไปช่องว่างระดับพลังงาน ($\Delta\varepsilon$) มีความกว้างกว่าโลหะมาก เช่น ในโครงสร้างเชิงโมเลกุลมีค่าช่องว่างระดับพลังงานประมาณ 1 eV ในกรณีนี้ คุณสมบัติการส่งผ่านจะขึ้นอยู่กับค่าพลังงานการเพิ่มประจุ และช่องว่างระดับพลังงาน $\Delta\varepsilon$ เป็นสำคัญ

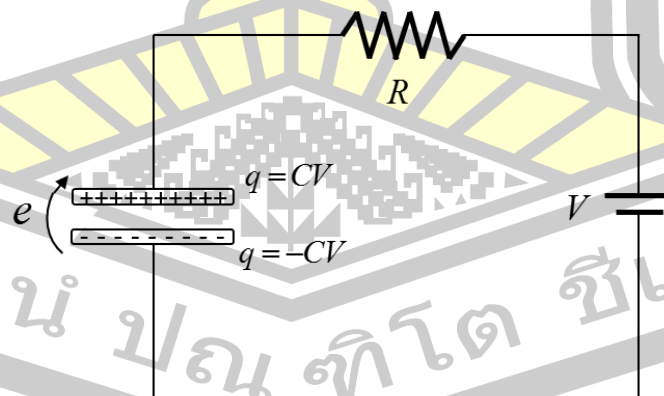
เพื่อศึกษาการคำนวณพลังงานการเพิ่มประจุ ให้พิจารณาพลังงานที่สะสมในตัวเก็บประจุ กำหนดให้สถานะเริ่มต้น ระบบเป็นกลางทางไฟฟ้าและมีความจุไฟฟ้า C ดังแสดงในภาพประกอบ

2.2 ประจุ Q ใด ๆ จะถูกเหนี่ยวนำตามสมการ $Q = CV$ หรือกล่าวอีกในหนึ่งได้ว่า เมื่อมีการเปลี่ยนแปลงประจุ dQ จะทำให้พลังงานของตัวเก็บประจุเปลี่ยนไปเป็น $dE = VdQ = (Q/C)dQ$ จากเงื่อนไขเริ่มต้นที่กำหนดให้ จุดเริ่มต้น $Q = 0$ และที่สถานะสุดท้ายเป็น q พบว่าพลังงานที่ใช้ในการเพิ่มประจุ $\Delta E = q^2/2C$

พิจารณาเหตุการณ์ที่มีอิเล็กตรอนหนึ่งตัวทะลุผ่านรอยต่อที่มีความจุไฟฟ้า C และศักย์ไฟฟ้าที่ให้เข้าไปมีค่าคงที่ค่าหนึ่ง ดังภาพประกอบ 2.2 ก่อนการทะลุผ่านของอิเล็กตรอน ประจุที่สะสมอยู่ฝั่งตรงข้ามมีค่าเป็น $q = CV$ พลังงานศักย์ไฟฟ้าสถิตที่ถูกสะสมบนตัวเก็บประจุเริ่มต้นคือ $E_i = q^2/2C$ แต่หลังจากที่อิเล็กตรอนหนึ่งตัวได้ทะลุผ่านแล้วประจุจะกลายเป็น $(q - e)$ และพลังงานของสถานะสุดท้ายจะมีค่าเป็น

$$E_f = \frac{(q - e)^2}{2C} = \frac{q^2}{2C} - e\left(\frac{q}{C}\right) + \frac{e^2}{2C} = E_i - eV + E_c \quad (2.1)$$

เมื่อ E_c คือพลังงานการเพิ่มประจุ พิจารณาในกรณีที่พลังงานจลน์ของอิเล็กตรอนมีค่าประมาณศูนย์ ($k_B T \approx 0$) การทะลุผ่านจะเกิดขึ้นได้ก็ต่อเมื่อ $\Delta E \leq 0$ กล่าวคือ ความน่าจะเป็นที่จะเกิดเหตุการณ์การทะลุผ่านของอิเล็กตรอนสามารถคำนวณได้ตามสมการ $P(E) \propto \exp(-\Delta F)$ เมื่อ ΔF เป็นพลังงานอิสระ (free energy) ในกรณีที่ต้องการให้เกิดเหตุการณ์การทะลุผ่านขึ้น โอกาสของการเกิดเหตุการณ์ต้องมีค่ามากกว่าหรือเท่ากับหนึ่ง กล่าวคือ $\Delta F \leq 0$ ดังนั้น ในกรณีที่อุณหภูมิมิมีค่าประมาณศูนย์ ($T \approx 0$) เหตุการณ์การทะลุผ่านจะเกิดขึ้นเสมอเมื่อ $eV \geq E_c$



ภาพประกอบ 2.2 การทะลุผ่านของอิเล็กตรอนผ่านรอยต่อที่มีความจุไฟฟ้า C และระบบมีค่าความต้านทาน R

อย่างไรก็ตาม เมื่อพิจารณาการกวัดแกว่งเชิงควอนตัม (quantum fluctuation) ของประจุในระบบ การทะลุผ่านของอิเล็กทรอนิกส์สามารถเกิดขึ้นได้ แม้ว่าศักย์ไฟฟ้าที่ให้เข้าไปจะมีค่าต่ำกว่าพลังงานการเพิ่มประจุ ผลของปรากฏการณ์ดังกล่าวสามารถประมาณโดยใช้หลักความไม่แน่นอนของไฮเซนเบิร์ก (Heisenberg's uncertainty principle) กล่าวคือ เมื่อให้ความไม่แน่นอนของพลังงาน ΔE มีค่ามากกว่าหรือเท่ากับพลังงานการเพิ่มประจุ E_C กล่าวคือ

$$E_C \Delta \tau \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.2)$$

โดยที่ช่วงเวลา τ (ที่มีความไม่แน่นอนในการวัดค่าเป็น $\Delta \tau$) สามารถคำนวณได้จากการพิจารณาวงจรในภาพประกอบ 2.3 โดยเขียนสมการสำหรับประจุ q บนตัวเก็บประจุ จากหลักการที่ว่าความต่างศักย์ของตัวเก็บประจุและของตัวต้านทานรวม (R_Σ) ต้องมีค่าเท่ากัน กล่าวคือ

$$\frac{q}{C} = R_\Sigma \frac{dq}{dt} \quad (2.3)$$

หรือ

$$\frac{1}{q} dq = -\frac{1}{R_\Sigma C} dt \quad (2.4)$$

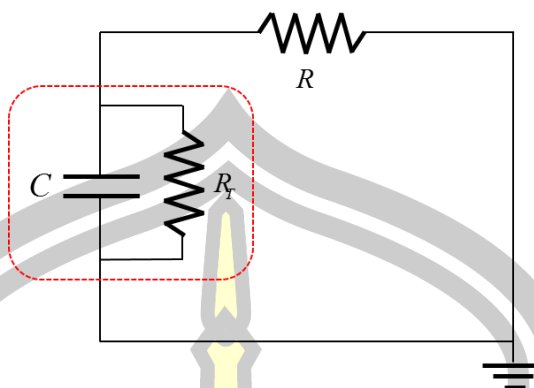
โดยเครื่องหมายลบในสมการ (2.4) แสดงถึงการลดลงของประจุ กล่าวคือตัวเก็บประจุคายประจุ [41]

เมื่อ $R_\Sigma = R_T R / (R_T + R)$ ดังนั้น ผลเฉลยของสมการ (2.4) เป็นไปตามสมการ

$$q(t) = q_0 e^{-t/R_\Sigma C} \quad (2.5)$$

เมื่อกำหนดให้ $\tau = R_\Sigma C$ เป็นช่วงเวลาที่ทำให้ประจุของระบบมีค่าลดต่ำลงคงเหลือประมาณ 36.8% เมื่อกำหนดให้ความไม่แน่นอนของช่วงเวลาในการวัด $\Delta \tau \approx \tau$ และพลังงานการเพิ่มประจุ $E_C = e^2/2C$

พูนุ ปณ ทิโต ชีเว



ภาพประกอบ 2.3 รอยต่อการทะลุผ่านหนึ่งรอยต่อ (ในบริเวณเส้นปะ) สามารถแทนด้วยด้วยคววมจุไฟฟ้า C ต่อขนานกับตัวต้านทาน R_T กำหนดให้รอยต่อการทะลุผ่านต่ออนุกรมกับสิ่งแวดล้อมที่มีความต้านทาน R

ในสมการ (2.2) จะได้เงื่อนไขของการเกิดปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์ กล่าวคือ

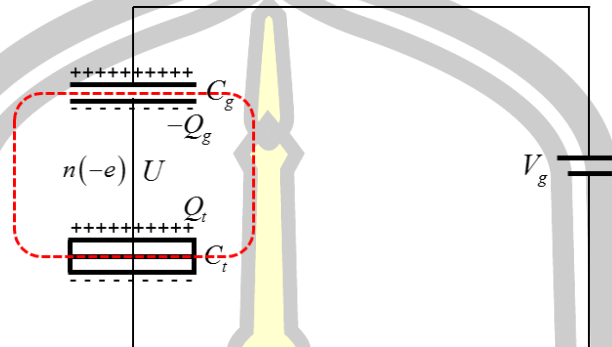
$$R_{\Sigma} \geq \frac{\hbar}{e^2} \equiv R_Q \quad (2.6)$$

เมื่อ $R_Q \approx 25.8k\Omega$ จากที่กล่าวมาข้างต้นแสดงให้เห็นว่า ปรากฏการณ์การทะลุผ่านจะสามารถเกิดขึ้นได้จากการกระเพื่อมเชิงควอนตัม โดยที่ความต้านทานรวม R_{Σ} เป็นตัวกำหนดเงื่อนไขสำหรับการสังเกตได้ของการเกิดปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์ในระบบหนึ่งรอยต่อ กล่าวคือ $R_T \gg R_Q$ หรือ $R_T \gg 25.8k\Omega$ นอกจากนี้ ยังมีเงื่อนไขที่สำคัญอีกข้อหนึ่ง กล่าวคือ เพื่อไม่ให้อิเล็กตรอนเคลื่อนที่ผ่านระบบไปได้อย่างต่อเนื่อง พลังงานจลน์ของอิเล็กตรอน ($\sim k_B T$) ต้องมีค่าน้อยกว่าพลังงานการเพิ่มประจุ กล่าวคือ $E_C \gg k_B T$ หรือ $\beta E_C \gg 1$ เมื่อ $\beta = 1/k_B T$ คือส่วนกลับของพลังงานจลน์ โดยระบบใดๆ ที่มีคุณสมบัติสอดคล้องกับเงื่อนไขดังกล่าวทั้งสองประการนี้ จะทำให้ระบบสามารถตรวจวัดการเกิดปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์ได้

2.2 กล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว

พิจารณาระบบของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวในภาพประกอบ 2.4 ระบบนี้ประกอบด้วยเกาะโลหะหนึ่งเกาะและรอยต่อการทะลุผ่านหนึ่งรอยต่อ โดยสัญลักษณ์สี่เหลี่ยมที่อยู่ทางซ้ายของเกาะเป็นสัญลักษณ์ของรอยต่อการทะลุผ่าน โดยมีรอยต่อตัวเก็บประจุที่ต่อกับขั้วเกต V_g ในกรณีที่ตั้งขั้วไฟฟ้าจากขั้วเกตมีค่าเป็นศูนย์ $V_g = 0$ เกาะจะมีสถานะเป็นกลางทางไฟฟ้า กล่าวคือ จำนวนประจุลบบนเกาะเท่ากับจำนวนไอออนบวก แต่สถานะของพลังงานที่สูงกว่าสถานะพื้น (ground state) จะเกี่ยวข้องกับจำนวนอิเล็กตรอนส่วนเกินบนเกาะที่เปลี่ยนแปลง ในกรณีที่กำหนดให้ V_g ไม่เป็นศูนย์ จากที่ประจุบนเกาะเริ่มต้นที่เป็นกลางทางไฟฟ้า เกาะจะมีจำนวนอิเล็กตรอนเพิ่มขึ้นแบบไม่ต่อเนื่อง

จากประจุเริ่มต้น $n=0$ เป็น $n=1,2,\dots$ โดยอิเล็กตรอนส่วนเกิน เกิดจากอิเล็กตรอนทางด้านซ้ายมือทะลุผ่านรอยต่อการทะลุผ่านเข้ามายังเกาะ แต่ไม่สามารถทะลุผ่านรอยต่อตัวเก็บประจุออกไปที่ขั้วไฟฟ้าได้



ภาพประกอบ 2.4 วงจรสมมูลของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งประกอบไปด้วยรอยต่อการทะลุผ่าน C_d และรอยต่อตัวเก็บประจุ C_g ที่สร้างให้มีความหนาแน่นมากพอจนกระทั่งอิเล็กตรอนไม่สามารถทะลุผ่านไปได้อีก โดยเส้นประแสดงขอบเขตของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว

จากภาพประกอบ 2.4 ศักย์ไฟฟ้าจากขั้วเกตจะเหนี่ยวนำประจุแบ่งออกเป็น Q_d และ $-Q_g$ กระจายอย่างต่อเนื่องบนตัวเก็บประจุทั้งสอง ซึ่งในกรณีที่มีการทะลุผ่านของอิเล็กตรอน ประจุรวมสุทธิ $Q_d - Q_g = n(-e)$ โดย n เป็นจำนวนของอิเล็กตรอนที่ทะลุเข้ามาในกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว พลังงานการเพิ่มประจุของระบบสามารถเขียนในพจน์ของจำนวนอิเล็กตรอน n และศักย์ไฟฟ้าจากขั้วเกต V_g ซึ่งเมื่อพิจารณาจากภาพประกอบ 2.4 พบว่า

$$V_g = \frac{Q_d}{C_d} - \frac{Q_g}{C_g} \quad (2.7)$$

โดยที่ประจุทั้งสองเป็นไปตามสมการ

$$Q_d = C_d U \quad (2.8)$$

เมื่อ U เป็นความต่างศักย์ของเกาะและ

$$Q_g = -C_g (V_g - U) \quad (2.9)$$

เมื่อแทนค่า Q_d และ Q_g ให้อยู่ในพจน์ของ n และ V_g พบว่า ศักย์ไฟฟ้าของเกาะมีค่าเป็นตามสมการ

$$U = -\frac{(ne + C_g V_g)}{(C_t + C_g)} \quad (2.10)$$

พลังงานอิสระ (free energy) ของระบบจะขึ้นอยู่กับศักย์ไฟฟ้าที่ให้จากขั้วเกต V_g ในการโพลาริซ์ ประจุในตัวเก็บประจุซึ่งสามารถเขียนพลังงานอิสระของระบบได้ดังสมการ

$$E_{free}(n, Q_g) = \frac{Q_t^2}{2C_t} + \frac{Q_g^2}{2C_g} + V_g Q_g \quad (2.11)$$

เมื่อ $V_g Q_g$ เป็นงานเนื่องจากการโพลาริซ์ประจุ เมื่อแทนค่า Q_t และ Q_g ในสมการ (2.8) และ (2.9) ลงในสมการ (2.11) จะได้

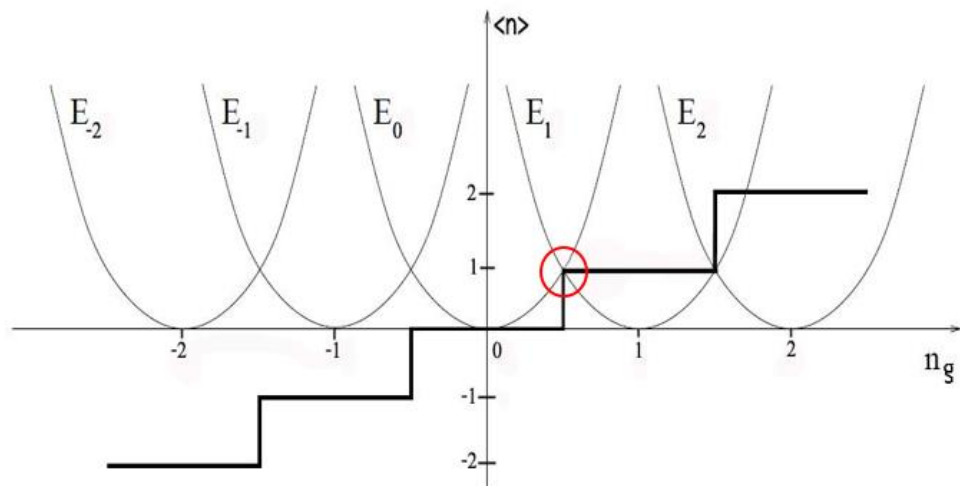
$$\begin{aligned} E_{free}(n, Q_g) &= \frac{(C_t U)^2}{2C_t} + \frac{(-C_g V_g + C_g U)^2}{2C_g} + V_g (-C_g (V_g - U)) \\ &= \frac{C_t U^2}{2} + \frac{Q_g^2}{2C_g} + \frac{C_g U^2}{2} - V_g Q_g \\ &= \frac{(ne - Q_g)^2}{2C_\Sigma} - \frac{V_g Q_g}{2} \end{aligned} \quad (2.12)$$

เมื่อแทนค่า U ตามสมการ (2.10) และ $C_\Sigma = C_t + C_g$ เป็นความจุไฟฟ้ารวมของระบบเมื่อมองออกมาจากเกาะ ในกรณีนี้ ศักย์ไฟฟ้าที่ขั้วเกตทำให้เกิดประจุ $Q_g = C_g V_g$ ที่มีค่าต่อเนื่อง โดยทั่วไป ประจุดังกล่าวถูกเรียกว่าประจุเหนี่ยวนำ (induced charge) จากขั้วเกต เมื่อกำหนดให้ $n_g = C_g V_g / |e|$ เป็นจำนวนประจุเหนี่ยวนำจากขั้วเกต สมการ (2.12) สามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$\begin{aligned} E_{free}(n, n_g) &= \frac{e^2}{2C_\Sigma} (n - n_g)^2 - \frac{V_g Q_g}{2} \\ &= E_{ch}(n, n_g) - W \end{aligned} \quad (2.13)$$

เมื่อ $E_{ch}(n, n_g)$ ถูกเรียกว่าพลังงานการเพิ่มประจุ และ W เป็นงานที่เกิดขึ้นเนื่องจากศักย์ไฟฟ้าที่ขั้วเกต พลังงานการเพิ่มประจุเป็นฟังก์ชันของ n และ n_g ซึ่งมีรูปแบบเป็นสมการพาราโบลา ดังแสดงในภาพประกอบ 2.5 สำหรับกล่องอิเล็กทรอนิกส์อนเดี่ยวจะมีจุดที่มีสถานะต่างกันแต่มีระดับพลังงานที่เท่ากันซึ่งเรียกว่า จุดดีเจนเนอเรซี (degeneracy point) ตัวอย่างของจุดดังกล่าวแสดงด้วยจุดที่มีวงกลมสีแดง เมื่อมีการเปลี่ยนแปลงศักย์ไฟฟ้าจากขั้วเกตอย่างช้า ๆ ประจุ n บนเกาะจะมีค่าคงที่

จนกระทั่งถึงจุดดีเจนเนอเรซี อิเล็กตรอนจะสามารถทะลุเข้า(หรือออกจากเกาะ) ซึ่งการทะลุผ่านเข้า(หรือออกจากเกาะ)จะขึ้นอยู่กับทิศทางของการเปลี่ยนประจุเหนี่ยวนำจากขั้วเกต ทำให้การเพิ่มขึ้นของประจุบนเกาะเป็นแบบขั้นบันได ดังแสดงในภาพประกอบ 2.5

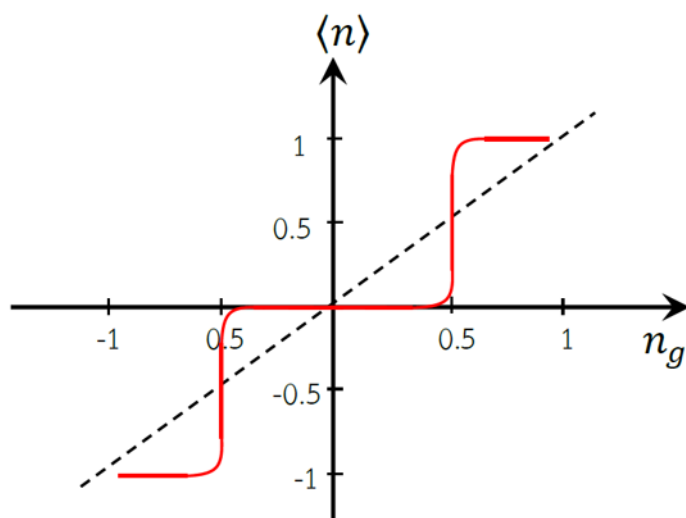


ภาพประกอบ 2.5 จำนวนประจุรวมสุทธิในกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวจะมีการเปลี่ยนแปลงเพิ่มขึ้นหรือลดลงหนึ่งตัวที่จุดดีเจนเนอเรซี กล่าวคือ $n_g = n \pm 1/2$ โดย n เป็นจำนวนประจุที่อยู่ภายในกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งบริเวณที่เกิดปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์ เป็นบริเวณที่จำนวนอิเล็กตรอนมีค่าคงที่ [20]

นอกจากนี้ ในการศึกษาปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์ที่เกิดขึ้นในกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวสามารถอธิบายได้ด้วยพลังงานการเพิ่มประจุยังผล (effective charging energy : E_C^*) [42]–[45] นิยามตามสมการ

$$\frac{E_C^*}{E_C} = 1 - \left. \frac{\partial \langle n \rangle}{\partial n_g} \right|_{n_g=0} \quad (2.14)$$

เมื่อ $\langle n \rangle$ เป็นจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว

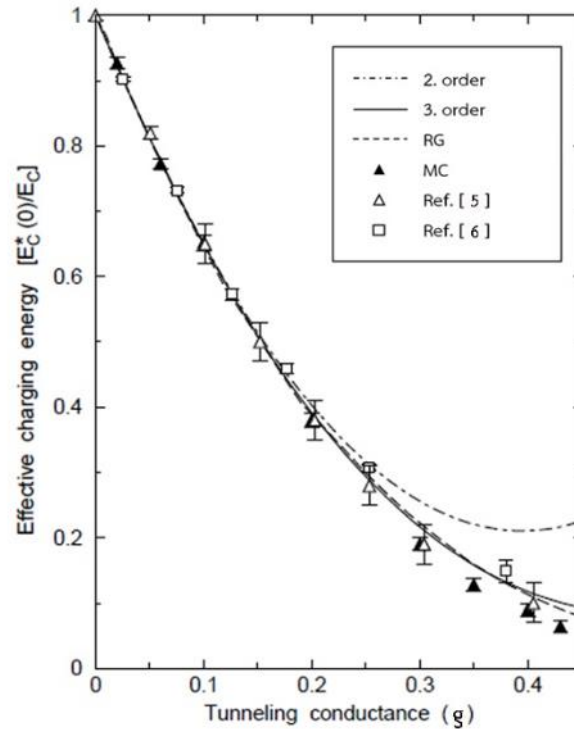


ภาพประกอบ 2.6 การเปลี่ยนแปลงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวในกรณีที่เกิดปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์แสดงด้วยเส้นสีแดง และในกรณีที่ไม่เกิดปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์แสดงด้วยเส้นปะ

ภาพประกอบ 2.6 แสดงการเปลี่ยนแปลงจำนวนประจุของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว โดยกราฟเส้นสีแดงเป็นกรณีที่เกิดปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์ ซึ่งสังเกตได้จากจำนวนอิเล็กตรอนที่มีค่าคงที่ขณะที่ความต่างศักย์ที่ให้จากขั้วเกตมีค่าเพิ่มขึ้นจนกระทั่ง $n_g = 0.5$ ส่วนกราฟเส้นปะแสดงกรณีที่ไม่เกิดปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์ เนื่องจากจำนวนอิเล็กตรอนจะเพิ่มขึ้นตามการเปลี่ยนแปลงศักย์ที่ให้จากขั้วเกต กล่าวคือ อิเล็กตรอนสามารถเคลื่อนที่ผ่านระบบได้อย่างต่อเนื่อง

จากสมการ (2.14) พบว่า ที่ $n_g \sim 0$ เมื่อความชันมีค่าลู่เข้าสู่ศูนย์ ($\partial \langle n \rangle / \partial n_g \rightarrow 0$) พลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าลู่เข้าสู่ค่าพลังงานการเพิ่มประจุ ($E_c^* \rightarrow E_c$) แสดงว่าระบบนี้เกิดปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์ จากภาพประกอบ 2.6 ให้พิจารณากราฟเส้นสีแดง พบว่า เมื่อเพิ่มความต่างศักย์จากขั้วเกตแต่จำนวนอิเล็กตรอนมีค่าคงที่ แสดงว่าเกิดปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์ แต่ในกรณีที่ไม่เกิดปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์ พบว่า จำนวนประจุเฉลี่ยบนเกาะจะแปรผันตามศักย์ไฟฟ้าที่ขั้วเกต ($\partial \langle n \rangle / \partial n_g \rightarrow 1$) ซึ่งทำให้พลังงานการเพิ่มประจุมีค่าลู่เข้าสู่ศูนย์ ($E_c^* \rightarrow 0$) กล่าวคือ ระบบไม่สามารถแสดงปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์ จากสมการ (2.14) สามารถกล่าวได้อีกลักษณะหนึ่งว่า ในกรณีที่ไม่เกิดปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์ ความจุไฟฟ้ายังผลมีค่าลู่เข้าสู่ค่าความจุไฟฟ้ารวมของระบบ แต่ในกรณีที่เกิดปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์ ค่าความจุไฟฟ้ายังผลจะลู่เข้าสู่ศูนย์ จากคุณสมบัติข้างต้นทำให้ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลเป็น

พารามิเตอร์ที่แสดงถึงความแรงของการเกิดปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์ ค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว ได้ถูกศึกษาอย่างกว้างขวาง ดังได้แสดงในภาพประกอบ 2.7

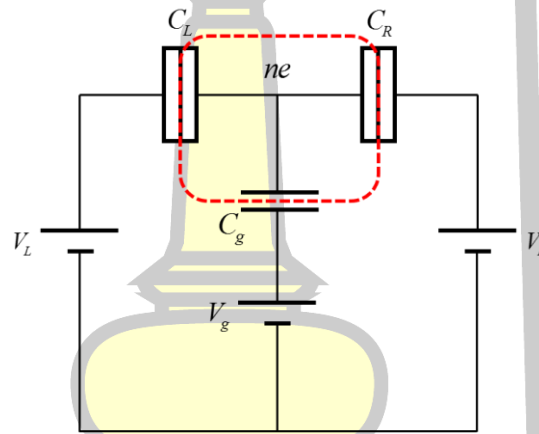


ภาพประกอบ 2.7 ความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานการเพิ่มประจุยังผลของกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวกับค่าความนำไฟฟ้าในช่วง $0 \leq g \leq 0.45$ [44]

จากภาพประกอบ 2.7 แสดงการเปรียบเทียบผลการคำนวณค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลเมื่อค่าความนำไฟฟ้าแบบไม่มีหน่วยของระบบเปลี่ยนแปลงไป ด้วยวิธีการรีนอร์มอลไลซ์กรุป (renormalize group method) ทฤษฎีการรบกวน (perturbation theory) [44], [45] และวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล จากภาพประกอบ 2.7 พบว่า เมื่อความนำไฟฟ้าของรอยต่อการทะลุผ่านมีค่าเพิ่มขึ้นค่าพลังงานการเพิ่มประจุยังผลมีค่าลู่เข้าสู่ศูนย์ จากผลการคำนวณด้วยทฤษฎีการรบกวนอันดับสอง สอดคล้องกับผลการทดลองในช่วง $0 \leq g \leq 0.15$ และทฤษฎีการรบกวนอันดับสาม สอดคล้องกับผลการทดลองในช่วง $0 \leq g \leq 0.4$ และจากผลการคำนวณด้วยวิธีการรีนอร์มอลไลซ์กรุป สอดคล้องกับผลการคำนวณที่ได้จากวิธีควอนตัมมอนติคาร์โลเป็นอย่างดี เมื่อความนำไฟฟ้ามีค่าสูงขึ้นพบว่า ผลที่ได้จากทฤษฎีการรบกวนไม่สอดคล้องกับผลการทดลอง

2.3 ทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว

ทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวเป็นระบบที่มีความซับซ้อนกว่ากล่องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว ซึ่งวงจรสมมูลของระบบดังกล่าวสามารถแสดงได้ดังภาพประกอบ 2.8 โดยทั่วไปทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวประกอบด้วยรอยต่อการทะลุผ่านสองรอยต่อ ทำให้อิเล็กทรอนิกส์สามารถเคลื่อนที่ผ่านอุปกรณได้ การเคลื่อนที่ของอิเล็กทรอนิกส์สามารถควบคุมได้โดยการปรับค่าความต่างศักย์ไฟฟ้าระหว่างขั้วไฟฟ้าทั้งด้านซ้ายและขวา V_L และ V_R ตามลำดับ หรือศักย์ไฟฟ้าที่ขั้วเกต V_g จึงเป็นที่มาของคำว่าทรานซิสเตอร์ เนื่องจากอาศัยแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตควบคุมการไหลของกระแส ในทำนองเดียวกับกรณีของกล่องอิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว การเพิ่มอิเล็กทรอนิกส์เข้าไปในเกาะที่มีอิเล็กทรอนิกส์ส่วนเกินต้องใช้พลังงานการเพิ่มประจุดังสมการที่ (2.15)



ภาพประกอบ 2.8 วงจรสมมูลของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว โดยบริเวณเส้นประแสดงขอบเขตของเกาะที่ถูกแยกออกจากแหล่งไฟฟ้าภายนอกด้วยรอยต่อการทะลุผ่านและรอยต่อตัวเก็บประจุ

$$E_{ch}(n, Q_g) = \frac{1}{C_\Sigma} (ne - Q_g)^2 \quad (2.15)$$

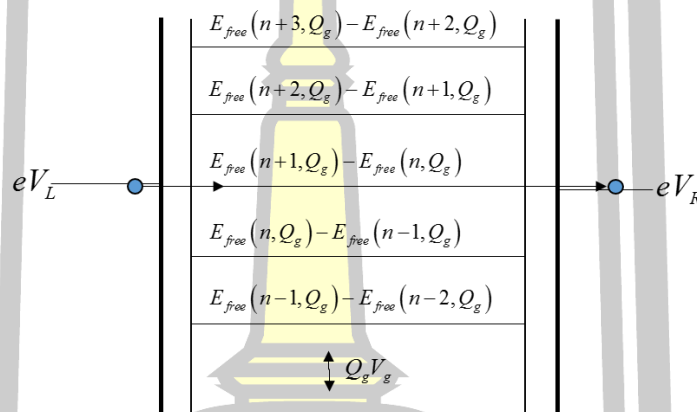
ในกรณีของทรานซิสเตอร์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวความจุไฟฟ้ารวมจะเกิดจากผลรวมของความจุทั้งสามรอยต่อ กล่าวคือ $C_\Sigma = C_L + C_R + C_g$ และประจุนี้นิยมนำมาจากขั้วเกต $Q_g = C_g V_g + C_L V_L + C_R V_R$ ประกอบด้วยประจุที่ถูกเหนี่ยวนำจากแหล่งจ่ายศักย์ไฟฟ้าภายนอกทั้งหมด ในกรณีที่ $T \sim 0$ และกำหนดให้ศักย์ไฟฟ้าฝั่งซ้ายสูงกว่าศักย์ไฟฟ้าฝั่งขวา กล่าวคือ $V_L - V_R > 0$ เมื่อมีกระแสทะลุผ่านจากขั้วไฟฟ้าทางฝั่งซ้ายเข้าไปยังเกาะ จะทำให้มีการเปลี่ยนแปลงสถานะของประจุบนเกาะจาก n ไปเป็น $n+1$ ซึ่งจะเกิดขึ้นได้ก็ต่อเมื่อ

$$eV_L > E_{free}(n+1, Q_g) - E_{free}(n, Q_g) = \left(n + \frac{1}{2} - \frac{Q_g}{e} \right) \frac{e^2}{C_\Sigma} \quad (2.16)$$

ในทำนองเดียวกัน เมื่อมีกระแสไหลผ่านจากเกาะไปยังขั้วไฟฟ้าทางด้านขวาทำให้สถานะประจุของเกาะมีการเปลี่ยนแปลงจาก $n+1 \rightarrow n$ ซึ่งจะสามารถเกิดขึ้นได้ก็ต่อเมื่อ

$$eV_R < E_{free}(n+1, Q_g) - E_{free}(n, Q_g) \quad (2.17)$$

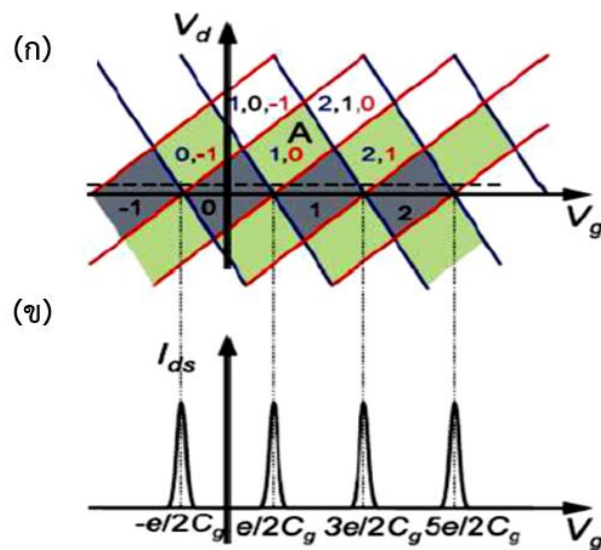
เพื่อให้กระแสสามารถไหลผ่านระบบไปได้ ทั้งสองเงื่อนไขต้องเกิดขึ้นพร้อมกัน ดังแสดงในภาพประกอบ 2.9



ภาพประกอบ 2.9 เงื่อนไขที่ทำให้เกิดกระแสไหลผ่านทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวจากทางด้านซ้ายไปยังด้านขวาของระบบ

ดังนั้น การเปลี่ยนแปลงศักย์ไฟฟ้าที่ขั้วเกิดจะทำให้กระแสไฟฟ้าไหลผ่านทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวในลักษณะเป็นคาบ เหตุการณ์ดังกล่าวถูกเรียกว่า การกีดขวางแบบคูลอมบ์ (Coulomb blockade oscillation) ซึ่งการกีดขวางดังกล่าวสามารถอธิบายได้จากแผนภาพเสถียรของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว ดังแสดงในภาพประกอบ 2.10 [46]

พูนุ ปณ ทิโต ชิว

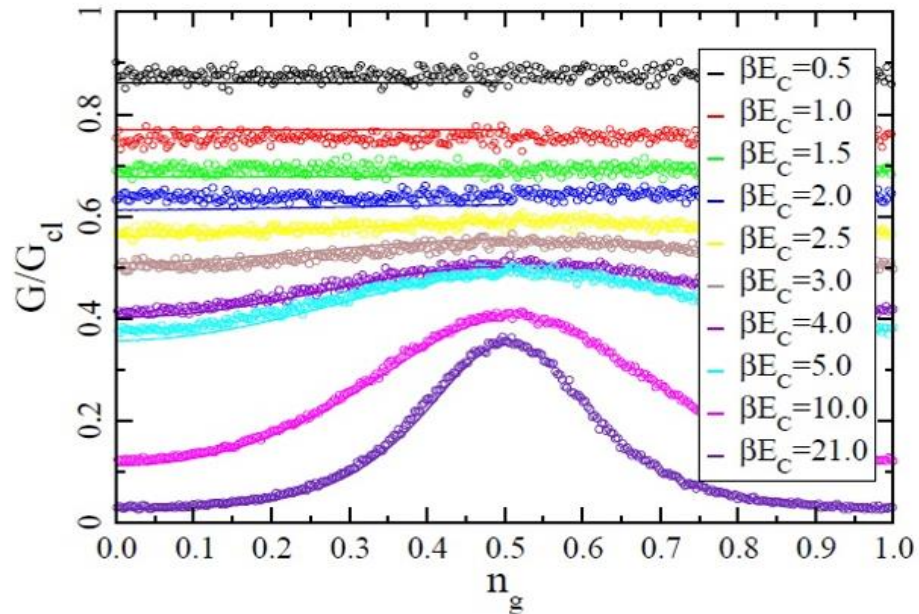


ภาพประกอบ 2.10 แผนภาพเสถียรของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว โดยบริเวณสีเทาเป็นบริเวณที่มีจำนวนประจุคงที่ ซึ่งเกิดจากผลของปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์ ตัวเลขที่อยู่ในบริเวณดังกล่าวหมายถึงจำนวนประจุที่อยู่ภายในเกาะ ซึ่งแสดงในภาพ (ก) และความสัมพันธ์ระหว่างกระแสที่ไหลผ่านทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวกับความต่างศักย์ที่ขั้วเกต ในกรณีที่ความต่างศักย์ระหว่างขั้วซอร์สและเดรน V_{ds} มีค่าน้อยดังแสดงด้วยเส้นประ ซึ่งแสดงในภาพ (ข) [47]

จากภาพประกอบ 2.10 (ก) จะเห็นว่าในบริเวณสีเทา เป็นบริเวณที่จำนวนประจุที่อยู่ในเกาะมีค่าคงที่ เมื่อศักย์ไฟฟ้าที่ให้จากขั้วเกตมีค่าเพิ่มขึ้น จนกระทั่งศักย์ที่ให้จากขั้วเกตมีค่าสอดคล้องกับพลังงานการเพิ่มประจุ กล่าวคือ ศักย์ที่ให้เข้าไปทำให้อิเล็กตรอนสามารถที่จะทะลุผ่านระบบออกไปได้ โดยเมื่อ V_g ที่ให้เข้าไปมีค่าเป็น $e/2C_g$ จะทำให้จำนวนอิเล็กตรอนในเกาะเพิ่มขึ้นและทะลุผ่านไปยังอีกด้านหนึ่งของระบบ ซึ่งสังเกตได้จากการไหลของกระแสที่มีลักษณะเป็นคาบตามภาพประกอบ 2.10 (ข) โดยระยะห่างของแต่ละคาบจะเท่ากับ e/C_g

ปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์สามารถสังเกตได้จากการวัดค่าความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งวอลลิสเซอร์และคณะ (Wallisser et al) [28] ได้ทำการทดลองและเปรียบเทียบกับค่าความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวที่คำนวณได้จากวิธีคอนตัมมอนติคาร์โล ดังภาพประกอบ 2.11 ในกรณีที่อุณหภูมิต่ำ กล่าวคือ $\beta E_C \leq 1$ พบว่า ความนำไฟฟ้าไม่ขึ้นกับการเปลี่ยนแปลงศักย์ไฟฟ้าที่ขั้วเกต ทำให้ความนำไฟฟ้ามีค่าคงที่ ซึ่งแสดงว่าไม่เกิดปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์ แต่ที่อุณหภูมิต่ำ $\beta E_C > 1.0$ เช่น ที่ $\beta E_C = 21.0$ ค่าความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวมีค่าเพิ่มขึ้นสูงสุดที่ $n_g = 0.5$ ซึ่งเป็นผลเนื่องจากปรากฏการณ์

ขีดขวางแบบคูลอมบ์ นอกจากนี้ภาพประกอบ 2.11 ได้แสดงให้เห็นว่า ผลการคำนวณจากวิธีควอนตัมมอนติคาร์โลกับผลการทดลองมีความสอดคล้องกันเป็นอย่างดี ในทุกช่วงของอุณหภูมิ



ภาพประกอบ 2.11 ความนำไฟฟ้าของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวที่อุณหภูมิค่าต่าง ๆ โดยค่าความนำไฟฟ้าที่ได้จากการทดลองแสดงด้วยจุด และเส้นทึบแสดงผลที่ได้จากการคำนวณโดยใช้วิธีควอนตัมมอนติคาร์โล [48]

จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว

จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวสามารถคำนวณตามสมการ [49]

$$\langle n \rangle = n_g + \frac{1}{2\beta E_C} \frac{\partial \ln Z}{\partial n_g} \quad (2.18)$$

โดยที่ Z เป็นฟังก์ชันแบ่งส่วน (partition function) ของระบบ ซึ่งฟังก์ชันแบ่งส่วนสามารถเขียนให้อยู่ในรูปปริพันธ์ของฟังก์ชันนอลดังสมการ

$$Z = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \int_{\varphi(0)}^{\varphi(\beta E_C) + 2\pi k} D\varphi e^{-S[\varphi, k]} \quad (2.19)$$

เมื่อ k เป็นตัวเลขไวน์ดิง (winding number) และแอกชันของระบบ $S[\varphi] = S_C[\varphi] + S_T[\varphi]$ เกิดจากผลรวมของกริยาของคูลอมบ์ (Coulomb action : $S_C[\varphi]$) และกริยาของการทะลุผ่าน (tunneling action : $S_T[\varphi]$) เป็นไปตามสมการ

$$S_C[\varphi] = \int_0^{\beta E_C} d\tau \left[\frac{\dot{\varphi}^2}{4} + i n_g \dot{\varphi}(\tau) \right] \quad (2.20)$$

และ

$$S_T[\varphi] = -g \int_0^{\beta E_C} d\tau \int_0^{\beta E_C} d\tau' \alpha(\tau - \tau') \cos(\varphi(\tau) - \varphi(\tau')) \quad (2.21)$$

โดยที่ $g = 2\pi G_{cl}/e^2$ เมื่อกำหนดให้ $\hbar = 1$ และ G_{cl} หมายถึงค่าความนำไฟฟ้ารวมของระบบที่วัดได้ที่อุณหภูมิสูง และเคอร์เนลของการทะลุผ่าน (tunneling kernel) เป็นไปตามสมการ

$$\alpha(\tau - \tau') = \frac{1}{4(\beta E_C)^2 \sin^2\left(\frac{\pi}{\beta E_C}(\tau - \tau')\right)} \quad (2.22)$$

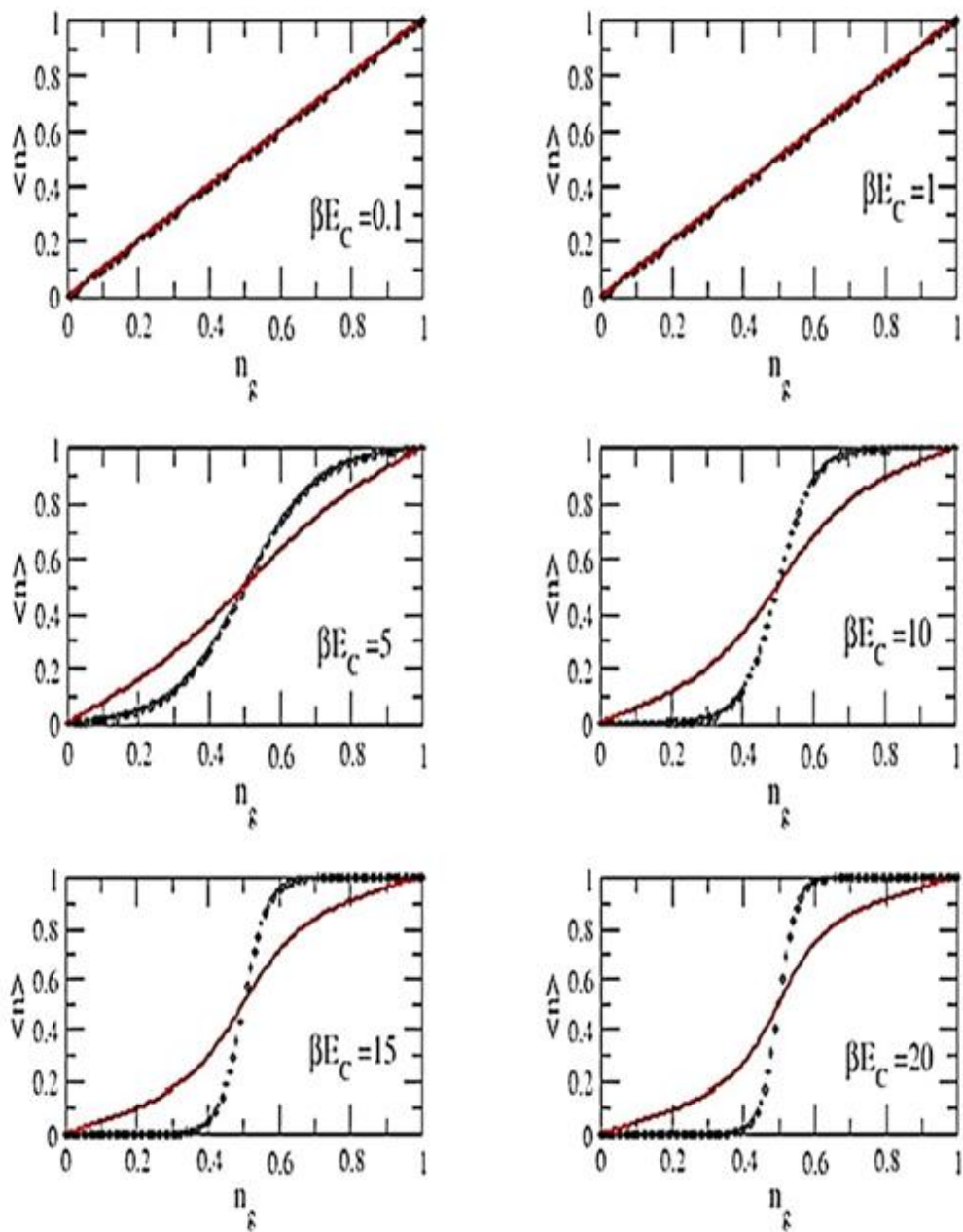
จากสมการ (2.18) สามารถคำนวณจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยได้ตามสมการ

$$\langle n \rangle = n_g - \frac{i\pi \langle k \rangle}{\beta E_C} \quad (2.23)$$

โดยที่ค่าคาดหวังของตัวเลขไวน์ดิง นิยามตามสมการ

$$\langle k \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{k \in \mathbb{R}} \int_{\varphi(0)}^{\varphi(\beta E_C) + 2\pi k} D[\varphi] k e^{-S[\varphi, k]} \quad (2.24)$$

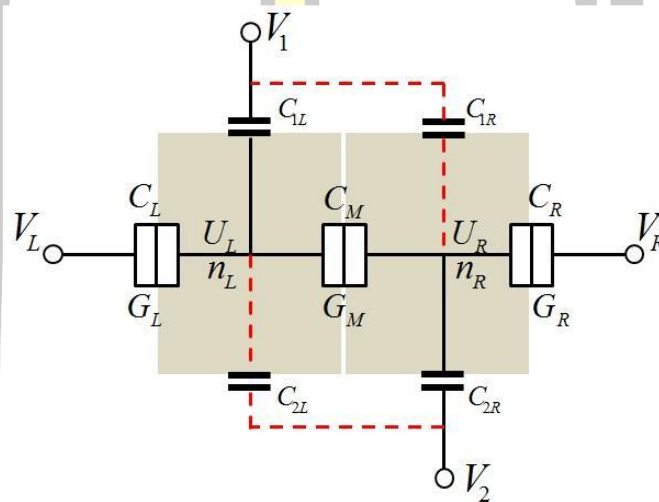
ผลการคำนวณจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวที่อุณหภูมิต่างๆ ได้แสดงในภาพประกอบ 2.12 พบว่าที่อุณหภูมิสูงหรือที่ $\beta E_C \leq 1$ เป็นช่วงที่ไม่เกิดปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์เนื่องจากจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยเพิ่มขึ้นตามศักย์ไฟฟ้าที่ชั่วเกิด ผลการคำนวณจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยจากวิธีแบบฉบับ [46] และวิธีควอนตัมมอนติคาร์โลสามารถนำไปอธิบายผลการทดลองได้เป็นอย่างดี แต่ที่อุณหภูมิต่ำลง กล่าวคือ $\beta E_C > 1$ พบว่าผลการคำนวณโดยวิธีแบบฉบับไม่สามารถอธิบายผลการทดลองได้ ในช่วงอุณหภูมิที่เกิดปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์



ภาพประกอบ 2.12 ผลการคำนวณจำนวนประจุอิเล็กตรอนเฉลี่ยที่รอดต่อการทะลุผ่านของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว โดยข้อมูลสีดำ เป็นผลที่ได้จากการคำนวณโดยใช้กลศาสตร์แบบฉบับ และข้อมูลสีแดง เป็นผลที่ได้จากการคำนวณโดยวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล [46]

2.4 ป้อนอิเล็กตรอนเดี่ยวชนิดโลหะ

โดยทั่วไปป้อนอิเล็กตรอนเดี่ยวประกอบไปด้วยเกาะโลหะสองเกาะ และรอยต่อการทะลุผ่าน 3 รอยต่อ แต่อย่างไรก็ตาม โครงสร้างพื้นฐานดังกล่าวไม่สามารถวัดค่าความจุไฟฟ้าแต่ละรอยต่อได้ เพื่อแก้ปัญหาลิ้มบัทและคณยะ[32] ได้ออกแบบโครงสร้างที่ประกอบด้วยรอยต่อการทะลุผ่าน 5 รอยต่อ ดังลูกศรสีแดงในภาพประกอบ 1.2 เพื่อให้สามารถวัดค่าความจุไฟฟ้าและค่าความนำไฟฟ้าของแต่ละรอยต่อ แต่ในการศึกษาได้กำหนดให้ขั้วซอร์สหมายเลข 1 กับ 2 และขั้วเดรนหมายเลข 1 กับ 2 รวมเข้าด้วยกัน ซึ่งสามารถเขียนวงจรสมมูลดังภาพประกอบ 2.13 โดยตัวห้อย L M และ R หมายถึง ค่าพารามิเตอร์ที่แสดงตำแหน่ง ฝั่งซ้าย ตรงกลาง และฝั่งขวาตามลำดับ



ภาพประกอบ 2.13 วงจรสมมูลของป้อนอิเล็กตรอนเดี่ยว [34] ที่รวมขั้วซอร์สหมายเลข 1 กับ 2 และขั้วเดรนหมายเลข 1 กับ 2 เข้าเป็นขั้วไฟฟ้า V_L และ V_R ตามลำดับ ได้ถูกรวมเข้าด้วยกันเพื่อใช้ในการศึกษาปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์ พารามิเตอร์ทั้งหมด ในภาพประกอบ 2.13 ได้แสดงไว้ในตาราง 2.1

ตาราง 2.1 ค่าของพารามิเตอร์ในวงจรสมมูลของป้อนอิเล็กตรอนเดี่ยว g_j เป็นค่าความนำไฟฟ้าของแต่ละรอยต่อการทะลุผ่าน $j \in \{L, M, R\}$ โดยนิยามจาก $g_j = G_j/G_0$ และ $G_0 = e^2/h$ และ G_0 เป็นค่าความนำไฟฟ้าที่อุณหภูมิสูงของป้อนอิเล็กตรอนเดี่ยว [34]

พารามิเตอร์	C_L	C_M	C_R	C_{L1}	C_{L2}	C_{R1}	C_{R2}	g_L	g_M	g_R	G_0
ค่าพารามิเตอร์	181 (aF)	173 (aF)	236 (aF)	50.5 (aF)	18.0 (aF)	21.5 (aF)	58.6 (aF)	0.52 -	1.32 -	0.83 -	10.0 (μS)

พลังงานการเพิ่มประจุของป้อนอิเล็กตรอนเดี่ยว

พลังงานการเพิ่มประจุของป้อนอิเล็กตรอนเดี่ยว สามารถแสดงได้ดังสมการ [33]

$$E_C(n_L, n_R) = E_{CL}(n_L - n_{L0})^2 + E_{CR}(n_R - n_{R0})^2 + 2E_{CM}(n_L - n_{L0})(n_R - n_{R0}), \quad (2.25)$$

โดยที่

$$E_{CL} = \frac{e^2 C_{\Sigma R}}{2(C_{\Sigma L} C_{\Sigma R} - C_M^2)} \quad (2.26)$$

$$E_{CR} = \frac{e^2 C_{\Sigma L}}{2(C_{\Sigma L} C_{\Sigma R} - C_M^2)} \quad (2.27)$$

$$E_{CM} = \frac{e^2 C_M}{2(C_{\Sigma L} C_{\Sigma R} - C_M^2)} \quad (2.28)$$

$$C_{\Sigma L} = C_L + C_M + C_{1L} + C_{2L}, \quad C_{\Sigma R} = C_R + C_M + C_{1R} + C_{2R} \quad (2.29)$$

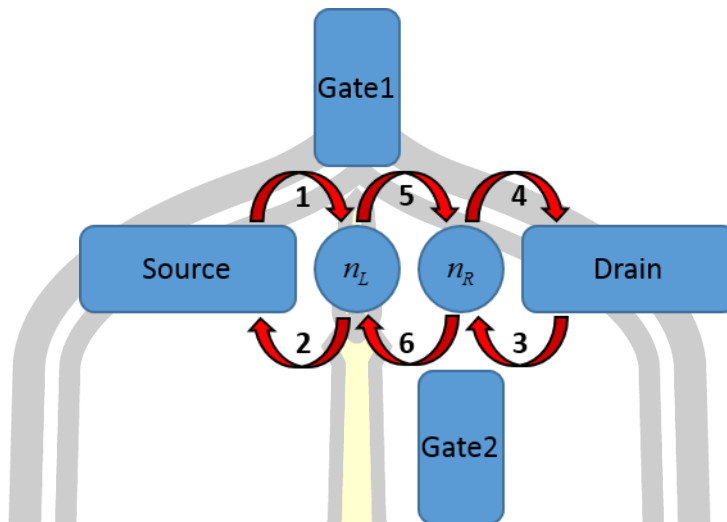
และ

$$n_{i0} = \frac{C_i V_i}{e} + \frac{C_{1i} V_1}{e} + \frac{C_{2i} V_2}{e} \quad (2.30)$$

เมื่อ $i \in \{L, R\}$ ค่า E_{CL} , E_{CM} และ E_{CR} เป็นพลังงานการเพิ่มประจุของรอยต่อการทะลุผ่านทางซ้าย ตรงกลางและทางขวาตามลำดับ สัญลักษณ์ n_L และ n_R เป็นจำนวนอิเล็กตรอนที่อยู่บนเกาะโลหะทางซ้ายและทางขวาตามลำดับ เมื่อ n_{L0} และ n_{R0} เป็นจำนวนประจุเหนี่ยวนำที่เกิดจากแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทางซ้ายและทางขวาตามลำดับ

แผนภาพเสถียร

แผนภาพเสถียรของป้อนอิเล็กตรอนเดี่ยวถูกสร้างขึ้นเพื่ออธิบายการเปลี่ยนแปลงสถานะของประจุที่อยู่ในแต่ละเกาะโลหะและเงื่อนไขเบื้องต้นของการส่งผ่านประจุ โดยแผนภาพดังกล่าวสามารถสร้างได้จากการพิจารณาการส่งผ่านของอิเล็กตรอนในป้อนอิเล็กตรอนเดี่ยว ซึ่งสามารถเกิดขึ้นได้ทั้งหมด 6 กรณี แสดงดังภาพประกอบ 2.14

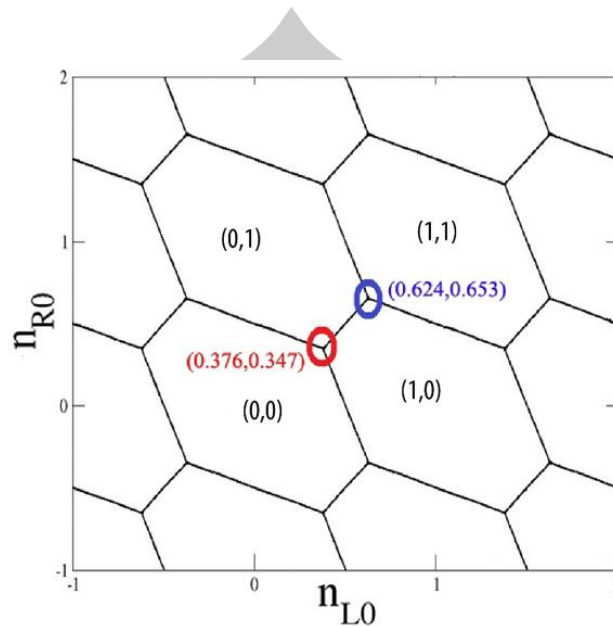


ภาพประกอบ 2.14 ลักษณะการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนที่สามารถเคลื่อนที่ได้ทั้งหมด 6 กรณี ดังแสดงด้วยลูกศร

การเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนทั้ง 6 กรณี ได้แก่ กรณีที่ 1 อิเล็กตรอนหนึ่งตัวเคลื่อนที่จากซอร์สไปยังเกาะโลหะทางซ้าย กรณีที่ 2 อิเล็กตรอนหนึ่งตัวเคลื่อนที่จากเกาะโลหะทางซ้ายไปยังซอร์ส กรณีที่ 3 อิเล็กตรอนหนึ่งตัวเคลื่อนที่จากซอร์สไปยังเกาะโลหะทางขวา กรณีที่ 4 อิเล็กตรอนหนึ่งตัวเคลื่อนที่จากเกาะโลหะทางขวาไปยังซอร์ส กรณีที่ 5 อิเล็กตรอนหนึ่งตัวเคลื่อนที่จากเกาะโลหะทางซ้ายไปยังเกาะโลหะทางขวา กรณีที่ 6 อิเล็กตรอนหนึ่งตัวเคลื่อนที่จากเกาะโลหะทางขวาไปยังเกาะโลหะทางซ้าย โดยรายละเอียดในการคำนวณแผนภาพเสถียรของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวจากเงื่อนไขทั้ง 6 กรณี ได้ถูกแสดงไว้ในงานวิจัยของวันเดอวิลล์และคณะ (Van Der Wiel *et al.*) และคณะ [50] และงานวิจัยของนาคาเริงฤทธิ์ [51] โดยในวิทยานิพนธ์นี้ได้แสดงตัวอย่างแผนภาพเสถียรของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวซึ่งถูกคำนวณโดยใช้พารามิเตอร์จากตาราง 2.1 แสดงดังภาพประกอบ 2.15

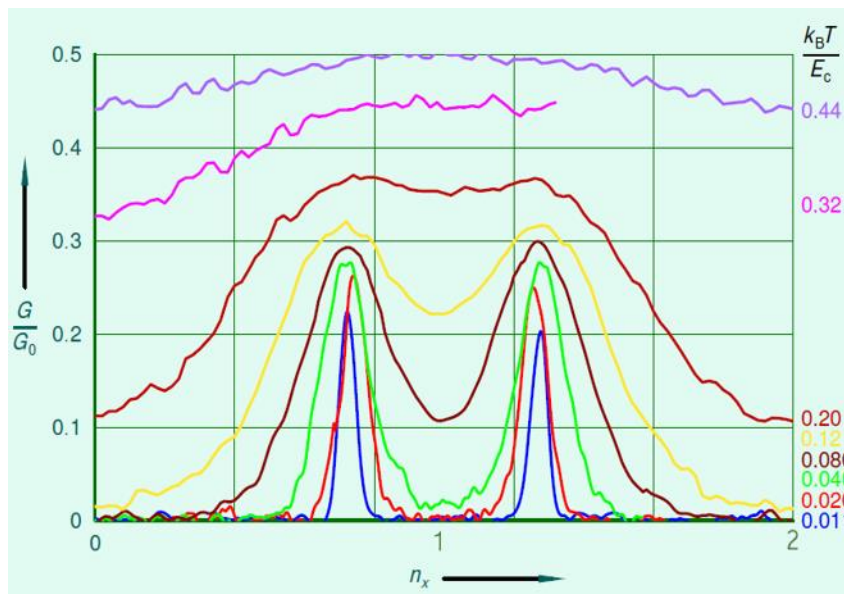
จากภาพประกอบ 2.15 แผนภาพเสถียรมีลักษณะเป็นรูปหกเหลี่ยมคล้ายกับหนึ่งหน่วยของรังผึ้ง (honeycomb unit) โดยเส้นขอบดังกล่าวเกิดจากเส้นของพลังงานการเพิ่มประจุ (charging line) และคู่อันดับแสดงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของแต่ละเกาะโลหะ เมื่อพิจารณาที่สถานะเริ่มต้น กล่าวคือที่ตำแหน่ง $n_{L0} = n_{R0} = 0$ อิเล็กตรอนไม่สามารถเคลื่อนที่จากซอร์สเข้าไปในเกาะโลหะทางซ้าย หรือเคลื่อนที่จากซอร์สเข้าไปในเกาะโลหะทางขวา หรือการเคลื่อนย้ายอิเล็กตรอนระหว่างเกาะโลหะได้ ดังนั้นบริเวณนี้จึงไม่มีอิเล็กตรอนอยู่ซึ่งแสดงสถานะในเซลล์หกเหลี่ยมได้เป็น $(0,0)$ แต่

เมื่อพิจารณาในกรณีที่มีอิเล็กตรอนในเกาะโลหะฝั่งซ้ายหนึ่งตัวสามารถแสดงสถานะในเซลล์หกเหลี่ยม เป็น $(1,0)$



ภาพประกอบ 2.15 แผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว [51] ที่คำนวณจากพารามิเตอร์ในตาราง 2.1

นอกจากนี้ เมื่อพิจารณาจุดทริปเปิลพอยท์ (วงกลมสีแดงและวงกลมสีน้ำเงิน) ซึ่งเป็นจุดที่เกิดการส่งผ่านอิเล็กตรอนระหว่างเกาะโลหะทั้งสอง จากแผนภาพข้างต้น เมื่อปรับแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทั้งสองให้มีค่าเท่ากับจุดทริปเปิลพอยท์ จะทำให้อิเล็กตรอนหนึ่งตัวสามารถส่งผ่านจากขั้วซอร์สไปยังขั้วเดรนได้ หรือกล่าวอีกนัยหนึ่งว่า จุดทริปเปิลพอยท์เป็นจุดที่เป็นเงื่อนไขทำให้เกิดค่าความนำไฟฟ้าของระบบสูงสุด (G_{\max}) จากภาพประกอบ 2.15 พบว่า จุดทริปเปิลพอยท์ในวงกลมสีแดงและสีน้ำเงิน อยู่ที่ตำแหน่ง $(n_{L0}, n_{R0}) = (0.376, 0.347)$ และ $(n_{L0}, n_{R0}) = (0.623, 0.625)$ เมื่อนำค่าดังกล่าวไปเปรียบเทียบกับผลการวัดค่าความนำไฟฟ้าที่ขึ้นกับแรงดันไฟฟารวมที่ขั้วเกต กล่าวคือ $n_x = n_{L0} + n_{R0}$ ดังภาพประกอบ 2.16 พบว่า ค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดปรากฏขึ้นที่ $n_x \approx 0.7$ และ $n_x \approx 1.3$ ซึ่งมีค่าใกล้เคียงกับจุดทริปเปิลพอยท์ที่อยู่ในแผนภาพเสถียร แต่อย่างไรก็ตาม ในการสร้างแผนภาพเสถียรที่ได้กล่าวมาแล้วนั้นได้พิจารณาเฉพาะพลังงานการเพิ่มประจุเท่านั้น ดังนั้น แผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวจึงไม่สามารถระบุตำแหน่งของค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดที่ได้ถูกต้องแม่นยำ



ภาพประกอบ 2.16 ผลการทดลองวัดค่าความนำไฟฟ้าของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยว [33] ที่เกิดในช่วงอุณหภูมิ 27 mK ($k_B T / E_C = 0.011$) ถึง 1 K ($k_B T / E_C = 0.44$)

จากภาพประกอบ 2.16 ในกรณีอุณหภูมิสูง $k_B T / E_C = 0.44$ กล่าวคือ กราฟเส้นสีม่วง ค่าความนำไฟฟ้าในช่วงดังกล่าวมีค่าเปลี่ยนแปลงน้อย เมื่อแรงดันไฟฟ้าของขั้วเกตรวม n_x มีค่าเปลี่ยนแปลงซึ่งเป็นผลจากอิเล็กตรอนมีพลังงานจลน์ที่เกิดจากความร้อนใกล้เคียงกับค่าพลังงานการเพิ่มประจุซึ่งส่งผลให้การส่งผ่านประจุอย่างต่อเนื่อง แต่เมื่อพิจารณาที่อุณหภูมิต่ำ เช่น กราฟเส้นสีเขียว ในกรณีนี้พลังงานจลน์ของอิเล็กตรอนที่เกิดจากความร้อนมีน้อยเมื่อเทียบพลังงานการเพิ่มประจุ กล่าวคือ $k_B T / E_C = 0.04$ ทำให้ประจุมีการส่งผ่านที่ไม่ต่อเนื่อง ซึ่งเป็นผลมาจากปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์ จากผลดังกล่าว ส่งผลให้ความนำไฟฟ้ามีการเปลี่ยนแปลงสูงที่สุดสองครั้งที่พารามิเตอร์ n_x มีค่าประมาณ 0.7 และ 1.3 เนื่องจากที่ตำแหน่งดังกล่าวเป็นสภาวะที่อุปกรณ์ได้รับแรงดันไฟฟ้าจากขั้วเกตทั้งสองอย่างเหมาะสม กล่าวคือ ได้รับพลังงานเท่ากับพลังงานการเพิ่มประจุของระบบ ทำให้อิเล็กตรอนสามารถเคลื่อนที่จากขั้วซอร์สไปยังขั้วเดรนหรือขั้วเดรนมายังขั้วซอร์สได้

2.5 การคำนวณปริพันธ์ตามวิถีของไฟน์แมน

การคำนวณปริพันธ์ตามวิถีของไฟน์แมน (Feynman path integral) เป็นวิธีการนำเสนอเพื่อใช้ในการแก้ปัญหาทฤษฎีควอนตัม (quantum mechanics) ซึ่งวิธีการดังกล่าวเป็นนัยนิยม (formalism) หนึ่งในกลศาสตร์ควอนตัม ซึ่งให้ผลการคำนวณที่สอดคล้องกับการแก้ปัญหาด้วย

รูปแบบพื้นฐานที่ใช้ในการแก้ปัญหาเชิงควอนตัม เช่น กลศาสตร์คลื่นของชเรอดิงเงอร์ และกลศาสตร์เชิงเมทริกซ์ของไฮเซนเบิร์ก [52] การคำนวณปริพันธ์ตามวิถีของไฟน์แมนถูกสร้างขึ้นโดยอยู่บนพื้นฐานของสมมติฐานที่ว่า อนุภาคในกลศาสตร์เชิงควอนตัมอาจจะเคลื่อนที่ไปตามเส้นทางใดๆ ระหว่างจุดสองจุดที่เชื่อมต่อกันระหว่างจุดเริ่มต้นกับจุดสุดท้าย ซึ่งแนวความคิดดังกล่าวได้ถูกนำเสนอในบทความเริ่มแรก [53] และในหนังสือของไฟน์แมน [54] ในหัวข้อนี้เป็นการแนะนำแนวความคิดที่จำเป็นสำหรับรูปแบบการคำนวณปริพันธ์ตามวิถีของไฟน์แมน

เพื่ออธิบายแนวความคิดเกี่ยวกับการคำนวณปริพันธ์ตามวิถีได้แสดงการคำนวณความน่าจะเป็น (probability amplitude) สำหรับอนุภาคควอนตัม (quantum particle) หนึ่งตัว โดยกำหนดให้อนุภาคดังกล่าวจะแพร่กระจายจากจุดเริ่มต้น (x) และเคลื่อนที่ไปยังจุด (x') ใดๆ เพื่อความสะดวกในการอธิบายในวิทยานิพนธ์เล่มนี้ได้พิจารณาการคำนวณความน่าจะเป็นในหนึ่งมิติ

สมการของชเรอดิงเงอร์ในสถานะเริ่มต้น ที่ขึ้นกับเวลา $|\psi(t=0)\rangle$ สามารถเขียนได้เป็น

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi(0)\rangle \quad (2.31)$$

เมื่อ \hat{H} เป็นตัวดำเนินการแฮมิลโทเนียนของระบบ (Hamiltonian operator) และกำหนดให้ $\hbar = 1$ ดังนั้น สามารถเขียนสถานะใดๆ ตามสมการ (2.31) ให้อยู่ในพิกัดตำแหน่งได้ดังสมการ

$$\begin{aligned} \psi(x', t) &\equiv \langle x' | \psi(t) \rangle \\ &= \int \langle x' | e^{-i\hat{H}t} | x \rangle \langle x | \psi(0) \rangle \\ &= \int K(t, x', x) \psi(0, x) dx \end{aligned} \quad (2.32)$$

เมื่อแทรกคุณสมบัติปิด (closure relation) $\int dx |x\rangle \langle x| = 1$ และกำหนดให้ $\psi(0, x) = \langle x | \psi(0) \rangle$ และให้เคอร์เนลนิยามได้ตามสมการ

$$K(t, x', x) = \langle x' | e^{-i\hat{H}t} | x \rangle \quad (2.33)$$

สมการ (2.33) บ่งบอกถึงความน่าจะเป็นของอนุภาคหนึ่งตัวที่แผ่กระจายจากจุดเริ่มต้น x ที่เวลา $t=0$ ไปยังจุด x' ที่เวลา t ใดๆ ดังนั้น ความน่าจะเป็นของอนุภาคเดี่ยวที่เคลื่อนที่จากจุดเริ่มต้นไป

ยังจุดสุดท้ายคำนวณได้จาก $|K(t, x', x)|^2$ โดยเคอร์เนลดังกล่าวถูกเรียกว่า ตัวแพร่กระจาย (propagator)

จากคุณสมบัติของทรอตเทอร์-ลี (Trotter-Lie formula) [55]

$$e^{A+B} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(e^{\frac{A}{N}} e^{\frac{B}{N}} \right)^N \quad (2.34)$$

เมื่อ A และ B เป็นจำนวนจริงหรือเมทริกซ์เชิงซ้อนและ N ถูกเรียกว่า เลขทรอตเทอร์ (Trotter number) โดยทั่วไปแฮมิลโทเนียนของอนุภาคเดี่ยวสามารถเขียนได้เป็น $\hat{H} = \hat{P}^2/2m + V(\hat{x})$ เมื่อ \hat{P} เป็นตัวดำเนินการโมเมนตัม (momentum Hamiltonian) ของอนุภาคมวล m พจน์แรกและพจน์ที่สองหมายถึงพลังงานจลน์และพลังงานศักย์ของอนุภาคดังกล่าว ตามลำดับ เพื่อคำนวณตัวแพร่กระจายของอนุภาค กำหนดให้ช่วงเวลาแบ่งออกเป็น N ช่วงและกำหนดให้ความยาวแต่ละช่วงเป็นค่าคงที่ ε ดังนั้น สามารถเขียนเวลาทั้งหมดได้เป็น $t = N\varepsilon$ เมื่อใช้คุณสมบัติในสมการ (2.34) สามารถเขียนตัวแพร่กระจายใหม่ได้ ดังสมการ

$$\begin{aligned} K(x, x', t) &= \langle x' | e^{-it(\hat{P}^2/2m + V(\hat{x}))} | x \rangle \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \langle x' | e^{-i\varepsilon(\hat{P}^2/2m + V(\hat{x}))N} | x \rangle \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \langle x' | \left(e^{-i\varepsilon\hat{P}^2/2m} e^{-i\varepsilon V(\hat{x})} \right)^N | x \rangle \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \prod_{j=1}^N \langle x_j | \left(e^{-i\varepsilon\hat{P}^2/2m} e^{-i\varepsilon V(\hat{x})} \right)^N | x_{j-1} \rangle \end{aligned} \quad (2.35)$$

โดยบรรทัดสุดท้ายในสมการ (2.35) ได้จากการแทรกคุณสมบัติปิด $\int dx_j |x_j\rangle \langle x_j| = 1$ จำนวน $N-1$ ครั้งและกำหนดให้ $x' \equiv x_N$ และ $x \equiv x_0$

พิจารณาตัวแพร่กระจายในช่วงเวลาสั้น (short-time propagator) สำหรับดัชนี j ใดๆ ฟังก์ชันเอกซ์โพเนนเชียล (exponential function) สามารถกระจายให้อยู่ในรูปของอนุกรมเทย์เลอร์ (Taylor's series expansion) ได้เป็น

$$\begin{aligned}\langle x_j | e^{-i\varepsilon\hat{P}^2/2m} e^{-i\varepsilon V(\hat{x})} | x_{j-1} \rangle &= \langle x_j | e^{-i\varepsilon\hat{P}^2/2m} (1 - i\varepsilon(V(\hat{x})) - \varepsilon^2(V(\hat{x}))^2 + \dots) | x_{j-1} \rangle \\ &= \langle x_j | e^{-i\varepsilon\hat{P}^2/2m} | x_{j-1} \rangle e^{-i\varepsilon V(\bar{x}_{j-1})}\end{aligned}\quad (2.36)$$

เมื่อ $\bar{x}_{j-1} = (x_j + x_{j-1})/2$ โดยในวิธานิพนธ์นี้เลือกใช้ค่าเฉลี่ยระหว่างจุด x_j และ x_{j-1} และพลังงานศักย์มีค่าเฉพาะกรณีนี้ที่ $j = j-1$ ในปริภูมิตำแหน่ง ดังนั้น ตัวแพร่กระจายในช่วงเวลาสั้นสำหรับดัชนี j สามารถมองเป็นอนุภาคอิสระ (free particle) ที่เคลื่อนที่ระหว่างจุด x_j และ x_{j-1} ซึ่งขึ้นอยู่กับพจน์ของพลังงานศักย์เฉลี่ยในช่วงดังกล่าว ดังนั้น ตัวแพร่กระจายของช่วงๆ หนึ่ง สามารถคำนวณได้ดังสมการ

$$\begin{aligned}\langle x_j | e^{-i\varepsilon\hat{P}^2/2m} | x_{j-1} \rangle &= \langle x_j | e^{-i\varepsilon\hat{P}^2/2m} \frac{1}{2\pi} \int dp | p \rangle \langle p | x_{j-1} \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dp e^{-i\varepsilon\hat{P}^2/2m} \langle x_j | p \rangle \langle p | x_{j-1} \rangle\end{aligned}\quad (2.37)$$

โดยแทรกคุณสมบัติปิดในปริภูมิของโมเมนตัม $\int dp | p \rangle \langle p | / 2\pi = 1$ และจากคุณสมบัติการโอเวอร์แลป (overlap) ของเวกเตอร์มูลฐานที่ต่างกันสองเซต กล่าวคือ $\{|x_j\rangle\}$ และ $\{|p_j\rangle\}$ มีความสัมพันธ์ตามสมการ

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{2\pi} e^{ipx}\quad (2.38)$$

จากคุณสมบัติดังกล่าวสามารถเขียนสมการ (2.37) ใหม่ได้ดังสมการ

$$\langle x_j | e^{-i\varepsilon\hat{P}^2/2m} | x_{j-1} \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dp e^{-i\varepsilon p^2/2m} e^{-ip(x_j - x_{j-1})}\quad (2.39)$$

จากสมการ (2.39) สามารถคำนวณโดยใช้รูปแบบการคำนวณปริพันธ์ของเกาส์ [39] ตามสมการ

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2 + bx + c} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a} + c}\quad (2.40)$$

ดังนั้น ตัวแพร่กระจายของช่วงๆ หนึ่ง สามารถเขียนได้ดังสมการ

$$\langle x_j | e^{-i\varepsilon\hat{P}^2/2m} | x_{j-1} \rangle = \left(\frac{m}{2\pi i\varepsilon} \right)^{1/2} e^{im(x_j - x_{j-1})^2 / 2\varepsilon}\quad (2.41)$$

จากนั้นแทนตัวแปรกระจายในช่วงเวลาสั้น ในสมการ (2.36)–(2.37) เข้าไปในตัวแปรกระจายคลื่นในสมการ (2.35) พบว่า

$$K(t, x', x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \left(\frac{m}{2\pi i \varepsilon} \right)^{N/2} e^{i\varepsilon \sum_{j=0}^{N-1} \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\varepsilon} \right)^2 - V(\bar{x}_{j-1}) \right\}} \quad (2.42)$$

ในกรณีที่ $N \rightarrow \infty$ หรือสมมูลกับ $\varepsilon \rightarrow 0$ สามารถเขียนอาร์กิวเมนต์ (argument) ของเอกซ์โพเนนเชียลด้วยผลรวมของรีมันน์ (Riemann sum) สำหรับแอคชันแบบดั้งเดิม (classical action) ของเส้นทางที่ถูกละทิ้งออกจากจุด $\{x_0, x_1, \dots, x_N\}$ ดังสมการ

$$\lim_{N \rightarrow \infty} i\varepsilon \sum_{j=0}^{N-1} \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\varepsilon} \right)^2 - V(\bar{x}_{j-1}) \right\} \cong \int_0^t dt' \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{dx(t')}{dt'} \right)^2 - V(x(t')) \right\} \quad (2.43)$$

สมการ (2.43) แสดงให้เห็นว่าในกรณีที่กำหนดให้ขีดจำกัดที่ N ลู่เข้าสู่อนันต์เส้นทางที่แตกออกจะกลายเป็นเส้นทางที่ต่อเนื่อง ในส่วนของปริพันธ์ $\int dx_1 \dots dx_{N-1}$ หมายถึงผลรวมของทุกๆ เส้นทางที่เป็นไปได้ทั้งหมดที่เริ่มต้นที่จุด x และสิ้นสุดที่จุด x' เขียนได้ดังสมการ

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \left(\frac{m}{2\pi i \varepsilon} \right)^{N/2} \cong \int_{x(0)=x}^{x(t)=x'} Dx \quad (2.44)$$

ในกรณีที่เส้นทางมีความต่อเนื่อง สามารถเขียนตัวแปรกระจายได้เป็น

$$K(t, x', x) = \int_{x(0)=x}^{x(t)=x'} Dx e^{iS[x(t)]} \quad (2.45)$$

เมื่อ

$$S[x(t)] = \int_0^t dt' \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{dx(t')}{dt'} \right)^2 - V[x(t')] \right\} \quad (2.46)$$

จากสมการ (2.45) พบว่า ตัวแปรกระจายคลื่นในช่วงเวลาสั้นขึ้นกับแอคชันของแต่ละเส้นทางเท่านั้น

ความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปรกระจายและฟังก์ชันแบ่งส่วนของอนุภาคเดี่ยว

ฟังก์ชันแบ่งส่วนเป็นฟังก์ชันที่สามารถอธิบายการแจกแจงสถานะที่เป็นไปได้ของระบบในกลศาสตร์เชิงสถิติ ซึ่งเป็นปริมาณที่สามารถนำไปสู่คำนวณปริมาณสำคัญอื่นๆ เช่น พลังงานเฉลี่ย

จำนวนอนุภาคเฉลี่ย เป็นต้น ดังนั้น หัวข้อนี้กล่าวถึงการคำนวณฟังก์ชันแบ่งส่วนของอนุภาคภาคเดียว ด้วยวิธีการคำนวณปริพันธ์ของฟังก์ชันนอล

พิจารณานิยามของตัวแผ่กระจายในสมการ (2.33) และตัวแปร t ซึ่งพิจารณาตัวแปรดังกล่าวเป็นตัวแปรจินตภาพ โดยกำหนดให้ $t = -i\beta$ เมื่อ β เป็นจำนวนจริง การแปลงดังกล่าวถูกเรียกว่า Wick's rotation [39] ซึ่งเป็นวิธีการแปลงตัวแปรเพื่อใช้เชื่อมโยงระหว่างกลศาสตร์เชิงสถิติและกลศาสตร์ควอนตัม ดังนั้น สามารถเขียนตัวแผ่กระจายในสมการ (2.33) ใหม่ได้ดังสมการ

$$\begin{aligned} K(-i\beta, x'; 0, x) &= \langle x' | e^{-iH(-i\beta)} | x \rangle \\ &= \langle x' | e^{-\beta H} \sum_j | x_j \rangle \langle x_j | x \rangle \\ &= \sum_j e^{-\beta E_j} \langle x_j | x' \rangle \langle x | x_j \rangle \end{aligned} \quad (2.47)$$

ถ้ากำหนดให้ $x' = x$ และรวมทุกค่าของ x ที่เป็นไปได้ พบว่า

$$\begin{aligned} \int dx K(-i\beta, x'; 0, x) &= \sum_j e^{-\beta E_j} \int dx | x \rangle \langle x | x_j \rangle \\ &= \sum_j e^{-\beta E_j} \\ &\equiv Z(\beta) \end{aligned} \quad (2.48)$$

เมื่อ E_j เป็นพลังงานของอนุภาคที่อยู่ในสถานะ $|j\rangle$ เมื่อกำหนดให้จุดเริ่มต้นและจุดสุดท้ายเป็นจุดเดียวกัน แล้วรวมทุกค่าของ x ที่เป็นไปได้ ฟังก์ชันดังกล่าวจะกลายเป็นฟังก์ชันแบ่งส่วนของระบบที่ขึ้นกับตัวแผ่กระจายในเวลาจินตภาพ

$$\begin{aligned} Z(\beta) &= \text{tr} \{ e^{-\beta H} \} \\ &= \int dx \langle x | e^{-\beta H} | x \rangle \end{aligned} \quad (2.49)$$

เมื่อ β หมายถึงส่วนกลับอุณหภูมิตามนิยาม ($1/k_B T$) ของระบบ ฟังก์ชันแบ่งส่วนดังกล่าวสามารถคำนวณได้จากเดนซิตีเมทริกซ์ (density matrix) [56]

นอกจากนั้น สามารถเขียนแอกชันในสมการ (2.46) ที่อยู่ในพจน์ของเวลาจินตภาพใหม่ได้ เป็น

$$i \int_0^t dt' \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{dx(t')}{dt'} \right)^2 - V[x(t')] \right\} = - \int_0^\beta d\tau \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{dx(\tau)}{d\tau} \right)^2 + V[x(\tau)] \right\} \quad (2.50)$$

เมื่อกำหนดให้ตัวแปรในการแปลง $t' = -i\tau$ ดังนั้น ฟังก์ชันแบ่งส่วนในสมการ (2.49) สามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$Z(\beta) = \int_{x(0)=x(\beta)} Dx e^{-S^E[x(\tau)]} \quad (2.51)$$

เมื่อ $S^E[x(\tau)] = \int_0^\beta d\tau \{ mx^2(\tau)/2 + V[x(\tau)] \}$ ถูกเรียกว่า ยูคลิดเดียนแอกชัน (Euclidian action)

2.6 การควอนไทส์ลำดับที่สองและพีชคณิตของแกรสมันน์

พิจารณาระบบควอนตัมที่ประกอบไปด้วยอนุภาคที่เหมือนกันหลายอนุภาค ด้วยวิธีที่คล้ายกันกับกลศาสตร์ควอนตัมของอนุภาคเดี่ยว ซึ่งโดยทั่วไปสามารถเขียนตัวดำเนินการให้อยู่ในพจน์ของตัวดำเนินการตำแหน่งและตัวดำเนินการโมเมนตัม กล่าวคือ ตัวดำเนินการอื่นสามารถสร้างขึ้นจากตัวดำเนินการของตำแหน่งและตัวดำเนินการโมเมนตัมได้ทั้งหมด นอกจากนี้ สถานะทางควอนตัมสามารถแสดงให้อยู่ในพจน์ของฟังก์ชันเจาะจง (Eigen function) ในทำนองเดียวกัน เพื่ออธิบายระบบควอนตัมของอนุภาคหลายตัว จำเป็นต้องกำหนดตัวดำเนินการสร้าง (creation operator) หรือตัวดำเนินการลบล้าง (annihilation operator) สำหรับอนุภาคในสถานะควอนตัม เนื่องจากตัวดำเนินการอื่นสามารถเขียนให้อยู่ในพจน์ของตัวดำเนินการสร้างและลบล้างได้ นอกจากนี้ การแสดงสถานะทางควอนตัมของอนุภาคหลายตัวถูกเขียนอยู่ในพจน์ของฟังก์ชันเจาะจงของตัวดำเนินการข้างต้น ซึ่งวิธีการดังกล่าวถูกเรียกว่า การควอนไทส์ลำดับที่สอง [39] [57] นอกจากนี้ จากหลักการกีดกันของเพาลี (Pauli exclusion principle) ทำให้การอธิบายพฤติกรรมของอิเล็กตรอนในระบบต้องอาศัยคณิตศาสตร์เฉพาะที่เรียกว่า พีชคณิตของแกรสมันน์ ซึ่งรายละเอียดจะได้อธิบายโดยลำดับดังต่อไปนี้

2.6.1 การควอนไทส์ลำดับที่สอง

เพื่ออธิบายสมการการควอนไทส์ลำดับที่สอง พิจารณาฟังก์ชันคลื่นของอนุภาคที่เหมือนกัน N ตัวในปริภูมิตำแหน่ง

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N | \psi \rangle \quad (2.52)$$

สมการ (2.52) เขียนได้จากเวกเตอร์สถานะ $|\psi\rangle$ ซึ่งเป็นองค์ประกอบของปริภูมิฮิลเบิร์ตของอนุภาคหลายตัว H_N ที่ได้จากผลคูณแบบเทนเซอร์ (tensor product) N ครั้ง ของอนุภาคเดี่ยว N อนุภาค ที่อยู่ในปริภูมิฮิลเบิร์ต (Hilbert space) H กล่าวคือ

$$H_N = H_1 \otimes H_2 \otimes \dots \otimes H_N | \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N \rangle \quad (2.53)$$

สมการ (2.53) สร้างจากสถานะเจาะจง (Eigen state) ของตำแหน่งของอนุภาค N ตัวที่ถูกนอร์มอลไลซ์ (normalization) ในวิทยานิพนธ์เล่มนี้ไม่พิจารณาผลของสปิน (spin) ของอนุภาค

จากข้อเท็จจริงที่ว่า อนุภาคที่เหมือนกันมีความน่าจะเป็นของการสลับที่แต่ละครั้งของอนุภาคเท่ากัน สำหรับการสลับที่ของอนุภาคสองตัว สามารถเขียนได้ดังสมการ

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N) = \pm \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_N) \quad (2.54)$$

เมื่อเครื่องหมายบวกและลบแสดงถึงความสมมาตรและไม่สมมาตรของการสลับที่ของฟังก์ชันคลื่น สำหรับระบบอนุภาคที่ฟังก์ชันคลื่นมีสมบัติสมมาตร อนุภาคดังกล่าวถูกเรียกว่า โบซอน (boson) ตรงกันข้าม ถ้าอนุภาคที่ฟังก์ชันคลื่นไม่มีคุณสมบัติความสมมาตรถูกเรียกว่า เฟอร์มิออน (fermion) นอกจากนี้ ปริภูมิฮิลเบิร์ตสำหรับอนุภาค N ตัว สำหรับโบซอนและเฟอร์มิออนสามารถเขียนแทนด้วย B_N และ F_N ตามลำดับ ซึ่งปริภูมิทั้งสองเป็นสมาชิกของปริภูมิฮิลเบิร์ตสำหรับอนุภาค N ตัว

จากที่ได้กล่าวมาข้างต้น ได้พิจารณาระบบที่มีจำนวนอนุภาคจำกัดค่าหนึ่ง อย่างไรก็ตาม ในระบบควอนตัมของอนุภาคหลายตัวนั้น จำนวนของอนุภาคมีความไม่แน่นอน เนื่องจากการกวัดแกว่งเชิงควอนตัม (quantum fluctuation) ที่ทำให้อิเล็กตรอนมีโอกาสที่จะเคลื่อนที่เข้าหรือออกจากระบบได้ โดยระบบดังกล่าว ถูกอธิบายด้วยแกรนด์คาโนนิคอลลองซอมเบล (grand canonical ensemble) ซึ่งฟังก์ชันแบ่งส่วนของระบบที่สามารถแลกเปลี่ยนทั้งพลังงานและอนุภาคของระบบสามารถเขียนได้ดังสมการ

$$Z = \text{tr} \left\{ e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \right\} \quad (2.55)$$

เมื่อ $\beta = 1/k_B T$ เป็นส่วนกลับของอุณหภูมิ μ เป็นพลังงานศักย์เคมี \hat{H} และ \hat{N} เป็นฮามิลโทเนียนและตัวดำเนินการจำนวน (number operator) ของระบบ ตามลำดับ

เพื่อคำนวณฟังก์ชันแบ่งส่วนของระบบต้องสร้างเซตที่สมบูรณ์ของระบบอนุภาคหลายตัว ซึ่งมีความจำเป็นที่จะต้องกำหนดจำนวนอนุภาคของระบบที่สร้างขึ้นจากการรวม (linear combination) ของสถานะมูลฐาน (basis state) ของอนุภาคแต่ละตัว ดังแสดงตามสมการ

$$|\psi\rangle = \sum_{n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_i}, \dots} c_{n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_i}, \dots} |n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_i}, \dots\rangle \quad (2.56)$$

เมื่อ $c_{n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_i}, \dots}$ แสดงถึงกลุ่มของสัมประสิทธิ์ที่ขยายออก และสถานะมูลฐาน $n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_i}, \dots$ สามารถเขียนให้อยู่ในพจน์ของจำนวน n_{α_i} สำหรับสถานะของอนุภาคเดี่ยวแต่ละตัว $|\alpha_i\rangle$ ซึ่งในกรณีของอนุภาคโบซอน n_{α_i} ต้องเป็นจำนวนบวกเท่านั้น แต่ในกรณีของเฟอร์มิออน เมื่อพิจารณาหลักการกีดกันของเพาลี (Pauli's exclusion principle) ร่วมด้วย ทำให้ n_{α_i} ต้องมีค่าเป็นศูนย์หรือหนึ่งเท่านั้นหรือกล่าวอีกนัยหนึ่งว่า สำหรับสถานะหนึ่งสถานะ จะมีอนุภาคเฟอร์มิออนสามารถครองครองได้หนึ่งตัวเท่านั้น โดยปริภูมิของเวกเตอร์ที่ถูกขยายออกซึ่งเป็นผลจากการรวมกันของกลุ่มของเวกเตอร์มูลฐานที่เกิดขึ้นทั้งหมด ถูกเรียกว่า ปริภูมิของฟอกซ์

ปริภูมิของฟอกซ์ของเฟอร์มิออน

ในหัวข้อนี้จะกล่าวถึงคุณสมบัติของปริภูมิของฟอกซ์ที่สำคัญ คือ จำนวนอนุภาคทั้งหมดที่อยู่ในปริภูมิของฟอกซ์สามารถเปลี่ยนแปลงได้ จากคุณสมบัติดังกล่าว ทำให้จำนวนอนุภาคกลายเป็นพารามิเตอร์ที่ไม่ถูกจำกัดค่า เนื่องจากปริภูมิของฟอกซ์สามารถสร้างจากผลรวมกันของอนุภาคเดี่ยวแต่ละตัว จำนวน N ตัว กล่าวคือ

$$F = \bigoplus_{N=0}^{\infty} F_N \quad (2.57)$$

เนื่องจากการควอนไทซ์ลำดับที่สองใช้ในการอธิบายสถานะของระบบด้วยตัวแปรที่ขึ้นกับจำนวนของอนุภาค โดยเทรซในสมการ (2.55) สามารถเขียนใหม่ได้จากเซตที่สมบูรณ์ของสถานะที่อยู่ในปริภูมิของฟอกซ์ที่ถูกขยายออกไปทั้งหมด กล่าวคือ

$$Z = \sum_{|n\rangle \in F} \langle n | e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} | n \rangle \quad (2.58)$$

เมื่อปริภูมิของฟอกซ์ F เป็นปริภูมิที่ประกอบด้วยสถานะของอนุภาคหลายตัวที่เป็นไปได้ทั้งหมดและ $|n\rangle$ เป็นสัญลักษณ์อย่างง่ายที่ใช้แทนสถานะมูลฐาน $|n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_i}, \dots\rangle$

ตัวดำเนินการสร้างและตัวดำเนินการลบ

ในหัวข้อนี้ได้กล่าวถึงตัวดำเนินการที่สร้างขึ้นเพื่อใช้กระทำบนปริภูมิของฟอกซ์ ซึ่งประกอบด้วยตัวดำเนินการสร้างและตัวดำเนินการลบ a_α^\dagger และ a_α ตามลำดับ ซึ่งตัวดำเนินการสร้าง a_α^\dagger นิยามได้ตามสมการ

$$a_{n_{\alpha_i}}^\dagger |n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_i}, \dots\rangle = \sqrt{n_{\alpha_i} + 1} |n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, (n_{\alpha_i} + 1), \dots\rangle \quad (2.59)$$

ตัวดำเนินการสร้างจะทำให้เกิดสถานะใหม่ที่มีอนุภาคเพิ่มขึ้นมาในสถานะที่เจาะจงสถานะหนึ่งสำหรับอนุภาคโบซอนซึ่งเป็นอนุภาคที่สามารถมีอนุภาคหลายตัวในสถานะเดียวกันได้ แต่สำหรับอนุภาคเฟอร์มิออนแต่ละสถานะ α_i สามารถมีอนุภาคเข้าไปครอบครองได้หนึ่งตัวเท่านั้น จึงจำเป็นต้องมีการกำหนดสถานะว่าง (vacuum state) $|0\rangle$ ของระบบ ซึ่งหมายถึงสถานะที่ไม่มีอนุภาคครอบครองอยู่ ดังนั้น ในกลศาสตร์ควอนตัมสามารถสร้างอนุภาคด้วยตัวดำเนินการสร้างเพื่อสร้างอนุภาคโบซอนและเฟอร์มิออนขึ้นมาจากสถานะว่างได้

ในทางตรงกันข้าม ตัวดำเนินการสร้างต้องมีตัวดำเนินการที่เป็นสังยุค คือ a_α ซึ่งถูกเรียกว่า ตัวดำเนินการลบ นิยามตามสมการ

$$a_{n_{\alpha_i}} |n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, n_{\alpha_i}, \dots\rangle = \sqrt{n_{\alpha_i}} |n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \dots, (n_{\alpha_i} - 1), \dots\rangle \quad (2.60)$$

ตัวดำเนินการลบสามารถกระทำบนสถานะใดๆ ที่อยู่ในปริภูมิของฟอกซ์แล้วสร้างสถานะขึ้นใหม่ โดยทำการลบอนุภาคหนึ่งตัวในสถานะที่เจาะจงหนึ่งๆ ออกไป นอกจากนี้ ตัวดำเนินการสร้างและตัวดำเนินการลบยังมีคุณสมบัติการสลับที่ ตามสมการ

$$[a_\alpha, a_\beta^\dagger]_{\mp} = a_\alpha a_\beta^\dagger \mp a_\beta^\dagger a_\alpha = \delta_{\alpha\beta} \quad (2.61)$$

$$[a_\alpha, a_\beta]_{\mp} = [a_\alpha^\dagger, a_\beta^\dagger]_{\mp} = 0 \quad (2.62)$$

เมื่อเครื่องหมายบวกและลบแทนด้วยอนุภาคโบซอนและเฟอร์มิออน ตามลำดับ อย่างไรก็ตาม ในวิทยานิพนธ์นี้สนใจเฉพาะระบบของเฟอร์มิออนเท่านั้น ดังนั้น เครื่องหมายบวกในที่นี้จะหมายถึงคุณสมบัติแอนติคอมมิว (anti-commutation) ของเฟอร์มิออน จากคุณสมบัติดังกล่าวของเฟอร์มิออนที่จะเกิดเครื่องหมายติดลบเมื่อเกิดการสลับที่แต่ละครั้ง จึงมีความจำเป็นต้องใช้พีชคณิตของแกรสมันน์เพื่อใช้ในการแก้ปัญหาของเครื่องหมายดังกล่าว ซึ่งจะถูกอธิบายในหัวข้อต่อไป

2.6.2 พีชคณิตของแกรสมันน์

ในหัวข้อนี้ได้กล่าวถึงปัญหาสำหรับระบบของอนุภาคเฟอร์มิออนที่เกิดเครื่องหมายติดลบเมื่อมีการเปลี่ยนตำแหน่งของอนุภาค ทำให้เกิดความยุ่งยากในการคำนวณเป็นอย่างมาก ดังนั้น ในหัวข้อนี้จะอธิบายพื้นฐานทางคณิตศาสตร์ที่จำเป็นเกี่ยวกับพีชคณิตของแกรสมันน์ ซึ่งไม่ได้กล่าวถึงแค่นิยามหรือสูตรที่สำคัญเท่านั้น แต่ยังได้แสดงตัวอย่างการคำนวณโดยใช้ตัวแปรของแกรสมันน์ที่สร้างขึ้นเพื่อเป็นตัวอย่างการคำนวณ พีชคณิตของแกรสมันน์สามารถศึกษาเพิ่มเติมได้ในอ้างอิง [58] นอกจากนี้ ในที่นี้ยังได้แนะนำเกี่ยวกับฟังก์ชันของตัวแปรที่มีคุณสมบัติและองค์ประกอบของแคลคูลัส โดยมีวัตถุประสงค์เพื่อกำหนดรูปแบบของการคำนวณปริพันธ์ของตัวแปรแกรสมันน์ เพื่อนำไปคำนวณปริพันธ์ตามวิถีของฟังก์ชันนอลต่อไป จากฮามิลโทเนียนในสมการ (2.58) สามารถเขียนให้อยู่ในพจน์ของตัวดำเนินการสร้างและตัวดำเนินการลบสำหรับอนุภาคเฟอร์มิออนได้ นอกจากนี้ ยังได้แสดงให้เห็นแล้วว่าอนุภาคเฟอร์มิออนมีคุณสมบัติแอนติคอมมิวตามสมการ (2.61) โดยในหัวข้อนี้ได้พิจารณาเฉพาะตัวดำเนินการสร้างและตัวดำเนินการลบสำหรับเฟอร์มิออนเท่านั้น

พิจารณากำลังสองของตัวดำเนินการของจำนวนของสถานะ i กล่าวคือ $n_i = a_i^\dagger a_i$ ได้ว่า

$$n_i^2 = a_i^\dagger a_i a_i^\dagger a_i = a_i^\dagger (1 - a_i^\dagger a_i) a_i = \hat{n}_i \quad (2.63)$$

หรืออาจเขียนได้เป็น

$$\hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) = 0 \quad (2.64)$$

จากสมการข้างต้นพบว่า ค่าเจาะจงของตัวดำเนินการของจำนวนสำหรับสถานะใดๆ ต้องมีค่าเป็นศูนย์หรือหนึ่งเท่านั้น กล่าวคือ สำหรับอนุภาคเฟอร์มิออน สถานะหนึ่งสถานะสามารถบรรจุเฟอร์มิออนได้สูงสุดหนึ่งตัว

2.6.2.1 แรงจูงใจและนิยามสำหรับพีชคณิตของแกรสมันน์

ก่อนอธิบายเกี่ยวกับคณิตศาสตร์และลักษณะของพีชคณิตของแกรสมันน์ ในหัวข้อนี้แสดงให้เห็นว่าทำไมตัวแปรของแกรสมันน์จึงมีความเหมาะสมที่จะนำมาอธิบายระบบของเฟอร์มิออน พิจารณาสถานะโคเฮเรนต์ (coherent states) ของระบบที่ถูกกระทำด้วยตัวดำเนินการลบข้างดังสมการ

$$a_\alpha |\zeta\rangle = \zeta_\alpha |\zeta\rangle \quad (2.65)$$

เมื่อ ζ_α เป็นค่าเฉพาะ (Eigenvalue) ของสถานะโคเฮเรนต์ จากคุณสมบัติแอนติคอมมิวเตชันในสมการ (2.62) สามารถเขียนสมการของค่าเฉพาะในสมการ (2.65) ได้ใหม่ดังสมการ

$$\zeta_\alpha \zeta_\beta |\zeta\rangle = a_\alpha a_\beta |\zeta\rangle = -a_\beta a_\alpha |\zeta\rangle = -\zeta_\beta \zeta_\alpha |\zeta\rangle \quad (2.66)$$

หรืออาจเขียนได้ว่า

$$\zeta_\alpha \zeta_\beta = -\zeta_\beta \zeta_\alpha \quad (2.67)$$

ดังนั้น จากสมการข้างต้นพบว่า ค่าเฉพาะของสถานะโคเฮเรนต์มีคุณสมบัติแอนติคอมมิวเตชัน ดังสมการ

$$[\zeta_\alpha, \zeta_\beta]_+ = 0 \quad (2.68)$$

เพื่อกำหนดสถานะโคเฮเรนต์สำหรับเฟอร์มิออน ต้องสร้างพีชคณิตเพื่อแก้ปัญหาเครื่องหมายของค่าเฉพาะเมื่อเกิดการสลับที่ของเฟอร์มิออน โดยพีชคณิตที่สร้างขึ้นจากคุณสมบัติแอนติคอมมิวเตชันของกลุ่มตัวแปรดังกล่าว เรียกว่า พีชคณิตของแกรสมันน์

นิยามสำหรับพีชคณิตของแกรสมันน์

พิจารณากลุ่มตัวแปรแกรสมันน์ $\{\zeta_\alpha\}$ เมื่อ $\alpha = 1, \dots, n$ ที่มีคุณสมบัติแอนติคอมมิวเตชันตามสมการ (2.68) และกำหนดให้จำนวนเชิงซ้อนที่คูณกับตัวแปรแกรสมันน์มีคุณสมบัติการสลับที่ กล่าวคือ

$$c\zeta_\alpha = \zeta_\alpha c \quad (2.69)$$

ซึ่งตัวแปรแกรสมันน์สามารถสร้างขึ้นจากตัวแปรเหล่านี้ได้ทั้งหมด โดยตัวแปรดังกล่าวถูกเรียกว่า ตัวสร้าง (generator) จากคุณสมบัติแอนติคอมมิวเตชัน พบว่า

$$\zeta_\alpha^2 = 0 \quad (2.70)$$

ดังนั้น ตัวแปรของพีชคณิตของแกรสมันน์สามารถสร้างได้จากการรวมกันทั้งหมดของ $\{1, \zeta_{\alpha_1}, \zeta_{\alpha_2}, \dots, \zeta_{\alpha_1} \zeta_{\alpha_2}, \dots, \zeta_{\alpha_n}\}$ เมื่อกำหนดให้ดัชนีดังกล่าว $\alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_n$ ซึ่งมีดีหรือจำนวนตัวแปรของแกรสมันน์ที่ถูกสร้างขึ้นมีค่าเป็น 2^n เท่าของตัวสร้าง ตัวอย่างเช่น ในกรณีที่ใช้ตัวสร้างสองตัว จะทำให้ชุดของตัวแปรแกรสมันน์สี่ตัว กล่าวคือ $\{\zeta_1, \zeta_2\}$ สามารถสร้างตัวแปรแกรสมันน์ทั้งหมดได้เป็น $\{1, \zeta_1, \zeta_2, \zeta_1 \zeta_2\}$ เนื่องจาก $\zeta_1 \zeta_2$ มีค่าเท่ากับ $\zeta_2 \zeta_1$ การกระทำของสังยุคสำหรับพีชคณิตแกรสมันน์ถูกกำหนดโดย $(\zeta)^* \equiv \zeta^*$ จากเงื่อนไขดังกล่าวสามารถเขียนสังยุคของตัวสร้างหลายตัวได้ดังสมการ

$$(\zeta_\alpha \zeta_\beta \dots \zeta_n)^* \equiv \zeta_n^* \dots \zeta_\beta^* \zeta_\alpha^* \quad (2.71)$$

และสังยุคของฟังก์ชันใดๆ ของตัวแปรแกรสมันน์สามารถเขียนได้ตามสมการ

$$(\lambda \zeta_1 + \mu \zeta_2)^* = \lambda^* \zeta_1^* + \mu^* \zeta_2^* \quad (2.72)$$

เมื่อ λ และ μ เป็นจำนวนเชิงซ้อนและ ζ_1 และ ζ_2 เป็นตัวแปรแกรสมันน์

2.6.2.2 แคลคูลัสสำหรับตัวแปรของแกรสมันน์

ในหัวข้อนี้ได้แสดงกฎของแคลคูลัสสำหรับตัวแปรแกรสมันน์ที่ใช้สร้างสมการการคำนวณปริพันธ์ตามวิถีในระบบควอนตัมสำหรับเฟอร์มิออน เนื่องจากฟังก์ชันใดๆ สามารถกระจายโดยใช้ออนุกรมเทย์เลอร์ได้ ดังนั้น ในหัวข้อนี้ได้นำข้อเท็จจริงดังกล่าวมาประยุกต์ใช้กับการสร้างฟังก์ชันของแกรสมันน์

ฟังก์ชันของแกรสมันน์

จากเงื่อนไขกำลังสองของตัวแปรแกรสมันน์ $\zeta_\alpha^2 = 0$ สำหรับ ζ ใดๆ ที่เป็นสมาชิกของฟังก์ชันแกรสมันน์ เมื่อกระจายอนุกรมเทย์เลอร์ของฟังก์ชันแกรสมันน์ ในที่สุดจะได้ฟังก์ชันที่ประกอบด้วยสองพจน์เท่านั้น กล่าวคือ

$$\mathcal{G}(\zeta) = c_0 + c_1 \zeta \quad (2.73)$$

เมื่อ ζ เป็นสมาชิกของฟังก์ชันแกรมมันน์ $\mathcal{G}(\zeta)$ สำหรับฟังก์ชันของแกรมมันน์สำหรับของสองตัวแปร $\mathcal{G}(\zeta_1, \zeta_2)$ สามารถเขียนได้ดังสมการ

$$\mathcal{G}(\zeta_1, \zeta_2) = c_0 + c_1 \zeta_1 + \bar{c}_1 \zeta_2 + c_{12} \zeta_1 \zeta_2 \quad (2.74)$$

เมื่อ c_0 , c_1 , \bar{c}_1 และ c_{12} เป็นจำนวนเชิงซ้อนและ \bar{c}_1 เป็นสังยุคของ c_1

อนุพันธ์ของฟังก์ชันแกรมมันน์

อนุพันธ์ของตัวแปรแกรมมันน์สามารถกำหนดได้ดังสมการ

$$\frac{\partial \zeta_j}{\partial \zeta_i} = \delta_{ij} \quad (2.75)$$

อนุพันธ์ดังกล่าว เรียกว่า การกระทำของอนุพันธ์ทางซ้าย [58] ในการคำนวณอนุพันธ์ของตัวแปรแกรมมันน์ใดๆ เทียบกับตัวแปร ζ_i ต้องย้ายตัวแปรที่เหมือนกับ ζ_i โดยใช้คุณสมบัติแอนติคอมมิวของตัวแปรแกรมมันน์ จนตัวแปรดังกล่าวติดกับ ∂ ตัวอย่างเช่น

$$\frac{\partial(\zeta_j \zeta_i)}{\partial \zeta_i} = \frac{\partial(-\zeta_i \zeta_j)}{\partial \zeta_i} = -\zeta_j \quad (2.76)$$

สำหรับอนุพันธ์ของฟังก์ชันทั่วไปของตัวแปรหนึ่งและสองตัว สามารถแสดงดังสมการ

$$\frac{\partial}{\partial \zeta} \mathcal{G}(\zeta) = \frac{\partial}{\partial \zeta} (c_0 + c_1 \zeta) = \zeta \quad (2.77)$$

$$\frac{\partial}{\partial \zeta_1} \mathcal{G}(\zeta_1, \zeta_2) = \frac{\partial}{\partial \zeta_1} (c_0 + c_1 \zeta_1 + \bar{c}_1 \zeta_2 + c_{12} \zeta_1 \zeta_2) = c_1 + c_{12} \zeta_2 \quad (2.78)$$

$$\frac{\partial}{\partial \zeta_2} \mathcal{G}(\zeta_1, \zeta_2) = \frac{\partial}{\partial \zeta_2} (c_0 + c_1 \zeta_1 + \bar{c}_1 \zeta_2 + c_{12} \zeta_1 \zeta_2) = \bar{c}_1 + c_{12} \zeta_1 \quad (2.79)$$

$$\frac{\partial}{\partial \zeta_2} \frac{\partial}{\partial \zeta_1} \mathcal{G}(\zeta_1, \zeta_2) = c_{12} = -\frac{\partial}{\partial \zeta_1} \frac{\partial}{\partial \zeta_2} \mathcal{G}(\zeta_1, \zeta_2) \quad (2.80)$$

จากสมการ (2.80) แสดงให้เห็นว่าตัวดำเนินการ $\partial/\partial \zeta_1$ และ $\partial/\partial \zeta_2$ มีคุณสมบัติแอนติคอมมิวกล่าวคือ

$$\left[\frac{\partial}{\partial \zeta_1}, \frac{\partial}{\partial \zeta_2} \right]_+ = 0 \quad (2.81)$$

ปริพันธ์ของฟังก์ชันแกรสมันน์

การกำหนดปริพันธ์ของตัวแปรแกรสมันน์ไม่สามารถทำในลักษณะที่คล้ายกับปริพันธ์แบบปริมันน์ที่ใช้กับจำนวนจริงได้ เนื่องจากไม่สามารถเปรียบเทียบขนาดของตัวแปรแกรสมันน์ได้ สำหรับตัวแปรแกรสมันน์หนึ่งตัวจะมีรูปแบบของการคำนวณปริพันธ์ที่น่าสนใจสองแบบเท่านั้น คือ $\int d\zeta$ และ $\int d\zeta\zeta$ เนื่องจากพจน์ของตัวแปรที่มีกำลังมากกว่าสองจะเป็นศูนย์เสมอ ซึ่งการแสดงการคำนวณปริพันธ์ดังกล่าวถูกแสดงด้วยเบเรซิน (Berezin) [58]

เพื่อกำหนดรูปแบบของการคำนวณปริพันธ์ของตัวแปรแกรสมันน์ทั้งหมด ต้องกำหนดให้ปริพันธ์มีค่าคงที่ภายใต้การเลื่อนตำแหน่ง กล่าวคือ

$$\int d\zeta = \int d\zeta' \quad (2.82)$$

เมื่อกำหนดให้ $\zeta' = \zeta + \eta$ และ η เป็นตัวแปรของแกรสมันน์ใดๆ ที่มีคุณสมบัติสอดคล้องกับสมการ

$$\int d\zeta'\zeta' = \int d\zeta(\zeta + \eta) = \int d\zeta\zeta - \eta \int d\zeta \quad (2.83)$$

เมื่อ $\int d\zeta\eta = -\eta \int d\zeta$ เพื่อให้สมมติฐานในสมการ (2.82) เป็นจริง ต้องกำหนดให้

$$\int d\zeta \equiv 0 \quad (2.84)$$

ดังนั้น ปริพันธ์ $\int d\zeta\zeta$ ต้องมีค่าไม่เท่ากับศูนย์ เนื่องจากจะทำให้การคำนวณดังกล่าวไม่มีความหมาย โดยในที่นี้ปริพันธ์ดังกล่าวถูกกำหนดให้มีค่าเท่ากับหนึ่ง กล่าวคือ

$$\int d\zeta\zeta \equiv 1 \quad (2.85)$$

นอกจากนั้น สามารถนิยามการคำนวณปริพันธ์สำหรับสังยุคของตัวแปรแกรสมันน์ได้คล้ายๆ กัน กล่าวคือ

$$\int d\zeta^* \equiv 0 \quad (2.86)$$

และ

$$\int d\zeta^* \zeta^* \equiv 1 \quad (2.87)$$

เพื่อคำนวณปริพันธ์ของฟังก์ชันแกมมันน์ที่มีหลายตัวแปร ต้องใช้คุณสมบัติแอนติคอมมิว จนกระทั่ง ตัวแปร ζ_α ติดกับ $d\zeta_\alpha$ ตัวอย่างเช่น

$$\int d\zeta \mathcal{G}(\zeta) = \int d\zeta (c_0 + c_1 \zeta) = c_1 \quad (2.88)$$

$$\int d\zeta_1 \mathcal{G}(\zeta_1, \zeta_2) = \int d\zeta_1 (c_0 + c_1 \zeta_1 + \bar{c}_1 \zeta_2 + c_{12} \zeta_1 \zeta_2) = c_1 + c_{12} \zeta_2 \quad (2.89)$$

$$\int d\zeta_2 \mathcal{G}(\zeta_1, \zeta_2) = \int d\zeta_2 (c_0 + c_1 \zeta_1 + \bar{c}_1 \zeta_2 + c_{12} \zeta_1 \zeta_2) = \bar{c}_1 - c_{12} \zeta_1 \quad (2.90)$$

$$\int d\zeta_1 \int d\zeta_2 \mathcal{G}(\zeta_1, \zeta_2) = c_{12} = - \int d\zeta_1 \int d\zeta_2 \mathcal{G}(\zeta_1, \zeta_2) \quad (2.91)$$

จากนิยามการคำนวณอนุพันธ์และปริพันธ์สำหรับตัวแปรแกมมันน์ข้างต้นสามารถสรุปได้ว่า

$$\frac{\partial 1}{\partial \zeta} = 0 = \int d\zeta 1 \quad (2.92)$$

และ

$$\frac{\partial \zeta}{\partial \zeta} = 1 = \int d\zeta \zeta \quad (2.93)$$

นอกจากนั้น เมื่อเปรียบเทียบผลที่ได้จากสมการ (2.77)–(2.80) กับสมการ (2.88)–(2.91) พบว่า การดำเนินการของอนุพันธ์สมมูลกับการดำเนินการของปริพันธ์ กล่าวคือ

$$\frac{\partial}{\partial \zeta} \equiv \int d\zeta \quad (2.94)$$

ซึ่งการสมมูลของตัวดำเนินการของอนุพันธ์และตัวดำเนินการปริพันธ์จะถูกนำไปประยุกต์ใช้ในการแปลงตัวแปรสำหรับการคำนวณปริพันธ์ต่อไป

2.6.2.3 สมการการคำนวณปริพันธ์ที่สำคัญ

ในหัวข้อย่อยนี้ จะกำหนดเดลต้าฟังก์ชัน (delta function) สำหรับฟังก์ชันของแกรสมันน์ จากนั้นได้แสดงวิธีการเปลี่ยนตัวแปร โดยใช้กฎของการแปลงของฮับบาร์ดและสตราโทโนวิช (Hubbard–Stratonovich transformations) สำหรับการคำนวณปริพันธ์ของแกรสมันน์เพื่อคำนวณปริพันธ์แบบเกาส์

เดลต้าฟังก์ชันของแกรสมันน์

เดลต้าฟังก์ชันของแกรสมันน์นิยามได้ตามสมการ

$$\delta(\zeta, \zeta') \equiv \int d\eta e^{-\eta(\zeta - \zeta')} = \int d\eta [1 - \eta(\zeta - \zeta')] = -(\zeta - \zeta') \quad (2.95)$$

จากนิยามดังกล่าวพบว่า

$$\int d\zeta' \delta(\zeta, \zeta') \mathcal{G}(\zeta') = -\int d\zeta' (\zeta - \zeta') (c_0 + c_1 \zeta') = \mathcal{G}(\zeta) \quad (2.96)$$

พบว่าเมื่อคำนวณปริพันธ์เดลต้าฟังก์ชันกับฟังก์ชันของแกรสมันน์ใดๆ จะได้ฟังก์ชันแกรสมันน์ในสมการ (2.73)

การแปลงตัวแปรแกรสมันน์สำหรับการคำนวณปริพันธ์

จากความสมมูลของตัวดำเนินการอนุพันธ์และปริพันธ์สำหรับตัวแปรแกรสมันน์ พิจารณาปริพันธ์สำหรับทุกค่าของฟังก์ชันแกรสมันน์ที่เป็นไปได้ ดังสมการ

$$\int d\zeta \mathcal{G}(\zeta) = \frac{\partial \mathcal{G}(\zeta)}{\partial \zeta} \quad (2.97)$$

จากสมการ (2.97) เมื่อแทนตัวแปรแกรสมันน์ของการคำนวณปริพันธ์ด้วย $\zeta' = c\zeta$ เมื่อ c ไม่เท่ากับศูนย์ในสมการ (2.97) สามารถเขียนสมการใหม่ได้เป็น

$$\int d\zeta \mathcal{G}(\zeta) = \frac{\partial \mathcal{G}(\zeta'/c)}{\partial \zeta'} = c \int d\zeta' \mathcal{G}(\zeta'/c) \quad (2.98)$$

เมื่อแฟกเตอร์ (factor) c เป็นค่าคงที่ที่เกิดจากการแปลงตัวแปรของการคำนวณปริพันธ์

นอกจากนั้น สมการ (2.98) สามารถเขียนให้อยู่ในรูปทั่วไปเพื่อใช้ในการคำนวณปริพันธ์สำหรับตัวแปรแกรมมันน์ใดๆ พิจารณาการแปลงแบบเชิงเส้นที่เขียนอยู่ในรูปของเมทริกซ์ $M_{\alpha\beta}$ ซึ่งมีมิติ $N \times N$ กล่าวคือ

$$\zeta'_\alpha = \sum_{\beta} M_{\alpha\beta} \zeta_\beta \quad (2.99)$$

เมื่อ $\det(M_{ij}) \neq 0$ แล้วสามารถเขียนกฎการแปลงของเมทริกซ์ได้ตามสมการ [59]

$$\int \prod_{\alpha=1}^n d\zeta_\alpha \mathcal{G}(\zeta_\alpha) = \det(M) \int \prod_{\alpha=1}^n d\zeta'_\alpha \mathcal{G}(M^{-1}\zeta'_\alpha) \quad (2.100)$$

เมื่อ M^{-1} เป็นส่วนกลับของเมทริกซ์ M

การคำนวณปริพันธ์ของเกาส์เขียน

ในหัวข้อนี้ได้แสดงพื้นฐานการคำนวณปริพันธ์ของแกรมมันน์สำหรับตัวแปรแกรมมันน์ทั้งหมด พิจารณาเซตของตัวแปรแกรมมันน์ที่เป็นอิสระต่อกันสองกลุ่ม กล่าวคือ กลุ่มของตัวแปร $\{\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_N\}$ และ $\{\zeta_1^*, \zeta_2^*, \dots, \zeta_N^*\}$ สามารถเขียนปริพันธ์ของตัวแปรดังกล่าวได้ดังสมการ

$$\prod_{\alpha, \beta=1}^N \int d\zeta_\alpha^* d\zeta_\beta e^{-\zeta_\alpha^* M_{\alpha\beta} \zeta_\beta} \quad (2.101)$$

เมื่อ $M_{\alpha\beta}$ เป็นเมทริกซ์เชิงซ้อนมิติ $N \times N$ และกำหนดให้ $\sum_{\alpha, \beta} \zeta_\alpha^* M_{\alpha\beta} \zeta_\beta \equiv \zeta_\alpha^* M_{\alpha\beta} \zeta_\beta$ ในสมการ (2.101) เพื่อความสะดวกในการเขียนในหัวข้อย่อๆนี้ และกำหนดให้อินเวอร์สเมทริกซ์ M^{-1} สามารถหาค่าได้ เพื่อคำนวณปริพันธ์ดังกล่าว ต้องแปลงตัวแปรตามสมการ (2.99) กล่าวคือ $\zeta'_\alpha = \sum_{\beta} M_{\alpha\beta} \zeta_\beta$ จากนั้นใช้คุณสมบัติตามสมการ (2.100) พบว่า

$$\begin{aligned} \prod_{\alpha, \beta=1}^N \int d\zeta_\alpha^* d\zeta_\beta e^{-\zeta_\alpha^* M_{\alpha\beta} \zeta_\beta} &= \det(M) \prod_{\alpha=1}^N \int d\zeta_\alpha^* d\zeta'_\alpha e^{-\zeta_\alpha^* \zeta'_\alpha} \\ &= \det(M) \prod_{\alpha=1}^N \int d\zeta_\alpha^* d\zeta'_\alpha (1 - \zeta_\alpha^* \zeta'_\alpha) \\ &= \det(M) \end{aligned} \quad (2.102)$$

เนื่องจาก $\int d\zeta_\alpha^* d\zeta'_\alpha (1 - \zeta_\alpha^* \zeta'_\alpha) = 1$ สำหรับตัวแปรแกรสมันน์สองตัวใดๆ ที่เป็นอิสระต่อกัน
พิจารณาปริพันธ์สำหรับตัวแปรแกรสมันน์คู่ใดๆ ที่เป็นอิสระต่อกัน N คู่ ตามสมการ

$$I = \prod_{\alpha,\beta=1}^N \int d\zeta_\alpha^* d\zeta_\beta e^{-\zeta_\alpha^* M_{\alpha\beta} \zeta_\beta + \eta_\alpha^* \zeta_\alpha + \zeta_\alpha^* \eta_\alpha} \quad (2.103)$$

เมื่อ $\zeta_\alpha, \zeta_\alpha^*, \eta_\alpha, \eta_\alpha^*$ เป็นตัวแปรแกรสมันน์และกำหนดให้อินเวอร์สเมทริกซ์ H^{-1} สามารถหาค่าได้
เพื่อคำนวณปริพันธ์ตามสมการ (2.103) ต้องเปลี่ยนตัวแปรดังนี้

$$\psi_\alpha = H_{\alpha\beta} \zeta_\beta - \eta_\alpha \quad (2.104)$$

หรือ

$$\zeta_\alpha = H_{\alpha\beta}^{-1} (\psi_\beta + \eta_\beta) \quad (2.105)$$

และ

$$\psi_\alpha^* = \zeta_\alpha^* - \eta_\alpha^* H_{\alpha\beta}^{-1} \quad (2.106)$$

แล้ว พบว่า

$$\begin{aligned} I &= \prod_{\alpha,\beta=1}^N \int d\zeta_\alpha^* d\zeta_\beta e^{-\zeta_\alpha^* (H_{\alpha\beta} \zeta_\beta - \eta_\alpha) + \eta_\alpha^* \zeta_\alpha} \\ &= \det(H) \prod_{\alpha,\beta=1}^N \int d\zeta_\alpha^* d\psi_\beta e^{-\zeta_\alpha^* \psi_\beta + \eta_\alpha^* H_{\alpha\beta}^{-1} (\psi_\beta + \eta_\beta)} \\ &= \det(H) \prod_{\alpha,\beta=1}^N \int d\zeta_\alpha^* d\psi_\beta e^{-(\zeta_\alpha^* - \eta_\alpha^* H_{\alpha\beta}^{-1}) \psi_\beta + \eta_\alpha^* H_{\alpha\beta}^{-1} \eta_\beta} \\ &= \det(H) \prod_{\alpha,\beta=1}^N \int d\psi_\alpha^* d\psi_\beta e^{\psi_\alpha^* \psi_\alpha + \eta_\alpha^* H_{\alpha\beta}^{-1} \eta_\beta} \\ &= \det(H) e^{\eta_\alpha^* H_{\alpha\beta}^{-1} \eta_\beta} \end{aligned} \quad (2.107)$$

เนื่องจาก $\int d\psi_\alpha^* d\psi_\beta e^{\psi_\alpha^* \psi_\alpha} = 1$ สำหรับ α ทุกตัว และเมื่อนำสมการ (2.107) เปรียบกับปริพันธ์
ของเกาส์สำหรับตัวแปรเชิงซ้อน [56] ดังสมการ

$$\int \prod_{i=1}^N \frac{d\zeta_i^* d\zeta_i}{2\pi i} e^{-x_i^* H_{ij} x_j + J_i^* x_i + x_i^* J_i} = (\det(H))^{-1} e^{J_i^* H_{ij}^{-1} J_j} \quad (2.108)$$

เมื่อ $\{x_i\}$ เป็นตัวแปรเชิงซ้อน พบว่าปริพันธ์ของเกาส์สำหรับตัวแปรแกรสมันน์และตัวแปรเชิงซ้อนมี
ลักษณะที่คล้ายกันซึ่งแตกต่างกันเฉพาะกำลังของดีเทอร์มิแนนต์ (determinant) เท่านั้น

2.7 สถานะโคเฮเรนต์ของเฟอร์มิออน

การสร้างสถานะทางควอนตัมของระบบอนุภาคใดๆ ต้องสร้างสถานะดังกล่าวจากการรวม (superposition) ของสถานะของแต่ละอนุภาคเดี่ยวที่แตกต่างกัน ซึ่งการรวมกันของสถานะดังกล่าว ถูกเรียกว่า สถานะโคเฮเรนต์ [39]

2.7.1 นิยามของสถานะโคเฮเรนต์ของเฟอร์มิออน

พิจารณาพีชคณิตของแกรสมันน์ \mathcal{G} ที่เป็นเซตของตัวแปรแกรสมันน์ $\{\zeta_\alpha, \zeta_\alpha^*\}$ ซึ่งตัวสร้าง ζ_α และ ζ_α^* สอดคล้องกับตัวดำเนินการลบ a_α และตัวดำเนินการสร้าง a_α^\dagger ตามลำดับ ในที่นี้ สถานะของอนุภาคหนึ่งตัวถูกกำหนดด้วยตัวเลข α จากปริภูมิฮิลเบิร์ตของอนุภาคเดี่ยว โดยทั่วไป ปริภูมิของฟอกซ์สามารถสร้างได้โดยการรวมกันของสถานะของอนุภาคเดี่ยวที่มีสัมประสิทธิ์เป็นตัวแปรแกรสมันน์

เพื่อแสดงการรวมกันของตัวแปรแกรสมันน์และตัวดำเนินการ ต้องใช้คุณสมบัติที่จำเป็นสองข้อ คือ ตัวแปรแกรสมันน์ $\{\zeta_\alpha, \zeta_\alpha^*\}$ และตัวดำเนินการสร้างและตัวดำเนินการลบมีคุณสมบัติแอนติคอมมิว กล่าวคือ

$$[\tilde{\zeta}, \tilde{a}]_+ = 0 \quad (2.109)$$

เมื่อ $\tilde{\zeta}$ และ \tilde{a} เป็นตัวแปรแกรสมันน์ที่เกิดจากตัวสร้าง $\{\zeta_\alpha, \zeta_\alpha^*\}$ และตัวดำเนินการสร้างหรือตัวดำเนินการทำลาย ตามลำดับ และมีคุณสมบัติของแอดจอยท์ (adjoint) แสดงดังสมการ

$$(\tilde{\zeta} \tilde{a})^\dagger \equiv \tilde{a}^\dagger \tilde{\zeta}^\dagger \quad (2.110)$$

สถานะโคเฮเรนต์ของเฟอร์มิออนสามารถนิยามตามสมการ

$$\begin{aligned} |\zeta\rangle &\equiv e^{\sum_\alpha \zeta_\alpha a_\alpha^\dagger} |0\rangle \\ &= \prod_\alpha (1 - \zeta_\alpha a_\alpha^\dagger) |0\rangle \end{aligned} \quad (2.111)$$

เมื่อใช้คุณสมบัติ $e^{-\zeta_\alpha} = 1 - \zeta_\alpha$

2.7.2 คุณสมบัติพื้นฐานของสถานะโคเฮเรนต์ของเฟอร์มิออน

หัวข้อนี้ได้แสดงคุณสมบัติที่จำเป็นสำหรับสถานะโคเฮเรนต์ ซึ่งเริ่มด้วยการพิจารณาการกระทำของตัวดำเนินการลบข้างบนสถานะโคเฮเรนต์ จากคุณสมบัติตามสมการ (2.65) พิจารณาสถานะของอนุภาคเดี่ยว แสดงดังสมการ

$$a_\alpha (1 - \zeta_\alpha a_\alpha^\dagger) |0\rangle = \zeta_\alpha |0\rangle = \zeta_\alpha (1 - \zeta_\alpha a_\alpha^\dagger) |0\rangle \quad (2.112)$$

จากสมการ (2.110)–(2.111) และข้อเท็จจริงที่ว่า $(1 - \zeta_\alpha a_\alpha^\dagger)$ มีคุณสมบัติการสลับที่กับ $(1 - \zeta_\beta a_\beta^\dagger)$ ดังนั้น การกระทำของตัวดำเนินการลบข้างบนสถานะโคเฮเรนต์สามารถเขียนได้ ดังสมการ

$$\begin{aligned} a_\alpha |\zeta\rangle &= \prod_{\beta \neq \alpha} (1 - \zeta_\beta a_\beta^\dagger) a_\alpha (1 - \zeta_\alpha a_\alpha^\dagger) |0\rangle \\ &= \prod_{\beta \neq \alpha} (1 - \zeta_\beta a_\beta^\dagger) \zeta_\alpha (1 - \zeta_\alpha a_\alpha^\dagger) |0\rangle \\ &= \zeta_\alpha \prod_{\beta} (1 - \zeta_\beta a_\beta^\dagger) |0\rangle \\ &= \zeta_\alpha |\zeta\rangle \end{aligned} \quad (2.113)$$

ในทำนองเดียวกัน การกระทำของตัวดำเนินการสร้างบนสถานะโคเฮเรนต์สามารถเขียนได้ ดังสมการ

$$\begin{aligned} a_\alpha^\dagger |\zeta\rangle &= a_\alpha^\dagger (1 - \zeta_\alpha a_\alpha^\dagger) \prod_{\beta \neq \alpha} (1 - \zeta_\beta a_\beta^\dagger) |0\rangle \\ &= a_\alpha^\dagger \prod_{\beta \neq \alpha} (1 - \zeta_\beta a_\beta^\dagger) |0\rangle \\ &= -\frac{\partial}{\partial \zeta_\alpha} (1 - \zeta_\alpha a_\alpha^\dagger) \prod_{\beta} (1 - \zeta_\beta a_\beta^\dagger) |0\rangle \\ &= -\frac{\partial}{\partial \zeta_\alpha} |\zeta\rangle \end{aligned} \quad (2.114)$$

ในทางตรงกันข้าม การกระทำของตัวดำเนินการสร้างและตัวดำเนินการลบข้างบนไอเกนเวกเตอร์ (Eigen vector) $\langle \zeta |$ สามารถทำได้โดยใช้คุณสมบัติ

$$\langle \zeta | = \langle 0 | e^{-a \zeta^*} = \langle 0 | e^{\zeta^* a} = \langle 0 | \prod_{\alpha} (1 + \zeta^* a_{\alpha}) \quad (2.115)$$

ดังนั้น

$$\langle \zeta | a_{\alpha}^{\dagger} = \langle \zeta | \zeta_{\alpha}^* \quad (2.116)$$

และ

$$\langle \zeta | a_{\alpha} = \frac{\partial}{\partial \zeta_{\alpha}^*} \langle \zeta | \quad (2.117)$$

การโอเวอร์แลปของสถานะโคเฮเรนต์ (overlapping of coherent state)

การโอเวอร์แลปของสถานะโคเฮเรนต์สองสถานะ กล่าวคือ $(1 + \zeta_{\alpha}^* a_{\alpha})$ และ $(1 - \zeta'_{\beta} a_{\beta}^{\dagger})$ สามารถคำนวณได้โดยตรงจากสมการ

$$\begin{aligned} \langle \zeta | \zeta' \rangle &= \langle 0 | \prod_{\alpha} (1 + \zeta_{\alpha}^* a_{\alpha}) (1 - \zeta'_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger}) | 0 \rangle \\ &= \prod_{\alpha} (1 + \zeta_{\alpha}^* \zeta'_{\alpha}) \\ &= e^{\sum_{\alpha} \zeta_{\alpha}^* \zeta'_{\alpha}} \end{aligned} \quad (2.118)$$

เมื่อ $\langle 0 | a_{\alpha}^{\dagger}$ สมมูลกับ $a_{\alpha} | 0 \rangle$ ซึ่งมีค่าเท่ากับศูนย์

คุณสมบัติปิดสำหรับสถานะโคเฮเรนต์ (closure relation for coherent state)

คุณสมบัติปิดเป็นคุณสมบัติที่มีความสำคัญสำหรับสถานะโคเฮเรนต์ ซึ่งนิยามได้ตามสมการ

$$\int \prod_{\alpha} d\zeta_{\alpha}^* d\zeta_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha} \zeta_{\alpha}^* \zeta_{\alpha}} |\zeta\rangle \langle \zeta| = 1 \quad (2.119)$$

เพื่อพิสูจน์ความสัมพันธ์ดังกล่าว พิจารณาสมการ

$$\langle \alpha_1 \dots \alpha_n | \int \prod_{\alpha} d\zeta_{\alpha}^* d\zeta_{\alpha} e^{-\sum_{\alpha} \zeta_{\alpha}^* \zeta_{\alpha}} |\zeta\rangle \langle \zeta| \beta_1 \dots \beta_m \rangle = \langle \alpha_1 \dots \alpha_n | \beta_1 \dots \beta_m \rangle \quad (2.120)$$

สำหรับคู่ของเวกเตอร์ที่เป็นเบสิส (basis) ของปริภูมิของฟอกซ์ใดๆ เพื่อพิสูจน์สมการ (2.120) พิจารณาข้อเท็จจริงที่ว่า $|\alpha_1 \dots \alpha_n\rangle = a_{\alpha_1}^\dagger \dots a_{\alpha_n}^\dagger |0\rangle$ แล้วพบว่า

$$\begin{aligned} \langle \alpha_1 \dots \alpha_n | \zeta \rangle &= \langle 0 | \alpha_{\alpha_n} \dots \alpha_{\alpha_1} (1 - \zeta_{\alpha_i} a_{\alpha_i}^\dagger) | 0 \rangle \\ &= \zeta_{\alpha_n} \dots \zeta_{\alpha_1} \end{aligned} \quad (2.121)$$

จากสมการ (2.121) แสดงให้เห็นว่าผลของตัวแปรแกรสมันน์จะเป็นสเกลาร์เสมอ เนื่องจาก a_α สามารถสลับที่กับ $(1 - \zeta_\beta a_\beta^\dagger)$ สำหรับ $\alpha \neq \beta$ ด้านขวาของสมการ (2.120) สามารถเขียนได้เป็น

$$\begin{aligned} \int \prod_\alpha d\zeta_\alpha^* d\zeta_\alpha e^{-\sum_\alpha \zeta_\alpha^* \zeta_\alpha} \langle \alpha_1 \dots \alpha_n | \zeta \rangle \langle \zeta | \beta_1 \dots \beta_m \rangle \\ = \int \prod_\alpha d\zeta_\alpha^* d\zeta_\alpha \prod_\alpha (1 - \zeta_\alpha^* \zeta_\alpha) \zeta_{\alpha_n} \dots \zeta_{\alpha_1} \zeta_{\beta_1}^* \dots \zeta_{\beta_m}^* \end{aligned} \quad (2.122)$$

สำหรับสถานะเจาะจง λ ใดๆ จะมีสถานะที่เป็นไปได้ โดยสามารถเขียนฝั่งขวาของสมการ (2.122) ได้เป็น

$$\int d\zeta_\alpha^* d\zeta_\alpha (1 - \zeta_\alpha^* \zeta_\alpha) \begin{Bmatrix} \zeta_\lambda^* \zeta_\lambda \\ \zeta_\lambda^* \\ \zeta_\lambda \\ 1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{Bmatrix} \quad (2.123)$$

จากสมการ (2.123) แสดงให้เห็นว่าปริพันธ์จะมีค่าถ้าสถานะ λ เป็นสถานะที่มีหรือไม่มีอนุภาคทั้งสองสถานะทั้ง $\langle \alpha_1 \dots \alpha_n |$ และ $|\beta_1 \dots \beta_m \rangle$ ดังนั้น จำนวนของสถานะ m ต้องเท่ากับจำนวนสถานะ n นอกจากนั้น พิจารณาการสลับที่ของตัวแปรแกรสมันน์ $\{\alpha_1 \dots \alpha_n\}$ และ $\{\beta_1 \dots \beta_m\}$ พบว่ามีคุณสมบัติการโอเวอร์แลป กล่าวคือ $\langle \alpha_1 \dots \alpha_n | \beta_1 \dots \beta_n \rangle = (-1)^P$ การโอเวอร์แลปดังกล่าว มีค่าไม่เท่ากับศูนย์เมื่อ m ไม่เท่ากับ n นอกจากนั้น การรวมกันของตัวแปรแกรสมันน์ในสมการ (2.122) สามารถเขียนใหม่ได้ดังสมการ

$$\zeta_{\alpha_n} \dots \zeta_{\alpha_1} \zeta_{\beta_1}^* \dots \zeta_{\beta_n}^* = (-1)^P \zeta_{\alpha_n} \dots \zeta_{\alpha_1} \zeta_{\alpha_1}^* \dots \zeta_{\alpha_n}^* \quad (2.124)$$

เมื่อ P เป็นจำนวนครั้งของการสับเปลี่ยน ในที่สุด จะได้ว่า

$$\langle \alpha_1 \dots \alpha_n | \int d\zeta^* d\zeta e^{-\zeta^* \zeta} | \zeta \rangle \langle \zeta | \beta_1 \dots \beta_m \rangle = \begin{cases} (-1)^P & n=m, \beta_i = P\alpha_i, P \in S_n \\ 0 & n \neq m \end{cases} \quad (2.125)$$

สมการ (2.125) แสดงให้เห็นว่าสมการ (2.120) เป็นจริงสำหรับคู่ของเวกเตอร์ใดๆ ในปริภูมิของฟอกซ์ ดังนั้นคุณสมบัติปิดตามสมการดังกล่าวเป็นจริง

นัยนิยมของเทรซโดยสถานะโคเฮเรนต์ (Representation of the trace by coherent states)

เพื่อคำนวณเทรซของตัวดำเนินการให้อยู่ในพจน์ของสถานะโคเฮเรนต์ พิจารณาข้อเท็จจริงที่ว่าสเกลาร์โปรดัก (scalar product) ระหว่างสถานะในปริภูมิของฟอกซ์ $|\psi_i\rangle$ และสถานะโคเฮเรนต์ $|\zeta\rangle$ $\langle \psi_i | \zeta \rangle$ และ $\langle \zeta | \psi_i \rangle$ เป็นตัวแปรแกมมันน์ สามารถเขียนคุณสมบัติแอนติคอมมิวเตตังสมการ

$$\langle \psi_i | \zeta \rangle \langle \zeta | \psi_i \rangle = \langle -\zeta | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \zeta \rangle \quad (2.126)$$

เพื่อคำนวณฟังก์ชันแบ่งส่วนหรือการสร้างฟังก์ชันนอลของค่าเจาะจงบางตัวของระบบที่ต้องการใช้เป็นตัวแทนสำหรับเทรซของตัวดำเนินการในพจน์ของสถานะโคเฮเรนต์สำหรับเฟอร์มิออน สามารถคำนวณได้ดังสมการ

$$\begin{aligned} \text{tr} \{A\} &= \sum_n \langle n | A | n \rangle \\ &= \int \prod_{\alpha} d\zeta^* d\zeta e^{\sum_{\alpha} \zeta^*_{\alpha} a_{\alpha}} \langle n | A | n \rangle \\ &= \int \prod_{\alpha} d\zeta^* d\zeta e^{\sum_{\alpha} \zeta^*_{\alpha} a_{\alpha}} \langle -\zeta | \sum_n A | n \rangle \langle n | \zeta \rangle \\ &= \int \prod_{\alpha} d\zeta^* d\zeta e^{\sum_{\alpha} \zeta^*_{\alpha} a_{\alpha}} \langle -\zeta | A | \zeta \rangle \end{aligned} \quad (2.127)$$

2.8 ปริพันธ์ตามวิถีของสถานะโคเฮเรนต์

ในหัวข้อนี้ จะนำสมการที่ได้จากพีชคณิตแกรสมันน์และสถานะโคเฮเรนต์เพื่อนำไปคำนวณฟังก์ชันแบ่งส่วนของระบบสำหรับสถานะโคเฮเรนต์ จากการควอนไทส์ลำดับที่สองของฮามิลโทเนียน H ในนอร์มอลออเดอร์ (normal order) กล่าวคือ ให้ตัวดำเนินการสร้างอยู่ฝั่งซ้ายของตัวดำเนินการลบไล่ง เพื่อจะให้กระทำกับสถานะว่างได้ สำหรับการคำนวณอนุพันธ์ พิจารณาฟังก์ชันแบ่งส่วน $Z = \text{tr}\{e^{-\beta H}\}$ จากเทรซในสถานะโคเฮเรนต์ตามสมการ (2.127) สามารถเขียนฟังก์ชันแบ่งส่วนในสถานะโคเฮเรนต์ได้เป็น

$$Z = \text{tr}\{e^{-\beta H}\} = \int d\mu(\zeta) e^{-\zeta^* \zeta} \langle -\zeta | e^{-\beta H} | \zeta \rangle \quad (2.128)$$

เมื่อกำหนดให้ $d\mu(\zeta) = \prod_{\alpha} d\zeta_{\alpha}^* d\zeta_{\alpha}$

พิจารณาลำดับกับกรณีของการคำนวณปริพันธ์ตามวิถีของพายน์แมนน์ กล่าวคือ แบ่งช่วงของการคำนวณปริพันธ์ออกเป็นช่วงเวลาสั้นๆ Δ_j ออกเป็น P ช่วง เมื่อ $(j=1, \dots, P)$ และกำหนดให้การแผ่กระจายของอนุภาคไปตามเส้นทาง C จากจุดเริ่มต้น $z=0$ ไปยัง $z=-i\beta$ ดังนั้น สามารถเขียนเวลาทั้งหมดได้ดังสมการ

$$\sum_{j=1}^P \Delta_j = -i\beta \quad (2.129)$$

แล้ว

$$e^{-\beta H} = \prod_{j=1}^P e^{-i\Delta_j H} \quad (2.130)$$

จากเทรซของสถานะโคเฮเรนต์ในสมการ (2.127) และคุณสมบัติปิดในสมการ (2.119) สามารถเขียนฟังก์ชันแบ่งส่วนในสถานะโคเฮเรนต์ ได้ดังสมการ

$$\begin{aligned}
Z &= \text{tr} \{ e^{-\beta H} \} = \int d\zeta_0 d\zeta_P^* e^{\zeta_P^* \zeta_0} \langle \zeta_P | e^{-\beta H} | \zeta_0 \rangle \\
&= \int d\zeta_0 d\mu(\zeta_P) \delta(\zeta_P + \zeta_0) e^{\zeta_P^* \zeta_0} \langle \zeta_P | \prod_{j=1}^P e^{-i\Delta_j H} | \zeta_0 \rangle \\
&= \int d\zeta_0 d\mu(\zeta_P) \dots d\mu(\zeta_1) \delta(\zeta_P + \zeta_0) \prod_{j=1}^P e^{\zeta_P^* \zeta_0} \langle \zeta_j | e^{-i\Delta_j H} | \zeta_{j-1} \rangle \\
&= \int D\mu(\zeta) \prod_{j=1}^P e^{\zeta_P^* \zeta_0} \langle \zeta_j | e^{-i\Delta_j H} | \zeta_{j-1} \rangle \tag{2.131}
\end{aligned}$$

เมื่อผลคูณระหว่างปริพันธ์ทั้งหมดของตัวแปรแกรสมันน์ที่การขยับเวลาแตกต่างกันไปตามเส้นทาง และฟังก์ชันเดลต้าที่บังคับให้ความสัมพันธ์แบบไม่สมมาตร $\zeta_0 = -\zeta_P$ ได้ถูกรวมเข้ากับการวัดปริพันธ์ตามวิถี

ในการคำนวณค่าขององค์ประกอบเมทริกซ์ของสถานะโคเฮเรนต์ เนื่องจากฮามิลโทเนียนตอนนี้อยู่ในรูปทั่วไป ซึ่งสามารถขยายออกเป็นฟังก์ชันเอ็กโพเนนเชียลและใช้ความสัมพันธ์ของค่าเจาะจงสำหรับตัวดำเนินการสร้างและตัวดำเนินการลบล้างเพื่อแทนที่ $H = H[a^\dagger, a]$ โดย $H[\zeta_j^*, \zeta_{j-1}]$ สำหรับองค์ประกอบเมทริกซ์ จะได้ว่า

$$\langle \zeta_j | e^{-i\Delta_j H} | \zeta_{j-1} \rangle = \langle \zeta_j | 1 - i\Delta_j H | \zeta_{j-1} \rangle + O(\Delta_j^2) \tag{2.132}$$

$$\begin{aligned}
\langle \zeta_j | e^{-i\Delta_j H} | \zeta_{j-1} \rangle &= \langle \zeta_j | \zeta_{j-1} \rangle (1 - i\Delta_j H)[\zeta_j^*, \zeta_{j-1}] + O(\Delta_j^2) \\
&= e^{\zeta_j^* \zeta_{j-1}} e^{-i\Delta_j H[\zeta_j^*, \zeta_{j-1}]} + O(\Delta_j^2) \tag{2.133}
\end{aligned}$$

จากสมการ (2.132) และ (2.133) สามารถเขียนฟังก์ชันแบ่งส่วนใหม่ ได้ดังสมการ

$$\begin{aligned}
Z &= \int D\mu(\zeta) \prod_{j=1}^P e^{\zeta_j^* \zeta_{j-1} - \zeta_j^* \zeta_j} e^{-i\Delta_j H[\zeta_j^*, \zeta_{j-1}]} \\
&= \int D\mu(\zeta) e^{i \sum_{j=1}^P \Delta_j \left(\zeta_j^* \frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta_j} - H[\zeta_j^*, \zeta_{j-1}] \right)} \quad (2.134)
\end{aligned}$$

เมื่อพิจารณาในกรณีที่ $P \rightarrow \infty$ และ $\Delta_j \rightarrow 0$ สามารถเขียนผลรวมดังกล่าวให้อยู่ในรูปของปริพันธ์ได้ นอกจากนั้น เพื่อความสะดวกได้กำหนดสัญลักษณ์ในการเขียน ดังต่อไปนี้

$$\sum_{j=1}^P \Delta_j [\dots] \rightarrow \int_c dz [\dots] \quad (2.135)$$

$$\frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta_j} \rightarrow \partial_z \zeta(z) \quad (2.136)$$

$$H[\zeta_j^*, \zeta_{j-1}] \rightarrow H[\zeta^*(z), \zeta(z)] \quad (2.137)$$

เมื่อแทนสมการ (2.135)–(2.137) ลงในสมการ (2.134) สามารถเขียนฟังก์ชันแบ่งส่วนของสถานะโคเฮเรนต์สำหรับเฟอร์มิออน ในรูปอย่างง่ายได้เป็น

$$Z = \int D\mu(\zeta) \exp(iS[\zeta^*, \zeta]) \quad (2.138)$$

เมื่อแอคชัน $S[\zeta^*, \zeta]$ มีค่าดังสมการ

$$S = \int_c dz (\zeta^* i \partial_z \zeta - H[\zeta^*, \zeta]) \quad (2.139)$$

2.9 เฟอร์มิออนที่ไม่มีอันตรกิริยาต่อกัน

ในหัวข้อนี้ได้ยกตัวอย่างการประยุกต์ใช้ปริพันธ์ตามวิถีของสถานะโคเฮเรนต์ โดยเริ่มจากพิจารณาการคำนวณฟังก์ชันแบ่งส่วนสำหรับอนุภาคเฟอร์มิออนที่ไม่มีอันตรกิริยาต่อกัน (non-interacting fermions) เมื่อฮามิลโทเนียนของระบบนี้สามารถเขียนได้ตามสมการ

$$H = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} \equiv a^{\dagger} \varepsilon a \quad (2.140)$$

เมื่อ α หมายถึงเวกเตอร์คลื่น k และสปิน σ ของอนุภาคเสมือน และกำหนดให้ $\varepsilon_{\alpha\alpha'} \equiv \varepsilon_\alpha \delta_{\alpha\alpha'}$ ในกรณีที่ $\alpha = \alpha'$ ฟังก์ชันแบ่งส่วนในสมการ (2.138) สามารถเขียนให้อยู่ในรูปแบบตามสมการ (2.134) ได้เป็น

$$\begin{aligned} Z &= \int d\zeta_0 d\mu(\zeta_p) \dots d\mu(\zeta_1) \delta(\zeta_0 + \zeta_p) e^{-\sum_{j=1}^p [\zeta_j^* \zeta_j - \zeta_j^* (1 - i\Delta_j \varepsilon) \zeta_{j-1}]} \\ &= \int D\mu(\zeta) e^{-\zeta^* S \zeta} \end{aligned} \quad (2.141)$$

เมื่อพิจารณาในกรณีที่จุดเริ่มต้นและจุดสุดท้ายในการคำนวณเป็นจุดเดียวกัน กล่าวคือ $\zeta_0 = \zeta_p$ สามารถเขียนเมทริกซ์ S^α ที่เวลา j เมื่อกำหนดให้เมทริกซ์ของแอกชันเป็นไปตามเงื่อนไข $S_{j\alpha j\alpha'} \equiv S_{jj}^\alpha \delta_{\alpha,\alpha'}$ ได้เป็น

$$S^\alpha = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & c_1^\alpha \\ -c_2^\alpha & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -c_{p-1}^\alpha & 1 \end{pmatrix} \quad (2.142)$$

เมื่อ $c_j^\alpha = 1 - i\Delta_j \varepsilon_\alpha$ จากการใช้รูปแบบการคำนวณปริพันธ์ของเกาส์สำหรับเมทริกซ์ในสมการ (2.108) สามารถเขียนฟังก์ชันแบ่งส่วนใหม่ที่ขึ้นกับเมทริกซ์ของแอกชันได้ดังสมการ

$$Z = \det S = \prod_\alpha \det[S_\alpha] \quad (2.143)$$

เมื่อคำนวณดีเทอร์มิแนนต์ด้วยวิธีการคำนวณโดยไมเนอร์ [39] พิจารณาสมาชิกของเมทริกซ์แถวที่ 1 สามารถเขียนฟังก์ชันแบ่งส่วนได้เป็น

$$\begin{aligned} Z &= \prod_\alpha \left(1 + (-1)^{p+1} c_1^\alpha \prod_{j=2}^p (-c_j^\alpha) \right) \\ &= \prod_\alpha \left(1 + \prod_{j=1}^p (1 - i\Delta_j \varepsilon_\alpha) \right) = \prod_\alpha \left(1 + e^{-i\varepsilon_\alpha \sum_{j=1}^p \Delta_j} \right) \\ &= \prod_\alpha (1 + e^{-\beta_\alpha}) \end{aligned} \quad (2.144)$$

เทอร์มอลกรีนฟังก์ชัน (the thermal Green's function)

จากนิยามของเทอร์มอลกรีนฟังก์ชันสามารถเขียนได้ตามสมการ

$$G_{\alpha\alpha'}(z, z') = \langle \mathcal{T} [a_\alpha(z) a_\alpha^\dagger(z')] \rangle \quad (2.145)$$

เมื่อ \mathcal{T} เป็นคอนทัวร์ออเดอร์โปรดักต์ (contour-order product) ซึ่งเป็นตัวดำเนินการที่กำหนดโดยเวลาที่อยู่ในเส้นทาง C จากการพิจารณาที่เวลา \mathcal{T} ต้องทำการนอร์มอลออเดอร์โปรดักต์ (normal-ordered product) แต่สำหรับเส้นทางในเวลาจินตภาพ \mathcal{T} จะเป็นตัวดำเนินการออเดอร์เรียงกับการลดลงของเวลาในจินตภาพ เช่น เวลา z และ z' สามารถเขียนให้อยู่ในรูปไม่ต่อเนื่องได้ตามสมการ

$$z = \sum_{j=1}^k \Delta_j \quad \text{และ} \quad z' = \sum_{j=1}^{k'} \Delta_j \quad (2.146)$$

จากสมการ (2.145) สามารถเขียนให้อยู่ในรูปแบบการคำนวณปริพันธ์ตามวิถีได้ตามสมการ

$$G_{\alpha\alpha'}(z, z') = \frac{1}{Z} \int d\mu(\zeta) \zeta_{k,\alpha} \zeta_{k',\alpha}^* e^{-\zeta^* S \zeta} \quad (2.147)$$

เนื่องจากแอกชันในสมการ (2.147) มีค่าเฉพาะในแนวทแยงเท่านั้น และใช้คุณสมบัติอนุพันธ์ของซอร์สเทอม (source terms) ที่ขึ้นกับตัวแปร $\zeta_{k,\alpha}$ และ $\zeta_{k',\alpha}^*$ และคุณสมบัติในสมการ (2.143) สามารถเขียนสมการของกรีนฟังก์ชันได้ตามสมการ

$$G_{\alpha\alpha'}(z, z') = \frac{\delta_{\alpha\alpha'}}{\det(S)} \frac{\partial^2}{\partial J_{k,\alpha}^* \partial J_{k',\alpha}} \int d\mu(\zeta) e^{-\zeta^* S \zeta + J^* \zeta + \zeta^* J} \Big|_{J=J^*=0} \quad (2.148)$$

พิจารณาการคำนวณปริพันธ์ของแกาส์ในสมการ (2.108) พบว่า

$$G_{\alpha\alpha'}(z, z') = \frac{\delta_{\alpha\alpha'}}{\det(S)} \frac{\partial^2}{\partial J_{k,\alpha}^* \partial J_{k',\alpha}} e^{J^* S^{-1} J} \Big|_{J=J^*=0} = \delta_{\alpha\alpha'} (S^\alpha)^{-1}_{kk'} \quad (2.149)$$

เมื่ออินเวิร์สเมทริกซ์ $(S^\alpha)^{-1}$ ในสมการ (2.142) เขียนได้ดังสมการ [60]

$$(S^\alpha)^{-1} = \frac{1}{\det(S)} (\tilde{S}^\alpha)^T \quad (2.150)$$

เมื่อ

$$(\tilde{S})_{ij}^\alpha = \begin{vmatrix} s_{1,1} & \cdots & s_{1,j-1} & s_{1,j+1} & \cdots & s_{1,P} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ s_{i-1,1} & \cdots & s_{i-1,j-1} & s_{i-1,j+1} & \cdots & s_{i-1,P} \\ s_{i+1,1} & \cdots & s_{i+1,j-1} & s_{i+1,j+1} & \cdots & s_{i+1,P} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ s_{P,1} & \cdots & s_{P,j-1} & s_{P,j+1} & \cdots & s_{P,P} \end{vmatrix} \quad (2.151)$$

และทรานส์โพส (transpose) ของเมทริกซ์ $(\tilde{S}^\alpha)^T$ เขียนได้ดังสมการ

$$(\tilde{S}^\alpha)^T = \begin{pmatrix} 1 & -c_1^\alpha \prod_{j=3}^P c_j^\alpha & -c_1^\alpha \prod_{j=4}^P c_j^\alpha & \cdots & -c_1^\alpha c_{P-1}^\alpha c_P^\alpha & -c_1^\alpha c_P^\alpha & -c_1^\alpha \\ c_2^\alpha & 1 & -c_1^\alpha c_2^\alpha \prod_{j=4}^P c_j^\alpha & \cdots & -c_1^\alpha c_2^\alpha c_{P-1}^\alpha c_P^\alpha & -c_1^\alpha c_2^\alpha c_P^\alpha & -c_1^\alpha c_2^\alpha \\ c_2^\alpha c_3^\alpha & c_3^\alpha & 1 & \cdots & -\prod_{j=4}^P c_j^\alpha c_{P-1}^\alpha c_P^\alpha & -c_1^\alpha c_2^\alpha c_3^\alpha c_P^\alpha & -c_1^\alpha c_2^\alpha c_3^\alpha \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \prod_{j=2}^{P-2} c_j^\alpha & \prod_{j=3}^{P-2} c_j^\alpha & \prod_{j=4}^{P-2} c_j^\alpha & \cdots & 1 & -\prod_{j=1}^{P-2} c_j^\alpha c_P^\alpha & -\prod_{j=1}^{P-2} c_j^\alpha \\ \prod_{j=2}^{P-1} c_j^\alpha & \prod_{j=3}^{P-1} c_j^\alpha & \prod_{j=4}^{P-1} c_j^\alpha & \cdots & c_{P-1}^\alpha & 1 & -\prod_{j=1}^{P-1} c_j^\alpha \\ \prod_{j=2}^P c_j^\alpha & \prod_{j=3}^P c_j^\alpha & \prod_{j=4}^P c_j^\alpha & \cdots & c_{P-1}^\alpha c_P^\alpha & c_P^\alpha & 1 \end{pmatrix} \quad (2.152)$$

เมื่อพิจารณาเทอร์มอลกรีนฟังก์ชันในสมการ (2.149) พบว่า สามารถพิจารณาได้สองกรณี กล่าวคือ กรณีที่ $k > k'$ และ $k < k'$ โดยในกรณีที่ $k > k'$ สามารถเขียนได้เป็น

$$G_{\alpha\alpha'}(z, z') = \delta_{\alpha\alpha'} \frac{\prod_{j=k'+1}^k c_j^\alpha}{1 + \prod_{j=1}^P c_j^\alpha} = \delta_{\alpha\alpha'} \frac{e^{-i \sum_{j=k'+1}^k \Delta_j \varepsilon_\alpha}}{1 + e^{-\beta \varepsilon_\alpha}} \rightarrow \delta_{\alpha\alpha'} \frac{e^{-i(z-z')\varepsilon_\alpha}}{1 + e^{-\beta \varepsilon_\alpha}} \quad (2.153)$$

และในกรณีที่ $k < k'$ พบว่า

$$\begin{aligned}
 G_{\alpha\alpha'}(z, z') &= -\delta_{\alpha\alpha'} \frac{\prod_{j=1}^P c_j^\alpha \left(\prod_{j=k+1}^{k'} c_j^\alpha \right)^{-1}}{1 + \prod_{j=1}^P c_j^\alpha} \\
 &= -\delta_{\alpha\alpha'} e^{-\varepsilon_\alpha} \frac{e^{-i \sum_{j=k+1}^{k'} \Delta_j \varepsilon_\alpha}}{1 + e^{-\beta \varepsilon_\alpha}} \rightarrow -\delta_{\alpha\alpha'} e^{-\varepsilon_\alpha} \frac{e^{-i(z-z')\varepsilon_\alpha}}{1 + e^{-\beta \varepsilon_\alpha}} \quad (2.154)
 \end{aligned}$$

จากสมการ (2.153) และ (2.154) สามารถเขียนเทอร์มอลกรีนฟังก์ชันให้อยู่ในรูปอย่างง่ายสำหรับพิจารณาในกรณีเส้นทางในเวลาจินตภาพ โดยกำหนดให้พารามิเตอร์ $\tau = iz$ ได้ดังสมการ [39]

$$G_{\alpha\alpha'}(\tau, \tau') = \delta_{\alpha\alpha'} \begin{cases} \frac{e^{-\varepsilon_\alpha(\tau-\tau')}}{1+e^{-\beta\varepsilon_\alpha}} & \tau > \tau' \\ \frac{e^{-\varepsilon_\alpha(\tau-\tau')}}{1+e^{-\beta\varepsilon_\alpha}} & \tau < \tau' \end{cases} \quad (2.155)$$

2.10 การคำนวณปริพันธ์ด้วยวิธีมอนติคาร์โล

ในหัวข้อนี้จะกล่าวถึงหลักการเบื้องต้นของวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล ที่ใช้คำนวณในวิทยานิพนธ์นี้ โดยเริ่มจากการคำนวณค่าปริพันธ์ในหลายมิติ (multi-dimensional integrals) เพื่อที่จะแสดงให้เห็นถึงความสำคัญของวิธีมอนติคาร์โล (Monte Carlo method) ซึ่งได้กล่าวในหัวข้อ 2.10.1 ส่วนในหัวข้อ 2.10.2 ได้นำเสนอแนวความคิดพื้นฐานที่ใช้ในการจำลองแบบมอนติคาร์โล (Monte Carlo simulation) ซึ่งประกอบไปด้วย การสุ่มตัวอย่างตามความสำคัญ (importance sampling) กระบวนการมาร์คอฟ (Markov process) และระเบียบวิธีของเมโทรโพลิส (Metropolis algorithm) ตามลำดับ หัวข้อที่ 2.10.3 แสดงวิธีการสุ่มตัวอย่างในเวลาจินตภาพ และสุดท้ายในหัวข้อที่ 2.10.4 ได้แนะนำวิธีการวิเคราะห์เชิงสถิติของข้อมูลที่ได้จากการคำนวณค่าปริพันธ์ตามวิถีด้วยวิธีมอนติคาร์โล

2.10.1 การคำนวณค่าปริพันธ์ในหลายมิติ

พิจารณาการคำนวณค่าปริพันธ์ในหลายมิติ (multi-dimensional integration) เพื่อที่จะแสดงถึงจุดเด่นของวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล โดยพิจารณาการคำนวณค่าปริพันธ์ที่มีจำนวนมิติ (หรือจำนวนตัวแปร) d ของฟังก์ชัน $f(x_1, \dots, x_d)$ ที่ขึ้นอยู่กับตัวแปร x_1, \dots, x_d ตามสมการ

$$I = \int_0^1 dx_1 \dots \int_0^1 dx_d f(x_1, \dots, x_d) \quad (2.156)$$

ในการคำนวณค่าดังกล่าวมีวิธีการเชิงตัวเลขหลายวิธีที่ใช้คำนวณ ตัวอย่างเช่น สูตรนิวตัน-โคสต์ (Newton-Cotes formula) ซึ่งสามารถประมาณค่าปริพันธ์ได้จากสมการทั่วไปดังนี้ [61]

$$I = \frac{1}{(n+1)^d} \sum_{j_1=0}^n \dots \sum_{j_d=0}^n w_{j_1} \dots w_{j_d} f(x_{j_1}, \dots, x_{j_d}) + O\left(\frac{1}{(n+1)^\gamma}\right) \quad (2.157)$$

เมื่อ n เป็นจำนวนช่วงที่ถูกแบ่งออกภายในช่วง 0 ถึง 1 ของแต่ละตัวแปร w_j เป็นค่าถ่วงน้ำหนักของแต่ละช่วง γ เป็นค่าคงที่ของการประมาณในแต่ละแบบ เช่น กฎสี่เหลี่ยมคางหมู $\gamma=2$ และพจน์สุดท้ายทางขวามือของสมการ (2.157) แสดงถึงความคลาดเคลื่อน (ε) ในการคำนวณ ดังนั้น ในกรณีนี้ในแต่ละมิติจะถูกคำนวณ $(n+1)$ ครั้ง ซึ่งทำให้การคำนวณทั้งหมด $M = (n+1)^d$ หรือประมาณได้เป็น $M \approx n^d$ หรือสามารถเขียนใหม่ได้เป็น $n \approx M^{1/d}$ เมื่อแทนค่าดังกล่าวลงในพจน์ของความคลาดเคลื่อน พบว่า ความคลาดเคลื่อนของการคำนวณค่าปริพันธ์เขียนได้ตามสมการ

$$\varepsilon \propto M^{-\gamma/d} \quad (2.158)$$

จากสมการ (2.157) จะเห็นได้ว่า จากสูตรนิวตัน-โคสต์ ความคลาดเคลื่อนของการประมาณค่าปริพันธ์ในหลายมิติจะเพิ่มขึ้นตามจำนวนของมิติ d ดังนั้น ในกรณีที่คำนวณค่าปริพันธ์ในหลายมิติ เช่น การคำนวณปริพันธ์ตามเส้นทาง ซึ่งมีจำนวนมิติมาก การประมาณด้วยสูตรนิวตัน-โคสต์จะมีความคลาดเคลื่อนสูง จึงไม่เหมาะที่จะมาประยุกต์ใช้ในการคำนวณดังกล่าว

อย่างไรก็ตาม วิธีควอนตัมมอนติคาร์โลมีความเหมาะสมที่จะนำมาใช้แก้ปัญหาการคำนวณค่าปริพันธ์ในหลายมิติ เพราะความคลาดเคลื่อนของการคำนวณไม่ขึ้นกับจำนวนมิติของการคำนวณปริพันธ์ แนวคิดพื้นฐานของวิธีมอนติคาร์โลเป็นการประมาณโดยใช้ตัวเลขสุ่ม (random number) มาช่วยในการแก้ปัญหาการคำนวณค่าปริพันธ์ เมื่อใช้วิธีมอนติคาร์โล จะสามารถประมาณสมการ (2.157) ได้เป็น

$$I = \int dx f(\vec{x}) \rho(\vec{x}) = \langle f \rangle_\rho \approx \frac{1}{M} \sum_{\substack{i=1 \\ \vec{x}_i \in \rho(\vec{x})}}^M f(\vec{x}_i) \quad (2.159)$$

เมื่อ $f(\vec{x}) = f(x_1, x_2, \dots, x_d)$ และสัญลักษณ์ $\langle f \rangle_\rho$ หมายถึงค่าคาดหวังของฟังก์ชัน $f(\vec{x})$ โดยใช้ฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น $\rho(\vec{x})$ ซึ่งฟังก์ชันดังกล่าวนี้ต้องเป็นไปตามเงื่อนไข 2 ข้อ ดังต่อไปนี้ [29]

- 1) ความน่าจะเป็นของทุกค่าของ \vec{x} ต้องมีค่ามากกว่าหรือเท่ากับศูนย์

$$\rho(\vec{x}) \geq 0 \quad (2.160)$$

- 2) ผลรวมของความน่าจะเป็นของทุกค่า \vec{x} ที่เป็นไปได้ต้องมีค่าเท่ากับหนึ่ง

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\vec{x} \rho(\vec{x}) = 1 \quad (2.161)$$

จากสมการ (2.159) สัญลักษณ์ $\vec{x}_i \in \rho(\vec{x})$ หมายถึง ตัวแปร \vec{x}_i ที่ถูกเลือกอย่างสุ่มจากฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น $\rho(\vec{x})$ ดังนั้น ค่า I จะสามารถคำนวณได้จาก [29]

$$I = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M f(\vec{x}_i) \quad (2.162)$$

เมื่อ M เป็นจำนวนตัวอย่างที่ใช้ในการคำนวณค่าปริพันธ์

อย่างไรก็ตาม ในทางปฏิบัติค่า M ต้องมีค่าจำกัด ซึ่งทฤษฎีแนวโน้มเข้าสู่ศูนย์กลาง (center limit theorem) [39] ได้กล่าวไว้ว่า สำหรับการคำนวณค่าคาดหวัง $\langle f \rangle_\rho$ จะมีค่าความแปรปรวนเท่ากับ σ^2 เป็นไปตามสมการ

$$\sigma^2 = \frac{1}{M} \left(\langle f^2 \rangle_\rho - \langle f \rangle_\rho^2 \right) \quad (2.163)$$

ดังนั้น สามารถเขียนค่าประมาณของ I ในสมการ (2.162) ได้เป็น

$$I = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M f(\vec{x}_i) \pm \frac{1}{\sqrt{M}} \left(\langle f^2 \rangle_\rho - \langle f \rangle_\rho^2 \right)^{1/2} \quad (2.164)$$

โดยพจน์ที่สองของสมการ (2.164) เรียกว่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน ซึ่งถูกใช้เป็นตัววัดความคลาดเคลื่อนในการคำนวณค่าปริพันธ์โดยใช้วิธีมอนติคาร์โล โดยมีค่าแปรผันตาม $M^{-1/2}$ ค่าความคลาดเคลื่อนนี้ไม่ขึ้นกับจำนวนมิติของการคำนวณค่าปริพันธ์ ซึ่งเป็นจุดเด่นสำหรับการคำนวณค่าปริพันธ์โดยใช้วิธีมอนติคาร์โล ยกตัวอย่างเช่น เพื่อที่จะได้ให้ได้ความคลาดเคลื่อนที่น้อยลงหนึ่งจุดทศนิยม จำนวนของ

ตัวอย่างจะต้องเพิ่มขึ้นหนึ่งร้อยเท่า ดังนั้น วิธีมอนติคาร์โลจึงถูกใช้ในการคำนวณค่าคาดหวังที่เขียนอยู่ในรูปแบบปริพันธ์ตามเส้นทาง

2.10.2 การสุ่มตัวอย่างด้วยวิธีมอนติคาร์โล

นอกจากการเพิ่มจำนวนตัวอย่างจะเป็นการลดค่าความคลาดเคลื่อนของการคำนวณแล้ว ยังมีวิธีลดความคลาดเคลื่อนของการคำนวณด้วยวิธีมอนติคาร์โลอีกวิธีหนึ่งซึ่งเรียกว่า การสุ่มตัวอย่างตามความสำคัญ

การสุ่มตัวอย่างตามความสำคัญ

การสุ่มตัวอย่างตามความสำคัญเป็นยุทธวิธีในการเลือกฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็นให้เกิดประสิทธิภาพในการคำนวณสูงสุด เพื่อที่จะแสดงแนวความคิดพื้นฐานของการสุ่มตัวอย่างตามความสำคัญ ให้พิจารณาการคำนวณค่า I ตามสมการ

$$I = \int dx f(x) = \int dx \frac{f(x)}{\rho(x)} \rho(x) = \left\langle \frac{f}{\rho} \right\rangle_{\rho} \quad (2.165)$$

ในกรณีนี้ได้ให้ฟังก์ชันที่ถูกคำนวณค่าคาดหวัง $f(x)/\rho(x)$ และฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น $\rho(x)$ ในการคำนวณค่าปริพันธ์โดยใช้วิธีมอนติคาร์โลและความคลาดเคลื่อนจากวิธีการดังกล่าวสามารถเขียนได้เป็น

$$\left\langle \frac{f}{\rho} \right\rangle_{\rho} \approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \frac{f(x_i)}{\rho(x_i)} \pm \frac{\sigma \langle f/\rho \rangle_{\rho}}{\sqrt{M}} \quad (2.166)$$

เมื่อส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานหรือความคลาดเคลื่อนสามารถเขียนได้เป็น

$$\sigma_{\langle f/\rho \rangle_{\rho}} = \left(\left\langle \left(\frac{f}{\rho} \right)^2 \right\rangle_{\rho} - \left\langle \frac{f(x)}{\rho(x)} \right\rangle_{\rho}^2 \right)^{1/2} = \left(\left\langle \left(\frac{f(x)}{\rho(x)} - I \right)^2 \right\rangle_{\rho} \right)^{1/2} \quad (2.167)$$

เพื่อที่จะลดความคลาดเคลื่อนในสมการ (2.167) ให้มีค่าเป็นศูนย์ สามารถทำได้โดยการใช้ $\rho(x) = f(x)/I$ แต่ I เป็นตัวแปรที่ไม่ทราบค่า เนื่องจากเป็นคำตอบของสมการที่จะคำนวณค่าปริพันธ์ อย่างไรก็ตาม สมการ (2.167) ได้นำเสนอแนวความคิดพื้นฐานในการเลือกฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น กล่าวคือ ในทางปฏิบัติควรที่จะเลือกฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น $\rho(x)$ ให้คล้ายคลึงกับฟังก์ชัน $f(x)$ มากที่สุด เพื่อที่จะทำให้ความคลาดเคลื่อนมีค่าน้อยที่สุด

กระบวนการมาร์คอฟ

ในหัวข้อที่ผ่านมา ได้อธิบายแนวคิดพื้นฐานเกี่ยวกับการสุ่มตัวอย่างตามความสำคัญและแสดงให้เห็นว่าการคำนวณค่าคาดหวังต้องใช้เซตของตัวอย่างสุ่ม ดังนั้นในหัวข้อนี้ จะแสดงวิธีในการสร้างลำดับของตัวอย่างสุ่ม ซึ่งเป็นประชากรของฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น เพื่อใช้ในการคำนวณในสมการ (2.166) เพื่อความสะดวกในการอธิบาย ให้พิจารณากรณีหนึ่งมิติ ซึ่งวิธีการดังกล่าวสามารถนำไปประยุกต์ใช้ในกรณีหลายมิติได้ เมื่อกำหนดฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น $p(x)$ และกำหนดให้ x_i เป็นค่าเริ่มต้น ตัวแปรสุ่มทั้งหมดจะสามารถคำนวณได้จากกระบวนการมาร์คอฟ ซึ่งกระบวนการดังกล่าวจะสร้างลำดับของตัวอย่าง ได้ดังต่อไปนี้

กระบวนการมาร์คอฟมีคุณสมบัติที่สำคัญคือ ตัวอย่างในลำดับถัดไป x_{i+1} จะขึ้นกับเฉพาะตัวอย่างปัจจุบัน x_i เท่านั้น กล่าวคือ เป็นอิสระจาก $\{x_{i-1}, x_{i-2}, \dots\}$ ความน่าจะเป็นของการสร้างตัวอย่าง y โดยการเริ่มต้นที่ตัวอย่าง x ใด ๆ ถูกเรียกว่า ความน่าจะเป็นของการเปลี่ยนสถานะ (transition probability) $T(x \rightarrow y)$ ซึ่งความน่าจะเป็นของการเปลี่ยนสถานะต้องเป็นไปตามเงื่อนไขการอนุรักษ์ความน่าจะเป็น (probability conservation condition)

$$\int dy T(x \rightarrow y) = 1 \quad (2.168)$$

กระบวนการมาร์คอฟสามารถเริ่มจากการเลือกตัวอย่างสุ่มค่าใด ๆ และทำการสุ่มตัวอย่างลำดับต่อไปขึ้นมาพิจารณา ซึ่งถ้ามีการยอมรับตัวอย่าง ตัวอย่างดังกล่าวจะถูกเก็บไว้ในกลุ่มของตัวอย่าง ซึ่งถ้ามีการดำเนินการตามกระบวนการมากเพียงพอ สุดท้ายจะสามารถสร้างกลุ่มตัวอย่างที่สอดคล้องกับฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็นซึ่งถูกกำหนดไว้เบื้องต้นได้ นอกจากนี้ ก่อนจะนำกลุ่มตัวอย่างที่สร้างขึ้นไปหาค่าเฉลี่ยเชิงสถิติของปริมาณใด ๆ ในสมการ (2.166) จะต้องทำการทดสอบว่าตัวอย่างที่สุ่มขึ้นมาจากกระบวนการมาร์คอฟเป็นไปตามฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็นหรือไม่ โดยทั่วไปสามารถทดสอบได้หลายวิธี [62] นอกจากนี้ เพื่อที่จะให้ได้กลุ่มตัวอย่างเป็นไปตามฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น ระเบียบวิธีที่ใช้จะต้องมีคุณสมบัติสองข้อคือ เอกกอดิกซิตี (ergodicity) และ ดีเทลบาลานซ์ (detailed balance) ดังต่อไปนี้

เอกกอดิกซิตี

เงื่อนไขเอกกอดิกซิตีได้กำหนดว่าความน่าจะเป็นของการเปลี่ยนสถานะจากตัวอย่างเริ่มต้น x ใด ๆ ไปยังตัวอย่าง y ต้องมีจำนวนการเปลี่ยนสถานะตามกระบวนการมาร์คอฟเป็นค่าจำกัด กล่าวคือ

จำนวนครั้งของการเปลี่ยนสถานะจากตัวอย่าง x ไปยังตัวอย่าง y จะต้องมีจำนวนครั้งที่จำกัด เพื่อให้สามารถเข้าถึงสถานะ y ได้เสมอ ตามสมการ [29]

$$T^n(x \rightarrow y) > 0 \quad (2.169)$$

เมื่อ $T^n(x \rightarrow y) > 0$ เป็นความน่าจะเป็นสำหรับการเปลี่ยนสถานะจาก x ไป y โดยที่ n เป็นจำนวนของกระบวนการมาร์คอฟซึ่งต้องมีค่าจำกัด

ดีเทลบาลานซ์

เงื่อนไขของดีเทลบาลานซ์ได้กำหนดให้

$$\rho(x)T(x \rightarrow y) = \rho(y)T(y \rightarrow x) \quad (2.170)$$

เป็นคุณสมบัติที่กำหนดว่าโอกาสของการเปลี่ยนแปลงสถานะจากตัวอย่าง x ไป y ต้องมีค่าเท่ากับโอกาสของการเปลี่ยนสถานะจากตัวอย่าง y ไป x [29]

ในกระบวนการมาร์คอฟ คุณสมบัติเออออกติกซิตีและดีเทลบาลานซ์ได้การันตีว่าตัวอย่างใหม่ที่ถูกสร้างขึ้นจะอยู่ในฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น $\rho(x)$ ที่กำหนดไว้ ซึ่งสามารถพิสูจน์ได้ด้วยเงื่อนไขดีเทลบาลานซ์ดังสมการ

$$\int dx \rho(x)T(x \rightarrow y) = \rho(y) \int dx T(y \rightarrow x) = \rho(y) \quad (2.171)$$

เมื่อใช้กฎอนุรักษ์ความน่าจะเป็นในสมการ (2.168) พบว่าคำตอบของสมการ (2.171) แสดงให้เห็นว่าฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น จะไม่เปลี่ยนแปลงภายใต้กระบวนการมาร์คอฟ นอกจากนี้ลำดับของตัวอย่างของกระบวนการมาร์คอฟที่มีค่าจำกัด จะถูกเรียกว่า ห่วงโซ่มาร์คอฟ (Markov chain) [63]

ระเบียบวิธีของเมโทรโพลิส

ในหัวข้อนี้จะนำเสนอเกี่ยวกับระเบียบวิธีที่ใช้สร้างลำดับของตัวอย่าง ซึ่งระเบียบวิธีที่ได้รับความนิยมมากที่สุดคือระเบียบวิธีของเมโทรโพลิส (Metropolis algorithm) ถูกเสนอโดย นิโคลัส เมโทรโพลิส และคณะ (Nicolas Metropolis et al.) [64] โดยการพิจารณาจากตัวอย่างเริ่มต้น x ในการเปลี่ยนสถานะตัวอย่างไปสู่ตัวอย่างใหม่ y ด้วยความน่าจะเป็นของการเปลี่ยนแปลงสถานะ $T(x \rightarrow y)$ ซึ่งการเปลี่ยนแปลงสถานะดังกล่าวสามารถถูกแยกออกเป็นสองส่วน ดังสมการ

$$T(x \rightarrow y) = S(x \rightarrow y)A(x \rightarrow y) \quad (2.172)$$

เมื่อ $S(x \rightarrow y)$ เป็นความน่าจะเป็นของการเลือกเปลี่ยนสถานะจาก x ไป y และ $A(x \rightarrow y)$ เป็นความน่าจะเป็นของการยอมรับการเปลี่ยนแปลงสถานะ เมื่อแทนค่า $T(x \rightarrow y)$ ในสมการ (2.172) ลงในสมการ (2.170) จะได้

$$\frac{A(x \rightarrow y)}{A(y \rightarrow x)} = \frac{S(y \rightarrow x)\rho(y)}{S(x \rightarrow y)\rho(x)} \quad (2.173)$$

จากสมการ (2.173) สามารถเขียนสมการโดยย่อของความน่าจะเป็นในการยอมรับตัวอย่าง y ได้เป็น

$$A(x \rightarrow y) = \min \left[1, \frac{S(y \rightarrow x)\rho(y)}{S(x \rightarrow y)\rho(x)} \right] \quad (2.174)$$

ในกรณีสมมาตร (symmetry) กล่าวคือ

$$S(x \rightarrow y) = S(y \rightarrow x) \quad (2.175)$$

สมการ (2.174) สามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$A(x \rightarrow y) = \min \left[1, \frac{\rho(y)}{\rho(x)} \right] \quad (2.176)$$

ซึ่งสามารถแยกออกได้เป็น 2 กรณี ดังต่อไปนี้

$$A(x \rightarrow y) = \begin{cases} 1 & \text{if } \rho(y) \geq \rho(x) \\ \frac{\rho(y)}{\rho(x)} & \text{if } \rho(y) < \rho(x) \end{cases} \quad (2.177)$$

เพื่อแสดงให้เห็นว่าระเบียบวิธีของเมโทรโพลิสสอดคล้องกับเงื่อนไขดีเทลบาลาซัน สามารถตรวจสอบได้ โดยแบ่งการพิจารณาออกเป็นสองกรณี ดังต่อไปนี้

ในกรณี $\rho(y) < \rho(x)$ จะได้

$$\begin{aligned} \rho(x)T(x \rightarrow y) &= \rho(x)S(x \rightarrow y)A(x \rightarrow y) \\ &= \rho(y)S(y \rightarrow x) \\ &= \rho(y)\frac{T(y \rightarrow x)}{A(y \rightarrow x)} \end{aligned}$$

$$= \rho(y)T(y \rightarrow x) \quad (2.178)$$

ในกรณี $\rho(y) \geq \rho(x)$ จะได้

$$\begin{aligned} \rho(x)T(x \rightarrow y) &= \rho(x)S(x \rightarrow y)A(x \rightarrow y) \\ &= \rho(x)S(y \rightarrow x) \\ &= \rho(x) \frac{T(y \rightarrow x)}{A(y \rightarrow x)} \\ &= \rho(y)T(y \rightarrow x) \end{aligned} \quad (2.179)$$

นอกจากนี้ เงื่อนไขเอกกอดิกซิติ์จะเป็นจริงเสมอเมื่อ $\rho(y) > 0$ จากที่กล่าวมาข้างต้นได้แสดงให้เห็นว่า ระเบียบวิธีแบบเมโทรโพลิส เป็นไปตามทั้งสองเงื่อนไข

2.10.3 การสุ่มตัวอย่างของเส้นทางในจินตภาพ

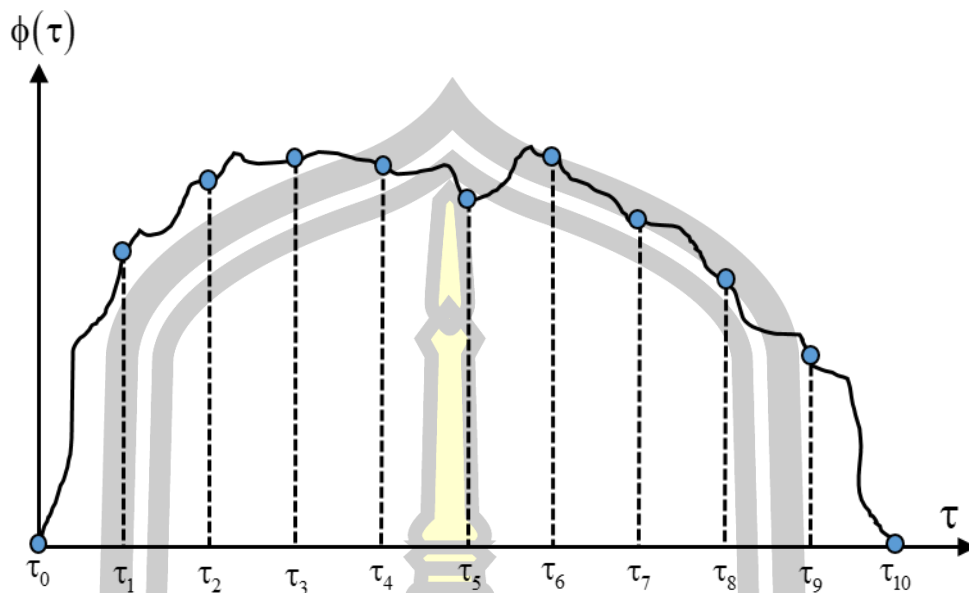
ตามทฤษฎีกลศาสตร์ควอนตัมของไฟน์แมน (Feynman's quantum mechanics) [54] สามารถเขียนฟังก์ชันแบ่งส่วนของระบบควอนตัม ได้ดังสมการ

$$Z(\beta) = \oint D\phi e^{-S[\phi(\tau)]} \quad (2.180)$$

เมื่อ $S[\phi(\tau)]$ เป็นแอคชันตามเส้นทางของยูคลิด (Euclidian action) ซึ่งเป็นแอคชันที่อยู่ในพจน์ของเวลาทางจินตภาพและ $\oint D\phi$ เป็นผลรวมของทุกเส้นทางปิด กล่าวคือ $\phi(0) = \phi(\beta)$

จากภาพประกอบ 2.17 แสดงตัวอย่างการแบ่งเส้นทางที่ต่อเนื่องออกเป็นเส้นทางที่ไม่ต่อเนื่อง โดยช่วงเวลาในจินตภาพ 0 ถึง β ถูกแยกออกเป็นสับส่วน ($N=10$) แสดงโดยจุดสีน้ำเงิน ในขอบเขตที่ $N \rightarrow \infty$ เส้นทางที่ไม่ต่อเนื่องจะกลายเป็นเส้นทางที่ต่อเนื่อง ซึ่งการสร้างเส้นทางใหม่สามารถทำได้โดยการขยับจุดใด ๆ ที่ตำแหน่ง τ_i ขึ้นหรือลง นอกจากนี้ ค่าคาดหวังของปริมาณใด ๆ สามารถคำนวณได้ตามสมการ

พูนุ ปณ ทิโต ชีเว



ภาพประกอบ 2.17 ตัวอย่างเส้นทางจินตภาพที่ถูกแบ่งออกเป็น 10 ช่วงเท่า ๆ กันในช่วงเวลาจินตภาพ $\beta = (\tau_{10} - \tau_0)$

$$\langle O \rangle = \int D\phi \hat{O}[\phi(\tau)] \rho[\phi(\tau)] \quad (2.181)$$

เมื่อตัวดำเนินการ $\hat{O}[\phi(\tau)]$ เขียนอยู่ในรูปของเส้นทางในจินตภาพ โดยที่ $\rho[\phi(\tau)]$ นิยามตามสมการ

$$\rho[\phi(\tau)] = \frac{1}{Z} e^{-S[\phi(\tau)]} \quad (2.182)$$

โดย $\rho[\phi(\tau)]$ เป็นฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็นของระบบทางควอนตัมและสามารถคำนวณค่าคาดหวังด้วยการประมาณโดยใช้วิธีควอนตัมมอนติคาร์โลได้ดังสมการ

$$\langle O \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{\substack{j=1 \\ \phi_j \in \rho[\phi]}}^M O(\phi_j) \quad (2.183)$$

เมื่อ M เป็นจำนวนของตัวอย่าง ซึ่งสุ่มจากฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็น $\rho(\phi)$ ดังนั้น ความน่าจะเป็นของการยอมรับ (acceptance probability) สามารถคำนวณได้ตามสมการ

$$\frac{\rho(\phi_2)}{\rho(\phi_1)} = \frac{e^{-S[\phi_2]}}{e^{-S[\phi_1]}} = e^{-\Delta S} \quad (2.184)$$

เมื่อ ϕ_1 และ ϕ_2 เป็นสัญลักษณ์ของเส้นทางเริ่มต้นและเส้นทางใหม่ที่ถูกสร้างขึ้น จากสมการ (2.184) พบว่าในการคำนวณความน่าจะเป็นของการยอมรับตัวอย่างใหม่ ไม่จำเป็นต้องคำนวณค่าฟังก์ชันแบ่งส่วน ซึ่งเป็นข้อดีของระเบียบวิธีของเมโทรโพลิซิส ที่ต้องการเฉพาะค่าผลต่างของแอคชัน $\Delta S = S[\phi_2] - S[\phi_1]$ ดังนั้น จากสมการ (2.176) สามารถเขียนความน่าจะเป็นของการยอมรับใหม่ได้เป็น

$$A(\phi_1 \rightarrow \phi_2) = \min[1, e^{-\Delta S}] \quad (2.185)$$

จากสัญลักษณ์โดยย่อในสมการ (2.185) สามารถนำไปสร้างเส้นทางใหม่ได้ดังต่อไปนี้

- 1) เริ่มจากเส้นทางเริ่มต้น ϕ_1 ใด ๆ และทำการสร้างการเปลี่ยนแปลงในตัวอย่างเริ่มต้นเพื่อที่จะได้เส้นทาง ϕ_2 ซึ่งเป็นเส้นทางใหม่เพื่อนำไปพิจารณา
- 2) คำนวณความแตกต่างของแอคชัน $\Delta S = S[\phi_2] - S[\phi_1]$ ตามเส้นทาง ϕ_1 และ ϕ_2 ตามลำดับ
- 3) ถ้า $\Delta S < 0$ เส้นทาง ϕ_2 ที่ถูกเสนอจะถูกยอมรับทันที
- 4) ถ้า $\Delta S > 0$ ให้สร้างตัวเลขสุ่ม r ที่มีค่าอยู่ระหว่าง $[0,1]$ โดยเส้นทางใหม่ ϕ_2 ที่ถูกเสนอขึ้นจะถูกยอมรับเมื่อ $\exp(-\Delta S)$ มีค่ามากกว่าตัวเลขที่สุ่มขึ้นมา แต่ถ้ามีค่าน้อยกว่าให้เริ่มข้อ 1 อีกครั้ง

เมื่อทำการสุ่มจนได้ตัวอย่างทั้งหมด $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_M\}$ ที่เป็นไปตามฟังก์ชันการแจกแจงความน่าจะเป็นแล้ว สามารถนำตัวอย่างดังกล่าวไปใช้ในการคำนวณค่าคาดหวังตามสมการ (2.183) จากที่กล่าวมาข้างต้น สามารถสรุปได้ว่า วิธีควอนตัมมอนติคาร์โลสามารถนำไปใช้ในการคำนวณค่าคาดหวัง โดยที่ความคลาดเคลื่อนของการคำนวณไม่ขึ้นอยู่กับจำนวนของมิติหรือตัวแปรของการคำนวณค่าปริพันธ์

2.10.4 การวิเคราะห์เชิงสถิติของข้อมูลมอนติคาร์โล

ในหัวข้อนี้จะสรุปเกี่ยวกับการคำนวณความคลาดเคลื่อนของข้อมูลจากวิธีมอนติคาร์โล กล่าวคือ ในการคำนวณค่าคาดหวังด้วยวิธีการมอนติคาร์โลจะมีความคลาดเคลื่อนเชิงสถิติเกิดขึ้นเสมอ ซึ่งสามารถคำนวณได้ดังรายละเอียดต่อไปนี้ ตัวอย่างของการกระจายตัวของกลุ่มตัวอย่าง x_i ที่ได้จากการบวกรวมการมาร์คอฟที่ได้กล่าวถึงในหัวข้อก่อนหน้านี้ที่เป็นข้อมูลที่ไม่มีความสัมพันธ์ต่อกัน (uncorrelated data) โดยวิธีการดังกล่าวนี้จะถูกนำไปใช้ในการคำนวณความคลาดเคลื่อนของค่าเฉลี่ย ที่ได้จากการคำนวณด้วยวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล พิจารณาค่าคาดหวัง $\langle f \rangle$ สามารถถูกประมาณได้ตามสมการ

$$\langle f \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\substack{i=1 \\ x_i \in \rho(x)}}^N f(x_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i \quad (2.186)$$

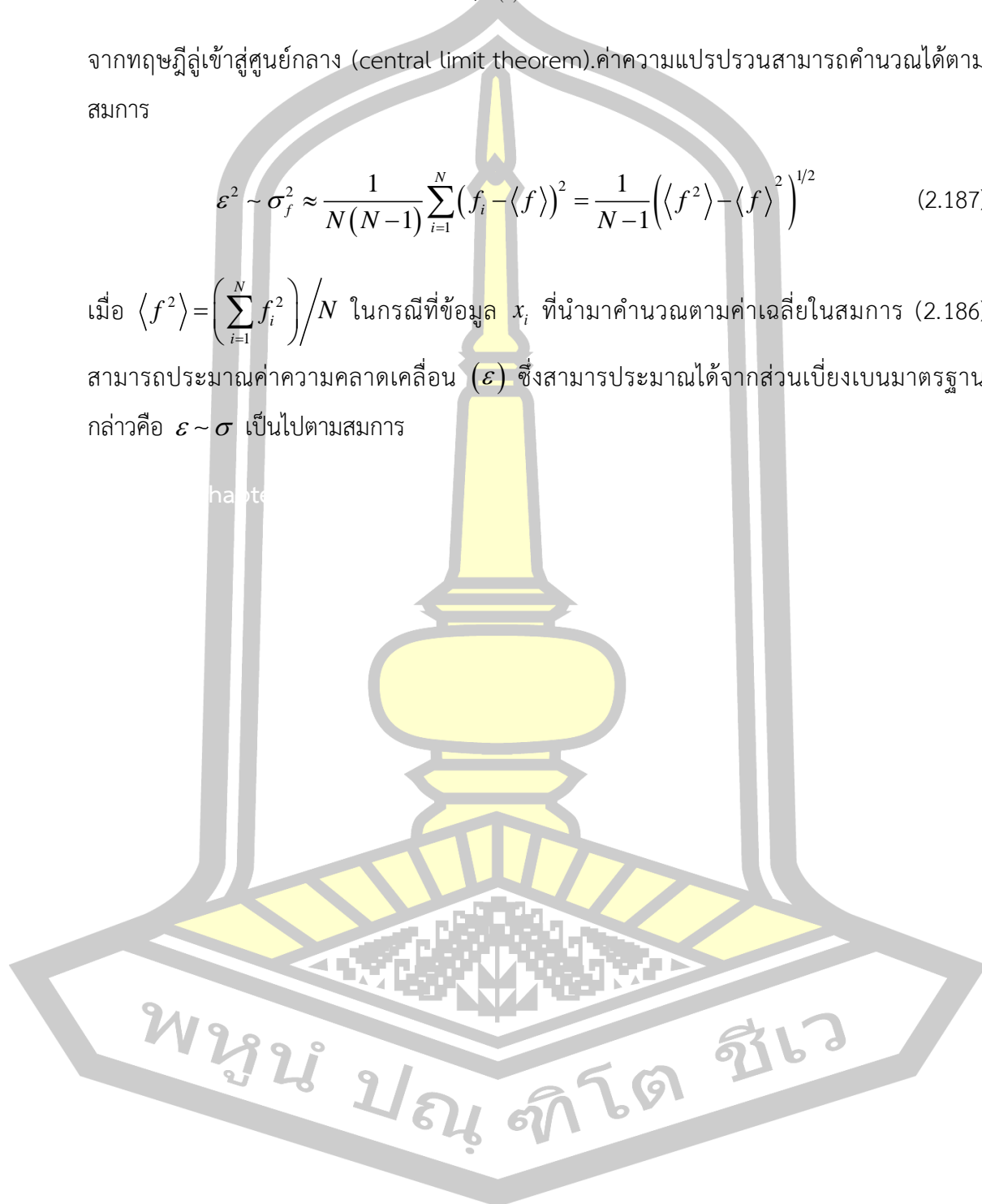
จากทฤษฎีลู่เข้าสู่ศูนย์กลาง (central limit theorem) ค่าความแปรปรวนสามารถคำนวณได้ตามสมการ

$$\varepsilon^2 \sim \sigma_f^2 \approx \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N (f_i - \langle f \rangle)^2 = \frac{1}{N-1} \left(\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2 \right)^{1/2} \quad (2.187)$$

เมื่อ $\langle f^2 \rangle = \left(\sum_{i=1}^N f_i^2 \right) / N$ ในกรณีที่ข้อมูล x_i ที่นำมาคำนวณตามค่าเฉลี่ยในสมการ (2.186)

สามารถประมาณค่าความคลาดเคลื่อน (ε) ซึ่งสามารถประมาณได้จากส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน กล่าวคือ $\varepsilon \sim \sigma$ เป็นไปตามสมการ

habe



บทที่ 3

วิธีดำเนินการวิจัย

ในบทนี้ได้แสดงวิธีการคำนวณแอกชันยังผลของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม โดยในหัวข้อ 3.1 ได้เขียนแฮมิลโทเนียนสำหรับการบรรยายระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม หัวข้อ 3.2 ได้แสดงการเขียนฟังก์ชันแบ่งส่วนในรูปแบบปริพันธ์ของฟังก์ชันนอล หัวข้อ 3.3 และ 3.4 แสดงวิธีการคำนวณแอกชันของคูลอมบ์ (Coulomb action) และแอกชันของการทะลุผ่าน (tunneling action) ด้วยวิธีการคำนวณปริพันธ์ตามวิถี หัวข้อ 3.5 แสดงวิธีการเปลี่ยนตัวแปรของแอกชันยังผลเพื่อให้เหมาะสำหรับการคำนวณด้วยวิธีมอนติคาร์โล

3.1 แฮมิลโทเนียนของระบบ

จากแบบจำลองของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรมในภาพประกอบ 1.5 สามารถแสดงแฮมิลโทเนียนของระบบได้ดังสมการ [65]

$$H = H_B + H_T + H_C \quad (3.1)$$

พจน์ของ H_B ในสมการ (3.1) แสดงถึงพลังงานจลน์ของอิเล็กตรอนในระบบ เขียนได้ดังสมการ

$$H_B = \sum_{Jk\sigma} \varepsilon_{Jk\sigma} c_{Jk\sigma}^\dagger c_{Jk\sigma} + \sum_{Ik\sigma} \varepsilon_{Ik\sigma} d_{Ik\sigma}^\dagger d_{Ik\sigma} \quad (3.2)$$

เมื่อ $\varepsilon_{Jk\sigma}$ เป็นพลังงานของอิเล็กตรอนที่มีเลขคลื่น k อยู่ในช่องของการทะลุผ่าน (channel) σ ของขั้วไฟฟ้า J เมื่อ $J = \{S, D\}$ และ $c_{Jk\sigma}^\dagger$ และ $c_{Jk\sigma}$ เป็นตัวดำเนินการสร้างและตัวดำเนินการลบข้างของอิเล็กตรอนที่อยู่ในขั้วไฟฟ้า J ตามลำดับ ในทำนองเดียวกัน $\varepsilon_{Ik\sigma}$ เป็นพลังงานของอิเล็กตรอนที่มีเลขคลื่น k ในช่องของการทะลุผ่าน σ ของเกาะโลหะ I เมื่อ $I = \{1, 2, \dots, N\}$ และ $d_{Ik\sigma}^\dagger$ และ $d_{Ik\sigma}$ เป็นตัวดำเนินการสร้างและตัวดำเนินการลบข้างของอิเล็กตรอนที่อยู่ในเกาะโลหะ

พจน์ของ H_T ในสมการ (3.1) บรรยายพลังงานที่ใช้ในการทะลุผ่านของอิเล็กตรอนจากขั้วซอร์สไปยังขั้วเดรนโดยผ่านรอยต่อของการทะลุผ่านในระบบ จากในภาพประกอบ 1.5 สามารถเขียนได้ดังสมการ

$$H_T = \sum_{kq\sigma} \left[t_{1Skq\sigma} e^{-i\varphi_1} d_{1k\sigma}^\dagger c_{Sq\sigma} + \sum_{I=2}^N t_{I-1kq\sigma} e^{-i(\varphi_I - \varphi_{I-1})} d_{Ik\sigma}^\dagger d_{I-1q\sigma} + t_{DNkq\sigma} e^{-i\varphi_N} d_{Dk\sigma}^\dagger c_{Nq\sigma} + H.c. \right] \quad (3.3)$$

เมื่อ $t_{1Skq\sigma}$ $t_{I-1kq\sigma}$ และ $t_{DNkq\sigma}$ เป็นสัมประสิทธิ์การทะลุผ่านของรอยต่อการทะลุผ่านซึ่งเขียนแทนด้วยสัญลักษณ์ $1S$ $I-1$ และ DN ตามลำดับ ตัวอย่างเช่น $t_{1Skq\sigma}$ เป็นสัมประสิทธิ์การทะลุผ่านสำหรับอิเล็กตรอนที่อยู่ในชั่วซอร์สซึ่งมีสถานะเริ่มต้น $|q\sigma\rangle$ ที่ทะลุผ่านไปยังเกาะโลหะลำดับที่ 1 โดยมีสถานะสุดท้ายเป็น $|k\sigma\rangle$ นอกจากนั้น ตัวดำเนินการเฟสคอนจูเกต (phase conjugate) φ_I เป็นตัวดำเนินการที่สอดคล้องกับตัวดำเนินการของจำนวนอิเล็กตรอน n_I ที่แสดงถึงอิเล็กตรอนส่วนเกินในเกาะโลหะลำดับที่ I กล่าวคือ $[n_I, \varphi_I] = i$ โดยมีตัวดำเนินการที่แสดงถึงการเปลี่ยนแปลงของอิเล็กตรอน (charge shift operator) $e^{-i\varphi_I}$ ที่แสดงถึงการเพิ่มขึ้น(หรือลดลง)ของอิเล็กตรอนหนึ่งตัวในเกาะโลหะลำดับที่ I ในการคำนวณนี้กำหนดให้ $\varphi_S = \varphi_D = 0$ และ $\hbar = 1$

พจน์ H_C ในสมการ (3.1) แสดงถึงพลังงานการเพิ่มประจุที่ใช้ในการเพิ่มอิเล็กตรอนให้เข้าไปยังเกาะโลหะ สามารถเขียนได้ดังสมการ

$$H_C = E_{CN}(n_1, n_2, \dots, n_N) \quad (3.4)$$

เมื่อพลังงานการเพิ่มประจุในสมการ (3.4) สามารถนิยามได้ตามสมการ

$$E_{CN}(n_1, n_2, \dots, n_N) = \sum_{I=1}^N E_{II}(n_I - n_{0I})^2 + 2 \sum_{I < I'}^N E_{II'}(n_I - n_{0I})(n_{I'} - n_{0I'}) \quad (3.5)$$

เมื่อ n_I เป็นอิเล็กตรอนส่วนเกินที่อยู่ในเกาะโลหะ I และ 2 เกิดจากการเขียนสัญลักษณ์อย่างง่ายของผลรวมในกรณีที $I < I'$ และ $I > I'$ มีค่าเท่ากัน ส่วนตัวแปร n_{0I} (หรือ $n_{0I'}$) เป็นประจุเหนี่ยวนำเนื่องจากขั้วเกตที่ต่อกับเกาะโลหะ โดยจำนวนประจุของเกาะโลหะที่เหนี่ยวนำจากขั้วเกตสามารถเขียนได้เป็น $en_{0I} = C_{gI} V_{gI}$ ยกตัวอย่างเช่น ในกรณีที่มีความต่างศักย์ไฟฟ้าระหว่างชั่วซอร์สและเดรนไม่เป็นศูนย์ สามารถเขียนจำนวนประจุเหนี่ยวนำของเกาะโลหะที่ 1 เป็น $en_1 = C_S V_S + C_{g1} V_{g1} + C_m V_m$ และเกาะโลหะที่ 2 เป็น $en_2 = C_m V_m + C_{g2} V_{g2} + C_D V_D$ โดยในที่นี้จะใช้ตัวแปร n_{0I} แสดงถึงแรงดันไฟฟ้าที่ให้จากขั้วเกต สัมประสิทธิ์ $E_{II'}$ เป็นสมาชิกของเมทริกซ์ E_{CN} ซึ่งสามารถเขียนเมทริกซ์ได้เป็น

$$\mathbf{E}_{CN} = \begin{pmatrix} E_{11} & E_{12} & \cdots & E_{1N} \\ E_{21} & E_{22} & \cdots & E_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ E_{N1} & \cdots & \cdots & E_{NN} \end{pmatrix} = \frac{e^2}{2} \mathbf{C}_N^{-1} \quad (3.6)$$

เมื่อ \mathbf{C}_N^{-1} เป็นอินเวอร์สเมทริกซ์ของ \mathbf{C}_N ที่สามารถแสดงได้ตามสมการ

$$\mathbf{C}_N = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & \cdots & C_{1N} \\ C_{21} & C_{22} & \cdots & C_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{N1} & C_{N2} & \cdots & C_{NN} \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

สมาชิกของเมทริกซ์ $\mathbf{C}_{II'}$ สามารถเขียนตามเงื่อนไขดังนี้

$$\mathbf{C}_{II'} = \begin{cases} -C_{I'}, & |I - I'| = 1 \\ C_{\Sigma I}, & I = I' \\ 0, & |I - I'| > 1 \end{cases} \quad (3.8)$$

เมื่อ $C_{\Sigma I}$ เป็นค่าความจุไฟฟ้ารวมของตัวเก็บประจุที่เชื่อมกับเกาะโลหะลำดับที่ I ตัวอย่างเช่น ระบบ 2 เกาะโลหะในภาพประกอบ 2.14 สามารถเขียนผลรวมของความจุไฟฟ้าที่ต่อกับเกาะโลหะที่ 1 และ 2 ได้เป็น $C_{\Sigma 1} = C_S + C_{g1} + C_M$ และ $C_{\Sigma 2} = C_M + C_{g2} + C_D$ ตามลำดับ จากเงื่อนไขในสมการ (3.8) พบว่า $\mathbf{C}_{II'} = \mathbf{C}_{I'I}$

3.2 ฟังก์ชันแบ่งส่วนในรูปของฟังก์ชันนอล

ในหัวข้อนี้มีวัตถุประสงค์ที่จะเขียนฟังก์ชันแบ่งส่วนของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรมให้อยู่ในรูปแบบของฟังก์ชันนอล โดยเริ่มจากนิยามของฟังก์ชันแบ่งส่วนของแกรนคาโนนิคอลล (grand-canonical partition function)

$$Z = \text{tr} \{ e^{-\beta H} \} \quad (3.9)$$

เมื่อฮามิลโทเนียนของระบบเป็นไปตามสมการ (3.2)–(3.4) และปริภูมิฮิลเบิร์ตเป็นผลที่ได้จากการขยายปริภูมิโดยใช้สถานะ $|n\rangle$ หรือสถานะของเฟส $|\varphi\rangle$ และปริภูมิของพอกซ์ของอนุภาคเสมือน (quasi particle) เพื่อที่จะหาผลรวมของเทรซของอนุภาคเสมือนที่เป็นไปได้ทั้งหมด โดยใช้ตัวแปร

แกรสมันน์ $\zeta_{Jk\sigma}$ และ $\theta_{Ik\sigma}$ โดยมีตัวดำเนินการ $c_{Jk\sigma}$ และตัวดำเนินการ $d_{Ik\sigma}$ ที่สอดคล้องกันตามลำดับ ตามลำดับ เพื่อความสะดวกในการอธิบาย กำหนดให้จำนวนของแกรสมันน์สำหรับสถานะของอิเล็กตรอนที่อยู่ในขั้วไฟฟ้าและในเกาะโลหะทั้งหมดเขียนแทนด้วยเวกเตอร์ $\vec{\zeta} = (\zeta_{Sk\sigma}, \zeta_{Dk\sigma})^T$ และ $\vec{\theta} = (\theta_{Ik\sigma}, \theta_{2k\sigma}, \dots, \theta_{Nk\sigma})^T$ ตามลำดับ เพื่อที่จะคำนวณเทรซของอนุภาคที่อยู่ในเกาะโลหะทั้งหมด ในวิทยานิพนธ์นี้ได้แสดงฟังก์ชันแบ่งส่วนให้อยู่ในนิยามของเฟส $\vec{\varphi} = (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N)^T$ ซึ่งสามารถเขียนฟังก์ชันแบ่งส่วนในสมการ (3.9) ใหม่ได้เป็น

$$Z = \int D\mu(\vec{\varphi}) \int D\mu(\vec{\zeta}) \int D\mu(\vec{\theta}) e^{-\vec{\zeta}^* \cdot \vec{\zeta} - \vec{\theta}^* \cdot \vec{\theta}} \langle \vec{\varphi}, \vec{\zeta}, \vec{\theta} | e^{-\beta H} | \vec{\varphi}, \vec{\zeta}, \vec{\theta} \rangle \quad (3.10)$$

เมื่อ $|\vec{\varphi}\rangle$ แสดงสถานะของเฟส $|\varphi_I\rangle$ เมื่อ $I \in \{1, 2, \dots, N\}$ นอกจากนั้น สัญลักษณ์ $|\vec{\zeta}\rangle$ และ $|\vec{\theta}\rangle$ แสดงถึงสถานะโคเฮเรนต์ของเฟอร์มิออน $|\zeta_{Jk\sigma}\rangle$ เมื่อ $J \in \{S, D\}$ และ $|\theta_{Ik\sigma}\rangle$ ตามลำดับ สัญลักษณ์ปริพันธ์โดยย่อสำหรับตัวแปรของแกรสมันน์ทั้งหมดที่เกี่ยวข้องกับสถานะที่อยู่ในขั้วไฟฟ้าและเกาะโลหะในสมการ (3.10) นิยามได้เป็น

$$\int D\mu(\vec{\zeta}) \equiv \int \prod_{Jk\sigma} d\zeta_{Jk\sigma}^* d\zeta_{Jk\sigma} \quad (3.11)$$

$$\int D\mu(\vec{\theta}) \equiv \int \prod_{Ik\sigma} d\theta_{Ik\sigma}^* d\theta_{Ik\sigma} \quad (3.12)$$

ตามลำดับ ปริพันธ์ของตัวแปรเฟส φ_I ที่มีคาบ 2π นิยามตามสมการ

$$\int D\mu(\vec{\varphi}) \equiv \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \int \prod_I d\varphi_I \quad (3.13)$$

นอกจากนั้น ได้กำหนดให้สัญลักษณ์

$$\vec{\zeta}^* \cdot \vec{\zeta} = \sum_{Jk\sigma} \zeta_{Jk\sigma}^* \cdot \zeta_{Jk\sigma} \quad (3.14)$$

$$\vec{\theta}^* \cdot \vec{\theta} = \sum_{Ik\sigma} \theta_{Ik\sigma}^* \cdot \theta_{Ik\sigma} \quad (3.15)$$

จากฟังก์ชันแบ่งส่วนในสมการ (3.10) เมื่อแทรกคุณสมบัติปิดตามสมการ [66]

$$1 = \int D\mu(\vec{\varphi}) \int D\mu(\vec{\zeta}) \int D\mu(\vec{\theta}) e^{-\vec{\zeta}^* \cdot \vec{\zeta} - \vec{\theta}^* \cdot \vec{\theta}} |\vec{\varphi}, \vec{\zeta}, \vec{\theta}\rangle \langle \vec{\varphi}, \vec{\zeta}, \vec{\theta}| \quad (3.16)$$

พิจารณากรณีที่แบ่งเวลาออกเป็นช่วง สามารถคำนวณการแผ่กระจายในช่วงเวลาสั้นๆ ได้ตามสมการ

$$\langle \vec{\varphi}_j, \vec{\zeta}_j, \vec{\theta}_j | e^{-\Delta_j H} | \vec{\varphi}_{j-1}, \vec{\zeta}_{j-1}, \vec{\theta}_{j-1} \rangle = \langle \vec{\zeta}_j, \vec{\theta}_j | e^{-\Delta_j [H_B + H_T(\varphi^{-1})]} | \vec{\zeta}_{j-1}, \vec{\theta}_{j-1} \rangle \langle \vec{\varphi}_j | e^{-\Delta_j H_C} | \vec{\varphi}_{j-1} \rangle \quad (3.17)$$

เมื่อ $\vec{\varphi}_j = (\varphi_1(\tau_j), \varphi_2(\tau_j), \dots, \varphi_N(\tau_j))^T$ และ $\vec{\varphi}_{j-1} = (\varphi_1(\tau_{j-1}), \varphi_2(\tau_{j-1}), \dots, \varphi_N(\tau_{j-1}))^T$ โดยที่สัญลักษณ์ $\vec{\zeta}_j$ และ $\vec{\theta}_j$ เป็นตัวแปรแกรสมันน์ที่เวลา τ_j ในที่นี้ $H_T(\vec{\varphi}_j)$ เป็นแฮมิลโทเนียนของการทะลุผ่านในสมการ (3.3) ที่ขึ้นอยู่กับตัวดำเนินการของตัวแปรเฟส φ_l โดยเขียนแทนด้วย $\varphi_l(\tau_j)$ จากสมการ (3.17) ที่แสดงการแผ่กระจายในช่วงเวลาสั้นๆ ของฟังก์ชันแบ่งส่วน ทำให้สามารถแบ่งการพิจารณาออกจากกัน โดยสามารถเขียนฟังก์ชันแบ่งส่วนใหม่ได้ดังสมการ

$$Z = \prod_{l=1}^N \left\{ \int_0^{2\pi} d\varphi_{l,P} \cdots \int_0^{2\pi} d\varphi_{l,0} \delta(\varphi_{l,P} - \varphi_{l,0}) \right\} \times \langle \vec{\varphi}_P | e^{-\Delta_j H_C} | \vec{\varphi}_{P-1} \rangle \cdots \langle \vec{\varphi}_1 | e^{-\Delta_j H_C} | \vec{\varphi}_0 \rangle Z_{TB}[\vec{\varphi}] \quad (3.18)$$

เมื่อ P เป็นเลขทอเดเตอร์และ $Z_{BT}[\vec{\varphi}]$ เป็นฟังก์ชันแบ่งส่วนที่อยู่ในรูปแบบของตัวแปรแกรสมันน์ ซึ่งจะแสดงรายละเอียดการคำนวณในหัวข้อ 3.4

3.3 แอคชันของคูลอมบ์

จากสมการ (3.17) เมื่อแทรกคุณสมบัติปิด [66]

$$1 = \int_0^{2\pi} d\varphi |\varphi\rangle \langle \varphi| = \sum_{n \in \mathbb{Z}} |n\rangle \langle n| \quad (3.19)$$

ลงไปในพจน์ที่สองทางขวามือของสมการ (3.17) พบว่า

$$\begin{aligned} \langle \vec{\varphi}_j | e^{-\Delta_j H_C} | \vec{\varphi}_{j-1} \rangle &= \sum_{\vec{n}} \langle \varphi_{1,j} | n_1 \rangle \cdots \langle \varphi_{N,j} | n_N \rangle e^{-\Delta_j E_{CN}(n_1, \dots, n_N)} \langle n_1 | \varphi_{1,j-1} \rangle \langle n_N | \varphi_{N,j-1} \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi)^N} \sum_{\vec{n}} e^{-\Delta_j E_{CN}(n_1, \dots, n_N) - i \sum_{l=1}^N n_l (\varphi_{l,j} - \varphi_{l,j-1})} \end{aligned} \quad (3.20)$$

เมื่อกำหนดให้ทุกค่าของ $n \in \mathbb{Z}$ และ

$$\sum_{\vec{n}} = \sum_{n_1=-\infty}^{\infty} \sum_{n_2=-\infty}^{\infty} \cdots \sum_{n_N=-\infty}^{\infty} \quad (3.21)$$

และ $\langle n_I | \varphi_{I,j} \rangle = (2\pi)^{-1/2} \exp(in_I \varphi_{I,j})$ พิจารณาผลรวมของฟังก์ชันของเลขจำนวนเต็ม ที่สามารถเขียนให้อยู่ในรูปของปริพันธ์ได้ โดยการใช้อนุกรมขัณฑ์ผลรวมของปัวซองตามสมการ [66]

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} f(n) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dn e^{-2\pi i k n} f(n) \quad (3.22)$$

สมการ (3.20) สามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$\langle \vec{\varphi}_j | e^{-\Delta_j \hat{H}_C} | \vec{\varphi}_{j-1} \rangle = \left\{ \frac{1}{(2\pi)^N} \sum_{k_{I,j}=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{n}_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{n}_N \times \exp(-i) \sum_{I=1}^N \left[\begin{array}{l} (\tilde{n}_I + n_{0I}) \times \\ (\varphi_{I,j} - \varphi_{I,j-1} + 2\pi k_{I,j}) \end{array} \right] \right\} \\ \times \exp \left[-\Delta_j (\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \dots, \tilde{n}_N) \mathbf{E}_{CN} \begin{pmatrix} \tilde{n}_1 \\ \vdots \\ \tilde{n}_N \end{pmatrix} \right] \quad (3.23)$$

เมื่อกำหนดให้ $\tilde{n}_I = (n_I - n_{0I})$ และกำหนดให้

$$\Delta \varphi_I = \frac{\varphi_{I,j} - \varphi_{I,j-1} + 2\pi k_{I,j}}{\Delta_j} \quad (3.24)$$

เพื่อความสะดวกในการคำนวณสามารถเขียนสมการ (3.23) ให้อยู่ในรูปของเมทริกซ์ได้เป็น

พหุ ประถม ชาติ ชีวะ

$$\langle \bar{\varphi}_j | e^{-\Delta_j \hat{H}_c} | \bar{\varphi}_{j-1} \rangle = \left[\frac{1}{(2\pi)^N} \sum_{k_{I,j}=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{n}_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{n}_N \times \exp(-i) \sum_{I=1}^N \left[\begin{array}{c} i \sum_{I=1}^N -\Delta_j (\tilde{n}_I) \Delta \varphi_I \\ -\lambda \quad \mathbf{n}^T \quad \mathbf{J} \end{array} \right] + \underbrace{\left[\begin{array}{c} i \sum_{I=1}^N -\Delta_j (\tilde{n}_{0I}) \Delta \varphi_I \\ \text{Const.} \end{array} \right]}_{\text{Const.}} \right] \times \exp \left[-\Delta_j (\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \dots, \tilde{n}_N) \underbrace{\begin{pmatrix} E_{11} & E_{12} & \cdots & E_{1N} \\ E_{21} & E_{22} & \cdots & E_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ E_{N1} & E_{N2} & \cdots & E_{NN} \end{pmatrix}}_{\mathbf{E}_{CN}} \underbrace{\begin{pmatrix} \tilde{n}_1 \\ \vdots \\ \tilde{n}_N \end{pmatrix}}_{\mathbf{n}} \right] \right] \quad (3.25)$$

จากการคำนวณปริพันธ์ที่อยู่ในรูปของเมทริกซ์ สามารถใช้สมการการคำนวณปริพันธ์ของเกาส์ซึ่งอยู่ในรูปของเมทริกซ์ดังสมการ [66]

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_1 \cdots dx_n}{(2\pi)^{n/2}} e^{\frac{-1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \mathbf{J}} = [\det \mathbf{A}]^{-1/2} e^{\frac{1}{2} \mathbf{J}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{J}} \quad (3.26)$$

เมื่อกำหนด λ เป็นค่าคงที่ ทำให้สามารถจัดรูปปริพันธ์ของเกาส์ใหม่ได้เป็น

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{n}_1 \cdots d\tilde{n}_N \exp[-\lambda (\mathbf{n}^T \mathbf{E}_{CN} \mathbf{n} + \mathbf{n}^T \mathbf{J})] = \left(\frac{\pi}{\lambda} \right)^{N/2} [\det \mathbf{E}_{CN}]^{-1/2} \exp \left[\left(\frac{\lambda}{4} \right) \mathbf{J}^T \mathbf{E}_{CN}^{-1} \mathbf{J} \right] \quad (3.27)$$

โดย $\mathbf{n} = \vec{n} = (\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \dots, \tilde{n}_N)^T$ และ $\mathbf{J} = (\Delta \varphi_1, \Delta \varphi_2, \dots, \Delta \varphi_N)^T$ สมการ (3.25) สามารถคำนวณได้เป็น

$$\langle \bar{\varphi}_j | e^{-\Delta_j \hat{H}_c} | \bar{\varphi}_{j-1} \rangle = \mathcal{N}_j \sum_{k_{I,j} \rightarrow -\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{-\Delta_j}{4} (\Delta \vec{\varphi}_j^T) \mathbf{E}_{CN}^{-1} (\Delta \vec{\varphi}_j) + [-i \Delta_j (\vec{n}_g^T) (\Delta \vec{\varphi}_j)] \right\} \quad (3.28)$$

โดยที่ $\vec{n}_g = (n_{01}, \dots, n_{0N})^T$ และ

$$\mathcal{N}_j = \frac{1}{(2\pi)^N} \left(\frac{\pi}{\Delta_j} \right)^{N/2} [\det \mathbf{E}_{CN}]^{-1/2} \quad (3.29)$$

พจน์ \mathcal{N}_j เป็นค่าคงที่ของการนอร์มอลไลซ์ (normalize) เพื่อความสะดวกในการเขียนแอมพลิจูดของควอลอมบ์ กำหนดให้

$$k'_{I,n} = \sum_{j=1}^n k_{I,j} \quad (3.30)$$

โดย $n=1,2,3,\dots,P$ ซึ่งจะทำได้

$$\Delta\varphi_{I,j} = \frac{(\varphi_{I,j} + 2\pi k'_{I,j}) - (\varphi_{I,j-1} + 2\pi k'_{I,j-1})}{\Delta_j} \quad (3.31)$$

และจากการกำหนดให้

$$\varphi'_{I,j} = \varphi_{I,j} + 2\pi k'_{I,j} \quad (3.32)$$

จากนิยามของสมการ (3.30) และ (3.32) พบว่า

$$\Delta\varphi_{I,j} = \frac{(\varphi_{I,j} + 2\pi k'_{I,j}) - (\varphi_{I,j-1} + 2\pi k'_{I,j-1})}{\Delta_j} = \frac{\varphi'_j - \varphi'_{j-1}}{\Delta_j} = \Delta\varphi'_{I,j} \quad (3.33)$$

ดังนั้น สมการ (3.17) สามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$Z = \left\{ \mathcal{N} \prod_{I=1}^N \left(\sum_{k'_{I,1}, \dots, k'_{I,P} = -\infty}^{\infty} \int_{2\pi k'_{I,P}}^{2\pi(k'_{I,P}+1)} d\varphi'_{I,P} \cdots \int_{2\pi k'_{I,1}}^{2\pi(k'_{I,1}+1)} d\varphi'_{I,1} \int_0^{2\pi} d\varphi'_{I,0} \delta(\varphi'_{I,P} - \varphi'_{I,0} - 2\pi k'_{I,P}) \right) \right\} Z_{BT}[\vec{\varphi}] \quad (3.34)$$

$$\times \exp \left\{ \sum_{j=1}^P \Delta_j \left[\frac{1}{4} \Delta \vec{\varphi}'_j{}^T \mathbf{E}_{CN}^{-1} \Delta \vec{\varphi}'_j - i \vec{n}_g{}^T \Delta \vec{\varphi}'_j \right] \right\}$$

โดยที่

$$\Delta \vec{\varphi}'_j = \left(\frac{(\varphi'_{1,j} - \varphi'_{1,j-1})}{\Delta_j}, \frac{(\varphi'_{2,j} - \varphi'_{2,j-1})}{\Delta_j}, \dots, \frac{(\varphi'_{N,j} - \varphi'_{N,j-1})}{\Delta_j} \right)^T \quad (3.35)$$

เมื่อพจน์นอมอลไลซ์ในสมการ (3.34) มีค่า $\mathcal{N} \equiv \prod_{j=1}^P \mathcal{N}_j$ พิจารณาในลิมิตที่ $P \rightarrow \infty$ หรือ $\Delta_j \rightarrow 0$ ผลรวมของทุกช่วงเวลาสามารถแทนด้วยผลของการหาค่าปริพันธ์ดังสมการ เพื่อความสะดวกในวิทยานิพนธ์นี้ได้ละเครื่องหมายไพรม์ (') ซึ่งจะไม่ส่งผลต่อการคำนวณปริพันธ์ ดังนั้น

$$Z = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_{\varphi_1(0)}^{\varphi_1(0)+2\pi k_1} D[\varphi_1(\tau)] \cdots \int_{\varphi_N(0)}^{\varphi_N(0)+2\pi k_N} D[\varphi_N(\tau)] e^{-S_C[\varphi(\tau)]} Z_{BT}[\vec{\varphi}] \quad (3.36)$$

เมื่อกำหนดให้ k_n ใดๆ เป็นจำนวนเต็มและ

$$\sum_{\vec{k}} = \sum_{k_1=-\infty}^{\infty} \sum_{k_2=-\infty}^{\infty} \cdots \sum_{k_N=-\infty}^{\infty} \quad (3.37)$$

โดยที่

$$\begin{aligned} & \int_{\varphi_1(0)}^{\varphi_1(0)+2\pi k_1} D[\varphi_1(\tau)] \cdots \int_{\varphi_N(0)}^{\varphi_N(0)+2\pi k_N} D[\varphi_N(\tau)] \\ &= \mathcal{N} \prod_{I=1}^N \int_{2\pi k_{I,P}}^{2\pi(k_{I,P}+1)} d\varphi_{I,P} \cdots \int_{2\pi k_{I,1}}^{2\pi(k_{I,1}+1)} d\varphi_{I,1} \int_0^{2\pi} d\varphi_{I,0} \delta(\varphi_{I,P} - \varphi_{I,0} - 2\pi k_{I,P}) \end{aligned} \quad (3.38)$$

แอกชันของคูลอมบ์ของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม สามารถนิยามได้ตามสมการ

$$S_C[\vec{\varphi}(\tau)] = \int_0^\beta d\tau \left[\frac{1}{4} \vec{\varphi}^T \mathbf{E}_{CN}^{-1} \Delta \vec{\varphi} - i(\vec{n}_g^T \cdot \vec{\varphi}) \right] \quad (3.39)$$

เมื่อ $\vec{\varphi}(\tau_j) = (\varphi_1(\tau_j), \dots, \varphi_N(\tau_j))^T$ ได้จากการพิจารณาลิมิตความต่อเนื่องของ $\Delta \vec{\varphi}_j$ สำหรับ $\Delta_j \rightarrow 0$ และ $\mathbf{E}_{CN}^{-1} = 2\mathbf{C}_N/e^2$ เพื่อความสะดวกได้นิยาม \mathbb{E}_N ดังสมการ

$$\mathbb{E}_N = \frac{\mathbf{E}_{CN}^{-1}}{4} = \frac{\mathbf{C}_N}{2e^2} \quad (3.40)$$

โดยเมทริกซ์ \mathbb{E}_N สามารถเขียนได้โดยตรงจากเมทริกซ์ \mathbf{C}_N ซึ่งขึ้นอยู่กับค่าคงที่ $1/2e^2$ ดังนั้นสมการ (3.39) สามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$S_C[\vec{\phi}(\tau)] = \int_0^\beta d\tau \left[\frac{1}{4} \vec{\phi}^T \mathbb{E}_N \vec{\phi} - i \vec{n}_g^T \cdot \vec{\phi} \right] \quad (3.41)$$

เมื่อแอดชันในสมการ (3.41) นี้ถูกเรียกว่า แอดชันของคูโอมบ์ของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม

3.4 แอดชันของการทะลุผ่าน

จากหัวข้อที่ผ่านมาได้แสดงการคำนวณฟังก์ชันแบ่งส่วนในสมการ (3.17) ในส่วนที่เกี่ยวข้องกับพลังงานการเพิ่มประจุ ในหัวข้อนี้จะคำนวณในส่วนของ $Z_{TB}(\beta)$ ซึ่งเกี่ยวข้องกับการคำนวณปริพันธ์ที่อยู่ภายใต้ตัวแปรของแกรสมันน์ โดยจะพิจารณาช่วงของเวลาในจินตภาพ Δ_j เช่นเดียวกับในหัวข้อที่ผ่านมา พบว่า ตัวแปรกระจายคลื่นในช่วงเวลาสั้นๆ ในสมการ

$$\begin{aligned} \langle \vec{\phi}_j, \vec{\zeta}_j, \vec{\theta}_j | e^{-\Delta_j H} | \vec{\phi}_{j-1}, \vec{\zeta}_{j-1}, \vec{\theta}_{j-1} \rangle &= \langle \vec{\zeta}_j, \vec{\theta}_j | e^{-\Delta_j [H_B + H_T(\phi_{j-1})]} | \vec{\zeta}_{j-1}, \vec{\theta}_{j-1} \rangle \\ &\times \langle \vec{\phi}_j | e^{-\Delta_j H_C} | \vec{\phi}_{j-1} \rangle \end{aligned} \quad (3.42)$$

เริ่มด้วยจากตัวแปรกระจายคลื่นในช่วงเวลาสั้นๆ ของเฟอร์มิออนดังสมการ

$$\langle \vec{\zeta}_j, \vec{\theta}_j | e^{-\Delta_j [H_B + H_T(\phi_{j-1})]} | \vec{\zeta}_{j-1}, \vec{\theta}_{j-1} \rangle \quad (3.43)$$

เมื่อ Δ_j หมายถึงการพิจารณาในระบบในช่วงเวลาสั้นๆ และพลังงานที่เกี่ยวข้องกับพลังงานจลน์ของอิเล็กตรอน H_B และพลังงานที่เกี่ยวข้องกับการทะลุผ่าน H_T สามารถเขียนได้ดังสมการ (3.44) และ (3.45)

$$H_{B,j,j-1} = \sum_{J=S,D} \sum_{k,\sigma} \varepsilon_{Jk\sigma} \zeta_{Jk\sigma}^* \zeta_{Jk\sigma} + \sum_{I=1}^N \sum_{k,\sigma} \varepsilon_{Ik\sigma} \theta_{Ik\sigma}^* \theta_{Ik\sigma} \quad (3.44)$$

$$H_{T,j,j-1}(\vec{\phi}_{j-1}) = \sum_{k,q,\sigma} \left(\begin{aligned} &t_{1Skq\sigma} e^{-i\phi_{1,j-1}} \theta_{1k\sigma,j}^* \zeta_{Sq\sigma,j-1} + \sum_{I=2}^N t_{I-1kq\sigma} e^{-i(\phi_{I,j-1} - \phi_{I-1,j-1})} \theta_{Ik\sigma,j} \theta_{I-1q\sigma,j-1} \\ &+ t_{DNkq\sigma} e^{-i\phi_{N,j-1}} \zeta_{Dk\sigma,j}^* \theta_{Nq\sigma,j-1} + \text{H.c.} \end{aligned} \right) \quad (3.45)$$

เมื่อ J หมายถึงซิวอร์สและเดรน และ I หมายถึงลำดับของเกาะโลหะในระบบ พิจารณาการเปลี่ยนแปลงในช่วงเวลาสั้นๆ พบว่า

$$\langle \bar{\zeta}_j, \bar{\theta}_j | e^{-\Delta_j [H_B + H_T(\varphi_j - 1)]} | \bar{\zeta}_{j-1}, \bar{\theta}_{j-1} \rangle = \langle \bar{\zeta}_j, \bar{\theta}_j | \bar{\zeta}_{j-1}, \bar{\theta}_{j-1} \rangle \exp \left\{ -\Delta_j [H_{B,j,j-1} + H_{T,j,j-1}(\varphi_j - 1)] \right\} \quad (3.46)$$

จากสมการ (3.46) เมื่อใช้คุณสมบัติของเอ็กซีโพเนนเชียล $\exp(-\bar{\zeta}_j^* \cdot \bar{\zeta}_j - \bar{\theta}_j^* \cdot \bar{\theta}_j)$ พร้อมกับแทรกคุณสมบัติปิดในสมการ (3.16) พิจารณา $\langle \bar{\zeta}_j, \bar{\theta}_j | \bar{\zeta}_{j-1}, \bar{\theta}_{j-1} \rangle = \exp(-\bar{\zeta}_j^* \cdot \bar{\zeta}_{j-1} + \bar{\theta}_j^* \cdot \bar{\theta}_{j-1})$ สามารถเขียนผลการคำนวณในแต่ละช่วงเวลา Δ_j ได้ตามสมการ

$$\exp \left\{ -\Delta_j \left[\bar{\zeta}_j^* \cdot \frac{\bar{\zeta}_j - \bar{\zeta}_{j-1}}{\Delta_j} + \bar{\theta}_j^* \cdot \frac{\bar{\theta}_j - \bar{\theta}_{j-1}}{\Delta_j} + H_{B,j,j-1} + H_{T,j,j-1}(\bar{\varphi}_{j-1}) \right] \right\} \quad (3.47)$$

เมื่อพิจารณากรณีที่มีความต่อเนื่อง แพคเตอร์ดังกล่าวและการคำนวณปริพันธ์ของจำนวนของแกรสมันน์ $\bar{\zeta}_j$ และ $\bar{\theta}_j$ จะถูกรวมเข้ากับการคำนวณปริพันธ์ตามวิถี กล่าวคือ

$$Z_{BT}[\bar{\varphi}] = \int D\mu[\bar{\zeta}] \int D\mu[\bar{\theta}] e^{-S_{BT}[\bar{\zeta}, \bar{\theta}, \bar{\varphi}]} \quad (3.48)$$

เมื่อ

$$S_{BT}[\bar{\zeta}, \bar{\theta}, \bar{\varphi}] = S_{\text{lead}}[\bar{\zeta}] + S_{\text{isl}}[\bar{\theta}] + S_T[\bar{\zeta}, \bar{\theta}, \bar{\varphi}] \quad (3.49)$$

เมื่อแอกชันของอิเล็กตรอนที่ในขั้วไฟฟ้า เกาะโลหะ และพจน์ของการทะลุผ่านสามารถเขียนได้ตามสมการ (3.50)–(3.52) ตามลำดับ

$$S_{\text{lead}}[\bar{\zeta}] = \int_0^\beta d\tau \sum_{Jk\sigma} [\zeta_{Jk\sigma}^*(\tau) (\partial_\tau - \mu + \varepsilon_{Jk\sigma}) \zeta_{Jk\sigma}(\tau)] \quad (3.50)$$

$$S_{\text{isl}}[\bar{\theta}] = \int_0^\beta d\tau \sum_{Iq\sigma} [\theta_{Iq\sigma}^*(\tau) (\partial_\tau - \mu + \varepsilon_{Iq\sigma}) \theta_{Iq\sigma}(\tau)] \quad (3.51)$$

$$S_T[\bar{\zeta}, \bar{\theta}, \bar{\varphi}] = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{kq\sigma} t_{1Skq\sigma} e^{-i\varphi_1} \theta_{1k\sigma}^* \zeta_{Sq\sigma} + \sum_{l=1}^N \sum_{kq\sigma} t_{l-1kq\sigma} e^{-i(\varphi_{l-1} - \varphi_l)} \theta_{lk\sigma}^* \theta_{l-1q\sigma} + \sum_{kq\sigma} t_{DNkq\sigma} e^{-i\varphi_N} \zeta_{Dk\sigma}^* \theta_{Nq\sigma} + \text{H.c.} \right] \quad (3.52)$$

เมื่อ $\partial_\tau = (\bar{x}_j - \bar{x}_{j-1})/\Delta_j$ สำหรับตัวแปรใดๆ เพื่อความสะดวก ในที่นี้ได้เขียนแอดชันให้อยู่ในรูปอย่างง่าย ตามนิยาม

$$S_{\text{lead}}[\zeta] \equiv \sum_{J=S,D} [\zeta_J^* g_J \zeta_J] \quad (3.53)$$

$$S_{\text{isl}}[\vec{\theta}] \equiv \sum_{I=1}^N \theta_I^* G_I \theta_I \quad (3.54)$$

$$S_T[\vec{\zeta}, \vec{\theta}, \vec{\varphi}] \equiv \theta_1^* \Lambda_{1S}^* \zeta_S + \sum_{I=2}^N \theta_I^* \Lambda_{II-1}^* \theta_{I-1} + \zeta_{Dk\sigma}^* \Lambda_{DN}^* \theta_{Nq\sigma} + \text{H.c.} \quad (3.55)$$

โดยกำหนดให้

$$\begin{aligned} \Lambda_{1S} &\equiv t_{1Skq\sigma} e^{-i\varphi_1} \\ \Lambda_{II-1} &\equiv t_{II-1kq\sigma} e^{-i(\varphi_{I-1} - \varphi_I)} \\ \Lambda_{DN} &\equiv t_{DNkq\sigma} e^{-i\varphi_N} \end{aligned} \quad (3.56)$$

และ Λ^* ใดๆ เป็นสังยุคเชิงซ้อน (complex conjugate) ของ Λ ในสมการ (3.56) นำผลที่ได้จากสมการ (3.48) แทนลงในฟังก์ชันแบ่งส่วนของระบบดังสมการ

$$\begin{aligned} Z[\vec{\zeta}, \vec{\theta}, \vec{\varphi}] &= \sum_{\vec{k}} \int_{\varphi_1(0)}^{\varphi_1(0)+2\pi k_1} D[\varphi_1(\tau)] \int_{\varphi_2(0)}^{\varphi_2(0)+2\pi k_2} D[\varphi_2(\tau)] \cdots \int_{\varphi_N(0)}^{\varphi_N(0)+2\pi k_N} D[\varphi_N(\tau)] \\ &\times \int D\mu[\vec{\zeta}] \int D\mu[\vec{\theta}] e^{-S[\vec{\zeta}, \vec{\theta}, \vec{\varphi}]} \end{aligned} \quad (3.57)$$

เมื่อ

$$S[\vec{\zeta}, \vec{\theta}, \vec{\varphi}] = S_C[\vec{\varphi}] + S_{BT}[\vec{\zeta}, \vec{\theta}, \vec{\varphi}] \quad (3.58)$$

โดยเวกเตอร์ $\vec{\zeta}_J = (\dots, \zeta_{Jk\sigma}, \dots)^T$ และ $\vec{\theta}_I = (\dots, \theta_{Ik\sigma}, \dots)^T$ จากสมการ (3.49)–(3.52) สามารถเขียนแอดชันที่เกี่ยวข้องกับพลังงานจลน์และการทะลุผ่านได้ดังสมการ

$$S_{BT}[\vec{\zeta}, \vec{\theta}, \vec{\varphi}] = S_{\text{lead}}[\vec{\zeta}] + S_{\text{isl}}[\vec{\theta}] + \int_0^\beta d\tau \{ \theta_1^* \Lambda_{1S}(\varphi) \vec{\zeta}_S + \sum_{I=2}^N \theta_I^* \Lambda_{I-1}(\varphi) \theta_{I-1} + \zeta_D^* \Lambda_{DN}(\varphi) \theta_N + \text{H.c.} \} \quad (3.59)$$

3.3.1 การคำนวณปริพันธ์สำหรับตัวแปรแกรสมันน์ (Integration over Grassmann fields)

พิจารณากรีนฟังก์ชัน (Green's function) ของอิเล็กตรอนที่อยู่ในขั้วไฟฟ้าสามารถกำหนดโดย

$$(\partial_\tau - \mu + \varepsilon_{Jk\sigma}) g_{Jk\sigma}(\tau, \tau') = \delta(\tau - \tau') \quad (3.60)$$

และคุณสมบัติ

$$g_{Jk\sigma}(0, \tau') = -g_{Jk\sigma}(\beta, \tau') \quad (3.61)$$

เมื่อ μ แสดงถึงศักย์เคมีของขั้วไฟฟ้า J สำหรับ $J \in \{S, D\}$ ในทำนองเดียวกัน สำหรับกรีนฟังก์ชันของอิเล็กตรอนที่อยู่ในเกาะโลหะ พบว่า

$$(\partial_\tau - \mu + \varepsilon_{Iq\sigma}) G_{Iq\sigma}(\tau, \tau') = \delta(\tau - \tau') \quad (3.62)$$

และ

$$G_{Iq\sigma}(0, \tau') = -G_{Iq\sigma}(\beta, \tau') \quad (3.63)$$

เมื่อ μ แสดงถึงศักย์เคมีของเกาะโลหะ I สำหรับ $I \in \{1, 2, \dots, N\}$ และผลเฉลยของสมการเชิงอนุพันธ์ไม่เอกพันธ์ (inhomogeneous differential equation) ในสมการ (3.62) โดยมีเงื่อนไขขอบเขตเป็นไปตามสมการ (3.63) เขียนได้ดังสมการ

$$G_{Iq\sigma}(\tau, \tau') = \begin{cases} \frac{\exp[-\varepsilon_{Iq\sigma}(\tau - \tau')]}{1 + \exp(-\beta\varepsilon_{Iq\sigma})} & ; \quad \tau > \tau' \\ -\frac{\exp[-\varepsilon_{Iq\sigma}(\tau - \tau')]}{1 + \exp(-\beta\varepsilon_{Iq\sigma})} & ; \quad \tau < \tau' \end{cases} \quad (3.64)$$

ในทำนองเดียวกันสำหรับ $g_{Jk\sigma}(\tau, \tau')$ สามารถเขียนผลเฉลยได้เป็น

$$g_{Jk\sigma}(\tau, \tau') = \begin{cases} \frac{\exp[-\varepsilon_{Jk\sigma}(\tau - \tau')]}{1 + \exp(-\beta\varepsilon_{Jk\sigma})} & ; \quad \tau > \tau' \\ \frac{\exp[-\varepsilon_{Jk\sigma}(\tau - \tau')]}{1 + \exp(-\beta\varepsilon_{Jk\sigma})} & ; \quad \tau < \tau' \end{cases} \quad (3.65)$$

แอดชันในสมการ (3.58) เป็นสมการกำลังสองในพีชคณิตของแกรสมันน์ ซึ่งตัวแปร ζ และ $\bar{\theta}$ สามารถเขียนให้อยู่ในรูปอย่างง่ายในสมการ (3.59) ดังนั้น การคำนวณปริพันธ์ตามวิธีดังกล่าวจะอยู่ในรูปแบบของการคำนวณปริพันธ์ของเกาส์เซียนและสามารถหาคำตอบแบบแม่นยำได้ โดยจะเริ่มด้วยการคำนวณปริพันธ์สำหรับเฟอร์มิออนที่อยู่ในชั่วออร์สและเดรน จากสมการ (3.57) ทำการคำนวณปริพันธ์เฉพาะที่ขึ้นกับ ζ_s โดยใช้คุณสมบัติในสมการ (2.108) พบว่า

$$\begin{aligned} \int D\mu[\zeta_s] e^{-S_T[\Lambda, \bar{\theta}]} &= \int D\mu[\zeta_s] e^{-(\zeta_s g_s^{-1} \zeta_s + \theta_1^* \Lambda_{1s}^* \zeta_s + \zeta_s^* \Lambda_{1s} \theta_1)} \\ &= \int D\mu[\zeta_s] e^{-\zeta_s g_s^{-1} \zeta_s - \theta_1^* \Lambda_{1s}^* \zeta_s - \zeta_s^* \Lambda_{1s} \theta_1} \\ &= \det(g_s^{-1}) e^{(-\theta_1^* \Lambda_{1s}^*) g_s (-\Lambda_{1s} \theta_1)} \\ &= \det(g_s^{-1}) e^{\theta_1^* \Lambda_{1s}^* g_s \Lambda_{1s} \theta_1} \\ &= Z_s e^{\theta_1^* \Lambda_{1s}^* g_s \Lambda_{1s} \theta_1} \end{aligned} \quad (3.66)$$

เมื่อ $\det(g_s^{-1}) = Z_s$ ต่อจากนั้น ค่าคำนวณปริพันธ์ที่พิจารณาตัวแปร θ_1 และใช้คุณสมบัติของดีเทอร์มิแนนต์

$$\det(AB) = \det A + \det B. \quad (3.67)$$

พบว่า

$$\begin{aligned} \int D\mu[\theta_1] e^{-S_T[\Lambda, \bar{\theta}]} &= \int D\mu[\theta_1] e^{-(\theta_1^* \tilde{G}_1^{-1} \theta_1 + \theta_2^* \Lambda_{21}^* \theta_1 + \theta_1^* \Lambda_{21} \theta_2) + \theta_1^* \Lambda_{1s}^* g_s \Lambda_{1s} \theta_1} \\ &= \int D\mu[\theta_1] e^{-\theta_1^* \tilde{G}_1^{-1} \theta_1 - \theta_2^* \Lambda_{21}^* \theta_1 - \theta_1^* \Lambda_{21} \theta_2} \\ &= \det(\tilde{G}_1^{-1}) e^{\theta_2^* \Lambda_{21}^* \tilde{G}_1 \Lambda_{21} \theta_2} \\ &= \det(G_1^{-1} - \Lambda_{1s}^* g_s \Lambda_{1s}) e^{\theta_2^* \Lambda_{21}^* \tilde{G}_1 \Lambda_{21} \theta_2} \\ &= \det(G_1^{-1}) (1 - G_1 \Lambda_{1s}^* g_s \Lambda_{1s}) e^{\theta_2^* \Lambda_{21}^* \tilde{G}_1 \Lambda_{21} \theta_2} \\ &= Z_1 \det(1 - G_1 \Lambda_{1s}^* g_s \Lambda_{1s}) e^{\theta_2^* \Lambda_{21}^* \tilde{G}_1 \Lambda_{21} \theta_2} \end{aligned} \quad (3.68)$$

เมื่อ $\tilde{G}_1^{-1} = G_1^{-1} - \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S}$ และ $\det(G_1^{-1}) = Z_1$ ต่อไปคำนวณปริพันธ์เมื่อพิจารณาตัวแปร θ_2

$$\begin{aligned} \int D\mu[\theta_2] e^{-S_T[\Lambda, \vec{\theta}]} &= \int D\mu[\theta_2] e^{-(\theta_2^* \tilde{G}_2^{-1} \theta_2 + \theta_3^* \Lambda_{32}^* \theta_2 + \theta_2^* \Lambda_{32} \theta_3) + \theta_2^* \Lambda_{21}^* \tilde{G}_1 \Lambda_{21} \theta_2} \\ &= \int D\mu[\theta_2] e^{-\theta_2^* \tilde{G}_2^{-1} \theta_2 - \theta_3^* \Lambda_{32}^* \theta_2 - \theta_2^* \Lambda_{32} \theta_3} \\ &= \det(\tilde{G}_2^{-1}) e^{\theta_3^* \Lambda_{32}^* \tilde{G}_2 \Lambda_{32} \theta_3} \\ &= Z_2 \det(1 - G_2 \Lambda_{21}^* \tilde{G}_1 \Lambda_{21}) e^{\theta_3^* \Lambda_{32}^* \tilde{G}_2 \Lambda_{32} \theta_3} \end{aligned} \quad (3.69)$$

เมื่อ $\tilde{G}_2^{-1} = G_2^{-1} - \Lambda_{21}^* \tilde{G}_1 \Lambda_{21}$ และ $\det(G_2^{-1}) = Z_2$ ในทำนองเดียวกันเมื่อทำการคำนวณปริพันธ์เมื่อพิจารณาตัวแปร $\theta \in (\theta_3, \theta_4, \dots, \theta_N)$ และ ζ_D พบว่า

$$\begin{aligned} \int D\mu[\theta_3] e^{-S_T[\Lambda, \vec{\theta}]} &= Z_3 \det(1 - G_3 \Lambda_{32}^* \tilde{G}_2 \Lambda_{32}) e^{\theta_3^* \Lambda_{32}^* \tilde{G}_2 \Lambda_{32} \theta_3} \\ \int D\mu[\theta_N] e^{-S_T[\Lambda, \vec{\theta}]} &= Z_N \det(1 - G_N \Lambda_{NN-1}^* \tilde{G}_{N-1} \Lambda_{NN-1}) e^{\theta_N^* \Lambda_{NN-1}^* \tilde{G}_{N-1} \Lambda_{NN-1} \theta_{N-1}} \\ \int D\mu[\zeta_D] e^{-S_T[\Lambda, \vec{\theta}]} &= Z_D \det(1 - g_D \Lambda_{DN}^* \tilde{G}_N \Lambda_{DN}) \end{aligned} \quad (3.70)$$

เมื่อ $\tilde{G}_N^{-1} = G_N^{-1} - \Lambda_{NN-1}^* \tilde{G}_{N-1} \Lambda_{NN-1}$ และ $\det(G_N^{-1}) = Z_N$ จากผลการคำนวณปริพันธ์ข้างต้นสามารถเขียนฟังก์ชันแบ่งส่วนใหม่ได้ดังสมการ

$$\begin{aligned} Z_{BT}[\vec{\zeta}, \vec{\theta}, \vec{\varphi}] &= Z_S Z_1 \det(1 - G_1 \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S}) \\ &\quad \times Z_2 \det(1 - G_2 \Lambda_{21}^* \tilde{G}_1 \Lambda_{21}) \cdots \\ &\quad \times Z_N \det(1 - G_N \Lambda_{NN-1}^* \tilde{G}_{N-1} \Lambda_{NN-1}) \\ &\quad \times Z_D \det(1 - g_D \Lambda_{DN}^* \tilde{G}_N \Lambda_{DN}) \end{aligned} \quad (3.71)$$

จากผลการคำนวณข้างต้น ในการคำนวณหาค่าของ \tilde{G}_N ใดๆ ให้เริ่มจากการคำนวณค่า \tilde{G}_1 จากนั้น

$$\begin{aligned} \tilde{G}_1^{-1} &= G_1^{-1} - \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S} \\ &= G_1^{-1} - (G_1^{-1} G_1) \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S} \\ &= G_1^{-1} (1 - G_1 \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S}) \end{aligned} \quad (3.72)$$

ซึ่งได้จากการคูณเอกลักษณ์เมทริกซ์ $(G_1^{-1} G_1) = I$ เข้าไปในสมการ (3.72) จากนั้นใช้คุณสมบัติอินเวอร์สเมทริกซ์ตามสมการ

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1} \quad (3.73)$$

จากคุณสมบัติข้างต้น พบว่า สมการ (3.72) สามารถเขียนใหม่ได้เป็น

$$\tilde{G}_1 = (1 - G_1 \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S})^{-1} G_1 \quad (3.74)$$

พิจารณาคูณสมบัติของฟังก์ชัน

$$\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \quad (3.75)$$

เมื่อ $-1 < x < 1$ และในกรณีของเกาะโลหะ พบว่า $M = \sum_{\sigma} 1$ มีค่ามากๆ ทำให้สามารถละทิ้งพจน์ที่เลขยกกำลัง $n \geq 2$ ไปได้ ซึ่งการประมาณนี้ถูกเรียกว่า การประมาณเมื่อจำนวน M มีค่ามาก (large channel number approximation) [67], [68] โดยรายละเอียดจะแสดงอีกครั้งในลำดับถัดไป ดังนั้น สามารถเขียนสมการ (3.74) ใหม่ได้เป็น

$$\begin{aligned} \tilde{G}_1 &= (1 - G_1 \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S})^{-1} G_1 \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (G_1 \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S})^n G_1 \\ &\approx (1 + G_1 \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S}) G_1 \end{aligned} \quad (3.76)$$

โดยที่ เมื่อ $n \geq 2$ กำหนดให้

$$(\Lambda_{II}^* \Lambda_{II})^n \approx 0 \quad (3.77)$$

จากนั้น พิจารณาการคำนวณค่าของ \tilde{G}_2 จากนิยาม

$$\begin{aligned} \tilde{G}_2^{-1} &= G_2^{-1} + \Lambda_{21}^* \tilde{G}_1 \Lambda_{21} \\ &= G_2^{-1} + (G_2^{-1} G_2) \Lambda_{21}^* \tilde{G}_1 \Lambda_{21} \\ &= G_2^{-1} (1 + G_2 \Lambda_{21}^* \tilde{G}_1 \Lambda_{21}) \end{aligned} \quad (3.78)$$

แล้วใช้คุณสมบัติอินเวอร์สเมทริกซ์ พบว่า

$$\tilde{G}_2 = (1 + G_2 \Lambda_{21}^* \tilde{G}_1 \Lambda_{21})^{-1} G_2 \quad (3.79)$$

จากสมการ (3.79) แทนค่า \tilde{G}_1 ในสมการ (3.76) พบว่า

$$\begin{aligned}
\tilde{G}_2 &= (1 + G_2 \Lambda_{21}^* (1 + G_1 \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S}) G_1 \Lambda_{21})^{-1} G_2 \\
&= (1 + G_2 \Lambda_{21}^* G_1 \Lambda_{21} + G_2 \Lambda_{21}^* G_1 \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S} G_1 \Lambda_{21})^{-1} G_2 \\
&= (1 + G_2 \Lambda_{21}^* G_1 \Lambda_{21})^{-1} G_2
\end{aligned} \tag{3.80}$$

ในทำนองเดียวกันทำการคำนวณหาค่า \tilde{G}_N เมื่อ $N \in (3, 4, \dots, n)$ พบว่า

$$\tilde{G}_N = (1 + G_N \Lambda_{NN-1}^* G_{N-1} \Lambda_{NN-1})^{-1} G_N \tag{3.81}$$

จากการคำนวณข้างต้นสามารถเขียนฟังก์ชันแบ่งส่วนในสมการ (3.71) ใหม่ ได้ดังสมการ

$$\begin{aligned}
Z_{BT} [\vec{\zeta}, \vec{\theta}, \vec{\varphi}] &= Z_{\text{lead}} Z_{\text{isl}} \det(1 - G_1 \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S}) \det(1 - g_D \Lambda_{DN}^* \tilde{G}_N \Lambda_{DN}) \\
&\quad \times \prod_{I=2}^N \det(1 - G_I \Lambda_{II-1}^* \tilde{G}_{I-1} \Lambda_{II-1})
\end{aligned} \tag{3.82}$$

จากคุณสมบัติของเอกซ์โพเนนเชียล

$$\det A = e^{\text{tr}\{\ln A\}} \tag{3.83}$$

สามารถเขียนสมการ (3.82) ได้ใหม่ ดังสมการ

$$Z_{BT} [\vec{\zeta}, \vec{\theta}, \vec{\varphi}] = Z_{\text{lead}} Z_{\text{isl}} e^{\text{tr}\{\ln(1 - G_1 \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S})\}} e^{\text{tr}\{\ln(1 - g_D \Lambda_{DN}^* \tilde{G}_N \Lambda_{DN})\}} e^{\sum_{I=2}^N \text{tr}\{\ln(1 - G_I \Lambda_{II-1}^* \tilde{G}_{I-1} \Lambda_{II-1})\}} \tag{3.84}$$

ดังนั้น ฟังก์ชันแบ่งส่วนของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรมในสมการ (3.84) สามารถลดรูปได้เป็น

$$Z [\vec{\zeta}, \vec{\theta}, \vec{\varphi}] = Z_{\text{lead}} Z_{\text{isl}} \int D\varphi e^{-S_{\text{eff}}[\varphi]} \tag{3.85}$$

เมื่อ S_{eff} หมายถึงแอคชันยังผลของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อกันแบบอนุกรม โดย

$$S_{\text{eff}} [\varphi] = S_C [\varphi] + S_T [\varphi, \Lambda] \tag{3.86}$$

เมื่อแอคชันของคูลอมบ์เป็นไปตามสมการ (3.41) และแอคชันของการทะลุผ่านเขียนได้ดังสมการ

$$S_T[\vec{\varphi}, \Lambda] = -tr \left\{ \ln(1 - G_1 \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S}) \right\} - tr \left\{ \ln(1 - g_D \Lambda_{DN}^* \tilde{G}_N \Lambda_{DN}) \right\} \\ - \sum_{I=2}^N tr \left\{ \ln(1 - G_I \Lambda_{II-1}^* \tilde{G}_{I-1} \Lambda_{II-1}) \right\} \quad (3.87)$$

เพื่อคำนวณค่า $S_T[\vec{\varphi}, \Lambda]$ ในสมการ (3.87) ให้พิจารณาคูณสมบัติของลอกกาลิทึม

$$\ln(1-x)^{-1} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^n}{n} \quad (3.88)$$

โดยเริ่มจากพจน์ที่ 1 ในสมการ (3.87) ใช้คุณสมบัติของลอกกาลิทึมในสมการ (3.88) พบว่า

$$-tr \left\{ \ln(1 - G_1 \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S}) \right\} = tr \left\{ \ln(1 - G_1 \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S})^{-1} \right\} \\ = tr \left\{ \frac{G_1 \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S}}{1} + \frac{(G_1 \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S})^2}{2} + \dots \right\} \quad (3.89)$$

จากคุณสมบัติในสมการ (3.77) ทำให้สามารถประมาณลอกกาลิทึมได้เป็น

$$\ln(1-x)^{-1} \approx x \quad (3.90)$$

ทำให้สามารถเขียนสมการ (3.89) ใหม่ได้เป็น

$$-tr \left\{ \ln(1 - G_1 \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S}) \right\} \approx tr \left\{ G_1 \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S} \right\} \quad (3.91)$$

จากการประมาณในทำนองเดียวกัน สมการ (3.87) ทำให้สามารถเขียนสมการใหม่ได้เป็น

$$S_T[\vec{\varphi}, \Lambda] = tr \left\{ G_1 \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S} \right\} + tr \left\{ g_D \Lambda_{DN}^* \tilde{G}_N \Lambda_{DN} \right\} + \sum_{I=2}^N tr \left\{ G_I \Lambda_{II-1}^* \tilde{G}_{I-1} \Lambda_{II-1} \right\} \\ = tr \left\{ G_1 \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S} + g_D \Lambda_{DN}^* \tilde{G}_N \Lambda_{DN} + \sum_{I=2}^N (G_I \Lambda_{II-1}^* \tilde{G}_{I-1} \Lambda_{II-1}) \right\} \quad (3.92)$$

โดยใช้คุณสมบัติ

$$tr \{ A + B \} = tr \{ A \} + tr \{ B \} \quad (3.93)$$

กำหนดให้

$$\begin{aligned}\Lambda_{1S} &= t_{1S} e^{-i(\varphi_1 - \varphi_S)} \\ \Lambda_{II-1} &= t_{II-1} e^{-i(\varphi_I - \varphi_{I-1})} \\ \Lambda_{DN} &= t_{DN} e^{i(\varphi_N - \varphi_D)}\end{aligned}\quad (3.94)$$

แทนค่าตัวแปรที่อยู่ในพจน์ที่ 1 ในสมการ (3.92)

$$\begin{aligned}tr\{G_1 \Lambda_{1S}^* g_S \Lambda_{1S}\} &= tr\left\{\int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_{jkq\sigma} \sum_{j'k'q'\sigma'} G_1(\tau, \tau') \delta_{kk'} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} \lambda_{1S}^* t_{1S}^* \right. \\ &\quad \left. \times g_S(\tau, \tau') \delta_{kk'} \delta_{jj'} \delta_{\sigma\sigma'} \lambda_{1S} t_{1S}\right\} \\ &= \sum_{jkq\sigma} \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' G_1(\tau, \tau') \lambda_{1S}^* t_{1S}^* g_S(\tau, \tau') \lambda_{1S} t_{1S} \\ &= \sum_{jkq\sigma} \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' G_1(\tau, \tau') e^{-i(\varphi_1 - \varphi_S)} t_{1S}^* g_S(\tau, \tau') e^{i(\varphi_1 - \varphi_S)} t_{1S} \\ &= \sum_{jkq\sigma} \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' |t_{1S}|^2 G_1(\tau, \tau') g_S(\tau, \tau')\end{aligned}\quad (3.95)$$

เมื่อ

$$\begin{aligned}\lambda_{1S} &= e^{i(\varphi_1 - \varphi_S)} \\ \lambda_{II-1} &= e^{i(\varphi_I - \varphi_{I-1})} \\ \lambda_{DN} &= e^{-i(\varphi_N - \varphi_D)}\end{aligned}\quad (3.96)$$

กำหนดให้

$$\alpha_{1S}(\tau, \tau') = \sum_{kq\sigma} |t_{1S}|^2 G_1(\tau, \tau') g_S(\tau, \tau') \quad (3.97)$$

จากการนิยามในทำนองเดียวกัน สามารถเขียนสมการ (3.92) ใหม่ได้ดังสมการ

$$S_T[\varphi] = \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \left(\alpha_{1S}(\tau, \tau') + \alpha_{DN}(\tau, \tau') + \sum_{I=2}^N \alpha_{II-1}(\tau, \tau') \right) \quad (3.98)$$

เมื่อ

$$\begin{aligned}\alpha_{DN}(\tau, \tau') &= \sum_{jkq\sigma} |t_{DN}|^2 G_N(\tau, \tau') g_D(\tau, \tau') \\ \alpha_{II-1}(\tau, \tau') &= \sum_{jkq\sigma} |t_{DN}|^2 G_I(\tau, \tau') G_{I-1}(\tau, \tau')\end{aligned}\quad (3.99)$$

เมื่อแทนค่ากรีนฟังก์ชันในสมการ (3.60)–(3.65) ลงในสมการ (3.97)–(3.99) พบว่า

$$\begin{aligned}\alpha_{1S}(\tau, \tau') &= -|t_{1S}|^2 N^{1S} \rho \rho' \left(\frac{\pi^2}{\beta^2 \sin^2 \left(\frac{\pi}{\beta} (\tau - \tau') \right)} \right) \\ \alpha_{DN}(\tau, \tau') &= -|t_{DN}|^2 N^{DN} \rho \rho' \left(\frac{\pi^2}{\beta^2 \sin^2 \left(\frac{\pi}{\beta} (\tau - \tau') \right)} \right) \\ \alpha_{II-1}(\tau, \tau') &= -\sum_{I=2}^N \left[|t_{1S}|^2 N^{I-II} \rho \rho' \left(\frac{\pi^2}{\beta^2 \sin^2 \left(\frac{\pi}{\beta} (\tau - \tau') \right)} \right) \right]\end{aligned}\quad (3.100)$$

ค่าสัมประสิทธิ์สามารถเขียนให้อยู่ในพจน์ของความนำของการทะลุผ่านที่ไม่มีหน่วยของรอยต่อ j ใดๆ เป็นไปตามนิยาม

$$g_j = \frac{2\pi}{e^2} G_j = 4\pi^2 |t_j|^2 N \rho \rho' \quad (3.101)$$

โดยที่ $h=1$ พบว่า

$$\alpha_{jj'}(\tau) = -\frac{g_{jj'}}{4\pi^2} \left(\frac{\pi^2}{\beta^2 \sin^2 \left(\frac{\pi}{\beta} (\tau - \tau') \right)} \right) \equiv -g_{jj'} \alpha(\tau - \tau') \quad (3.102)$$

จากนิยามในสมการ (3.101) สามารถอธิบายการประมาณที่จำนวน M มีค่ามากได้อีกลักษณะหนึ่งว่า เมื่อพิจารณาที่ $n=1$ พบว่า g_j แปรผันตรงกับ $M |t_j|^2$ ทำให้เมื่อ $n=2$ แล้ว $M |t_j|^4$ จะแปร

ผันตรงกับ g^2/M ดังนั้น พจน์ที่ $n=2$ จึงสามารถละทิ้งได้เมื่อ M มีค่ามากๆ ซึ่งเป็นจริงเสมอในกรณีของเกาะโลหะและเมื่อเลขยกกำลัง $n \geq 2$ นั้นเอง

ดังนั้น แอคชันของการทะลุผ่านของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อกันแบบอนุกรมเป็นไปตามสมการ

$$S_T[\vec{\phi}] = -\int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \alpha(\tau - \tau') \left(g_{1S} \lambda_{1S}^* \lambda_{1S} + \sum_{I=2}^N g_{II-1} \lambda_{II-1}^* \lambda_{II-1} + g_{DN} \lambda_{DN}^* \lambda_{DN} \right) \quad (3.103)$$

เมื่อแทนค่า $\lambda_{jj'}$ และ $\lambda_{jj'}^*$ ในสมการ (3.96) ลงในพจน์ที่ 1 ทางซ้ายมือของสมการ (3.103) พบว่า

$$\begin{aligned} g_{1S} \lambda_{1S}^* \lambda_{1S} &= g_{1S} e^{i(\varphi_1(\tau) - \varphi_1(\tau'))} e^{-i(\varphi_1(\tau') - \varphi_1(\tau))} \\ &= g_{1S} e^{i(\varphi_1(\tau) - \varphi_1(\tau'))} \end{aligned} \quad (3.104)$$

เมื่อพิจารณาสมการ (3.104) จากสูตรของออยเลอร์ (Euler's formula) พบว่า

$$\begin{aligned} g_{1S} \lambda_{1S}^* \lambda_{1S} &= g_{1S} e^{i(\varphi_1(\tau) - \varphi_1(\tau'))} \\ &= g_{1S} \left(\cos(\varphi_1(\tau) - \varphi_1(\tau')) - i \sin(\varphi_1(\tau) - \varphi_1(\tau')) \right) \end{aligned} \quad (3.105)$$

เมื่อแทนสมการ (3.105) เข้าไปในสมการ (3.103) แล้วทำการคำนวณปริพันธ์ พบว่า

$$\begin{aligned} \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \alpha(\tau - \tau') g_{1S} \left(\cos(\varphi_1(\tau) - \varphi_1(\tau')) - i \sin(\varphi_1(\tau) - \varphi_1(\tau')) \right) \\ = \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \alpha(\tau - \tau') g_{1S} \cos(\varphi_1(\tau) - \varphi_1(\tau')) \end{aligned} \quad (3.106)$$

ส่วนของพจน์จินตภาพในสมการมีค่าเท่ากับศูนย์ เนื่องจากคุณสมบัติของฟังก์ชันคี่ จากการคำนวณในทำนองดังกล่าว สามารถเขียนแอคชันของการทะลุผ่านยังผลได้ดังสมการ

$$S_T[\vec{\varphi}] = -\int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \alpha(\tau - \tau') \left\{ g_{1S} \cos(\varphi_1(\tau) - \varphi_1(\tau')) + g_{DN} \cos(\varphi_N(\tau) - \varphi_N(\tau')) \right. \\ \left. + \sum_{I=2}^n g_{II-1} (\cos(\varphi_I(\tau) - \varphi_I(\tau')) - \cos(\varphi_{I-1}(\tau) - \varphi_{I-1}(\tau'))) \right\} \quad (3.107)$$

จากที่กล่าวมาข้างต้นสามารถสรุปได้ว่า แอคชันยังผลของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม เป็นไปตามสมการ

$$S_{\text{eff}}[\vec{\varphi}] = \int_0^\beta d\tau \left[\frac{1}{4} \dot{\vec{\varphi}}^T \mathbb{E}_N \dot{\vec{\varphi}} - i \vec{n}_g^T \cdot \dot{\vec{\varphi}} \right] \\ - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \alpha(\tau - \tau') \left\{ g_{1S} \cos(\varphi_1(\tau) - \varphi_1(\tau')) + g_{DN} \cos(\varphi_N(\tau) - \varphi_N(\tau')) \right. \\ \left. + \sum_{I=2}^n g_{II-1} (\cos(\varphi_I(\tau) - \varphi_I(\tau')) - \cos(\varphi_{I-1}(\tau) - \varphi_{I-1}(\tau'))) \right\} \quad (3.108)$$

จากผลการคำนวณพบว่า ฟังก์ชันแบ่งส่วนที่แสดงในปริพันธ์ตามวิถีไม่อยู่ในรูปแบบการคำนวณปริพันธ์ของเกาส์ ทำให้ไม่สามารถหาคำตอบแบบแม่นยำได้ อย่างไรก็ตาม เมื่อทุกเส้นทางที่เป็นไปได้ที่ถูกเขียนอยู่ในเส้นทางในเวลาจินตภาพนั้น ทำให้สามารถเขียนความน่าจะเป็นของกลศาสตร์ควอนตัมให้เป็นเมทริกซ์ของความหนาแน่นเชิงสถิติควอนตัม [39] ซึ่งทำให้สามารถใช้วิธีควอนตัมมอนติคาร์โลในการคำนวณปริมาณดังกล่าวได้ ซึ่งจะได้กล่าวในหัวข้อต่อไป

3.5. การเปลี่ยนตัวแปรสำหรับกับวิธีมอนติคาร์โล

3.5.1 พลังงานที่ไม่มีหน่วย

เพื่อความสะดวกในการคำนวณด้วยวิธีเชิงตัวเลข เช่น การคำนวณด้วยวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล ในที่นี้ได้เปลี่ยนค่าพารามิเตอร์ที่เกี่ยวข้องกับพลังงานทั้งหมดให้อยู่ในรูปของปริมาณที่ไม่มีหน่วย กล่าวคือ เขียนให้อยู่ในรูปของอัตราส่วนของพลังงานการเพิ่มประจุที่อุณหภูมิสูงต่อพลังงานจลน์ ($k_B T$) ซึ่งจะเรียกว่า พลังงานการเพิ่มประจุเฉลี่ย (mean charging energy) สำหรับระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม สามารถเขียนพลังงานการเพิ่มประจุเฉลี่ย ได้ตามสมการ [9]

$$E_C = g_0 \left(\frac{E_{1S}}{g_{1S}} + \sum_{I=2}^N \frac{E_{II-1}}{g_{II-1}} + \frac{E_{DN}}{g_{DN}} \right) \quad (3.109)$$

เมื่อความนำไฟฟ้ารวมของระบบที่อุณหภูมิสูง g_0 สามารถนิยามได้ดังสมการ

$$g_0^{-1} = g_{1S}^{-1} + \sum_{I=2}^N g_{II-1}^{-1} + g_{DN}^{-1} \quad (3.110)$$

จากสมการ (3.109) พบว่า พลังงานการเพิ่มประจุเฉลี่ยเป็นผลรวมของพลังงานการเพิ่มประจุแต่ละรอยต่อ ซึ่งเขียนแทนด้วย E_{1S} , E_{II-1} และ E_{DN} โดยถูกถ่วงน้ำหนักด้วยค่าความนำไฟฟ้าของรอยต่อนั้นๆ ดังนั้น แอคชันของควมคุมของระบบในสมการ (3.41) เขียนใหม่ได้เป็น

$$S_C[\vec{\phi}(\tau)] = \int_0^{\beta E_C} d\tau \left[\frac{1}{4} \vec{\phi}^T \mathbb{E}_N \vec{\phi} - i \vec{n}_s^T \cdot \vec{\phi} \right] \quad (3.111)$$

และแอคชันของการทะลุผ่านในสมการ (3.107) เขียนใหม่ได้เป็น

$$S_T[\vec{\phi}] = - \int_0^{\beta E_C} d\tau \int_0^{\beta E_C} d\tau' \alpha(\tau - \tau') \left(g_{1S} \cos[\varphi_L(\tau) - \varphi_L(\tau')] + \sum_{I=2}^N g_{II-1} \cos[\varphi_I(\tau) - \varphi_I(\tau') - \varphi_{I-1}(\tau) + \varphi_{I-1}(\tau')] + g_{DN} \cos[\varphi_N(\tau) - \varphi_N(\tau')] \right) \quad (3.112)$$

เมื่อเมทริกซ์ของพลังงานการเพิ่มประจุ \mathbb{E}_N ในสมการ (3.111) เขียนได้ตามสมการ (3.40) และเคอร์เนลของการทะลุผ่านในสมการ (3.112) สามารถนิยามได้ดังสมการ

$$\alpha(\tau - \tau') = \left[4(\beta E_C)^2 \sin^2 \left(\frac{\pi(\tau - \tau')}{\beta E_C} \right) \right]^{-1} \quad (3.113)$$

โดยทั่วไปแล้วสามารถเลือกพลังงานเฉลี่ยที่ใช้อ้างอิงได้อย่างอิสระ แต่อย่างไรก็ตาม ในวิทยานิพนธ์เล่มนี้ ได้เลือกพลังงานการเพิ่มประจุเฉลี่ย โดยอ้างอิงตามแนวคิดในเอกสารอ้างอิง [9]

3.5.2 ตัวเลขไวน์ดิง

จากฟังก์ชันแบ่งส่วนในสมการ (3.57) ที่ถูกเขียนอยู่ในผลรวมของเส้นทางที่เป็นไปได้ทั้งหมด ที่มีขอบเขตของการคำนวณปริพันธ์ที่แตกต่างกัน เพื่อความสะดวกในการคำนวณเชิงตัวเลข ในที่นี่ได้เปลี่ยนตัวแปร ตามสมการ

$$\varphi_I(\tau) = \zeta_I(\tau) + v_{k_I} \tau \quad (3.114)$$

เมื่อ $v_{k_I} = 2\pi k_I / (\beta E_C)$ และกำหนดให้ขอบเขตของการคำนวณปริพันธ์

$$\zeta_I(0) = \zeta_I(\beta E_C) \quad (3.115)$$

จากการแปลงข้างต้น สามารถเขียนฟังก์ชันแบ่งส่วนใหม่ ได้ตามสมการ

$$Z[\vec{\zeta}, \vec{k}] = Z_{\text{isl}} Z_{\text{lead}} \sum_{\vec{k}} \int_{\zeta_1(0)}^{\zeta_1(\beta E_C)} D[\zeta_1] \cdots \int_{\zeta_N(0)}^{\zeta_N(\beta E_C)} D[\zeta_N] e^{-S_{\text{eff}}[\vec{\zeta}, \vec{k}]} \quad (3.116)$$

เมื่อ $\vec{\zeta}(\tau) = (\zeta_1(\tau), \zeta_2(\tau), \dots, \zeta_N(\tau))^T$ และค่าตัวเลขไวน์ดิง $\vec{k} = (k_1, k_2, \dots, k_N)^T$ จากวิธีการแปลงข้างต้นสามารถเขียนแอกชันยังผลในสมการ (3.108) ให้อยู่ในรูปแบบที่เหมาะสมกับการคำนวณด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ตามสมการ

$$S_{\text{eff}}[\vec{\zeta}, \vec{k}] = S_C[\vec{\zeta}, \vec{k}] + S_T[\vec{\zeta}, \vec{k}] \quad (3.117)$$

โดยแอกชันของคูลอมบ์ในสมการ (3.117) เขียนได้เป็น

$$S_C[\vec{\zeta}, \vec{k}] = \frac{4\pi^2}{\beta E_C} \vec{k}^T \mathbb{E}_N \vec{k} + \int_{\zeta(0)}^{\zeta(\beta E_C)} d\tau \vec{\zeta}^T \mathbb{E}_N \vec{\zeta} \quad (3.118)$$

และแอกชันของการทะลุผ่านในสมการ (3.117) เขียนใหม่ได้เป็น

พหุคูณ บณู ทิโต ชิว

$$\begin{aligned}
S_T[\vec{\zeta}, \vec{k}] = & - \int_{\zeta(0)}^{\zeta(\beta E_C)} d\tau \int_{\zeta(0)}^{\zeta(\beta E_C)} d\tau' \alpha(\tau - \tau') \left(g_{1S} \cos[\zeta_1(\tau) - \zeta_1(\tau') + v_{k_1} k_1] \right. \\
& + \sum_{I=2}^N g_{II-1} \cos[\zeta_I(\tau) - \zeta_I(\tau') - \zeta_{I-1}(\tau) + \zeta_{I-1}(\tau') + (v_{k_{I-1}} - v_{k_I})(\tau - \tau')] \\
& \left. + g_{DN} \cos[\zeta_N(\tau) - \zeta_N(\tau') + v_{k_N} k_N] \right) \quad (3.119)
\end{aligned}$$

เพื่อตรวจสอบและแสดงตัวอย่างการประยุกต์ใช้ของแอกชันยังผลในสมการ (3.117)–(3.119) ในบทที่ 4 ได้แสดงการคำนวณจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของระบบเกาะโลหะที่ต่อแบบอนุกรมและการประยุกต์ใช้ตลอดจนผลของการคำนวณ



บทที่ 4

การนำไปประยุกต์ใช้และผลการคำนวณ

ในบทนี้จะกล่าวถึงผลการคำนวณที่ได้จากการนำแอสซิงผลที่คำนวณได้ในบทที่ 3 มาประยุกต์ใช้ในการอธิบายปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์ที่เกิดขึ้นในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว โดยเริ่มจากการประยุกต์ใช้คำนวณจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม ในหัวข้อ 4.1 จากนั้นในหัวข้อ 4.2 แอสซิงผลถูกลดรูปสำหรับระบบ 2 เกาะโลหะ เพื่อคำนวณจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวเพื่อเปรียบเทียบกับผลการทดลองของลิมบัทและคณะ [34] ในหัวข้อ 4.3 แสดงวิธีการคำนวณจุดดีเจนเนอเรซีของระบบ 2 เกาะโลหะ เพื่อแสดงจุดที่เกิดการส่งผ่านอิเล็กตรอนได้มากที่สุด และสุดท้ายในหัวข้อ 4.4 ได้แสดงวิธีการสร้างแผนภาพเสถียรของระบบ 4 เกาะโลหะจากแอสซิงของคูลอมบ์

4.1 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม

ในหัวข้อนี้ได้แสดงผลการคำนวณจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม ซึ่งปริมาณดังกล่าวสามารถนำไปประยุกต์ใช้ในการอธิบายปรากฏการณ์การส่งผ่านอิเล็กตรอนในระบบ โดยการนำปริมาณปริมาณทางฟิสิกส์ เช่น พลังงานการเพิ่มประจุยังผล [69] ความจุไฟฟ้ายังผล [70] ตลอดจนการนำไปสร้างแผนภาพเสถียร ซึ่งเป็นเครื่องมือที่สำคัญที่ใช้ในการศึกษาอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว พิจารณาจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม สามารถนิยามได้ตามสมการ [71]

$$\langle n_T \rangle = \sum_{I=1}^N \langle n_I \rangle \quad (4.1)$$

โดยที่ $\langle n_I \rangle$ เป็นจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในเกาะโลหะ I สามารถแบ่งการคำนวณออกได้เป็น 3 กรณี ในกรณีเกาะโลหะลำดับที่ 1 กล่าวคือ $I=1$ พบว่า

$$\langle n_1 \rangle = n_{01} - \frac{2\pi i}{e^2 \beta} (C_1 \langle k_2 \rangle - C_{\Sigma 1} \langle k_1 \rangle) \quad (4.2)$$

กรณีที่เกาะโลหะอยู่กึ่งกลางระหว่างเกาะแรกและเกาะสุดท้าย $I' \in \{2, 3, \dots, N-1\}$ สามารถเขียนจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยได้เป็น

$$\langle n_{I'} \rangle = n_{0I'} - \frac{2\pi i}{e^2 \beta} (C_{I'-1} \langle k_{I'-1} \rangle - C_{\Sigma I'} \langle k_{I'} \rangle + C_{I'} \langle k_{I'+1} \rangle) \quad (4.3)$$

และกรณีเกาะโลหะที่สุดท้าย กล่าวคือ $I = N$ พบว่า

$$\langle n_N \rangle = n_{0N} - \frac{2\pi i}{e^2 \beta} (C_{N-1} \langle k_{N-1} \rangle - C_{\Sigma N} \langle k_N \rangle) \quad (4.4)$$

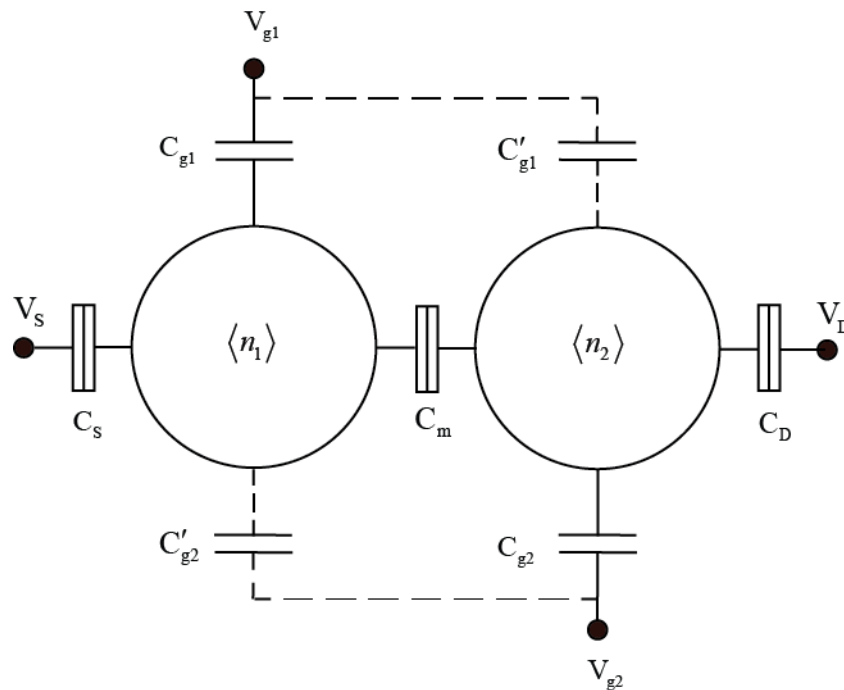
เมื่อค่าคาดหวังของเลขไวน์ดิงในสมการ (4.2)–(4.4) นิยามตามสมการ

$$\langle k_I \rangle = \frac{\sum_{\vec{k}=-\infty}^{\infty} \int D[\vec{\zeta}] k_I e^{-S_{\text{eff}}[\vec{\zeta}, \vec{k}]}}{\sum_{\vec{k}=-\infty}^{\infty} \int D[\vec{\zeta}] e^{-S_{\text{eff}}[\vec{\zeta}, \vec{k}]}} \quad (4.5)$$

เมื่อแอกชันยังผล $S_{\text{eff}}[\vec{\zeta}, \vec{k}]$ ในสมการ (4.5) เป็นไปตามสมการ (3.117)–(3.119) จากสมการ (4.5) พบว่า ค่าคาดหวังของตัวเลขไวน์ดิงไม่สามารถคำนวณด้วยวิธีเชิงวิเคราะห์ (analytic method) ได้โดยตรง เนื่องจากแอกชันยังผลของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม ไม่อยู่ในรูปแบบการคำนวณปริพันธ์ของเกาส์ อย่างไรก็ตาม สมการดังกล่าวสามารถคำนวณได้ด้วยวิธีควอนตัมมอนติคาร์โลซึ่งรายละเอียดได้กล่าวไว้ในหัวข้อ 2.10 เพื่อแสดงตัวอย่างการประยุกต์ใช้แอกชันยังผลของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรมในสมการ (3.117)–(3.119) และการคำนวณจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม ในหัวข้อต่อไปจะได้แสดงผลการคำนวณจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของระบบที่ประกอบด้วย 2 เกาะโลหะ

4.2 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของระบบสองเกาะโลหะ

เพื่อแสดงการประยุกต์ใช้แอกชันยังผลของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรมในการคำนวณจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ย ในหัวข้อนี้ได้พิจารณาระบบที่ประกอบด้วยสองเกาะโลหะหรือโดยทั่วไปว่าถูกเรียกว่า บั้มอิเล็กตรอนเดี่ยว สามารถแสดงแบบจำลองได้ดังภาพประกอบ 4.1



ภาพประกอบ 4.1 แบบจำลองระบบ 2 เกาะโลหะซึ่งประกอบไปด้วยรอยต่อการทะลุผ่าน 3 รอยต่อ และรอยต่อของตัวเก็บประจุระหว่างเกาะโลหะที่ 1 และ 2 ที่ต่อกับขั้วไฟฟ้าเกต V_{g1} และ V_{g2} โดยมีค่าความจุ C_{g1} , C'_{g1} , C'_{g2} และ C_{g2} ตามลำดับ ซึ่งแบบจำลองดังกล่าวนี้สอดคล้องกับตัวอย่างที่ 2 (sample 2) ในเอกสารอ้างอิง [32]

จากนิยามจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในสมการที่ (4.1) สามารถเขียนจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบสองเกาะโลหะ ได้ดังสมการ

$$\langle n_T \rangle = \langle n_1 \rangle + \langle n_2 \rangle \quad (4.6)$$

โดยที่ $\langle n_1 \rangle$ และ $\langle n_2 \rangle$ เป็นจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะโลหะลำดับที่ 1 และ 2 ตามลำดับ จากสมการแสดงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในรูปทั่วไปในสมการที่ (4.2)–(4.5) สามารถลดรูปสำหรับระบบสองเกาะโลหะได้ดังสมการ

$$\langle n_1 \rangle = n_{01} - \frac{2\pi i}{e^2 \beta} (C_m \langle k_2 \rangle - C_{\Sigma 1} \langle k_1 \rangle) \quad (4.7)$$

$$\langle n_2 \rangle = n_{02} - \frac{2\pi i}{e^2 \beta} (C_m \langle k_1 \rangle - C_{\Sigma 2} \langle k_2 \rangle) \quad (4.8)$$

เมื่อค่าคาดหวังของตัวเลขไวน์ดิงในระบบสองเกาะโลหะ สามารถเขียนได้ตามสมการ

$$\langle k_I \rangle = \frac{\sum_{k_1=-\infty}^{\infty} \sum_{k_2=-\infty}^{\infty} \phi D[\vec{\zeta}] k_I e^{-S_{\text{eff}}[\vec{\zeta}, \vec{k}]}}{\sum_{k_1=-\infty}^{\infty} \sum_{k_2=-\infty}^{\infty} \phi D[\vec{\zeta}] e^{-S_{\text{eff}}[\vec{\zeta}, \vec{k}]}} \quad (4.9)$$

โดยแอกชันยังผลสำหรับระบบสองเกาะโลหะ สามารถเขียนได้เป็น

$$S_{\text{eff}}[\vec{\zeta}, \vec{k}] = S_C[\vec{\zeta}, \vec{k}] + S_T[\vec{\zeta}, \vec{k}] \quad (4.10)$$

เมื่อแอกชันของคูลอมบ์ในสมการ (4.10) เขียนได้เป็น

$$S_C[\vec{\zeta}, \vec{k}] = \frac{4\pi^2}{\beta E_C} \vec{k}^T \mathbb{E}_2 \vec{k} + \int_0^{\beta E_C} d\tau \vec{\zeta}^T \mathbb{E}_2 \vec{\zeta} \quad (4.11)$$

เมื่อเวกเตอร์ $\vec{\zeta}(\tau) = (\partial\zeta_1(\tau)/\partial\tau, \partial\zeta_2(\tau)/\partial\tau)^T$ เวกเตอร์ของตัวเลขไวน์ดิง $\vec{k} = (k_1, k_2)^T$ และ $\mathbb{E}_2 = \mathbf{C}_2/2e^2$ โดยที่ \mathbf{C}_2 ได้จากการลดรูปของสมการ (3.7) ให้กลายเป็นเมทริกซ์ของความจุไฟฟ้าสำหรับระบบ 2 เกาะโลหะ กล่าวคือ

$$\mathbf{C}_2 = \begin{pmatrix} C_{\Sigma 1} & -C_m \\ -C_m & C_{\Sigma 2} \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

เมื่อ $C_{\Sigma 1} = C_S + C_{g1} + C'_{g2} + C_m$ และ $C_{\Sigma 2} = C_m + C_{g2} + C'_{g1} + C_D$ แอกชันของการทะลุผ่านสำหรับระบบสองเกาะโลหะในสมการ (4.10) เขียนได้เป็น

$$S_T[\vec{\zeta}, \vec{k}] = - \int_0^{\beta E_C} d\tau \int_0^{\beta E_C} d\tau' \alpha(\tau - \tau') \left(g_{1S} \cos[\zeta_1(\tau) - \zeta_1(\tau') + v_{k_1} k_1] \right. \\ \left. + g_{21} \cos[\zeta_2(\tau) - \zeta_2(\tau') - \zeta_1(\tau) + \zeta_1(\tau') + (v_{k_1} - v_{k_2})(\tau - \tau')] \right. \\ \left. + g_{D2} \cos[\zeta_2(\tau) - \zeta_2(\tau') + v_{k_2} k_2] \right) \quad (4.13)$$

เมื่อ g_{1S} g_{21} และ g_{D2} เป็นความนำไฟฟ้าแบบไม่มีหน่วยของรอยต่อระหว่างเกาะโลหะที่ 1 กับ ขั้วไฟฟ้าซอร์ส เกาะโลหะที่ 2 กับเกาะโลหะที่ 1 ขั้วไฟฟ้าเดรนกับเกาะโลหะที่ 2 ตามลำดับ

จากผลการทดลองของลิมบัทและคณะ [34] ที่ได้รายงานผลการทดลองในปี 2005 โดยจากการทดลองได้แสดงพารามิเตอร์ที่สามารถนำมาคำนวณจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยได้ นอกจากนั้น

พารามิเตอร์ความนำไฟฟ้าของระบบในการทดลองนี้มีค่าสูง กล่าวคือ $g \gg 1$ ซึ่งอยู่นอกเหนือจากขอบเขตของทฤษฎีการรบกวน [32] ที่จะนำมาใช้อธิบายปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์ เพื่อให้สามารถนำผลการคำนวณไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองของลิ้มบัทและคณะ วิทยานิพนธ์นี้ได้ใช้พารามิเตอร์จากการทดลองจากระบบของลิ้มบัทและคณะ ดังแสดงในตาราง 4.1

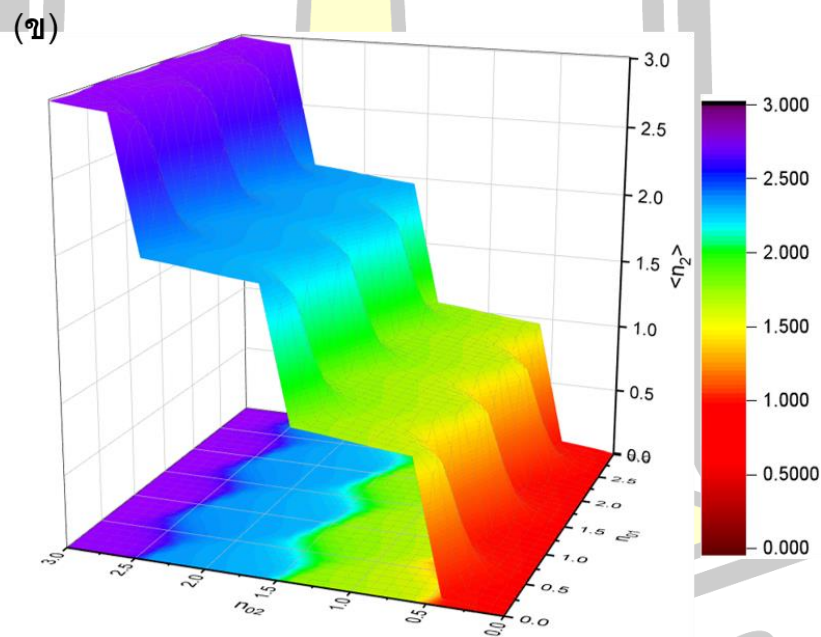
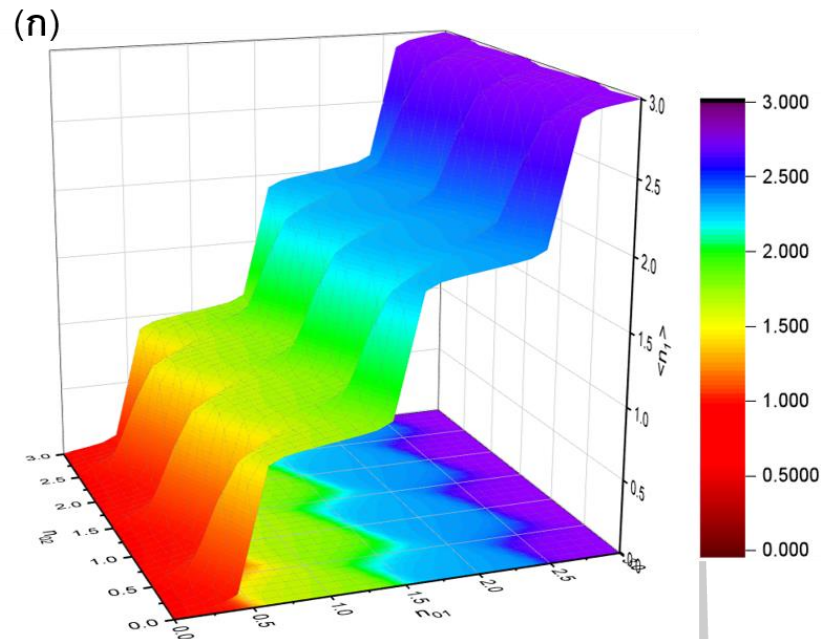
ตาราง 4.1 พารามิเตอร์ของป้อมอิเล็กตรอนเดี่ยวตัวอย่างที่ 2 [32]

พารามิเตอร์	C_S	C_1	C_D	C_{g1}	C_{g2}	C'_{g1}	C'_{g2}	g_s	g_1	g_D	G_0
ขนาดของ	181	173	236	50.5	18.0	21.5	58.6	0.52	1.32	0.83	10.0
พารามิเตอร์	(aF)	(aF)	(aF)	(aF)	(aF)	(aF)	(aF)	-	-	-	(μS)

โดยค่า C'_{g1} และ C'_{g2} เป็นตัวเก็บประจุที่ต่อคร่อมระหว่างขั้วไฟฟ้าเกต 2 กับเกาะโลหะที่ 1 และขั้วไฟฟ้าเกต 1 กับเกาะโลหะที่ 2 ตามลำดับ ค่าความจุไฟฟ้างกล่าวถูกเรียกว่า สเตรย์คาปาซิแตนซ์ (stray capacitance) รายละเอียดในการคำนวณจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยโดยใช้วิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล [46] จะไม่ได้ถูกกล่าวถึงในที่นี้ แต่ในวิทยานิพนธ์นี้ได้แสดงผลการคำนวณในกรณีที่ $\beta E_C = 21.3$ โดยผลการคำนวณแสดงได้ดังภาพประกอบ 4.2

จากภาพประกอบ 4.2 (ก) และ (ข) พบว่า จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะโลหะที่ 1 และ 2 เพิ่มขึ้นเป็นแบบขั้นบันได เมื่อแรงดันไฟฟ้าของขั้วเกตที่ต่อกับเกาะโลหะที่ 1 และ 2 ซึ่งแทนด้วยตัวแปร n_{01} และ n_{02} มีค่าเพิ่มขึ้น โดยจำนวนอิเล็กตรอนจะมีการเปลี่ยนแปลงโดยเพิ่มขึ้นบริเวณที่ n_{01} มีค่าใกล้เคียง 0.5 1.5 และ 2.5 ตามลำดับ

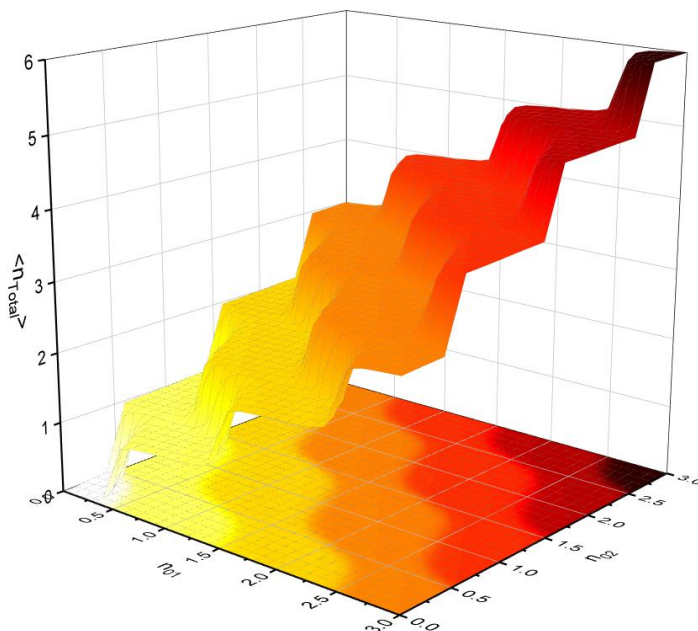
พูนุ ปณุกิตโต ชีเว



ภาพประกอบ 4.2 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะโลหะที่ 1 และ 2 ในระบบสองเกาะโลหะแสดงในภาพ (ก) และ (ข) ตามลำดับ โดยพิจารณาที่ $\beta E_C = 21.3$ และใช้ค่าพารามิเตอร์ในตารางที่ 4.1

เมื่อพิจารณาภาพฉายของผลรวมจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยทั้งสองเกาะโลหะในระนาบของ n_{01} และ n_{02} ในภาพประกอบ 4.2 (ก) และ (ข) พบว่า จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยที่เพิ่มขึ้นมีลักษณะคล้ายกับกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว เนื่องจากระบบข้างต้นกำหนดให้ความต่างศักย์ไฟฟ้าระหว่างขั้วไฟฟ้า

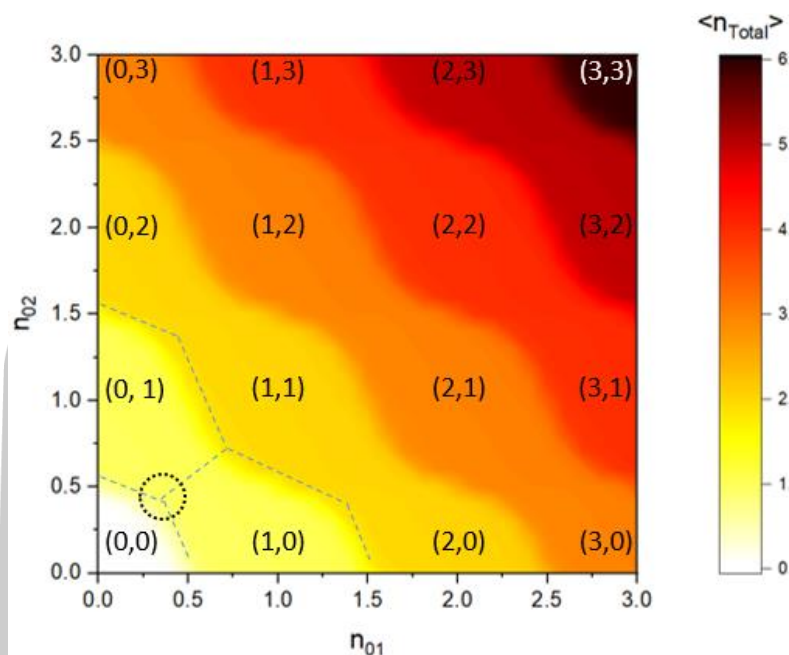
ซอร์สและเดรนเท่ากับศูนย์ จึงกล่าวได้ว่า ในกรณีนี้ปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวแสดงพฤติกรรมเป็นกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวสองกล่องที่ไม่ได้เชื่อมต่อกัน



ภาพประกอบ 4.3 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบสองเกาะโลหะที่ถูกแสดงในกราฟ 3 มิติ บนระนาบ n_{01} และ n_{02} โดยพิจารณาที่ $\beta E_C = 21.3$

พิจารณาจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบสองเกาะโลหะ ดังแสดงดังภาพประกอบ 4.3 จากความสัมพันธ์ระหว่างจำนวนอิเล็กตรอนรวมของระบบบนระนาบของ n_{01} และ n_{02} เมื่อกำหนดให้มีการเปลี่ยนแปลงในช่วง 0–3 ในภาพประกอบ 4.3 พบว่า จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของระบบเพิ่มขึ้นแบบไม่ต่อเนื่อง โดยบริเวณขอบเขตที่มีแคดสีเดียวกันเป็นบริเวณที่จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบมีค่าเท่ากัน เมื่อทำการฉายภาพดังกล่าวลงบนระนาบของ n_{01} และ n_{02} สามารถแสดงรายละเอียดได้ดังภาพประกอบ 4.4

พูนุ ปณุกิตโต ชิว



ภาพประกอบ 4.4 ภาพฉายของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบสองเกาะโลหะบนระนาบ n_{01} และ n_{02} โดยคู่อันดับ (n_1, n_2) แสดงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในเกาะโลหะที่ 1 และ 2 เส้นปะแสดงขอบเขตของแผนภาพเสถียรที่สร้างด้วยวิธีมาตรฐาน (standard method) [50] ที่ $\beta E_C = 21.3$

จากภาพฉายของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบสองเกาะโลหะ บริเวณที่ความเข้มของเฉดสีเดียวกันคือบริเวณที่มีจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบคงที่ แสดงด้วยผลรวมของคู่อันดับ (n_1, n_2) ภาพฉายดังกล่าวนี้มีลักษณะคล้ายคลึงกับแผนภาพเสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยว เพื่อตรวจสอบภาพฉายที่เกิดขึ้นว่าสอดคล้องกับแผนภาพเสถียรหรือไม่ ในวิทยานิพนธ์นี้ได้คำนวณแผนภาพเสถียรแบบมาตรฐาน ซึ่งให้ผลการคำนวณเป็นไปตามเส้นปะ จากภาพประกอบ 4.4 พบว่าเส้นปะซ้อนทับกับขอบเขตของการเปลี่ยนเฉดสี ซึ่งกล่าวได้ว่า ภาพฉายของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบสองเกาะโลหะที่สอดคล้องกับแผนภาพเสถียรแบบมาตรฐาน [50], [72] กล่าวคือ ทั้งสองวิธีแสดงบริเวณที่เกิดปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคู่ออมป์ที่สอดคล้องกัน เมื่อพิจารณาสมการ (4.7)–(4.8) ที่ใช้ในการสร้างภาพฉายของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของระบบ พบว่า ปริมาณดังกล่าวขึ้นกับอุณหภูมิต่ำ βE_C และขอบเขตของการส่งผ่านประจุของระบบก็ขึ้นกับอุณหภูมิต่ำด้วย โดยขอบเขตของการส่งผ่านจะขยายใหญ่ขึ้นเมื่ออุณหภูมิต่ำขึ้น เนื่องจากพลังงานจลน์ของอิเล็กตรอนเพิ่มขึ้น เมื่อ βE_C มีค่าลดลง ทำให้อิเล็กตรอนสามารถเคลื่อนที่เข้าไปยังเกาะโลหะได้มากขึ้น แต่เมื่อพิจารณาในกรณีที่อุณหภูมิต่ำ พบว่า ขอบเขตของการส่งผ่านประจุจะแคบลงและขอบเขตมีความชัดเจนขึ้น ซึ่งสอดคล้องกับเส้นที่สร้างจากวิธีการแบบมาตรฐานที่อุณหภูมิต่ำเข้าสู่ศูนย์องศาสัมบูรณ์

นอกจากนั้น จากผลการคำนวณในบริเวณอื่นๆ พบว่า ได้ผลในการทำงานเดียวกันกับที่ได้กล่าวมาในข้างต้น ดังนั้นสามารถสรุปได้ว่าภาพถ่ายของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบในภาพประกอบ 4.4 สามารถนำไปใช้เป็นแผนภาพเสถียร ซึ่งต่อไปจะเรียกว่าแผนภาพเสถียรนี้ว่าแผนภาพเสถียรแบบควอนตัม (quantum stability diagram)

พิจารณาบริเวณวงกลมสีดำในภาพประกอบ 4.4 พบว่า เป็นบริเวณที่อิเล็กตรอนมีพลังงานเท่ากันทั้งสามสถานะ โดยจุดดังกล่าวถูกเรียกว่า จุดทริปเปิลพอยต์ (triple point) หรือ จุดดีเจนเนอเรซี (degeneracy point) โดยที่บริเวณดังกล่าวเป็นจุดที่จะเกิดการส่งผ่านอิเล็กตรอนได้สูงที่สุด เมื่อความต่างศักย์ไฟฟ้าระหว่างขั้วไฟฟ้าซอร์สและเดรนมีค่าเกือบเป็นศูนย์ เมื่อพิจารณาจุดดังกล่าวตามทิศทางเข็มนาฬิกา พบว่า บริเวณจุดดังกล่าวสามารถเกิดการส่งผ่านอิเล็กตรอนจากขั้วไฟฟ้าซอร์สไปยังเกาะโลหะที่ 1 และจากเกาะโลหะที่ 1 ไปยังเกาะโลหะที่ 2 และส่งผ่านไปยังขั้วไฟฟ้าเดรน โดยเมื่อพิจารณาสถานะประจุเริ่มต้น $(0,0)$ จากนั้น เมื่อเพิ่มแรงดันที่ขั้วเกตที่ต่อเข้ากับเกาะโลหะที่ 1 หรือ n_{01} เพิ่มขึ้น พบว่า จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในเกาะโลหะที่ 1 เพิ่มขึ้นมา 1 ตัว ซึ่งแสดงด้วยสถานะประจุ $(1,0)$ จากนั้นเพิ่มแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตที่ 2 พบว่าจำนวนอิเล็กตรอนในเกาะที่ 2 เพิ่มขึ้นมา 1 ตัวและในขณะเดียวกัน จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยเกาะโลหะที่ 1 ก็ลดลง 1 ตัว โดยสามารถเขียนสถานะของการเปลี่ยนแปลงจำนวนประจุได้เป็น $(0,0) \rightarrow (1,0) \rightarrow (0,1) \rightarrow (0,0)$ ตามลำดับ เมื่อเปรียบเทียบจุดดังกล่าวกับผลที่ได้รายงานด้วยลิมิตและคณะ พบว่า จุดดังกล่าวเกิดขึ้นบริเวณ $(n_{01}, n_{02}) \approx (0.4, 0.3)$ ซึ่งสอดคล้องกับผลการทดลอง

จากที่กล่าวมาข้างต้นสามารถสรุปได้ว่า ภาพถ่ายของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบบนระนาบ n_{01} และ n_{02} มีความสอดคล้องกับแผนภาพเสถียรที่สร้างจากวิธีการมาตรฐาน ยิ่งไปกว่านั้น แผนภาพเสถียรที่ถูกสร้างขึ้นใหม่นี้ยังได้รวมผลของปรากฏการณ์การทะลุผ่านและผลของอุณหภูมির่วมด้วย ซึ่งถือเป็นวิธีการใหม่ในการสร้างแผนภาพเสถียร ดังนั้น ในหัวข้อนี้ได้แสดงให้เห็นว่าสามารถนำแอกชันยังผลของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรมมาประยุกต์ใช้ในการสร้างแผนภาพเสถียร และโดยวิธีการดังกล่าวสามารถขยายไปสู่ระบบที่มีเกาะโลหะมากกว่าสองเกาะได้

4.3 การคำนวณจุดดีเจนเนอเรซีของระบบสองเกาะโลหะ

จากการศึกษาการเปลี่ยนแปลงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยว พบว่า จุดดีเจนเนอเรซี ซึ่งเป็นจุดที่อิเล็กตรอนสามารถทะลุผ่านระบบได้มากที่สุดหรือเป็นจุดที่ค่าความนำไฟฟ้าของระบบมีค่าสูงสุด [34] จากข้อมูลดังกล่าวสามารถนำมาใช้เพื่อคำนวณจุดดีเจนเนอเรซีของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวได้ โดยเริ่มจากการพิจารณาจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบในสมการ (4.6) พบว่า การเปลี่ยนแปลงของปริมาณดังกล่าวเมื่อเทียบตัวแปรแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทั้งสอง พบว่า

$$\vec{\nabla} \langle n_T \rangle = \left(\frac{\partial}{\partial n_{01}} + \frac{\partial}{\partial n_{02}} \right) (\langle n_1 \rangle + \langle n_2 \rangle) \quad (4.14)$$

พิจารณาจุดที่มีการเปลี่ยนแปลงมากที่สุด กล่าวคือ $(\vec{\nabla} \langle n_T \rangle)_{\max}$ ดังนั้น จุดดีเจนเนอเรซีของระบบสองเกาะโลหะนิยามได้ตามสมการ

$$\vec{\nabla} \langle n_T \rangle \Big|_{(\tilde{n}_{01}, \tilde{n}_{02})} = 0 \quad (4.15)$$

เมื่อคู่อันดับ $(\tilde{n}_{01}, \tilde{n}_{02})$ เป็นคู่อันดับที่ทำให้ค่าของการเปลี่ยนแปลงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมมีค่าสูงสุด

จากสมการแอกชันของระบบ 2 เกาะโลหะในหัวข้อ 4.2 เมื่อนำแอกชันดังกล่าวมาประยุกต์ใช้ในการคำนวณจุดดีเจนเนอเรซีหรือจุดที่เกิดการส่งผ่านอิเล็กตรอนในระบบ 2 เกาะโลหะ โดยเริ่มจากการพิจารณาสมการ

$$\vec{\nabla} \langle n_T \rangle \Big|_{(\tilde{n}_{01}, \tilde{n}_{02})} = 0 \quad (4.16)$$

เมื่อ $\langle n_T \rangle = \langle n_1 \rangle + \langle n_2 \rangle$ และ $\vec{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial n_{01}} + \frac{\partial}{\partial n_{02}} \right)$ โดยจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของระบบสองเกาะโลหะสามารถเขียนได้เป็น

$$\langle n_1 \rangle = n_{01} - \frac{2\pi i}{e^2 \beta} (C_1 \langle k_2 \rangle - C_{\Sigma 1} \langle k_1 \rangle) \quad (4.17)$$

$$\langle n_2 \rangle = n_{02} - \frac{2\pi i}{e^2 \beta} (C_1 \langle k_1 \rangle - C_{\Sigma 2} \langle k_2 \rangle) \quad (4.18)$$

และค่าคาดหวังของตัวเลขไวน์ดิงสำหรับระบบสองเกาะโลหะสามารถเขียนได้เป็น

$$\langle k_I \rangle = \frac{\sum_{k_1=-\infty}^{\infty} \sum_{k_2=-\infty}^{\infty} \oint D[\vec{\zeta}] k_I e^{-S_{\text{eff}}[\vec{\zeta}, \vec{k}]}}{\sum_{k_1=-\infty}^{\infty} \sum_{k_2=-\infty}^{\infty} \oint D[\vec{\zeta}] e^{-S_{\text{eff}}[\vec{\zeta}, \vec{k}]}} \quad (4.19)$$

เมื่อ $I \in \{1, 2\}$ เนื่องจากระบบสองเกาะโลหะประกอบด้วยขั้วไฟฟ้าเกิดที่เป็นอิสระต่อกัน ทำให้สามารถแยกการพิจารณาการเปลี่ยนแปลงที่ขึ้นกับประจุเหนี่ยวนำ n_{01} และ n_{02} อิสระต่อกันได้ เมื่อแทนสมการ (4.17) และ (4.18) ลงในสมการ (4.16) พบว่า

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \langle n_I \rangle &= 1 - \frac{4\pi^2}{e^2 \beta} \left((C_1 - C_{\Sigma 1}) (\langle k_1^2 \rangle - \langle k_1 \rangle^2) + (C_1 - C_{\Sigma 2}) (\langle k_2 k_1 \rangle - \langle k_1 \rangle \langle k_2 \rangle) \right) \\ &\quad + 1 - \frac{4\pi^2}{e^2 \beta} \left((C_1 - C_{\Sigma 2}) (\langle k_2^2 \rangle - \langle k_2 \rangle^2) + (C_1 - C_{\Sigma 1}) (\langle k_1 k_2 \rangle - \langle k_2 \rangle \langle k_1 \rangle) \right) \\ &= 2 - \frac{4\pi^2}{e^2 \beta} \left((C_1 - C_{\Sigma 1}) (\langle k_1^2 \rangle - \langle k_1 \rangle^2) + (C_1 - C_{\Sigma 2}) (\langle k_2^2 \rangle - \langle k_2 \rangle^2) \right) \\ &\quad + (2C_1 - C_{\Sigma 1} - C_{\Sigma 2}) (\langle k_2 k_1 \rangle - \langle k_1 \rangle \langle k_2 \rangle) \end{aligned} \quad (4.20)$$

เมื่อค่าคาดหวังของตัวเลขไวน์ดิง $\langle k_1^2 \rangle$, $\langle k_2^2 \rangle$ และ $\langle k_2 k_1 \rangle$ ในสมการ (4.20) เขียนได้ดังนี้

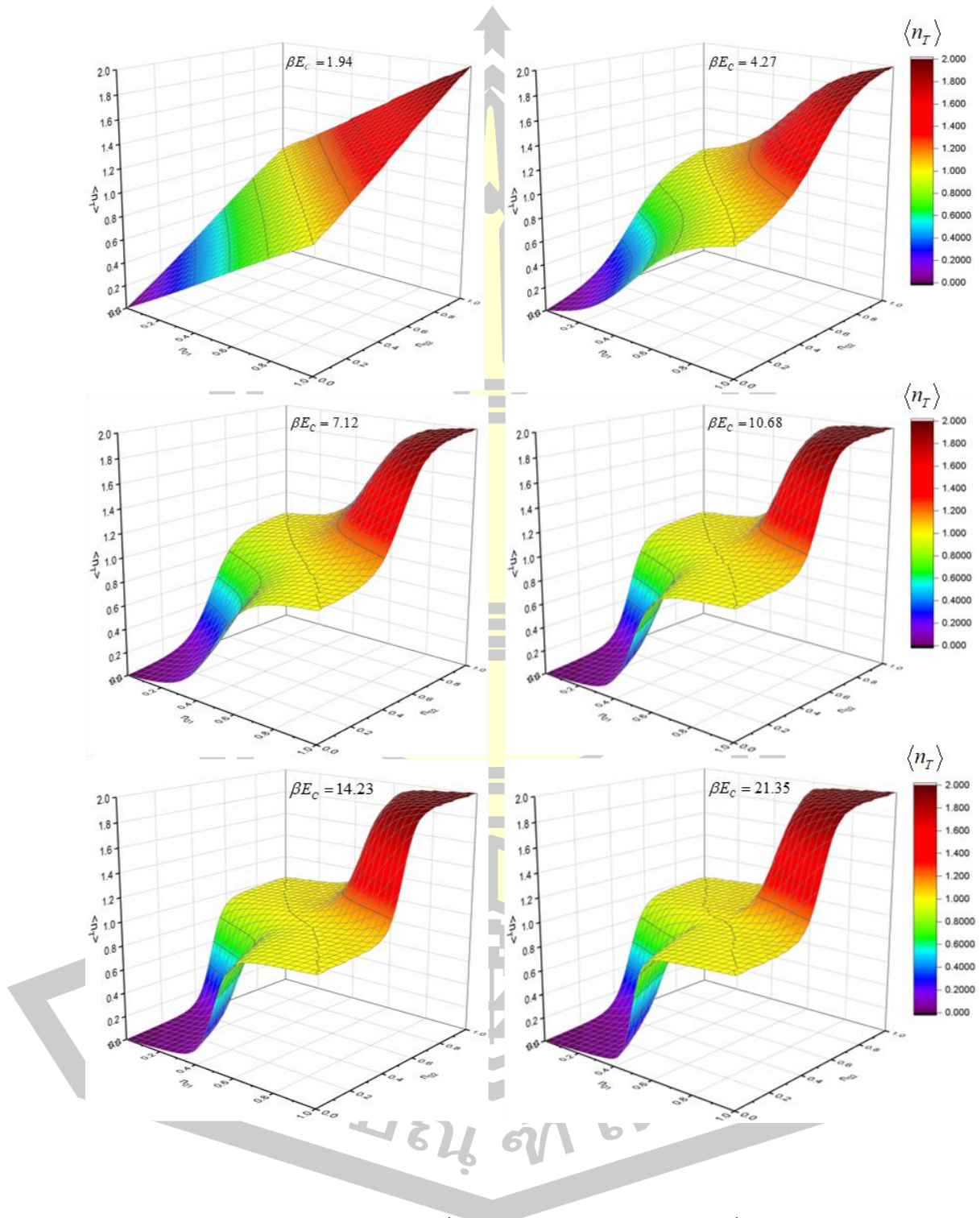
$$\langle k_1^2 \rangle = \frac{1}{Z} \oint D[\vec{\zeta}] \sum_{k=-\infty}^{\infty} k_1^2 e^{-S_{\text{eff}}[\vec{\zeta}, \vec{k}]} \quad (4.21)$$

$$\langle k_2^2 \rangle = \frac{1}{Z} \oint D[\vec{\zeta}] \sum_{k=-\infty}^{\infty} k_2^2 e^{-S_{\text{eff}}[\vec{\zeta}, \vec{k}]} \quad (4.22)$$

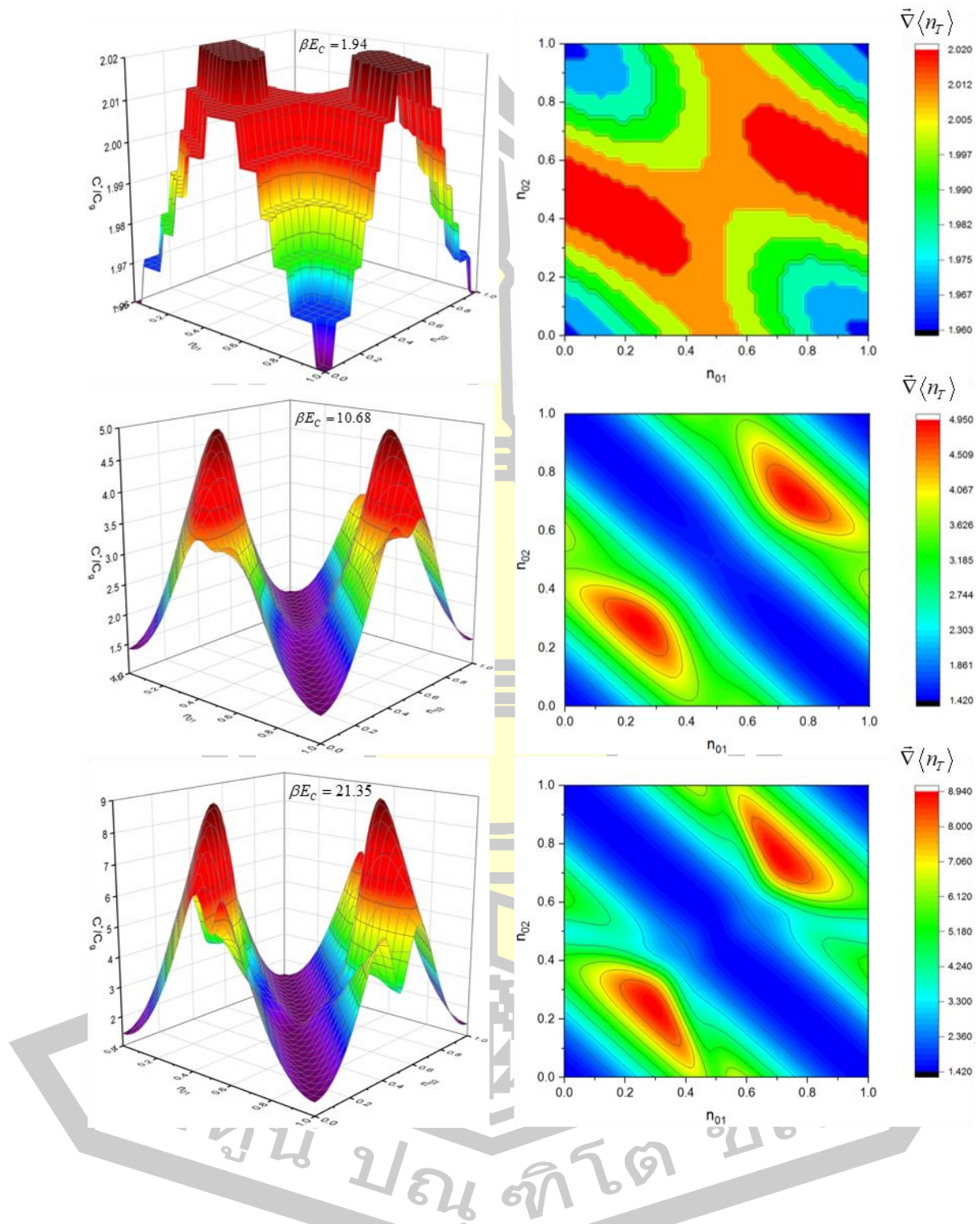
$$\langle k_1 k_2 \rangle = \frac{1}{Z} \oint D[\vec{\zeta}] \sum_{k=-\infty}^{\infty} k_1 k_2 e^{-S_{\text{eff}}[\vec{\zeta}, \vec{k}]} \quad (4.23)$$

พหุนาม โทโต ซิว

โดยผลการคำนวณที่ได้จากสมการ (4.20)–(4.23) สามารถแสดงได้ดังภาพประกอบ 4.5

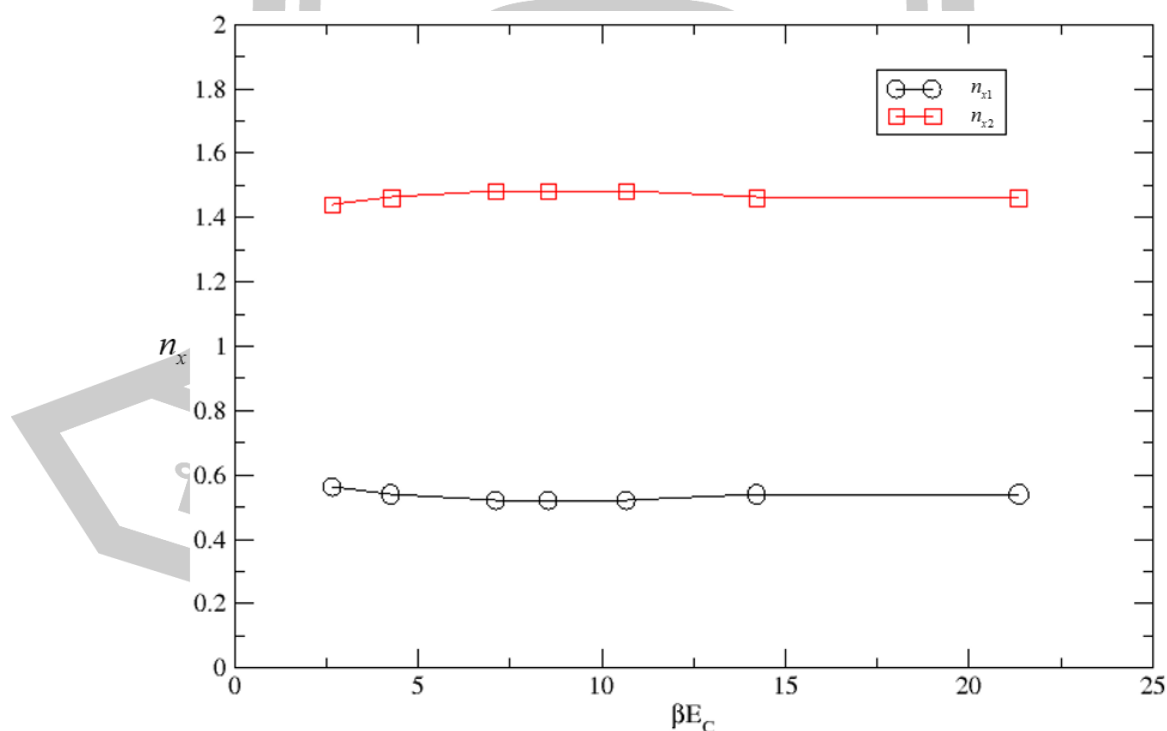


ภาพประกอบ 4.5 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบ 2 เกาะโลหะ เมื่อระนาบ (n_{01}, n_{02}) มีการเปลี่ยนแปลงอยู่ในช่วง 0–1 ที่ βE_c มีค่าแตกต่างกัน



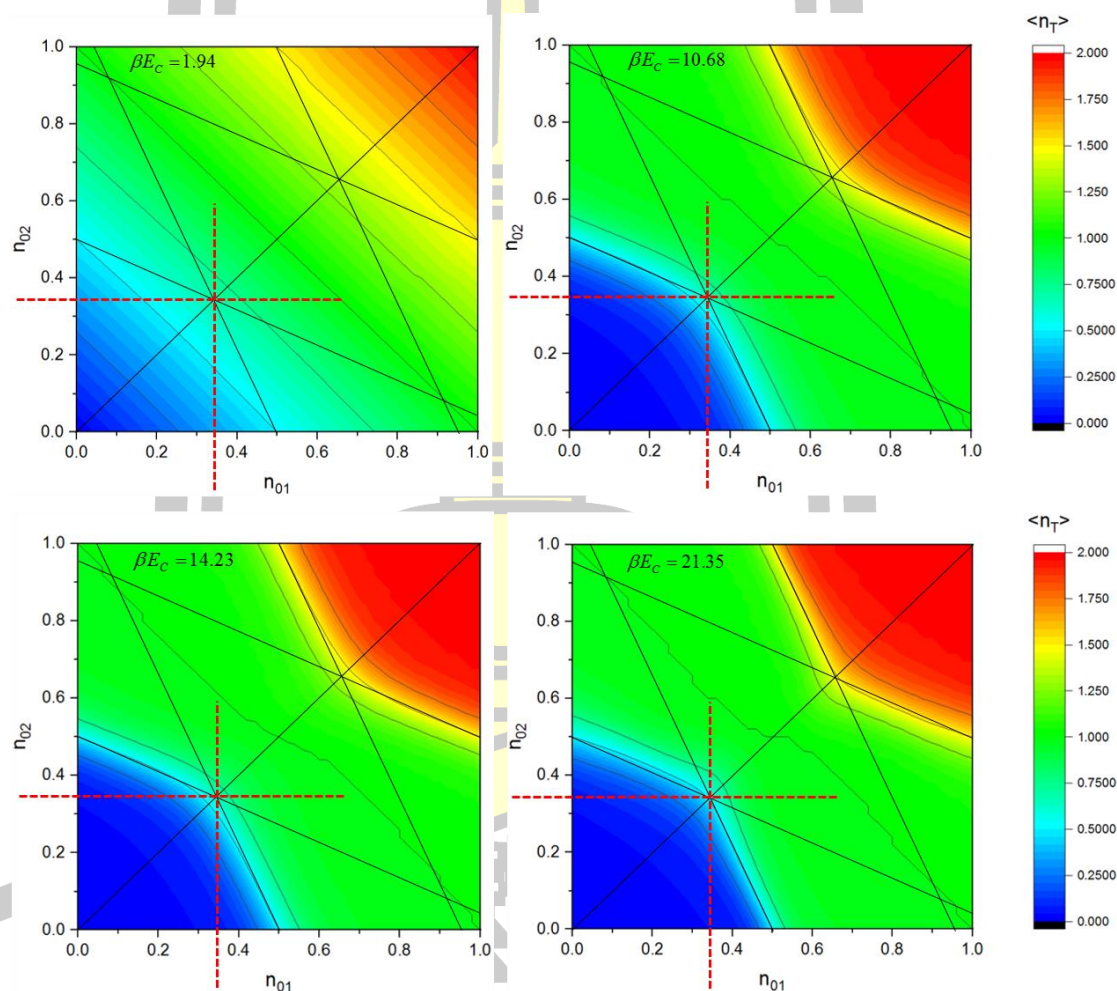
ภาพประกอบ 4.6 การเปลี่ยนของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบ 2 แถบโลหะ (ซ้าย) และ ภาพฉายของการเปลี่ยนแปลงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบ (ขวา) พิจารณาที่ βE_C มีค่า เป็น 1.94 10.68 และ 21.35 ตามลำดับ

จากภาพประกอบ 4.5 ที่ได้แสดงผลการคำนวณจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบ 2 เกาะโลหะ เมื่อ βE_C มีการเปลี่ยนแปลง พบว่า ที่ βE_C มีค่า 1.94 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบมีค่าเพิ่มขึ้นแบบต่อเนื่องหรือระบบไม่เกิดปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์ พิจารณาได้จากไม่สามารถแยกพิคของการเกิดการส่งผ่านสูงสุดได้เป็น 2 พิค ซึ่งสอดคล้องกับผลการทดลอง [32] แต่เมื่อ βE_C เพิ่มมากขึ้น พบว่า จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบมีการเพิ่มขึ้นแบบขั้นบันได เนื่องจากผลของปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์มีความเด่นชัดมากขึ้น นอกจากนี้ เมื่อพิจารณาการเปลี่ยนแปลงของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบ 2 เกาะโลหะในภาพประกอบ 4.6 (ซ้าย) พบว่า มีจุดยอดการเปลี่ยนแปลงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบสองจุดซึ่งสอดคล้องกับผลการทดลองของลิ้มบัทและคณะ [32] ที่ได้วัดค่าความนำไฟฟ้าของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวซึ่งเกิดจุดที่มีความนำไฟฟ้าสูงสุดสองจุดเช่นเดียวกัน จากนั้นพิจารณาภาพประกอบ 4.6 (ขวา) ที่ได้แสดงภาพฉายของการเปลี่ยนแปลงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบ 2 เกาะโลหะ โดยจุดที่เกิดการเปลี่ยนแปลงสูงสุดแสดงด้วยบริเวณสีแดง พบว่า จุด $n_x = \tilde{n}_{01} + \tilde{n}_{02}$ ซึ่งเป็นจุดที่เกิดจากผลรวมของคู่อันดับที่ทำให้การเปลี่ยนแปลงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบมีค่าสูงสุด $(\tilde{n}_{01}, \tilde{n}_{02})_1$ และ $(\tilde{n}_{01}, \tilde{n}_{02})_2$ แสดงได้ดังภาพประกอบ 4.7



ภาพประกอบ 4.7 แสดงจุดที่เกิดการเปลี่ยนแปลงของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยสูงสุด วงกลมสีดำและสี่เหลี่ยมสีแดงเป็นจุดสูงสุดตำแหน่งที่ 1 และ 2 ตามลำดับ

จากภาพประกอบ 4.7 พบว่า จุดที่เกิดการเปลี่ยนแปลงของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบสูงสุดตำแหน่งที่ 1 และ 2 มีค่าประมาณ 0.54 และ 1.46 ตามลำดับ ซึ่งมีค่าน้อยกว่าจุดที่ค่าความนำไฟฟ้าของปั๊มอิเล็กตรอนเดียวมีค่าสูงสุด โดยในการทดลองของลิมบัทและคณะนั้น n_x มีค่าประมาณ 0.7 และ 1.3 [32] แต่อย่างไรก็ตาม จากผลการคำนวณจุด n_x ที่จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยมีการเปลี่ยนแปลงสูงสุดและจุดที่ทำให้เกิดค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดนั้น พบว่า จุดดังกล่าวไม่เปลี่ยนแปลงตามอุณหภูมิ



ภาพประกอบ 4.8 ภาพฉายจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบ 2 เกาะโลหะเปรียบเทียบกับแผนภาพเสถียรจากวิธีมาตรฐาน

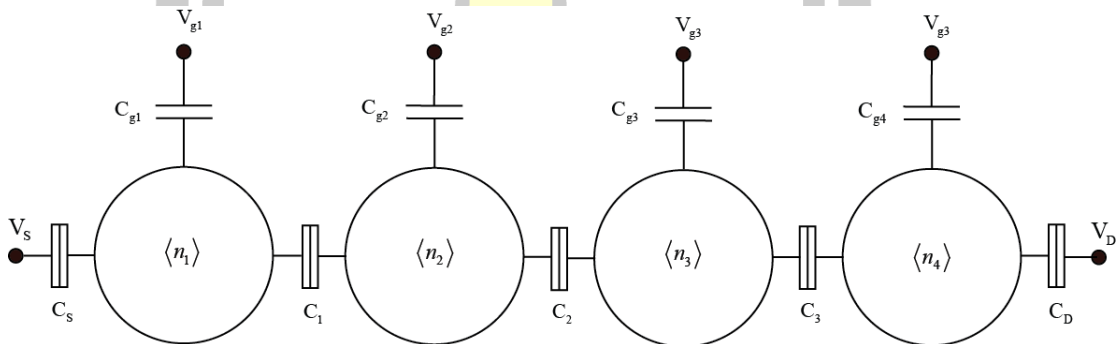
จากภาพประกอบ 4.8 เส้นปะสีแดงแสดงแนวของจุดดีเจนเนอเรซีของระบบ 2 เกาะโลหะที่สร้างจากวิธีมาตรฐาน ซึ่งสอดคล้องกับแผนภาพเสถียรที่สร้างจากภาพฉายของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบที่ βE_C มีค่าสูง (หรืออุณหภูมิต่ำๆ) แต่เมื่อพิจารณาที่ βE_C มีค่าลดลง พบว่า

แผนภาพเสถียรที่สร้างจากภาพถ่ายมีลักษณะเปลี่ยนแปลงไปเนื่องจากผลของอุณหภูมิกว่าคือ เมื่อเปรียบเทียบจุดที่เกิดค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดกับจุดที่เกิดการเปลี่ยนแปลงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยสูงสุด พบว่า จุด n_x ที่คำนวณได้มีค่าน้อยกว่าจุดที่ได้จากการทดลอง เนื่องจากการคำนวณได้กำหนดให้ $V_s - V_D = 0$ แต่ในการทดลองนั้น ในการวัดค่าความนำไฟฟ้าของระบบ จำเป็นต้องให้ความต่างศักย์ไฟฟ้าระหว่างขั้วซอร์สและขั้วเดรน กล่าวคือ $V_s - V_D > 0$ จากความต่างศักย์ดังกล่าวนี้ ทำให้อิเล็กตรอนที่จะเคลื่อนที่จากขั้วซอร์สไปยังขั้วเดรนต้องใช้พลังงานมากขึ้น ทำให้จุด n_x ที่เกิดค่าความนำไฟฟ้าสูงสุดมีค่ามากกว่าผลที่ได้จากการคำนวณการเปลี่ยนแปลงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบ ซึ่งผลดังกล่าวอาจจะเทียบเคียงได้กับการพิจารณาในระบบทรานซิสเตอร์อิเล็กตรอนเดี่ยวที่พิจารณาในกรณี $V_s - V_D > 0$ ดังเส้นปะในภาพประกอบ 2.10



4.4 แผนภาพเสถียรของระบบ 4 เกาะโลหะ

ในหัวข้อ 4.2 ได้แสดงวิธีการคำนวณแผนภาพเสถียรด้วยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล ที่ได้พิจารณาผลของปรากฏการณ์ทะลุผ่านร่วมด้วย พบว่า การคำนวณดังกล่าวต้องใช้วิธีการประมวลผลเชิงตัวเลข แต่ในกรณีที่ต้องการสร้างแผนภาพเสถียรในกรณีที่อุณหภูมิต่ำ ($T \approx 0$) แผนภาพเสถียรดังกล่าวถูกเรียกว่าแผนภาพเสถียรแบบมาตรฐาน โดยวิธีการดังกล่าวได้ละเลยผลของปรากฏการณ์ทะลุผ่าน ในหัวข้อนี้จะได้แสดงการสร้างแผนภาพเสถียรในระบบ 4 เกาะโลหะ ซึ่งแสดงดังแบบจำลองในภาพประกอบ 4.9 ดังนั้น ในหัวข้อนี้จะได้แสดงการประยุกต์ใช้แอกชันยังผลของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรมในการสร้างแผนภาพเสถียรแบบมาตรฐาน ซึ่งสามารถทำได้โดยการไม่พิจารณาผลของปรากฏการณ์ทะลุผ่าน กล่าวคือ กำหนดให้ $S_T = 0$ โดยเริ่มจากการนิยามจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบตามสมการ



ภาพประกอบ 4.9 แบบจำลองระบบสี่เกาะโลหะ ซึ่งประกอบด้วยรอยต่อการทะลุผ่าน 5 รอยต่อ และรอยต่อของตัวเก็บประจุระหว่างเกาะโลหะที่ 1 2 3 และ 4 ที่ต่อกับขั้วไฟฟ้าเกต V_{g1} V_{g2} V_{g3} และ V_{g4} ที่คั่นด้วยตัวเก็บประจุ C_{g1} C_{g2} C_{g3} และ C_{g4} ตามลำดับ

$$\langle n_T \rangle = \langle n_1 \rangle + \langle n_2 \rangle + \langle n_3 \rangle + \langle n_4 \rangle \quad (4.24)$$

โดยที่ $\langle n_1 \rangle$ $\langle n_2 \rangle$ $\langle n_3 \rangle$ และ $\langle n_4 \rangle$ เป็นจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะโลหะลำดับที่ 1 2 3 และ 4 ตามลำดับ จากสมการ (4.2)–(4.5) จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในแต่ละเกาะโลหะ สามารถคำนวณได้ตามสมการ

$$\langle n_1 \rangle = n_{01} - \frac{2\pi i}{e^2 \beta} (C_1 \langle k_2 \rangle - C_{\Sigma 1} \langle k_1 \rangle) \quad (4.25)$$

$$\langle n_2 \rangle = n_{02} - \frac{2\pi i}{e^2 \beta} (C_1 \langle k_1 \rangle - C_{\Sigma 2} \langle k_2 \rangle + C_2 \langle k_3 \rangle) \quad (4.26)$$

$$\langle n_3 \rangle = n_{03} - \frac{2\pi i}{e^2 \beta} (C_2 \langle k_2 \rangle - C_{\Sigma 3} \langle k_3 \rangle + C_3 \langle k_4 \rangle) \quad (4.27)$$

$$\langle n_4 \rangle = n_{04} - \frac{2\pi i}{e^2 \beta} (C_3 \langle k_3 \rangle - C_{\Sigma 4} \langle k_4 \rangle) \quad (4.28)$$

เมื่อค่าคาดหวังของตัวเลขไวน์ดิงในสมการ (4.25)–(4.28) นิยามดังสมการ

$$\langle k_I \rangle = \frac{\sum_{k_1=-\infty}^{\infty} \sum_{k_2=-\infty}^{\infty} \sum_{k_3=-\infty}^{\infty} \sum_{k_4=-\infty}^{\infty} e^{\frac{-4\pi^2}{\beta} [\mathbf{k}^T \mathbb{E}_4 \mathbf{k}]} k_I e^{-2\pi i (\mathbf{n}_g^T \mathbf{k})}}{\sum_{k_1=-\infty}^{\infty} \sum_{k_2=-\infty}^{\infty} \sum_{k_3=-\infty}^{\infty} \sum_{k_4=-\infty}^{\infty} e^{\frac{-4\pi^2}{\beta} [\mathbf{k}^T \mathbb{E}_4 \mathbf{k}]} e^{-2\pi i (\mathbf{n}_g^T \mathbf{k})}} \quad (4.29)$$

เมื่อ $I \in \{1, 2, 3, 4\}$ เมทริกซ์ $\mathbf{n}_g^T = [n_{01}, n_{02}, n_{03}, n_{04}]$ $\mathbf{k}_I^T = [k_1, k_2, k_3, k_4]$ และ $\mathbb{E}_4 = \frac{\mathbf{C}_4}{2e^2}$ เมื่อ

\mathbf{C}_4 สามารถเขียนได้ตามสมการ

$$\mathbf{C}_4 = \begin{pmatrix} C_{\Sigma 1} & -C_1 & 0 & 0 \\ -C_1 & C_{\Sigma 2} & -C_2 & 0 \\ 0 & -C_2 & C_{\Sigma 3} & -C_3 \\ 0 & 0 & -C_3 & C_{\Sigma 4} \end{pmatrix} \quad (4.30)$$

เมื่อกำหนดให้ $C_{\Sigma 1} = C_s + C_{g1} + C_1$ $C_{\Sigma 2} = C_1 + C_{g2} + C_2$ $C_{\Sigma 3} = C_2 + C_{g3} + C_3$ และ $C_{\Sigma 4} = C_3 + C_{g4} + C_D$ ตามลำดับ

ในการสร้างแผนภาพเสถียรของระบบ 4 เกาะโลหะ ซึ่งเป็นแผนภาพสามมิติ ในวิทยานิพนธ์นี้ ได้ยกตัวอย่างเฉพาะ 2 กรณี กล่าวคือ ในกรณีที่แรงดันไฟฟ้าของขั้วเกตที่เกาะโลหะ 2 และ 3 มีค่า

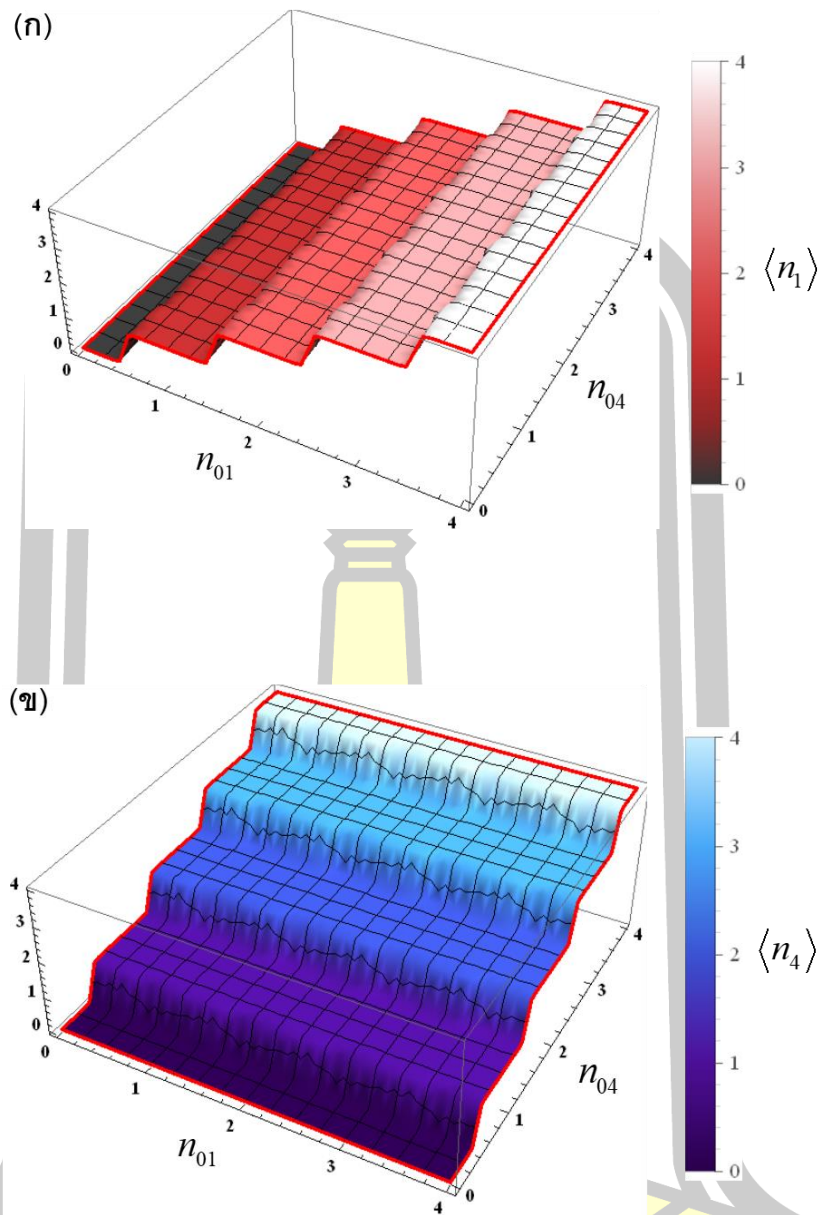
เป็น 0.0 และ 0.5 นอกจากนั้น กำหนดให้มีการเปลี่ยนแปลงของจำนวนประจุในเกาะโลหะที่ 1 และ 4 อยู่ในช่วง 0–4 และกำหนดให้ค่า $\beta E_C = 20$ และพารามิเตอร์ทั้งหมดที่ใช้ในการคำนวณแสดงในตาราง 4.2

ตาราง 4.2 ค่าพารามิเตอร์ที่ใช้ในการคำนวณของระบบ 4 เกาะโลหะ ประกอบด้วยค่าความจุไฟฟ้า โดยกำหนดให้ระบบมีความสมมาตร

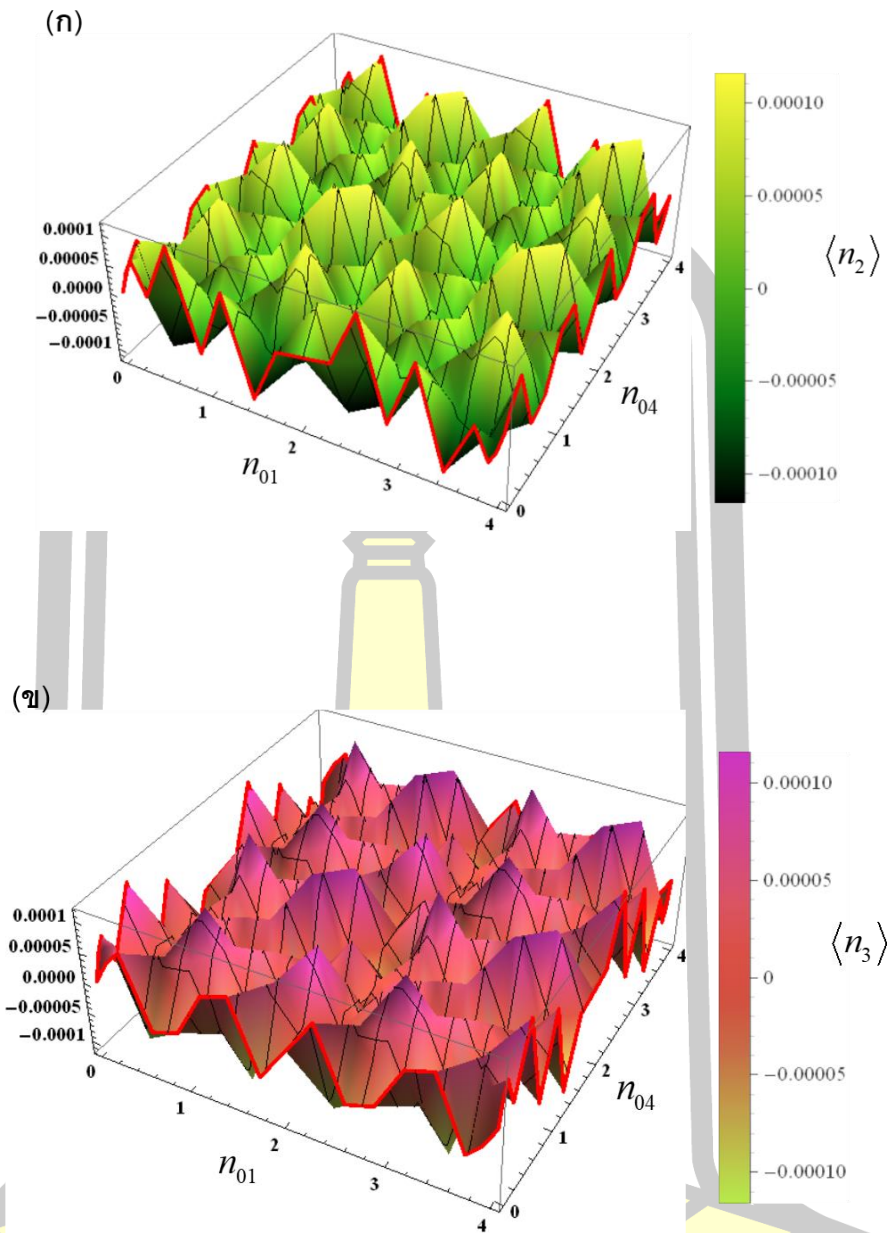
พารามิเตอร์	C_S	C_1	C_2	C_3	C_D	C_{g1}	C_{g2}	C_{g3}	C_{g4}
ขนาดของ	220	140	140	140	220	40	40	40	40
พารามิเตอร์	(aF)	(aF)	(aF)	(aF)	(aF)	(aF)	(aF)	(aF)	(aF)

4.4.1 กรณีที่แรงดันไฟฟ้าขั้วเกต $n_{02} = n_{03} = 0.0$

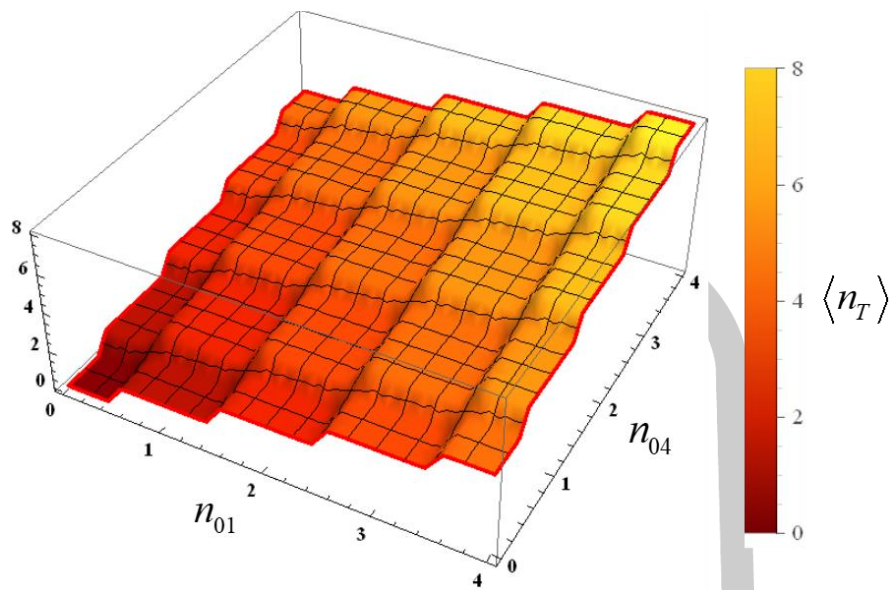
จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยสำหรับระบบ 4 เกาะโลหะ ในกรณีที่กำหนดให้ $n_{02} = n_{03} = 0.0$ สามารถคำนวณได้จากสมการ (4.25)–(4.28) ผลการคำนวณสามารถแสดงได้ดัง ภาพประกอบ 4.10 และภาพประกอบ 4.11 จากภาพประกอบ 4.10 และภาพประกอบ 4.11 ที่แสดงผลการคำนวณจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในกรณีที่แรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตของเกาะโลหะที่ 2 และ 3 มีค่าเป็นศูนย์ กล่าวคือ $n_{02} = n_{03} = 0.0$ พบว่า จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะโลหะที่ 1 และเกาะโลหะที่ 4 ซึ่งแสดงในภาพประกอบ 4.10 (ก) และ (ข) ตามลำดับ มีลักษณะการเปลี่ยนแปลงของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยเพิ่มขึ้นเป็นขั้นบันได โดยมีค่าตั้งแต่ 0–4 และจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะโลหะที่ 2 และ 3 ซึ่งแสดงในภาพประกอบ 4.11 (ก) และ (ข) มีค่าประมาณศูนย์ $\langle n_2 \rangle = \langle n_3 \rangle \approx 0$ สามารถอธิบายได้ว่า ในกรณีนี้อิเล็กตรอนไม่สามารถทะลุผ่านระบบไปได้ โดยระบบนี้สามารถเพิ่ม(หรือลด)จำนวนอิเล็กตรอนในเกาะโลหะที่ 1 และ 4 โดยอิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่จากขั้วไฟฟ้าซอร์สและเดรนเข้า(หรือออก)จากจากเกาะโลหะที่ 1 และ 4 ตามลำดับ แต่ไม่สามารถทะลุผ่านเข้าไปยังเกาะโลหะที่ 2 หรือ 3 ได้ จากภาพประกอบ 4.12 แสดงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบซึ่งมีลักษณะเพิ่มขึ้นเป็นขั้นบันได อาจกล่าวได้ว่าระบบมีพฤติกรรมคล้ายกับกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว นอกจากนั้น ภาพประกอบ 4.12 สามารถนำมาสร้างภาพฉายของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบ ซึ่งแสดงได้ดัง ภาพประกอบ 4.13



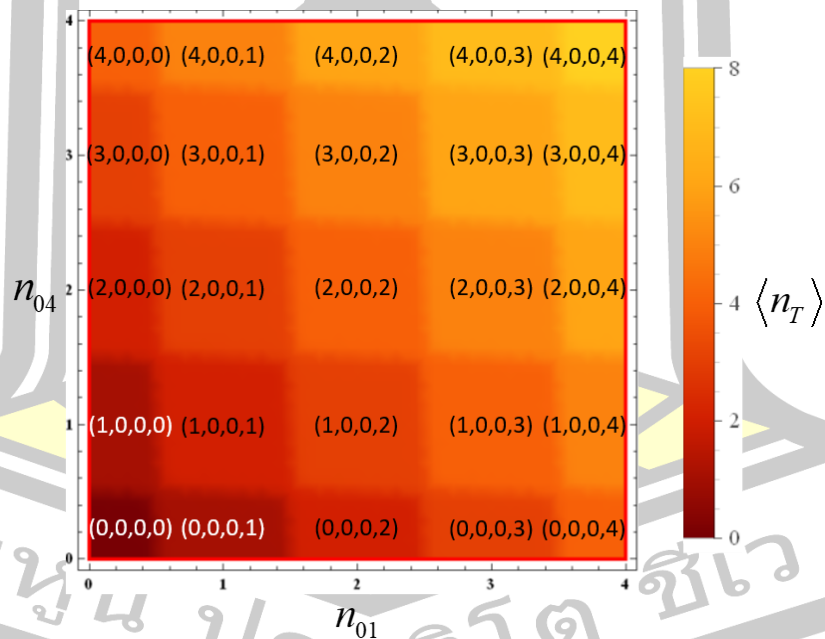
ภาพประกอบ 4.10 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะโลหะที่ 1 และ 4 ซึ่งแสดงในภาพประกอบ (ก) และ (ข) ตามลำดับ เมื่อกำหนดให้ $n_{02}, n_{03} = 0.0$ และมีการเปลี่ยนแปลง n_{01} และ n_{04} อยู่ในช่วง 0 ถึง 4 โดยพิจารณาที่ $\beta E_c = 20$



ภาพประกอบ 4.11 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะโลหะที่ 2 และ 3 และจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวม ซึ่งแสดงในภาพประกอบ (ก) และ (ข) ตามลำดับ และพิจารณาที่ $\beta E_C = 20$



ภาพประกอบ 4.12 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวม เมื่อกำหนดให้ $n_{02} = n_{03} = 0.0$ และพิจารณาที่ $\beta E_C = 20$

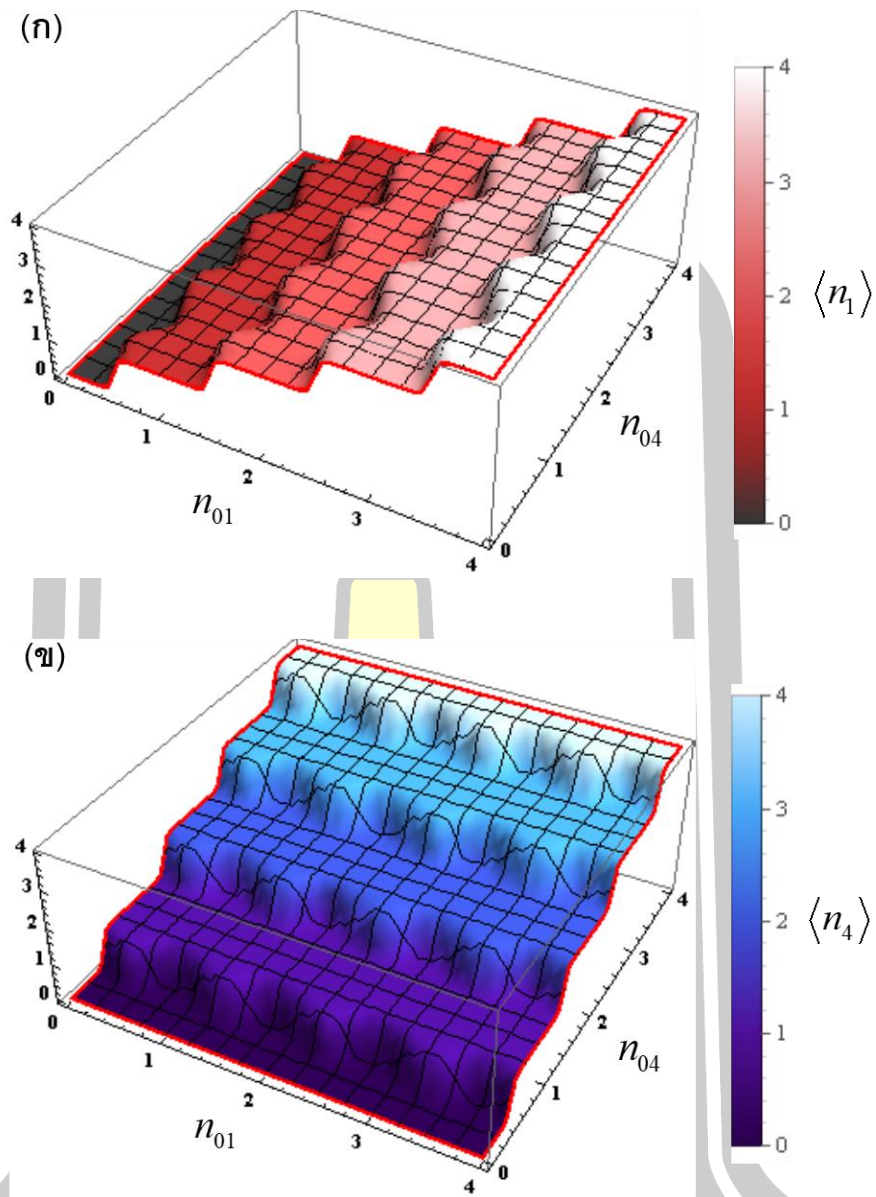


ภาพประกอบ 4.13 ภาพฉายของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบสามโลหะ โดยสัญลักษณ์คู่อันดับ (n_1, n_2, n_3, n_4) แสดงถึงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในเกาะโลหะที่ 1 2 3 และ 4 ตามลำดับ

ภาพประกอบ 4.13 แสดงภาพถ่ายของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบ โดยสัญลักษณ์ (n_1, n_2, n_3, n_4) แสดงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะโลหะลำดับที่ 1 2 3 และ 4 ตามลำดับ แผนภาพเสถียรของระบบ 4 เกาะโลหะ ที่กำหนดให้แรงดันไฟฟ้าขั้วเกิดของเกาะโลหะที่ 2 และ 3 มีค่าเป็นศูนย์ พบว่า ระบบสี่เกาะโลหะนี้ไม่สามารถส่งผ่านอิเล็กตรอนได้ กล่าวคือ อิเล็กตรอนไม่สามารถเคลื่อนที่จากขั้วไฟฟ้าซอร์สไปยังขั้วไฟฟ้าเดรนได้ เนื่องจาก อิเล็กตรอนไม่สามารถเคลื่อนที่เข้าไปในเกาะโลหะที่ 2 และ 3 เสมือนกับว่าในกรณีนี้เกาะโลหะที่ 2 และ 3 ประพฤติตัวเสมือนเป็นสวิตช์เปิด (open switch) ทำให้ระบบสี่เกาะโลหะในกรณีนี้มีพฤติกรรมเป็นกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวสองกล่องที่แยกออกจากกันอย่างอิสระ โดยเกาะที่ 1 และ 4 สามารถเพิ่มหรือลดอิเล็กตรอนได้พร้อมกัน แต่ไม่สามารถส่งผ่านอิเล็กตรอนผ่านระบบ กล่าวคือ สามารถเพิ่มและลดจำนวนอิเล็กตรอนในเกาะโลหะที่ 1 และ 4 ได้โดยการเพิ่มหรือลดแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกิดที่ต่อกับเกาะโลหะที่ 1 และ 4 ตามลำดับ

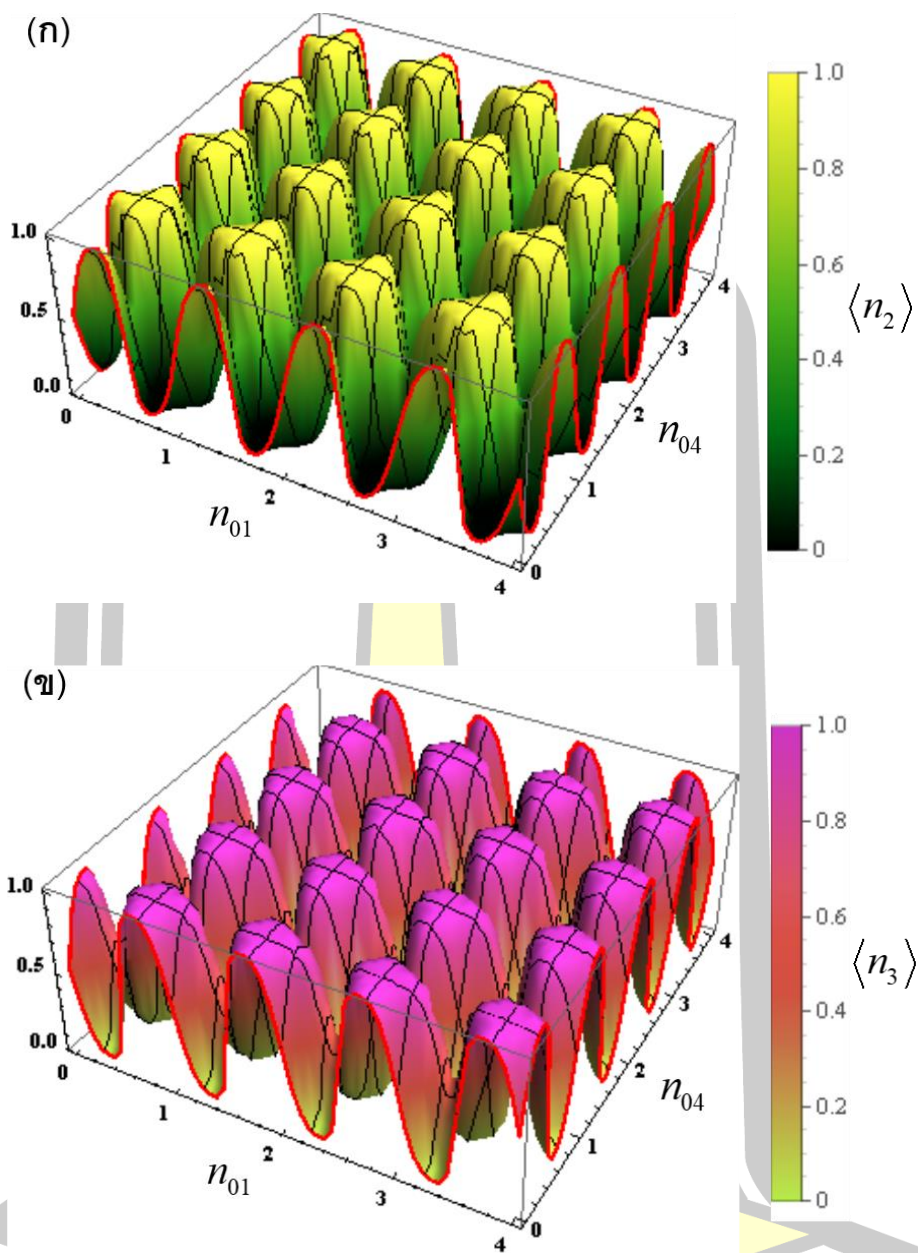
4.4.2 กรณีที่แรงดันไฟฟ้าขั้วเกิด $n_{02} = n_{03} = 0.5$

ในกรณีที่กำหนดให้ $n_{02} = n_{03} = 0.5$ และให้มีการแปลงแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกิดของเกาะโลหะ 1 และ 4 เท่านั้น พบว่า จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยสามารถคำนวณได้จากสมการ (4.25)–(4.28) ซึ่งผลการคำนวณสามารถแสดงได้ดังภาพประกอบ 4.14 และภาพประกอบ 4.15 จากภาพประกอบ 4.14 พบว่า จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในเกาะโลหะที่ 1 และ 4 มีค่าเพิ่มขึ้นแบบไม่ต่อเนื่องจาก 0 ถึง 4 ดังแสดงในภาพประกอบ 4.14 (ก) และ (ข) ตามลำดับ และในภาพประกอบ 4.15 แสดงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะโลหะที่ 2 และ 3 ซึ่งพบว่าการเปลี่ยนแปลงอยู่สองสถานะคือ 0 และ 1 เนื่องจากเงื่อนไขดังกล่าวจะทำให้เกาะโลหะที่ 2 และ 3 ประพฤติตัวเสมือนเป็นสวิตช์ปิด (closed switch) โดยเงื่อนไขนี้จะทำให้อิเล็กตรอนส่งผ่านจากเกาะโลหะที่ 1 ไปเกาะโลหะที่ 4 หรือการเคลื่อนที่ย้อนกลับจากเกาะโลหะที่ 4 ไปเกาะโลหะที่ 1 ได้ ทำให้สถานะของจำนวนอิเล็กตรอนในเกาะโลหะที่ 2 และ 3 มีสถานะเป็น 0 และ 1 ในทางที่ตรงกันข้าม เนื่องจากในกรณีนี้ระดับพลังงานของเกาะโลหะที่ 2 และ 3 เท่ากัน ทำให้สถานะดังกล่าวเกิดการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนได้เพียงทีละ 1 ตัวเท่านั้น

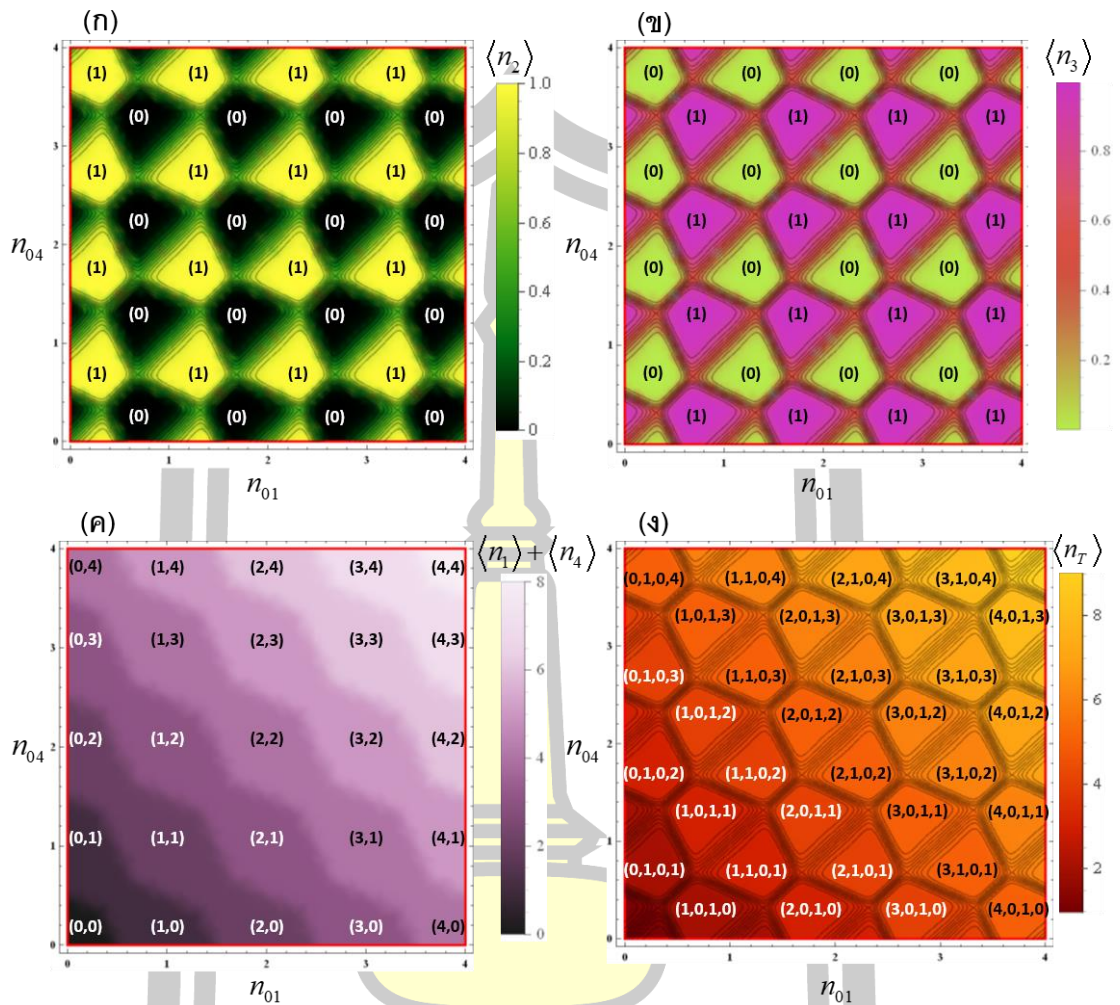


ภาพประกอบ 4.14 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะโลหะลำดับที่ 1 และ 4 แสดงดังภาพประกอบ (ก) และ (ข) ตามลำดับ เมื่อกำหนดให้ $n_{02} = n_{03} = 0.5$ และพิจารณาที่ค่า $\beta E = 20$

พหุคูณ ปณฺ ทิโต ชีเว



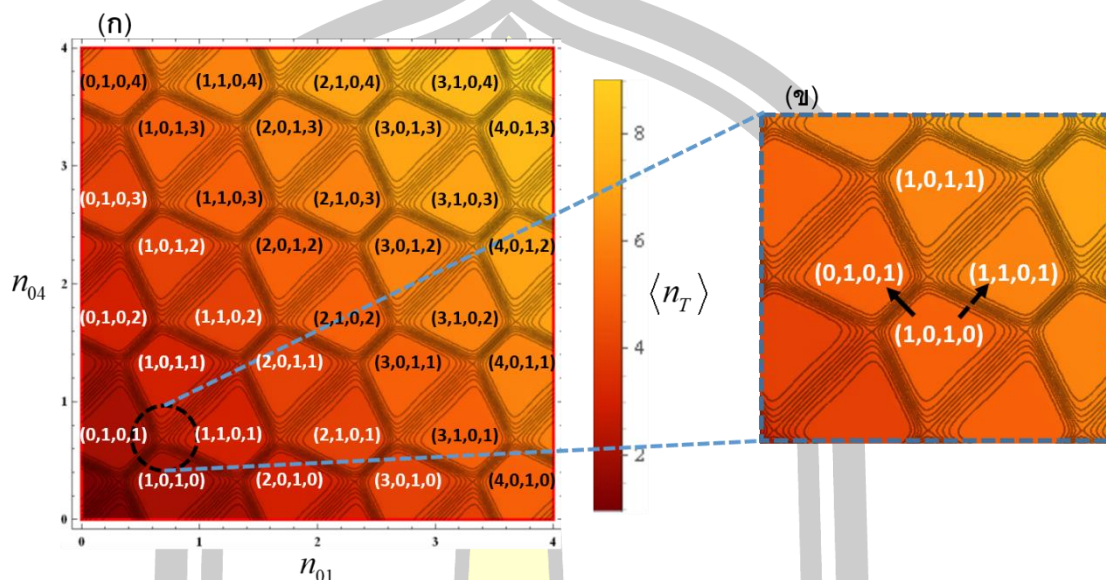
ภาพประกอบ 4.15 จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะโลหะลำดับที่ 2 และ 3 แสดงดังภาพประกอบ (ก) และ (ข) ตามลำดับ เมื่อกำหนดให้ $n_{02} = n_{03} = 0.5$ และพิจารณาที่ค่า $\beta E = 20$



ภาพประกอบ 4.16 (ก) และ (ข) แสดงภาพฉายของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะโลหะที่ 2 และ 3 และ (ค) ภาพฉายของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของเกาะโลหะที่ 1 และ 4 ในกรณีที่กำหนดให้ $n_{02} = n_{03} = 0.5$ คู่อันดับในภาพ (ก) ($\langle n_2 \rangle$) หมายถึงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยที่อยู่เกาะโลหะที่ 2 (ข) ($\langle n_3 \rangle$) หมายถึงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยที่อยู่เกาะโลหะที่ 3 ภาพ (ค) คู่อันดับ ($\langle n_1, n_4 \rangle$) หมายถึงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในเกาะที่ 1 และ 4 ตามลำดับ และภาพ (ง) คู่อันดับ ($\langle n_1, n_2, n_3, n_4 \rangle$) แสดงจำนวนอิเล็กตรอนในเกาะโลหะที่ 1 2 3 และ 4 ตามลำดับ

เมื่อพิจารณาภาพประกอบ 4.16 (ก) และ (ข) พบว่า จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในเกาะโลหะที่ 2 และ 3 จะมีค่าเป็น 0 หรือ 1 เท่านั้น เนื่องจากระดับพลังงานของเกาะโลหะทั้งสองมีค่าเท่ากัน ส่งผลให้จำนวนอิเล็กตรอนในเกาะโลหะที่ 2 และ 3 เพิ่มขึ้น(หรือลดลง) ในทางตรงกันข้าม ภาพประกอบ (ค) แสดงภาพฉายของอิเล็กตรอนรวมระหว่างเกาะโลหะที่ 1 และ 4 ซึ่งจากภาพ พบว่า

มีพฤติกรรมคล้ายปฏิกิริยาอิเล็กตรอนเดี่ยว โดยมีลักษณะการเพิ่มขึ้นของประจุแบบไม่ต่อเนื่อง ภาพประกอบ (ง) แสดงภาพฉายของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบ



ภาพประกอบ 4.17 (ก) ภาพฉายของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบสี่เกาะโลหะ โดยพิจารณาในกรณีที่ $n_{02}, n_{03} = 0.5$ สัญลักษณ์ (n_1, n_2, n_3, n_4) ในบริเวณสี่เหลี่ยมคางหมู แสดงถึงจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในเกาะโลหะที่ 1 2 3 และ 4 ตามลำดับ (ข) แสดงบริเวณที่เกิดการส่งผ่านประจุสองเหตุการณ์พร้อมกัน

จากภาพประกอบ 4.16 (ง) เมื่อนำแผนภาพดังกล่าวมาขยายขึ้น ในภาพประกอบ 4.17 พบว่า ภายในบริเวณสี่เหลี่ยมคางหมู เป็นบริเวณที่เกิดการขัดขวางแบบคูลอมบ์ กล่าวคือ จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในแต่ละเกาะโลหะมีค่าคงที่ จนกระทั่งแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทั้งสองมีค่าที่เหมาะสม อิเล็กตรอนจะสามารถส่งผ่านระหว่างเกาะโลหะได้ ทำให้จำนวนอิเล็กตรอนภายในระบบมีการเปลี่ยนแปลง

จากภาพประกอบ 4.17 (ข) พบว่า ภายในวงกลมเป็นบริเวณที่เรียกว่าจุดควอดรูเปิลพ้อยต์ (quadruple point) [37] ซึ่งเกิดจากการรวมกันของจุดทริปเปิลพ้อยต์ 2 จุด โดยบริเวณดังกล่าวเป็นตำแหน่งที่ระบบสามารถมีสถานะของประจุได้ 4 สถานะ กล่าวคือ $(0,1,0,1)$ $(1,0,1,0)$ $(1,1,0,1)$ หรือ $(1,0,1,1)$ ซึ่งบริเวณดังกล่าวสามารถเกิดการส่งผ่านอิเล็กตรอน 2 เหตุการณ์พร้อมกัน กล่าวคือ กรณีที่เกิดการส่งผ่านอิเล็กตรอน 2 และ 3 ตัว ระหว่างเกาะโลหะ โดยในภาพประกอบ 4.15 (ข) แสดงด้วยลูกศรทึบ บ่งบอกถึงการส่งผ่านอิเล็กตรอนสองตัว โดยอิเล็กตรอนสามารถเคลื่อนที่จากเกาะ

โลหะลำดับที่ 1 ไปยังเกาะโลหะลำดับที่ 2 และพร้อมกันนั้นอิเล็กตรอนก็เคลื่อนที่จากเกาะโลหะลำดับที่ 3 ไปยังเกาะโลหะลำดับที่ 4 แทนด้วยสัญลักษณ์ $(1,0,1,0) \leftrightarrow (0,1,0,1)$ สำหรับกรณีที่ 2 คือ การส่งผ่านอิเล็กตรอน 3 ตัว แสดงด้วยตัวอย่างลูกศรเส้นปะในภาพประกอบ 4.15 (ข) พบว่า เมื่อเพิ่มอิเล็กตรอน 1 ตัวเข้าไปยังเกาะโลหะลำดับที่ 1 อิเล็กตรอนที่อยู่ในเกาะโลหะลำดับที่ 1 จะถูกผลักไปยังเกาะโลหะลำดับที่ 2 และพร้อมกันนั้น อิเล็กตรอนที่อยู่ในเกาะโลหะลำดับที่ 3 จะเคลื่อนที่ไปยังเกาะโลหะลำดับที่ 4 โดยเหตุการณ์ทั้งสามแทนด้วยสัญลักษณ์ $(1,0,1,0) \leftrightarrow (1,1,0,1)$ กระบวนการดังกล่าวนี้ ถูกเรียกว่ากระบวนการควอนตัมเซลล์ูลาร์ออโตมาตา (quantum cellular automata process) [37], [73] ซึ่งเป็นเหตุการณ์เฉพาะที่เกิดขึ้นในระบบที่มีมากกว่า 2 เกาะโลหะ

จากการนำฟังก์ชันแบ่งส่วนและแอกชันยังผลของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม มาใช้คำนวณจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของระบบ พบว่า ผลการคำนวณในสมการ (4.1)–(4.4) สามารถนำไปสร้างภาพถ่ายของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบ ที่สามารถใช้เป็นแผนภาพเสถียรในกรณีต่างๆ ขึ้นอยู่กับเงื่อนไขการไบอัสที่ชั่วเกิดตามที่น่าสนใจพิจารณา จากการศึกษาแผนภาพดังกล่าว ทำให้สามารถอธิบายเงื่อนไขในการควบคุมอิเล็กตรอนเฉลี่ยในแต่ละเกาะโลหะได้โดยการปรับเปลี่ยนแรงดันไฟฟ้าที่ชั่วเกิด จากวิธีการที่กล่าวมาข้างต้น สามารถนำไปประยุกต์เป็นแนวทางในการอธิบายปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์ที่เกิดขึ้นในระบบที่โครงสร้างมีมากกว่า 4 เกาะโลหะ โดยปรับเปลี่ยนเงื่อนไขในการคำนวณตามลักษณะโครงสร้างของอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ที่ต้องการศึกษา



บทที่ 5

สรุปและอภิปรายผลการคำนวณ

5.1 สรุปผลการวิจัย

จากวัตถุประสงค์ของวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ที่ต้องการคำนวณแอกชันยังผลของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม และแสดงการนำแอกชันดังกล่าวไปประยุกต์ใช้อธิบายปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์ที่เกิดขึ้นในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยว โดยเริ่มจากการกำหนดฮามิลโทเนียนของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม จากนั้นเขียนฟังก์ชันแบ่งส่วนของระบบให้อยู่ในนิยามแบบปริพันธ์ของฟังก์ชันนอล พบว่า มีบางพจน์ในฮามิลโทเนียนที่สามารถคำนวณปริพันธ์ได้ในแบบแม่นยำและมีบางพจน์ที่ไม่สามารถคำนวณได้ ทำให้ฟังก์ชันแบ่งส่วนดังกล่าวถูกแสดงอยู่ในรูปของแอกชันยังผลของระบบ ที่ประกอบไปด้วย 2 ส่วนที่ยังคงเหลืออยู่คือ แอกชันของคูลอมบ์และแอกชันของการทะลุผ่าน อย่างไรก็ตาม เนื่องจากฟังก์ชันแบ่งส่วนดังกล่าวไม่สามารถคำนวณปริพันธ์ในแบบแม่นยำได้ ดังนั้น ในการตรวจสอบผลการคำนวณดังกล่าว จึงต้องอาศัยวิธีการควอนตัมมอนติคาร์โล เพื่อคำนวณปริมาณทางฟิสิกส์สำหรับการอธิบายปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์ที่เกิดขึ้นในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เดี่ยวดังต่อไปนี้

เพื่อตรวจสอบแอกชันยังผลของระบบที่คำนวณได้ ในวิทยานิพนธ์นี้ได้นำไปประยุกต์ใช้ในการคำนวณจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม จากนั้นได้ลดรูปสมการของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยดังกล่าว เพื่อนำไปอธิบายระบบ 2 เกาะโลหะหรือบีมอิเล็กตรอนเดี่ยว พบว่า เมื่อกำหนดให้แรงดันไฟฟ้าที่ขั้วซอร์สและเดรนมีค่าเป็นศูนย์ จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบที่ $\beta E_C = 21.3$ มีลักษณะการเพิ่มขึ้นแบบขั้นบันได ดังที่ได้แสดงในภาพประกอบ 4.3 จึงกล่าวได้ว่า ระบบบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวแสดงพฤติกรรมเป็นกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยว กล่าวคือ จะกักเก็บอิเล็กตรอนไว้ในเกาะโลหะ จากปรากฏการณ์ดังกล่าว ทำให้เราสามารถควบคุมการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนได้ที่ละ 1 ตัว ด้วยการเปลี่ยนแปลงแรงดันไฟฟ้าที่ขั้วเกตทั้งสอง นอกจากนี้ เมื่อสร้างภาพฉายจากจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบของบีมอิเล็กตรอนเดี่ยวในระนาบ n_{01} และ n_{02} พบว่า ภาพฉายที่ได้มีลักษณะคล้ายกับแผนภาพเสถียร และเมื่อทำการตรวจสอบขอบเขตของการเปลี่ยนแปลงจำนวนประจุกับผลการคำนวณที่ได้จากวิธีการมาตรฐาน พบว่า ในกรณีอุณหภูมิต่ำขอบเขตดังกล่าวซ้อนทับกัน และเมื่อคำนวณจุดที่เกิดการส่งผ่านสูงสุดหรือจุดที่ค่าความนำไฟฟ้ามีค่าสูงสุดแล้วนำไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองของลิ้มบัทและคณะก็พบว่า จุดที่เกิดการส่งผ่านสูงสุดดังกล่าวมีค่าใกล้เคียงกัน จึงสามารถสรุปได้ว่า ภาพฉายดังกล่าวสามารถนำไปใช้เป็นแผนภาพ

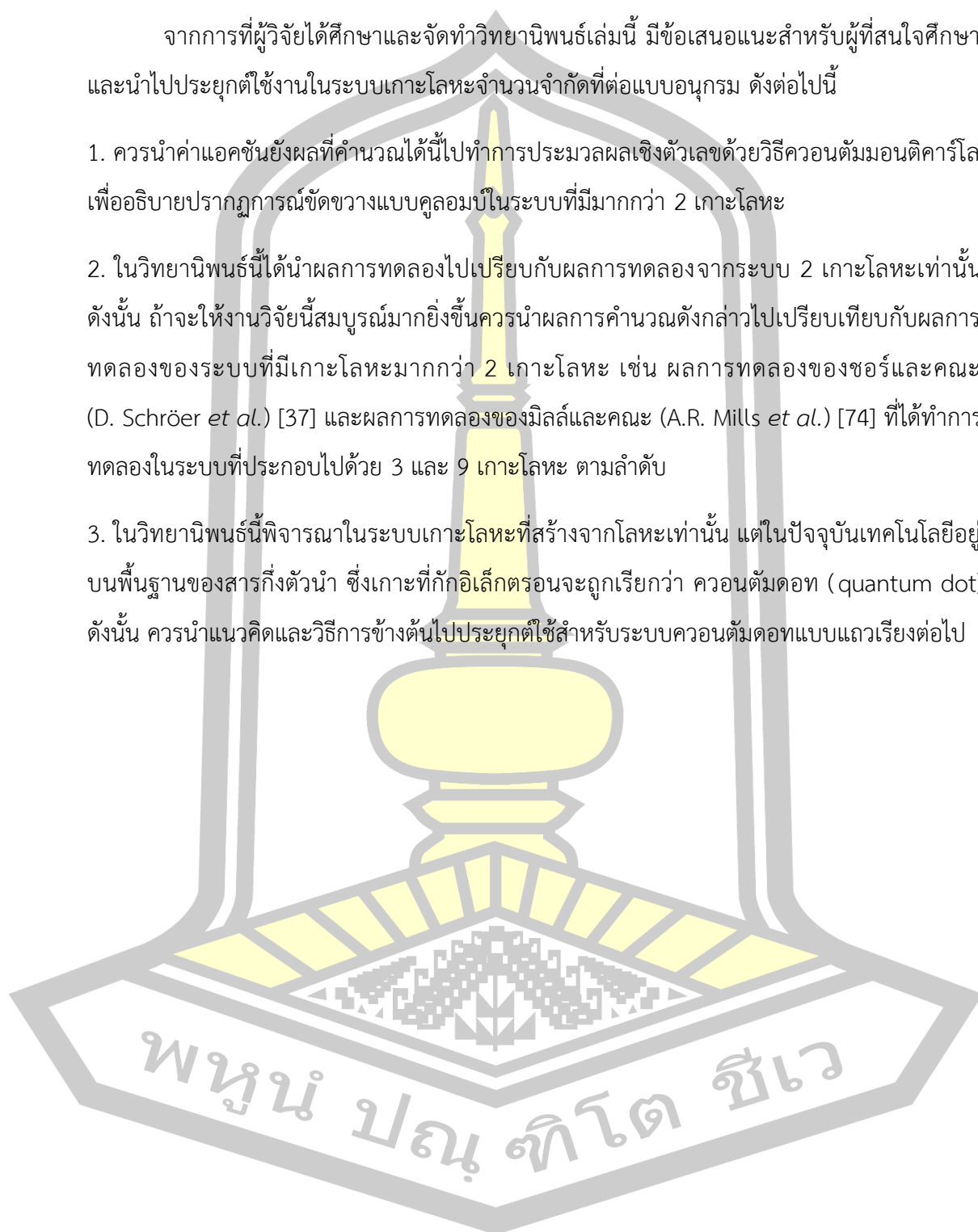
เสถียรของปั๊มอิเล็กตรอนเดี่ยวได้ และถูกเรียกว่า แผนภาพเสถียรแบบควอนตัม เนื่องจากแผนภาพเสถียรดังกล่าวได้พิจารณาผลของปรากฏการณ์การทะลุผ่านร่วมด้วย ซึ่งแตกต่างจากแผนภาพเสถียรจากวิธีการมาตรฐานที่ไม่พิจารณาผลของปรากฏการณ์การทะลุผ่าน

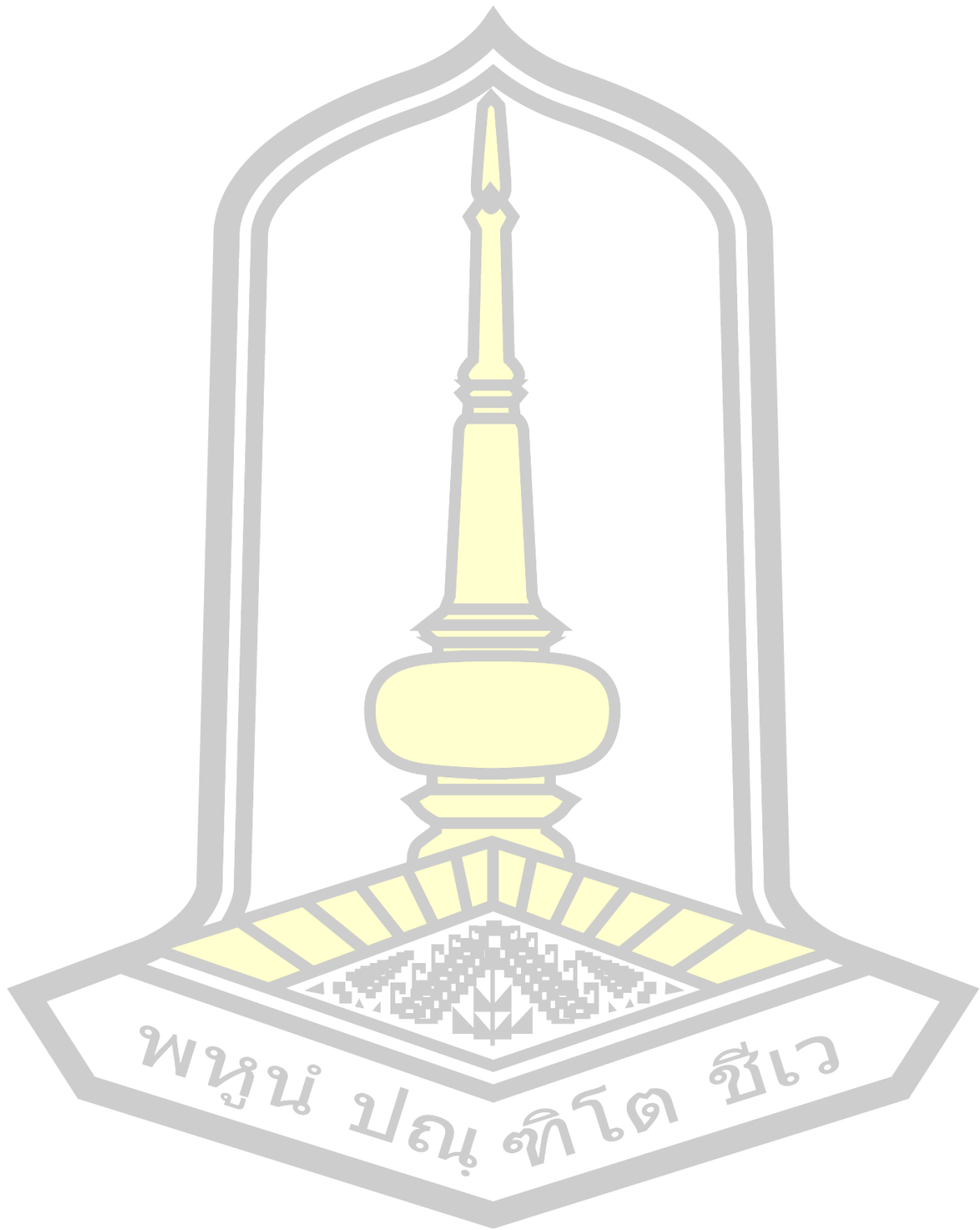
เมื่อนำวิธีการคำนวณจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยไปประยุกต์ใช้กับระบบที่ประกอบไปด้วย 4 เกาะโลหะ โดยในวิทยานิพนธ์ได้แบ่งการศึกษาออกเป็นสองกรณี โดยในกรณีแรกได้กำหนดให้ $n_{02} = n_{03} = 0.0$ จากผลการคำนวณพบว่า จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะโลหะที่ 2 และ 3 เป็นศูนย์เสมอ เนื่องจากอิเล็กตรอนไม่สามารถเข้าไปยังเกาะโลหะที่ 2 และ 3 ได้ แต่ในส่วนของเกาะที่ 1 และ 4 นั้น สามารถที่จะเพิ่ม(หรือลด)จำนวนอิเล็กตรอนในเกาะโลหะได้พร้อมกัน โดยระบบสามารถเพิ่ม(หรือลด)จำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยในเกาะโลหะที่ 1 และ 4 ได้เท่านั้น และอิเล็กตรอนสามารถเข้า(หรือออก)จากเกาะโลหะที่ 1 และ 4 ได้พร้อมกัน ดังนั้น กล่าวได้ว่าระบบภายใต้เงื่อนไขดังกล่าวแสดงพฤติกรรมเหมือนกับกล่องอิเล็กตรอนเดี่ยวสองกล่องที่แยกออกจากกัน ในกรณีที่สองกำหนดให้ $n_{02} = n_{03} = 0.5$ พบว่า ผลรวมของจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของเกาะโลหะที่ 2 และ 3 จะมีค่าเป็น 1 เสมอ โดยอิเล็กตรอนจะอยู่ในเกาะโลหะใดนั้นขึ้นอยู่กับว่า เมื่อเริ่มต้นพิจารณาจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยที่อยู่ในเกาะโลหะที่ 1 หรือ 4 เช่น ถ้าเริ่มต้นมีอิเล็กตรอนอยู่ในเกาะโลหะที่ 1 อิเล็กตรอนที่อยู่ในเกาะโลหะกึ่งกลางก็จะเลือกอยู่เกาะโลหะที่ไกลจากเกาะโลหะที่มีอิเล็กตรอนก่อน นอกจากนี้ เมื่อนำจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยรวมของระบบไปสร้างภาพฉายบนระนาบของ (n_{01}, n_{04}) พบว่ามีลักษณะสอดคล้องกับแผนภาพเสถียรแบบมาตรฐาน และสามารถแสดงจุดควอดรูเปิลพ้อยต์ซึ่งเป็นจุดที่แสดงปรากฏการณ์ควอนตัมเซลล์ลาร์ออตโตมาตา โดยปรากฏการณ์ดังกล่าวเป็นปรากฏการณ์ที่เกิดการส่งผ่านอิเล็กตรอนพร้อมกันมากกว่าสองตัว ซึ่งเป็นคุณสมบัติพิเศษของระบบที่มีเกาะโลหะมากกว่า 2 เกาะโลหะ จากที่กล่าวมาทั้งหมด สามารถสรุปได้ว่า ผลจากการคำนวณแอกชันยังผลและจำนวนอิเล็กตรอนเฉลี่ยของระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม และการยกตัวอย่างในการนำไปอธิบายปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์ในระบบ 2 และ 4 เกาะโลหะ สามารถนำไปประยุกต์ใช้ในการอธิบายปรากฏการณ์ขีดขวางแบบคูลอมบ์ในระบบที่ประกอบไปด้วยเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรมได้เสมอ เนื่องจากแอกชันยังผลที่คำนวณได้นี้เป็นของระบบในกรณีทั่วไป

5.2 ข้อเสนอแนะ

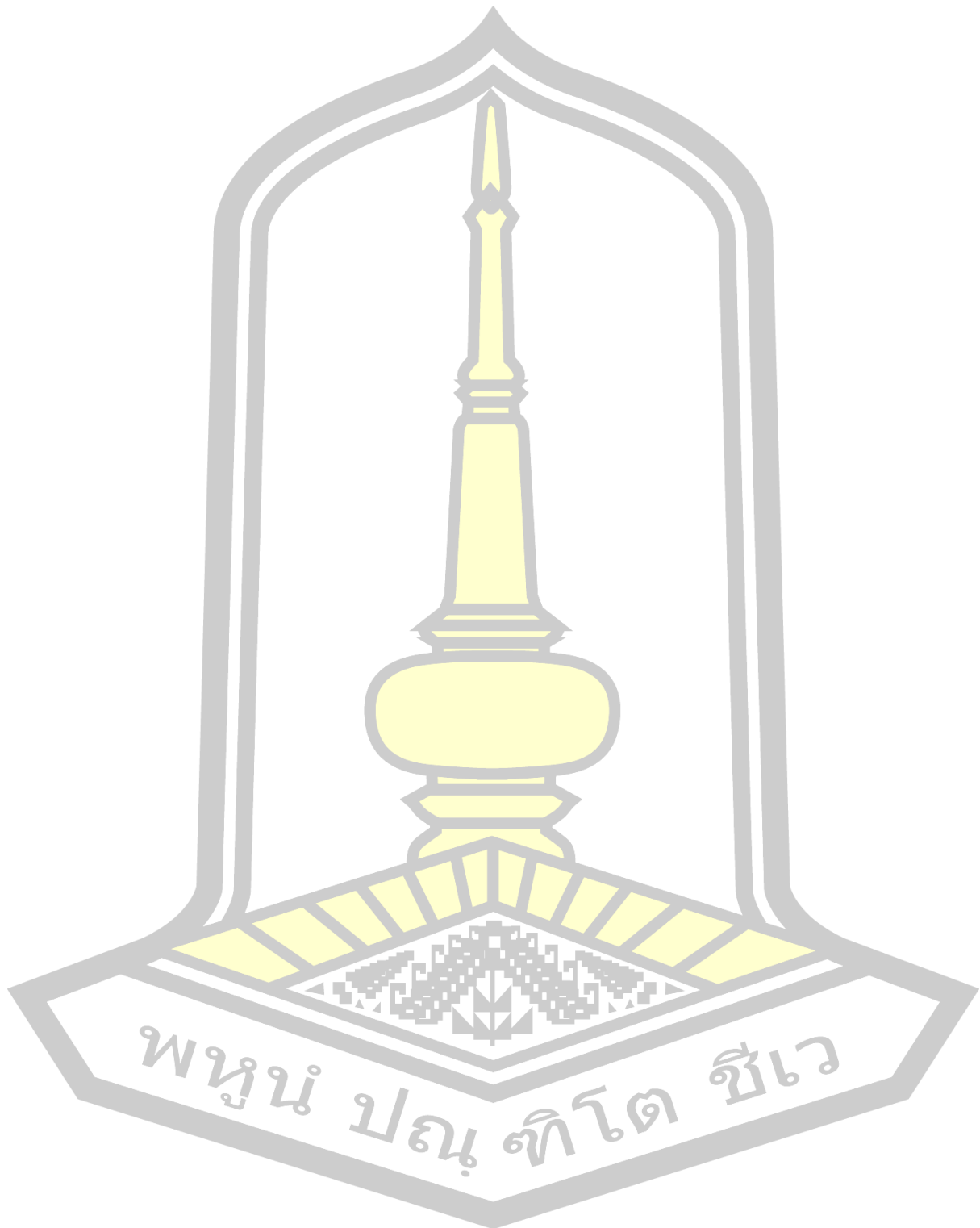
จากการที่ผู้วิจัยได้ศึกษาและจัดทำวิทยานิพนธ์เล่มนี้ มีข้อเสนอแนะสำหรับผู้สนใจศึกษาและนำไปประยุกต์ใช้งานในระบบเกาะโลหะจำนวนจำกัดที่ต่อแบบอนุกรม ดังต่อไปนี้

1. ควรนำค่าแอกชันยังผลที่คำนวณได้นี้ไปทำการประมวลผลเชิงตัวเลขด้วยวิธีควอนตัมมอนติคาร์โล เพื่ออธิบายปรากฏการณ์ขัดขวางแบบคูลอมบ์ในระบบที่มีมากกว่า 2 เกาะโลหะ
2. ในวิทยานิพนธ์นี้ได้นำผลการทดลองไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองจากระบบ 2 เกาะโลหะเท่านั้น ดังนั้น ถ้าจะให้งานวิจัยนี้สมบูรณ์มากยิ่งขึ้นควรนำผลการคำนวณดังกล่าวไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองของระบบที่มีเกาะโลหะมากกว่า 2 เกาะโลหะ เช่น ผลการทดลองของซอร์และคณะ (D. Schröer *et al.*) [37] และผลการทดลองของมิลล์และคณะ (A.R. Mills *et al.*) [74] ที่ได้ทำการทดลองในระบบที่ประกอบไปด้วย 3 และ 9 เกาะโลหะ ตามลำดับ
3. ในวิทยานิพนธ์นี้พิจารณาในระบบเกาะโลหะที่สร้างจากโลหะเท่านั้น แต่ในปัจจุบันเทคโนโลยีอยู่บนพื้นฐานของสารกึ่งตัวนำ ซึ่งเกาะที่กักอิเล็กตรอนจะถูกเรียกว่า ควอนตัมดอท (quantum dot) ดังนั้น ควรนำแนวคิดและวิธีการข้างต้นไปประยุกต์ใช้สำหรับระบบควอนตัมดอทแบบแถวเรียงต่อไป





บรรณานุกรม



- [1] M. Grabert, H. Devoret, and M. Kastner, "Single charge tunneling coulomb blockade phenomena in nanostructures," *Phys. Today*, vol. 46, no. 4, pp. 62–63, 1993.
- [2] H. Devoret, D. Esteve, and C. Urbina, "Single-electron transfer in metallic nanostructures," *Nature*, vol. 360, no. 6404, pp. 547–553, 1992.
- [3] T. Fulton, P. Gammel, and L. Dunkleberger, "Determination of Coulomb-blockade resistances and observation of the tunneling of single electrons in small-tunnel-junction circuits," *Ther. Res. Cent.*, vol. 67, no. 22, pp. 3148–3151, 1991.
- [4] W. Krech, A. Hädicke, and F. Seume, "Master-equation approach to macroscopic quantum tunneling of charge in ultrasmall single-electron-tunneling double junctions," *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 48, no. 8, pp. 5230–5240, 1993.
- [5] D. Averin, "Charge sensitivity of the single electron tunneling transistor with discrete energy spectrum," *J. Appl. Phys.*, vol. 73, no. 5, pp. 2593–2595, 1993.
- [6] Y. Nakamura, C. Chen, and J.-S. Tsai, "100-k operation of Al-based single-electron transistors," *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 35, no. Part 2, No. 11A, pp. L1465–L1467, 1996.
- [7] H. Grabert and H. Horner, "Special issue on single charge tunneling," *Zeitschrift für Phys. B Condens. Matter*, vol. 85, no. 3, p. 317, 1991.
- [8] C. Negri and F. Pistolesi, "Charge fluctuations in single-electron tunneling oscillations," *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 85, no. 11, pp. 1–11, 2012.
- [9] H. Grabert, "Single charge tunneling: a brief introduction," *Zeitschrift für Phys. B Condens. Matter*, vol. 85, no. 3, pp. 319–325, 1991.
- [10] Y. Takahashi, Y. Ono, and A. Fujiwara, "Silicon single-electron devices," *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 14, no. 39, pp. R995–R1033, 2002.
- [11] K. Yano, K. Seki, T. Ishii, T. Hashimoto, T. Kobayashi, and F. Murai, "Room-temperature single-electron memory," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 41, no. 9, pp. 1628–1638, 1994.

- [12] T. Bogart, J. Beasley, and G. Rico, *Electronic devices and circuits*. Oxford: Pergamon, 1968.
- [13] B. Scaling, A. Constant, F. Scaling, A. Constant, and V. Scaling, "Module 2 : mosfet lecture 7 : advanced topics," pp. 2–4, 2000.
- [14] U. Mahima, "Design and simulation of 2 – bit comparator using SET based logic circuits," vol. 2, no. 7, pp. 66–70, 2015.
- [15] S. Tiwari, F. Rana, H. Hanafi, A. Hartstein, E. F. Crabbé, and K. Chan, "A silicon nanocrystals based memory," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 1377, no. November 2018, p. 1377, 1995.
- [16] A. N. Korotkov, R. H. Chen, and K. K. Likharev, "Possible performance of capacitively coupled single-electron transistors in digital circuits," *Journal of Applied Physics*, vol. 78, no. 4. pp. 2520–2530, 1995.
- [17] A. Toriumi, K. Uchida, R. Ohba, and J. Koga, "Challenge and prospects for silicon SET/FET hybrid circuits," *Phys. B Condens. Matter*, vol. 272, no. 1–4, pp. 522–526, 1999.
- [18] H. Inokawa, A. Fujiwara, and Y. Takahashi, "A merged single-electron transistor and metal-oxide-semiconductor transistor logic for interface and multiple-valued functions," *Japanese J. Appl. Physics, Part 1 Regul. Pap. Short Notes Rev. Pap.*, vol. 41, no. 4 B, pp. 2566–2568, 2002.
- [19] Y. Takahashi, A. Fujiwara, Y. Ono, and K. Murase, "Silicon single-electron devices and their applications Si island," 2000.
- [20] P. Lafarge, H. Pothier, E. Williams, D. Esteve, C. Urbina, and M. Devoret, "Direct observation of macroscopic charge quantization," *Zeitschrift für Phys. B Condens. matter*, vol. 85, no. 3, pp. 547–553, 1991.
- [21] J. Cervera, P. Ramirez, and S. Mafé, "Logic gates scheme based on Coulomb blockade in metallic nanoclusters with organic ligands," *Phys. Lett. Sect. A Gen. At. Solid State Phys.*, vol. 374, no. 4, pp. 610–613, 2010.
- [22] R. Schoelkopf, P. Wahlgren, A. Kozhevnikov, P. Delsing, and D. Prober, "The radio-frequency single-electron transistor (RF-SET): a fast and ultrasensitive electrometer," *Science (80-.)*, vol. 1238, no. 1998, 2011.

- [23] D. Vion *et al.*, “Manipulating the quantum state of an electrical circuit,” *Science* (80-.), vol. 296, no. 5569, pp. 886–889, 2002.
- [24] J. Park *et al.*, “Coulomb blockade and the Kondo effect in single-atom transistors,” *Nature*, vol. 417, no. 6890, pp. 722–725, 2002.
- [25] W. Liang, M. P. Shores, M. Bockrath, J. R. Long, and H. Park, “Kondo resonance in a single-molecule transistor,” *Nature*, vol. 417, no. 6890, pp. 725–729, 2002.
- [26] J. Nygård, D. H. Cobden, and P. E. Lindelof, “Kondo physics in carbon nanotubes,” *Nature*, vol. 408, no. November, pp. 1–5, 2000.
- [27] T. Ihn *et al.*, “Graphene single-electron transistors,” *Mater. Today*, vol. 13, no. 3, pp. 44–50, 2010.
- [28] C. Wallisser *et al.*, “Conductance of the single-electron transistor: a comparison of experimental data with Monte Carlo calculations,” *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 66, no. 12, pp. 1253141–1253148, 2002.
- [29] C. Theis, “Conductance of single electron devices from imaginary-time path integrals,” *J. Phys.*, vol. 56, no. 8, 2004.
- [30] H. Pothier, P. Lafarge, C. Urbina, D. Esteve, and M. H. Devoret, “Single-electron pump based on charging effects,” *Epl*, vol. 17, no. 3, pp. 249–252, 1992.
- [31] X. Jehl, M. W. Keller, R. L. Kautz, J. Aumentado, and J. M. Martinis, “Counting errors in a voltage-biased electron pump,” *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 67, no. 16, pp. 1–9, 2003.
- [32] B. Limbach, P. Vom Stein, C. Wallisser, and R. Schäfer, “Coulomb blockade in two-island systems with highly conductive junctions,” *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 72, no. 4, pp. 1–7, 2005.
- [33] P. Srivilai, “Quantum Monte Carlo study of the metallic single electron pump,” Albert-Ludwigs-Universität, 2012.
- [34] B. Limbach, P. V Stein, C. Wallisser, and R. Schafer, “Coulomb blockade in two island systems with highly conductive junctions,” *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 72, no. 4, pp. 2–5, 2005.
- [35] A. Vidan, R. M. Westervelt, M. Stopa, M. Hanson, and A. C. Gossard, “Triple quantum dot charging rectifier,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 85, no. 16, pp. 3602–3604, 2004.

- [36] J. Łuczak and B. R. Bułka, “Two-qubit logical operations in three quantum dots system,” *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 30, no. 22, 2018.
- [37] D. Schröer *et al.*, “Electrostatically defined serial triple quantum dot charged with few electrons,” *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 76, no. 7, pp. 1–11, 2007.
- [38] C. Wasshuber, H. Kosina, and S. Selberherr, “SIMON - a simulator for single-electron tunnel devices and circuits,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 16, pp. 937–944, 1997.
- [39] J. Negele and H. Orland, *Quantum many-particle systems*. Perseus Books, 1998.
- [40] R. Shankar, “Renormalization-group approach to interacting fermions,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 66, no. 1, pp. 129–192, 1994.
- [41] H. Tero T, *The Physics of Nanoelectronics*. Oxford: OUP Oxford, 2013.
- [42] W. Hofstetter and W. Zwerger, “Single-Electron Box and the Helicity Modulus of an Inverse Square XY Model,” no. 5, pp. 3737–3740, 1997.
- [43] X. Wang, R. Egger, and H. Grabert, “Coulomb charging energy for arbitrary tunneling strength,” *Europhys. Lett.*, vol. 38, no. 7, pp. 545–550, 1997.
- [44] C. P. Herrero and A. D. Zaikin, “Strong charge fluctuations in the single-electron box: A quantum Monte Carlo analysis,” vol. 59, no. 8, pp. 5728–5737, 1999.
- [45] J. König and H. Schoeller, “Strong Tunneling in the Single-Electron Box,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 81, no. 16, pp. 3511–3514, 1998.
- [46] T. Thongsuk, “Calculation of average electron numbers on the metallic single electron transistor by quantum Monte Carlo method,” Mahasarakham University, 2013.
- [47] W. Rainer, *Nanoelectronics and information technology*, 3rd ed. 2012.
- [48] C. Theis, “Conductance of single electron devices from imaginary-time path integrals,” Albert-Ludwigs-University, 2004.
- [49] H. Grabert and G. Go, “Charge fluctuations in the single-electron box,” vol. 63, pp. 1–19, 2001.
- [50] W. G. Van Der Wiel, S. De Franceschi, J. M. Elzerman, T. Fujisawa, T. S., and Kouwenhoven L. P., “Electron transport through double quantum dots,” vol. 75, no. January, pp. 1–22, 2003.

- [51] N. Komkrit, "Stability diagram of single electron pumps," Mahasarakham, 2016.
- [52] J. J. Sakurai and E. D. Commins, "Modern quantum mechanics, revised edition," *Am. J. Phys.*, vol. 63, no. 1, pp. 93–95, 1995.
- [53] R. P. Feynman, "Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 20, no. 2, 1948.
- [54] R. P. Feynman, A. R. Hibbs, and D. F. Styer, *Quantum mechanics and path integrals*. Mineola, N.Y.: Dover Publications, 2014.
- [55] F. K. Kuhnemund and M. Wacker, "Commutator conditions implying the convergence of the Lie-Trotter products," *Proc. Am. Math. Soc. Math. Soc.*, vol. 129, no. 12, pp. 3569–3582, 2001.
- [56] A. Altland and B. Simons, *Condensed matter field theory*. Cambridge [etc.]: Cambridge University Press, 2013.
- [57] W. Nolting, *Grundkurs theoretische physik*, 5th ed. New York: SPRINGER, 2002.
- [58] F. . Berazin, *The method of second quantization*. New York: Academic Press, 1965.
- [59] M. S. Swanson, *Path integrals and quantum processes*, 1st ed. Academic Press, 1992.
- [60] I. N. Bronstejn and K. A. Semedjajew, *Taschenbuch der mathematik*, 23rd ed. Verlag Harri Deutsch, Thun, Frankfurt/Main, 1987.
- [61] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical recipes in c - The art of scientific computing*, 2nd ed., vol. 16, no. 2. Cambridge [etc.]: Cambridge University Press, 1992.
- [62] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, *Monte Carlo methods in statistical physicse*. Oxford, 1999.
- [63] B. Everitt, *The cambridge dictionary of statistics*. Cambridge [etc.]: Cambridge University Press, 2002.
- [64] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, "Equation of state calculations by fast computing machines," *J. Chem. Phys.*, vol. 21, no. 6, pp. 1087–1092, 1953.

- [65] H. Van Houten, C. W. J. Beenekker, and A. A. M. Staring, *Single charge tunnling: Coulomb-blockade phenomena in nanostructures*. New York: Plenum Press, 1992.
- [66] P. Symmetry, *Many-Particle Systems*.
- [67] V. Ambegaokar, U. Eckern, and G. Schön, “Quantum dynamics of tunneling between superconductors,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 48, no. 25, pp. 1745–1748, 1982.
- [68] H. Grabert and G. Göppert, “Charge fluctuations in the single-electron box,” vol. 63, pp. 1–19, 2001.
- [69] S. Phoungyod, “Effective charging energy of the metallic single-electron transistor,” Mahasarakham University, 2014.
- [70] P. Harata, “Effective capacitance of the metallic single electron transistor,” Mahasarakham University, 2016.
- [71] A. Intanin, “Coulomb action of finite one-dimensional array of tunneling junctions,” Mahasarakham, 2015.
- [72] P. Rungsri, W. Boonruesi, and S. Sampan-a-pai, “Quantum Monte Carlo study of the metallic single-electron transistor,” Mahasakham University, 2014.
- [73] G. Yamahata, Y. Tsuchiya, H. Mizuta, K. Uchida, and S. Oda, “Electron transport through silicon serial triple quantum dots,” *Solid. State. Electron.*, vol. 53, no. 7, pp. 779–785, 2009.
- [74] A. R. Mills, D. M. Zajac, M. J. Gullans, F. J. Schupp, T. M. Hazard, and J. R. Petta, “Shuttling a single charge across a one-dimensional array of silicon quantum dots,” *Nat. Commun.*, vol. 10, no. 1, 2019.

พหุ ประถมศึกษา

ประวัติผู้เขียน

ชื่อ	นายพิพัฒน์ ทาระทา
วันเกิด	วันที่ 2 กันยายน พ.ศ.2536
สถานที่เกิด	อำเภอคำม่วง จังหวัดกาฬสินธุ์
สถานที่อยู่ปัจจุบัน	บ้านเลขที่ 18 หมู่4 บ้านโพน อำเภอคำม่วง จังหวัดกาฬสินธุ์ รหัสไปรษณีย์ 46180
ตำแหน่งหน้าที่การงาน	นิสิตในโครงการทุนเรียนดีวิทยาศาสตร์แห่งประเทศไทย
สถานที่ทำงานปัจจุบัน	หน่วยวิจัยฟิสิกส์ทฤษฎีสารควบแน่น (Theoretical Condensed Matter Physics Research Unit) ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหาสารคาม
ประวัติการศึกษา	<p>พ.ศ.2548 สำเร็จการศึกษาระดับประถมศึกษาจากโรงเรียนชุมชนโพนพิทยาคม ตำบลโพน อำเภอคำม่วง จังหวัดกาฬสินธุ์</p> <p>พ.ศ.2551 สำเร็จการศึกษาระดับมัธยมศึกษาตอนต้นจากโรงเรียนกมลาลักษณ์ ตำบลศรีธาตุ อำเภอศรีธาตุ จังหวัดอุดรธานี</p> <p>พ.ศ.2554 สำเร็จการศึกษาระดับมัธยมศึกษาตอนปลายจากโรงเรียนอุดรพัฒนาการ ตำบลบ้านจั่น อำเภอเมืองอุดรธานี จังหวัดอุดรธานี</p> <p>พ.ศ.2558 สำเร็จการศึกษาระดับปริญญาตรี วิทยาศาสตร์บัณฑิต (เกียรตินิยมอันดับ1 เหรียญทอง) สาขาวิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหาสารคาม</p> <p>พ.ศ. 2564 สำเร็จการศึกษาระดับปรัชญาดุษฎีบัณฑิต (ปร.ด.) ฟิสิกส์ แบบ 2.2 ก (หลักสูตรโทควบเอก) คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหาสารคาม</p>

พูน ปณ ทัโต ชีเว

