

Tính toán các mức năng lượng của điện tử trong dây lượng tử bằng phương pháp khối lượng hiệu dụng và phương pháp liên kết chặt : Luận văn ThS /

Dương Ngọc Tùng ; Nghd. : PGS.TS. Nguyễn Như Đạt . - H. : ĐHCN, 2006 . - 60 tr. + CD-ROM

Tóm tắt: Tìm hiểu các cấu trúc có kích thước nano: cấu trúc dị thể, cấu trúc giới hạn lượng tử, mật độ trạng thái; Trình bày về phương pháp gần đúng khối lượng hiệu dụng áp dụng cho tính hàm sóng và năng lượng của electron trong dây lượng tử. Tính mức năng lượng gián đoạn của electron cho dây Ge. Trình bày về phương pháp liên kết chặt-Tight-Binding (TB) áp dụng cho tính hàm sóng và năng lượng của electron trong dây Ge. So sánh kết quả và rút ra ý nghĩa vật lý khi áp dụng hai phương pháp tính năng lượng của điện tử trong dây lượng tử

Mở đầu.....	2
Chương 1. CÁC CẤU TRÚC CÓ KÍCH THƯỚC NANÔ.[1,2,3,18]	
1.1 Cấu trúc dị thể.....	5
1.2 Cấu trúc giới hạn lượng tử.....	9
1.3 Mật độ trạng thái.....	17
Chương 2. TRẠNG THÁI ĐIỆN TỬ TRONG DÂY LƯỢNG TỬ.[4,5,15,16,17]	
2.1. Mô hình nghiên cứu.....	19
2.2. Trạng thái của electron trong dây lượng tử.....	19
2.3. Phương pháp gần đúng khối lượng hiệu dụng.....	20
2.4. Hàm sóng và năng lượng của electron trong dây lượng tử.....	26

2.5. Áp dụng cho bài toán dây Si trong trường hợp khối lượng hiệu dụng là bất đẳng hướng.....30

2.6. Áp dụng tính số.....32

Chương 3. PHƯƠNG PHÁP LIÊN KẾT CHẶT. [6,14]

3.1 Giới thiệu chung về phương pháp liên kết chặt.....32

3.2 Nguyên lí chung của phương pháp liên kết chặt.....34

3.3 Các tham số TB.34

3.4 Xây dựng ma trận Hamilton.....35

3.5 Xây dựng tinh thể dây nanô.....39

3.6. So sánh kết quả và thảo luận về hai phương pháp tính trong sự phụ thuộc vào bán kính của dây.....41

Kết luận.....43

Phụ lục 144

Phụ lục 2.....51

Tài liệu tham khảo.....60