

Electron transport in nanostructure lanthanum vanadium oxide quantum dots for solar cells

Mohammad Amini, Peyman Sahebsara*

Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran

Received: 29.10.2023 Final revised: 04.03.2024 Accepted: 20.05.2024

Doi: [10.22055/jrmbms.2024.19406](https://doi.org/10.22055/jrmbms.2024.19406)

Abstract

The incorporation of quantum dots in solar cells primarily aims to enhance efficiency by broadening the light absorption spectrum. However, this optimization necessitates careful examination of how these dots influence electronic transport. In this research, we focused on lanthanum vanadium oxide (LVO) quantum dots, chosen for their energy band gap that aligns optimally with the Shockley - Queisser limit curve for solar - to - electrical energy conversion. The Green's function approach was employed to calculate electron transport through these quantum dots, positioned as the central component between two metal conductors. Lanthanum vanadium oxide, classified as a strongly correlated material and a Mott insulator, required the application of the Hubbard model in second quantization representation for accurate system description. The Green's function was derived using both the equation of motion method and Dyson's equation. Calculations encompassed electron transmission probabilities for configurations involving two and four quantum dots. Furthermore, a key finding revealed an inverse relationship between electron - electron interaction strength and electronic transport efficiency. As interactions intensified, a decrease in electronic transport was observed. For the material under study, the optimal value of the Hubbard quantity at which electronic transport and system efficiency have their maximum value was determined.

Keywords: Electron transport, Quantum dots, Lanthanum vanadium oxide, Non-equilibrium green's function, Equation of motion, Dyson equation

*Corresponding Author: sahebsara@iut.ac.ir

ترابرد الکترونی نانو ساختار نقاط کوآنتومی لانتانیوم و انادیوم اکساید برای

سلول‌های خورشیدی

محمد امینی، پیمان صاحب‌سرا*

گروه فیزیک، دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان، ایران

دریافت: ۱۴۰۲/۰۸/۰۷ ویرایش نهایی: ۱۴۰۲/۱۲/۱۴ پذیرش: ۱۴۰۳/۰۲/۳۱

Doi: [10.22055/jrmb.2024.19406](https://doi.org/10.22055/jrmb.2024.19406)

چکیده

یکی از اهداف استفاده از نقاط کوآنتومی در سلول‌های خورشیدی، افزایش ضریب کارایی آنها از طریق گسترش بیناب جذب نور در آنها است. با این حال در این بهینه‌سازی تأثیر این نقاط بر ترابرد الکترونی در آنها باید به‌دقت بررسی گردد. در این پژوهش از نقاط کوآنتومی لانتانیوم و انادیوم اکساید استفاده شد که شکاف نوار انرژی آن مطابق منحنی محدودیت شاکلی-کویسر در مقدار بهینه برای تبدیل انرژی خورشید به انرژی الکتریکی است. با رهیافت تابع گرین، ترابرد الکترون از میان نقاط کوآنتومی لانتانیوم و انادیوم اکساید به‌عنوان قطعه مرکزی که به دو هادی فلزی متصل است، محاسبه شد. این ماده جزء مواد همبسته قوی است و نوعی عایق مات محسوب می‌شود از این منظر برای توصیف این سامانه از الگوی هابارد در نمایش کوآنتش دوم استفاده شد و با استفاده از روش معادله حرکت و همچنین معادله دایسون، تابع گرین به‌دست آمده است. احتمال عبور الکترون در دو و چهار نقطه کوآنتومی از این ماده محاسبه گردید. همچنین این پژوهش نشان داد که با افزایش میزان برهم‌کنش الکترون-الکترون، ترابرد الکترونی کاهش می‌یابد. برای ماده مورد مطالعه، مقدار بهینه کمیت هابارد که به‌ازای آن ترابرد الکترونی و بازده سامانه بیشینه مقدار خود را دارد، مشخص شد.

کلیدواژگان: ترابرد الکترونی، نقاط کوآنتومی، لانتانیوم و انادیوم اکساید، تابع گرین غیرتعادلی، معادله حرکت، معادله دایسون

مقدمه

الکتریکی خوب به رسانای الکتریکی خوب تحت عوامل مختلفی است. به‌عبارتی بهتر موادی که در آنها گذار مات اتفاق می‌افتد مواد همبسته قوی هستند. بنابراین هامیلتونی هابارد یک الگوی مناسب در نمایش کوآنتش دوم برای این گونه مواد است [۱].

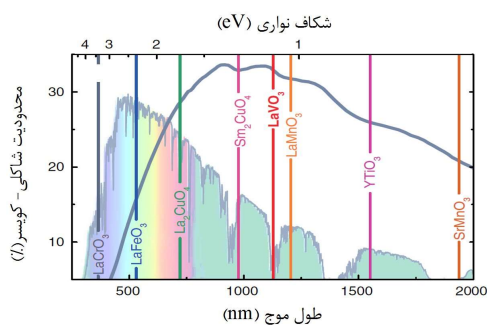
ساختار لانتانیوم و انادیوم اکساید

یاخته واحد این ماده در دمای اتاق ساختار اورتورومبیک با پارامترهای شبکه (

لانتانیوم و انادیوم اکساید (LaVO_3) جزء مواد پروسکایت عایق مات است، عایق‌های مات موادی هستند که باید بر اساس نظریه نواری رفتار رسانندگی از خود نشان دهند، اما در واقع، آن‌ها به‌عنوان یک عایق عمل می‌کنند. با اکسایش آن‌ها یا با افزودن برخی ناخالصی‌ها، الکترون آزاد می‌شود و گذار الکترون (گذار مات) رخ می‌دهد و آنها مانند یک رسانا رفتار می‌کنند. اصولاً گذار مات تغییر رفتار مواد از عایق

*نویسنده مسئول: sahebsara@iut.ac.ir



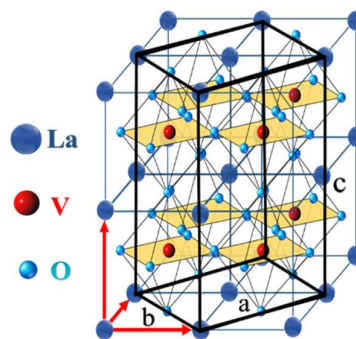


شکل ۳. منحنی محدودیت شاکلی-کوپرسر برای مواد مختلف [۳].

بر اساس محاسبات اصول اولیه و روش $GGA+U$ ساختار نواری لانتانیم و انادیوم اکساید مطابق شکل ۲ به دست آمده است که شکاف نواری بین حداکثر نوار ظرفیت و حداقل نوار هدایت در این ماده 1.1eV تعیین می شود. مطابق منحنی شاکلی-کوپرسر (شکل ۳) شکاف نواری لانتانیم و انادیوم اکساید در مقدار بهینه برای تبدیل انرژی خورشید است، بنابراین این ماده می تواند یک گزینه امیدوار کننده به عنوان جاذب نور در سلول های خورشیدی باشد [۳].

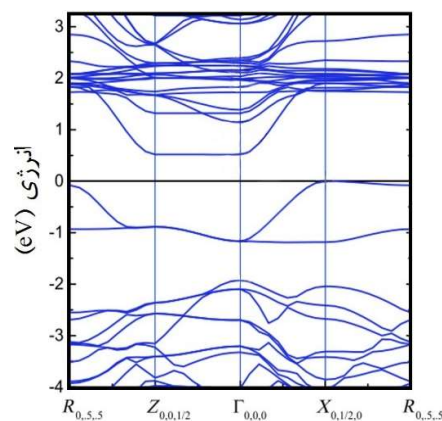
اگر جذب فوتون با انرژی بزرگتر از شکاف نواری رخ دهد یعنی برای این ماده طبق رابطه $E = hc/\lambda$ ، طول موج نور تابیده شده کمتر از 1227 nm باشد، آنگاه یک الکترون اضافی (حفره) در نوار هابارد بالایی (پایینی) ایجاد می کند که به سمت بیشینه (کمینه) پتانسیل الکتریکی حرکت می کند. در حالت مرتب شده مدار، الکترون های برانگیخته شده توسط نور، می توانند در امتداد یک کانال رسانا به خوبی حرکت کنند و اوربیتال های خالی را با یک قدرت پخش به اندازه 200 میلی الکترون ولت به هم متصل کنند، که این میزان توسط اندازه گیری های رامان استنباط می شود [۲].

با کج کردن ساختار حول محور b و چرخاندن حول محور c ، ساختار آن به پروسکایت تبدیل می شود [۲].



شکل ۱. ساخته واحد لانتانیم و انادیوم اکساید.

پیکربندی الکترونی این ماده $3d^2(t_{2g}^2)$ در کاتیون سه ظرفیتی و انادیوم است، در این اکسیدها به دلیل اوربیتال $3d$ نسبتاً موضعی و برهم کنش قوی الکترون-الکترون به عنوان یکی از مهم ترین مواد همبسته قوی مورد مطالعه قرار می گیرند. دافعه کولنی U در یک جایگاه با 3eV تا 5eV تخمین زده شده است [۲]، اما محتمل تر است که $3/6\text{eV}$ باشد [۳].



شکل ۲. ساختار نواری ماده لانتانیم و انادیوم اکساید [۳].

هامیلتونی سامانه

هامیلتونی مناسب برای بررسی LaVO_3 هامیلتونی هابارد است. در الگوی هابارد برای هر اتم جایگاه‌هایی فرض شده است که الکترون‌ها می‌توانند بر این جایگاه‌ها قرار گرفته و بین آنها پرش کنند. برای توصیف این مواد در کوآنتش دوم از هامیلتونی زیر استفاده می‌شود:

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}) + U \sum_i \hat{n}_{i\downarrow} \hat{n}_{i\uparrow} \quad 1$$

که در آن عملگرهای خلق $\hat{c}_{j\sigma}^\dagger$ و فنا $\hat{c}_{j\sigma}$ الکترونی، و شاخص‌های i و j معرف مکان فضایی شبکه‌ای (جایگاه) و شاخص σ معرف اسپین الکترون است. اولین عبارت انرژی جنبشی را بیان می‌کند و عبارت دوم انرژی ناشی از دافعه کولنی درون جایگاهی است؛ $\hat{n}_{i\sigma}$ عدد اشغال الکترون است که به صورت $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$ تعریف می‌شود [۴،۵].

و هامیلتونی تونل‌زنی (پرش الکترون از هادی به نقطه کوآنتومی و برعکس) است [۵].

$$H = H_L + H_R + H_{\text{dots}} + H_{\text{hop}} \quad 2$$

هامیلتونی هادی سمت راست و چپ به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$H_\alpha = \sum_{k,\sigma,\alpha \in L,R} (\epsilon_{k,\alpha} \hat{c}_{k\sigma\alpha}^\dagger \hat{c}_{k\sigma\alpha}) \quad 3$$

$\alpha = R$ معرف هادی چپ و $\alpha = L$ معرف هادی راست است.

هامیلتونی نقاط کوآنتومی عبارت است از:

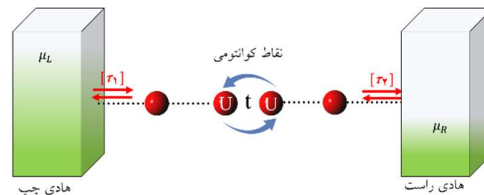
$$H_{\text{dots}} = \sum_i \epsilon_i d_i^\dagger d_i + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + t \sum_{ij} (d_i^\dagger d_j + d_j^\dagger d_i) \quad 4$$

در نهایت برای هامیلتونی قسمت تونل‌زنی داریم:

$$H_{\text{hop}} = \tau \sum_{\alpha,i} c_\alpha^\dagger d_i + d_i^\dagger c_\alpha \quad 5$$

در روابط قبل t قدرت پرش الکترون بین نقاط کوآنتومی بوده، τ قدرت پرش الکترون از هادی به نقطه کوآنتومی می‌باشد.

هامیلتونی تأثیر فوتون تابیده شده را نیز می‌توان اضافه نمود. با این حال، با توجه به اینکه عمق نفوذ نور در LVO در حد 100nm است، یعنی عمق نفوذ نور محدود است، می‌توان از تقریب تحریک منفرد استفاده کرد و برای سادگی از برهم‌کنش الکترون و فوتون، صرف نظر نمود. بدین ترتیب می‌توان با تقریب خوبی تأثیر نور تابیده شده را در قدرت پرش الکترون از هادی به نقطه کوآنتومی لحاظ کرد [۲].



شکل ۴. سامانه نقاط کوآنتومی متصل به دو هادی. سطح پتانسیل شیمیایی در دو هادی متفاوت است. تبادل الکترون میان دو هادی و نزدیک‌ترین نقطه کوآنتومی سمت چپ و راست به ترتیب با \mathcal{T}_1 و \mathcal{T}_2 نشان داده می‌شود، و پرش بین نزدیک‌ترین نقاط کوآنتومی همسایه با احتمال پرش t انجام می‌شود. هم‌نشینی دو الکترون با اسپین‌های پادموازی مستلزم هزینه‌ای به میزان U است.

سامانه شامل نقاط کوآنتومی بین دو هادی فلزی با پتانسیل‌های شیمیایی متفاوت است. هامیلتونی کل شامل جمع هامیلتونی هادی‌ها، نقاط کوآنتومی (کانال)

ترابرد الکترونی

به میزان الکترون‌هایی که به وسیله انتشار میان دستگاه از منبع به خروجی (درین) منتقل می‌شوند ترابرد الکترونی می‌گویند. ترابرد به کمک رد (تریس) تابع گرین طبق رابطه زیر محاسبه می‌شود [۶]:

$$T(E) = \text{Tr} [G_L G_R G^\dagger] \quad ۶$$

در رابطه ۶ تابع پهن‌شدگی را با نماد Γ نشان می‌دهند که به خودانرژی سامانه مربوط می‌شود.

رویکرد معادله حرکت

یک رویکرد در محاسبه تابع گرین غیرتعدالی، روش معادله حرکت است. با این روش توابع گرین مربوطه برحسب توابع درجه بالاتر گرین بیان می‌شود و با تقریب‌هایی از جمله نظریه میدان میانگین معادلات به صورت تقریبی حل می‌شوند؛ معادله حرکت در نمایش زوبارف برای نقاط کوآتومی به شکل زیر است [۷]:

$$E \langle\langle d_i, d_j^\dagger \rangle\rangle = \delta_{ij} + \langle\langle [d_i, H], d_j^\dagger \rangle\rangle \quad ۷$$

که در آن $G_{i,j}^r(E) = \langle\langle d_i, d_j^\dagger \rangle\rangle$ تابع گرین تأخیری مربوط به نقطه کوآتومی است. با جای‌گذاری هامیلتونی در رابطه ۷ داریم:

$$E \langle\langle d_i, d_j^\dagger \rangle\rangle = \delta_{ij} + \varepsilon_i \langle\langle d_i, d_j^\dagger \rangle\rangle + t \langle\langle d_{\bar{i}}, d_j^\dagger \rangle\rangle + U \langle\langle n_{i-\sigma} d_i, d_j^\dagger \rangle\rangle + \tau \langle\langle c_\alpha, d_j^\dagger \rangle\rangle \quad ۸$$

برای محاسبه $G_{i,j}^r(E) = \langle\langle c_\alpha, d_j^\dagger \rangle\rangle$ می‌توان یک بار دیگر از روش معادله حرکت به طریق زیر حل کرد:

$$(E - \varepsilon_\alpha + i\eta) \langle\langle c_\alpha, d_j^\dagger \rangle\rangle = \tau \langle\langle d_{\bar{i}}, d_j^\dagger \rangle\rangle \quad ۹$$

از جای‌گذاری رابطه ۹ در رابطه ۸ خودانرژی سامانه Σ_0 به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\Sigma_0 = \sum_{k,\alpha} \frac{|t|^2}{(E - \varepsilon_{k,\alpha} + i\eta)} \quad ۱۰$$

برای محاسبه عبارت $\langle\langle n_{i-\sigma} d_i, d_j^\dagger \rangle\rangle$ می‌توان تقریب میدان میانگین نوشت یا اینکه دوباره از معادله حرکت استفاده کرد بنابراین داریم:

$$\langle\langle n_{i-\sigma} d_i, d_j^\dagger \rangle\rangle = \frac{\langle n_{i-\sigma} \rangle}{(E - \varepsilon_i - U + i\eta)} (\delta_{ij} + t \langle\langle d_{\bar{i}}, d_j^\dagger \rangle\rangle + \Sigma_0 \langle\langle d_{\bar{i}}, d_j^\dagger \rangle\rangle) \quad ۱۱$$

حال امکان بیان صریح رسانایی خطی برحسب حالت تعادل توابع گرین فراهم می‌شود، هزینه چنین رویکردی این است که تأثیر همبستگی الکترون بر خواص انتقال نادیده گرفته می‌شود و مانند اثر کوندو عمل می‌کند.

با جای‌گذاری روابط به دست آمده در رابطه ۸ عبارت $g_i = \frac{E - \varepsilon_i - U(1 - \langle n_{i-\sigma} \rangle) + i\eta}{(E - \varepsilon_i + i\eta)(- \varepsilon_i - U + i\eta)}$ تابع گرین یک نقطه کوآتومی است و $\langle n_{i-\sigma} \rangle$ میانگین عدد اشغال است.

در نهایت تابع گرین غیرتعدالی به شکل زیر به دست می‌آید:

$$G_{i,j}^r(E) = \delta_{ij} g_i + g_i (-t G_{\bar{i},j}^r(E) + \Sigma_0 G_{\bar{i},j}^r(E)) \quad ۱۲$$

مثلاً برای دو نقطه کوآتومی در روابط پیش هر کجا $i = 1$ باشد، مقدار $\bar{i} = 2$ است، و برعکس بدین ترتیب مجموعه معادلات زیر را داریم:

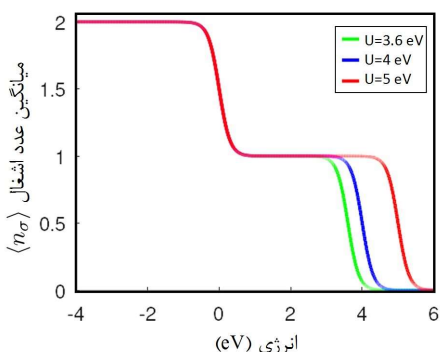
$$G_{11}^r(E) = g_1 - g_1 t G_{21}^r(E) + g_1 \Sigma_0 (G_{11}^r(E) + G_{21}^r(E)) \quad ۱۳$$

$$G_{12}^r(E) = -g_1 t G_{22}^r(E) + g_1 \Sigma_0 (G_{12}^r(E) + G_{22}^r(E)) \quad ۱۴$$

$$G_{21}^r(E) = -g_2 t G_{11}^r(E) + g_2 \Sigma_0 (G_{11}^r(E) + G_{21}^r(E)) \quad ۱۵$$

$$G_{22}^r(E) = g_2 - g_2 t G_{12}^r(E) + g_2 \Sigma_0 (G_{12}^r(E) + G_{22}^r(E)) \quad ۱۶$$

که در آن $\Gamma_\alpha = -2 \text{Im}(\Sigma_0^\alpha)$ قسمت موهومی خود انرژی است. برای یک نقطه کوآنتومی LVO میانگین عدد اشغال به صورت شکل ۶ به دست آمد.



شکل ۶. نمودار میانگین عدد اشغال برحسب انرژی با نیروهای دافعه کوآنتومی متفاوت.

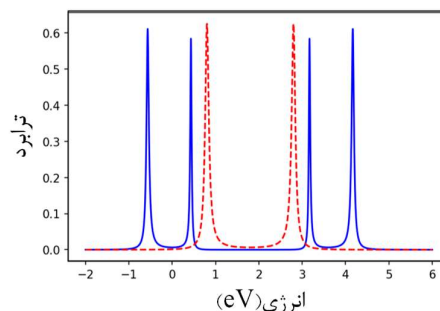
در مطالعات مختلف روی یک ماده، مقادیر متفاوتی برای دافعه کوآنتومی U دیده می‌شود؛ زیرا این کمیت وابسته به جزئیات ساختار الکترونی ماده است و نمی‌توان آن را به طور دقیق از قبل پیش‌بینی کرد، اما مقداری که بهترین توافق را با داده‌های تجربی نشان دهد به عنوان مقدار بهینه انتخاب می‌شود. در این پژوهش برای ماده LVO با مقایسه داده‌های تجربی، مقدار دافعه کوآنتومی ۳٫۶ eV بهترین نتیجه را دارد. در نمودار میانگین عدد اشغال رسم شده، نتیجه حاکی از آن است که با کاهش میزان برهم‌کنش الکترون-الکترون احتمال اینکه الکترون بتواند در نقطه کوآنتومی جابه‌جا شود بیشتر است.

معادله دایسون

محاسبه تابع گرین به روش معادله حرکت بسیار دشوار و وقت‌گیر است از این روی به معادله دایسون

می‌توان معادلات خودسازگار بالا را به صورت ماتریسی طبق رابطه ۱۷ نوشت:

$$\begin{pmatrix} (1-g_1\Sigma_0) & (g_1t-g_1\Sigma_0) \\ (g_2t-g_2\Sigma_0) & (1-g_2\Sigma_0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11}^r & G_{12}^r \\ G_{21}^r & G_{22}^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1 & 0 \\ 0 & g_2 \end{pmatrix} \quad (17)$$



شکل ۵. ترابرد الکترون از دو نقطه کوآنتومی متصل به هادی‌ها، با در نظر گرفتن دافعه کوآنتومی ۳٫۶ eV و قدرت تونل‌زنی ۲۰۰ meV. نمودار خط چین قرمز مربوط به استفاده از تقریب میدان میانگین و خط توپر آبی مربوط به محاسبه مرتبه بالاتر تابع گرین به روش معادله حرکت.

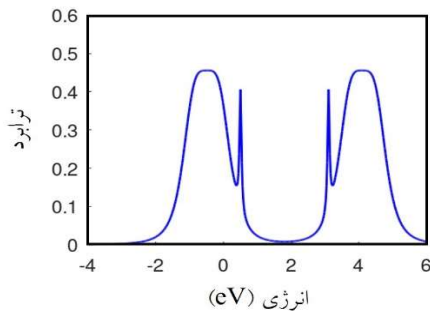
معادله ماتریسی قبل به صورت $M(E)G(E) = g(E)$ می‌باشد که از روی آن برای دو نقطه کوآنتومی، تابع گرین غیرتعدالی را داریم:

$$\begin{pmatrix} G_{11}^r & G_{12}^r \\ G_{21}^r & G_{22}^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1-g_1\Sigma_0}{g_1} & -(t+\Sigma_0) \\ -(t+\Sigma_0) & \frac{1-g_2\Sigma_0}{g_2} \end{pmatrix}^{-1} \quad (18)$$

عدد اشغال

در زبان کوانتوم دوم، به جای تعیین حالت هر ذره، با تعداد ذرات در هر حالت سر و کار داریم. در این صورت برحسب تابع گرین، ارزش انتظاری عدد اشغال به شکل زیر محاسبه می‌شود [۶]:

$$\langle n_\sigma \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dE G_\sigma^R(E) G_\sigma^A(E) [\Gamma_{LFL} + \Gamma_{RFR}] \quad (19)$$



شکل ۸. ترابرد الکترون از چهار نقطه کوآنتومی LVO متصل به هادی‌ها، با در نظر گرفتن دافعه کولنی 3.6 eV و قدرت تونل‌زنی 200 meV .

برای دو نقطه کوآنتومی که نمودار ترابرد آن برحسب انرژی از طریق رویکرد معادله حرکت، مطابق شکل ۵ به دست آمد، می‌توان نمودار آن را به طریق معادله دایسون نیز رسم کرد. در شکل ۹ با مقایسه نمودار ترابرد الکترون برای دو نقطه کوآنتومی از این ماده مشخص است که معادله دایسون و نظریه معادله حرکت تطابق قابل قبولی دارند. تقریب حد نوار پهن در معادله دایسون سبب شد تا در قله‌های کناری پهن‌شدگی به وجود آید.

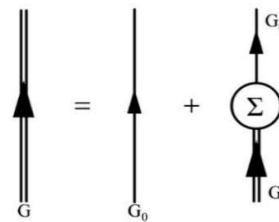
در صورتی که در محاسبات ترابرد قدرت برهم‌کنش الکترون-الکترون افزایش یابد، سبب می‌شود قله‌ها به همان میزان از هم فاصله بگیرند علاوه بر این، افزایش برهم‌کنش باعث کاهش میزان ترابرد می‌شود که این نشان دهنده آن است که چون برهم‌کنش الکترون-الکترون افزایش یافته، احتمال عبور الکترون از نقاط کوآنتومی کاهش می‌یابد؛ در حقیقت در این صورت انرژی بیشتری لازم است تا بر قدرت برهم‌کنش الکترون-الکترون غلبه کرده، عبور الکترون را میسر کند.

پرداخته می‌شود [۸]. زمانی که هامیلتونی به صورت $H = H_0 + V$ باشد، معادله دایسون به گونه زیر نوشته می‌شود:

$$G = \frac{G_0}{1 - G_0 \Sigma} \quad (20)$$

که در آن G_0 تابع گرین مربوط به H_0 برابر است با $G_0(E) = [EI - H_0 - i\eta]^{-1}$ برای اعمال تأثیر برهم‌کنش الکترون-الکترون، جمله خودانرژی Σ به صورت زیر وارد می‌شود.

$$\Sigma(E) = \sum_{k\alpha} |t|^2 f(\epsilon_{k,\alpha}) \left(\frac{1}{E - 2\epsilon_i - U + \epsilon_{k,\alpha} + i\eta} + \frac{1}{E - \epsilon_{k,\alpha} + i\eta} \right) \quad (21)$$



شکل ۷. نمودار فاینمن برای معادله دایسون. در این نمودار G_0 و G به ترتیب توابع گرین سامانه بدون برهم‌کنش و برهم‌کنشی، و Σ تابعی خودانرژی سامانه است.

تقریب حد نوار پهن

در این تقریب برای سامانه‌های نانو مقیاس، فرض می‌شود ساختار دقیق چگالی در هادی‌ها برای توصیف ترابرد مهم نیست و بدین ترتیب محاسبات به طور قابل توجهی ساده می‌شوند [۲]. اثر هادی‌ها به صورت خودانرژی در محاسبات اعمال می‌شود:

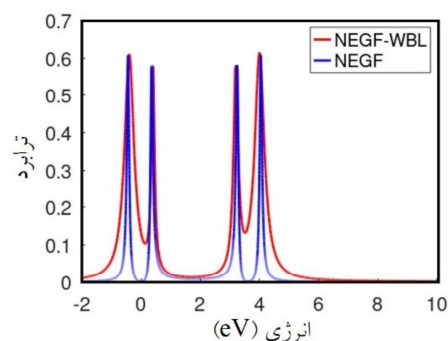
$$\Sigma_L = -i\tau |1\rangle\langle 1| \quad (22)$$

$$\Sigma_R = -i\tau |N\rangle\langle N| \quad (23)$$

برای چهار نقطه کوآنتومی، که به صورت سری به هادی‌های سمت چپ و راست متصل شده باشند نمودار ترابرد برحسب انرژی به صورت شکل ۸ حاصل می‌شود.

نتیجه‌گیری

از آنجایی که لانتانیم و انادیوم اکساید در میان مواد همبسته قوی دسته بندی می‌شود، در این پژوهش برای بررسی خواص الکترونی در این مواد از الگوی هابارد استفاده شد. سپس تابع گرین از دو رویکرد محاسبه شد و می‌توان نتیجه گرفت معادله دایسون روش مناسب‌تری برای محاسبه تابع گرین است.



شکل ۹: مقایسه دو رویکرد برای محاسبه ترابرد الکترون از دو نقطه کوآنتومی LVO متصل به هادی‌ها، با در نظر گرفتن دافعه کولنی 3.6 eV و قدرت تونل‌زنی 200 meV . نمودار به رنگ آبی مربوط به نتایج محاسبات تابع گرین غیرتعادلی، و نمودار قرمز مربوط است به تابع گرین غیر تعادلی در تقریب حد نوار پهن به دست آمده است.

با مقایسه نمودار ترابرد الکترون برای دو نقطه کوآنتومی از این ماده مطابق شکل ۹ مشخص است که معادله دایسون و رویکرد معادله حرکت تطابق قابل قبولی دارند. تنها تقریب حد نوار پهن (WBL) سبب شد تا در قله‌های کناری پهن‌شدگی به وجود آید. همچنین می‌توان نتیجه گرفت با افزایش انرژی برهم‌کنش الکترون-الکترون ترابرد کاهش می‌یابد. در نتیجه مقدار بهینه کمیت هابارد برای ماده لانتانیم و انادیوم اکساید $U = 3.6 \text{ eV}$ محاسبه می‌گردد.

از مقایسه نمودار ترابرد برای چهار و دو نقطه کوآنتومی از این ماده، نتیجه می‌شود با این پیکربندی، افزایش نقاط کوآنتومی باعث کاهش میزان ترابرد می‌شود.

بنابراین با دو نقطه کوآنتومی احتمال عبور الکترون بیشتر است که باعث افزایش بازدهی سامانه می‌شود. نتیجه دیگر این است که اگر برهم‌کنش الکترون-الکترون در نظر گرفته نشود، در نمودار ترابرد برحسب انرژی دو قله پدیدار می‌شود، اما زمانی که انرژی برهم‌کنشی را اعمال می‌کنیم چهار قله ایجاد می‌شود که به اندازه دافعه کولنی U فاصله دارند، در واقع تبهگنی انرژی از بین رفته و خاصیت عایق مات بودن ماده نمایان می‌شود.

در نهایت از این پژوهش می‌توان نتیجه گرفت که می‌توان از نقاط کوآنتومی لانتانیم و انادیوم اکساید برای استفاده در سلول‌های خورشیدی استفاده کرد و در واقع این ماده می‌تواند گزینه امیدوارکننده‌ای به عنوان یک جاذب نور در سلول‌های خورشیدی محسوب شود.

مرجع‌ها

- [1] H. Dixit, D. Punetha, S.K. Pandey, Performance investigation of Mott-insulator LaVO_3 as a photovoltaic absorber material, *Journal of Electronic Materials*, 48 (2019) 7696-7703. <https://doi.org/10.1007/s11664-019-07581-0>
- [2] C.M. Kropf, A. Valli, P. Franceschini, G.L. Celardo, M. Capone, C. Giannetti, F. Borgonovi, Towards high-temperature coherence-enhanced transport in heterostructures of a few atomic layers, *Physical Review B*, 100 (2019) 035126. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.035126>
- [3] L. Wang, Y. Li, A. Bera, C. Ma, F. Jin, K. Yuan, W. Yin, A. David, W. Chen, W. Wu, Device performance of the mott insulator LaVO_3 as a photovoltaic material, *Physical Review Applied*, 3 (2015) 064015. <https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.3.064015>

- [4] R.T. Scalettar, An introduction to the Hubbard hamiltonian, quantum materials: experiments and theory, 6 (2016)
- [5] S. Verma, A. Singh, A Strongly Correlated Quantum Dot Heat Engine with Optimal Performance: A Nonequilibrium Green's Function Approach, *physica status solidi (b)*, 260 (2023) 2200608. <https://doi.org/10.1002/pssb.202200608>
- [6] S. Datta, Quantum transport: atom to transistor, Cambridge university press 2005
- [7] M. Lavagna, V. Talbo, T. Duong, A. Crépieux, Level anticrossing effect in single-level or multilevel double quantum dots: Electrical conductance, zero-frequency charge susceptibility, and Seebeck coefficient, *Physical Review B*, 102 (2020) 115112. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.115112>
- [8] H. Bruus, K. Flensberg, Many-body quantum theory in condensed matter physics: an introduction, OUP Oxford 2004.