

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В.ЛОМОНОСОВА»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА ФИЗИКИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ И
КРИОЭЛЕКТРОНИКИ

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

**«ИССЛЕДОВАНИЕ ТРАНСПОРТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
ОДНОЭЛЕКТРОННОГО ОДНОАТОМНОГО ТРАНЗИСТОРА»**

Выполнил студент
416 группы:
Назаров Степан Сергеевич

Научный руководитель:
доцент, к.ф.-м.н. Шорохов В.В.

Допущена к защите
Зав. кафедрой профессор О.В.Снигирев

МОСКВА

2021

Оглавление

Введение	3
1 Двухуровневая система	5
1.1 Модель	6
1.2 Изменение свободной энергии системы	8
1.3 Матрица ёмкостей	10
1.4 Потенциалы и заряды системы концентрических проводящих сфер	11
1.5 Расчёт темпа туннелирования	12
1.6 Граф состояний двухуровневой системы	13
1.7 Система кинетических уравнений	15
1.8 Расчёт транспортных характеристик	16
1.9 Обсуждение результатов	18
Итоги	20
Список литературы	21

Введение

Одноэлектронные устройства — это такие устройства, принцип работы которых основан на явлении коррелированного в пространстве и времени транспорта единичных электронов через зарядовые центры, представляющие собой обособленные металлические островки, соединённые с электродами и между собой туннельными переходами. Обязательным требованием к таким устройствам является достаточно низкое значение собственных и взаимных ёмкостей электродов и зарядовых островков. Это необходимо для того, чтобы изменение электростатической энергии системы за единичный акт туннелирования электрона было много больше энергии тепловых флуктуаций.

Первые работы, сообщающие о реализации устройств данного типа появились более 30 лет назад [1–3] и нашли применения в самых разных сферах: термометрия [5], память [6], сенсоры [7].

Развитие технологических процессов в области изготовления полупроводниковых микросхем, привело к увеличению разрешающей способности, что позволяет уменьшить характерные размеры островков в устройствах. В наши дни на передовой находятся устройства с одиночными молекулами или атомами в роли зарядового центра [8, 9].

Нельзя не упомянуть резервуарные вычислительные нейросети, первые шаги к созданию которых уже были проделаны в работе [10]. Сами авторы считают, что кластер наночастиц золота можно рассматривать, как набор туннельно связанных одноатомных одноэлектронных транзисторов.

Пока не существует технологического процесса, позволяющего в производственных масштабах изготавливать структуры из единичных атомов с допусками в единицы ангстрем. Уже были проведены теоретические работы по созданию обобщённых алгоритмов расчёта

обычных одноэлектронных устройств [11], где в роли зарядовых центров выступают металлические островки. Однако, с точки зрения практических применений (создание сенсоров, логических элементов) больший интерес проявляется к элементам из одиночных атомов и молекул. А значит, разработка универсальных методик расчёта для структур с дискретной энергетической структурой существенно расширит возможности на стадии проектирования подобного рода устройств.

Цель работы

Целью данной бакалаврской работы является создание универсального алгоритма расчёта структур с атомной функциональной структурой, анализ и моделирование систем с такими структурами в роли ключевых элементов и применение данного алгоритма для объяснения наблюдаемых в эксперименте характеристик одноатомных одноэлектронных устройств.

Глава 1

Двухуровневая система

Одноэлектронный транзистор состоит из маленького металлического островка субмикронных размеров, двух электродов исток-сток соединённых с островком туннельно и электрода затвор, изолированного от острова. Схематично это устройство изображено на рис. 1.1. На рисунке так же указаны параметры: C_S, C_D, C_G — ёмкости соответствующих переходов; R_S, R_D — соответствующие туннельные сопротивления.

Работа такого транзистора возможна только при выполнении двух очень важных условий:

$$\frac{e^2}{2C} \gg kT \quad (1.1)$$

$$R_S \gg R_Q, R_D \gg R_Q, R_Q = h/e^2 \quad (1.2)$$

Первое условие о преобладании изменения электростатической энергии системы за единый акт туннелирования над энергией тепловых флуктуаций. В формуле (1.1) $C = C_S + C_D + C_G$ — суммарная ёмкость системы. Условие 1.2 говорит о том, что мы так же пренебрегаем ещё и

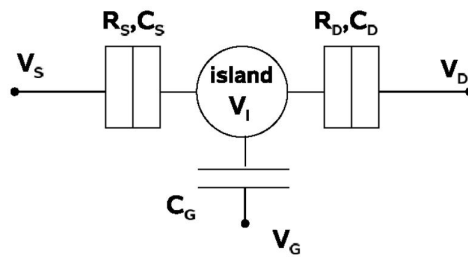


Рис. 1.1: Одноэлектронный транзистор

квантовыми флуктуациями электронов. $R_Q = 25.8$ кОм — так называемое квантовое сопротивление.

В основополагающей работе [1] размер острова был порядка $1\mu m$. В работе 2002 г. [12] Зазор между туннельными электродами был уже порядка 1-2 nm . Стоит отметить что для современных одноатомных транзисторов величина зазора не стала на порядок меньше, а находится на том же уровне, или чуть меньше 1 nm . Очевидно, что ёмкость системы пропорциональна её энергетическим размерам: $C \sim r$. Уменьшение размеров устройств позволило отодвинуть границу рабочей температуры, фигурирующей в (1.1).

Возможность создания столь малых структур позволила в роли островков использовать отдельные примесные атомы [8, 9]. Однако, электрон в атоме может пребывать только в строго определённых дискретных энергетических состояниях, в то время как в распределённом металлическом островке распределение энергетических состояний электрона практически непрерывно.

Учитывая последнее обстоятельство, становится ясно, что классическая (ортодоксальная) [3] теория одноэлектроники при рассмотрении одноатомных одноэлектронных транзисторов неприменима. Соответственно, для расчёта характеристик таких устройств необходимо составление отдельной физической модели явления и её расчёт.

1.1 Модель

Необходимо смоделировать работу одноатомного одноэлектронного транзистора. Типичное его устройство представлено на рис.1.2. Этот транзистор исследовался в работе [13]. Кремниевые электроды на подложке из оксида кремния. Между электродами находится примесный атом мышьяка. Электроды представим как три относительно больших проводящих сферы. Оценка точности такого представления в терминах близости взаимной и собственной ёмкости электродов в данной модели и в эксперименте будет произведена позднее. Примесный атом отождествим с двумя концентрическими проводящими сферами. Две

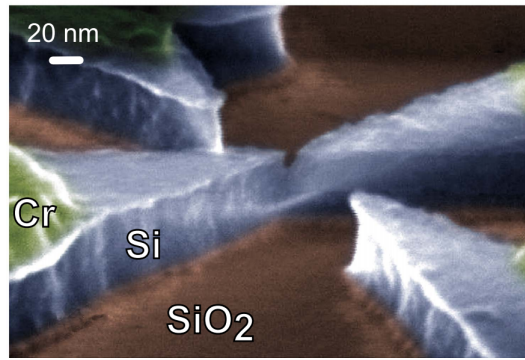


Рис. 1.2: Одноатомный одноэлектронный транзистор

последних отвечают за представление электронных оболочек атома. Все геометрические размеры представлены на рис. 1.4 Каждая сфера из набора

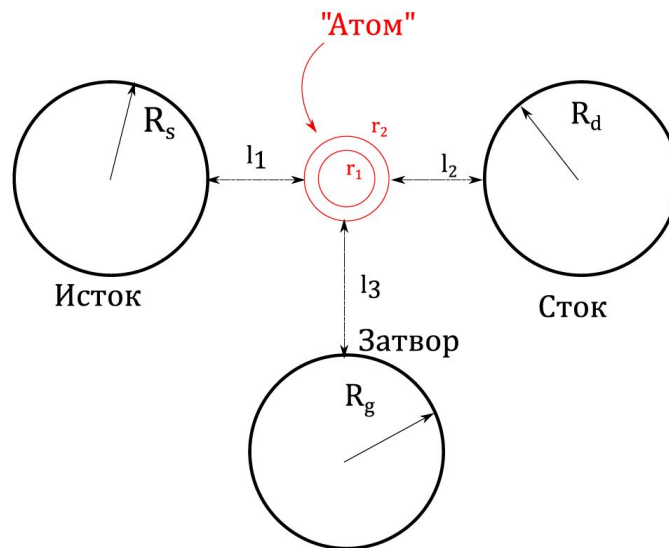


Рис. 1.3: Модель одноатомного одноэлектронного транзистора

концентрических будет соответствовать отдельной оболочке и отдельному энергетическому уровню. Для наглядности и простоты вычислений пока ограничимся двумя. Мы так же пока не принимаем во внимание различие в формах атомных орбиталей в зависимости от их типа(s, p, d, f).

Так-же будем считать, что электроны могут туннелировать только со сфер Исток, Сток на сферы атома и в обратную сторону. Т.е. туннельного тока на Затвор нет.

Исток, Сток и Затвор поддерживаем при постоянном напряжении, то есть подаём на указанные сферы потенциалы $\varphi_s, \varphi_d, \varphi_g$ соответственно.

Нам так же потребуются значения энергии Ферми ε_F для электродов

и уровней атома μ_1, μ_2 . Последние стоит отсчитывать от дна зоны проводимости для электрода.

Оканчивая постановку задачи, необходимо найти значение силы тока электронов с Истока на Сток, при заданных потенциалах на электродах $\varphi_s, \varphi_d, \varphi_g$. А для получения диаграмм стабильности, найти ток в каждой точке некоторого диапазона изменения потенциалов.

1.2 Изменение свободной энергии системы

Начнём с расчёта изменения свободной энергии системы. При наличии 5 тел в системе становится удобен матричный подход к описанию зарядов и потенциалов, т.к. количество уравнений для расчёта будет расти как минимум пропорционально количеству тел.

Введём векторы зарядов и векторы потенциалов на рассматриваемых телах.

$$\vec{q} = \begin{pmatrix} q_s \\ q_d \\ q_g \\ q_1 \\ q_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{q}_e \\ \vec{q}_d \end{pmatrix}, \vec{\varphi} = \begin{pmatrix} \varphi_s \\ \varphi_d \\ \varphi_g \\ \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{\varphi}_e \\ \vec{\varphi}_d \end{pmatrix} \quad (1.3)$$

Изменение энергии мы будем рассматривать за один акт туннелирования. Введём в рассмотрение начальные $\vec{\varphi}_i, \vec{q}_i$ и конечные $\vec{\varphi}_f, \vec{q}_f$ значения этих векторов. $\vec{q}_e, \vec{\varphi}_e$ — электродные компоненты векторов (от англ. electrode), так же являющиеся векторами, а $\vec{q}_d, \vec{\varphi}_d$ — атомные их компоненты (от англ. dopant). Для наглядности:

$$\vec{q}_e = \begin{pmatrix} q_s \\ q_d \\ q_g \end{pmatrix}, \vec{\varphi}_d = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \quad (1.4)$$

Изменение электростатической энергии запишем в виде

$$dU = \frac{\vec{\varphi}_f^T \vec{q}_f - \vec{\varphi}_i^T \vec{q}_i}{2} = \frac{(\vec{\varphi}_i^T + d\vec{\varphi}^T)(\vec{q}_i + d\vec{q}) - \vec{\varphi}_i^T \vec{q}_i}{2} \quad (1.5)$$

Здесь $\vec{\varphi}_f^T$ — по сути строка, получающаяся транспонированием вектора. Заметим, поскольку электроды поддерживаются при постоянном потенциале, то вектор изменения потенциалов всех элементов

$$d\vec{\varphi} = \vec{\varphi}_f - \vec{\varphi}_i = \begin{pmatrix} \vec{0}_e \\ d\vec{\varphi}_d \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

Вектор изменения зарядов всех элементов

$$d\vec{q} = \vec{q}_f - \vec{q}_i = \begin{pmatrix} d\vec{q}_{ind} + d\vec{q}_{tun} \\ d\vec{q}_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d\vec{q}_{ind} + ed\vec{n}_{tun} \\ ed\vec{n}_d \end{pmatrix}, \quad (1.7)$$

где $d\vec{q}_{ind}$ — вектор изменения индуцированных на электродах зарядах, $d\vec{n}_{tun}$ — вектор изменения заряда электродов вследствие туннелирования, $d\vec{n}_d$ — вектор изменения количества электронов на атомных уровнях. Выражение для изменения свободной энергии можно переписать в следующем виде с учетом неизменности электрических потенциалов электродов

$$dU = \frac{\vec{\varphi}_i^T d\vec{q} + \vec{q}_i^T d\vec{\varphi} + d\vec{q}^T d\vec{\varphi}}{2} = \frac{(\vec{q}_d^T + d\vec{q}_d^T)d\vec{\varphi}_d + \vec{\varphi}_d^T d\vec{q}_d + \vec{\varphi}_e^T d\vec{q}_{ind}}{2} \quad (1.8)$$

Для нахождения $d\vec{q}_{ind}$, $\vec{\varphi}_d$ и $d\vec{\varphi}_d$ запишем систему уравнений

$$\begin{pmatrix} \vec{q}_{ind} \\ \vec{q}_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{C}_{ee} & \hat{C}_{ed} \\ \hat{C}_{de} & \hat{C}_{dd} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\varphi}_e \\ \vec{\varphi}_d \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

Более подробно о матрице, фигурирующей в последнем уравнении, поговорим в следующем параграфе. Пока достаточно считать, что между зарядами и потенциалами на телах существует линейная связь. Отсюда получаем

$$\begin{aligned} \vec{\varphi}_d &= \hat{C}_{dd}^{-1}(\vec{q}_d - \hat{C}_{de}\vec{\varphi}_e) \\ \vec{q}_{ind} &= (\hat{C}_{ee} - \hat{C}_{ed}\hat{C}_{dd}^{-1}\hat{C}_{de})\varphi_e + \hat{C}_{ed}\hat{C}_{dd}^{-1}\vec{q}_d. \end{aligned} \quad (1.10)$$

На основе этих уравнений для $d\vec{q}_{ind}$ и $d\vec{\varphi}_d$ получаем:

$$\begin{aligned} d\vec{\varphi}_d &= \hat{C}_{dd}^{-1}d\vec{q}_d \\ d\vec{q}_{ind} &= \hat{C}_{ed}\hat{C}_{dd}^{-1}d\vec{q}_d. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Получаем для изменения электростатической энергии

$$dU = \frac{(\vec{q}_d^T + d\vec{q}_d^T)\hat{C}_{dd}^{-1}d\vec{q}_d + (\vec{q}_d^T - \vec{\varphi}_e^T \hat{C}_{ed})\hat{C}_{dd}^{-1}d\vec{q}_d + \vec{\varphi}_e^T \hat{C}_{ed}\hat{C}_{dd}^{-1}d\vec{q}_d}{2} \quad (1.12)$$

Окончательно изменения электростатической энергии:

$$dU = \vec{q}_d^T \hat{C}_{dd}^{-1}d\vec{q}_d + \frac{d\vec{q}_d^T \hat{C}_{dd}^{-1}d\vec{q}_d}{2} = e^2 \vec{n}_d^T \hat{C}_{dd}^{-1}d\vec{n}_d + \frac{e^2}{2} d\vec{n}_d^T \hat{C}_{dd}^{-1}d\vec{n}_d \quad (1.13)$$

Изменение свободной энергии системы включает в себя работу источников

$$dF = dU + U = e^2 \vec{n}_d^T \hat{C}_{dd}^{-1}d\vec{n}_d + \frac{e^2}{2} d\vec{n}_d^T \hat{C}_{dd}^{-1}d\vec{n}_d + e\vec{\varphi}_e^T (\hat{C}_{ed}\hat{C}_{dd}^{-1}d\vec{n}_d + d\vec{n}_{tun}) \quad (1.14)$$

1.3 Матрица ёмкостей

Для вычисления свободной энергии требуется вычислить матрицу ёмкостей, фигурирующую в (1.9). По сути само уравнение (1.9) можно считать определением матрицы ёмкостей данной системы — элементы матрицы ёмкости есть коэффициенты в линейной комбинации потенциалов для выражения зарядов на объектах в системе.

Рассмотрим процедуру расчёта данной матрицы в нашей модели. Расчёту взаимных коэффициентов концентрических сфер мы посвятим следующий параграф, а пока остановимся на всех остальных элементах. Для наглядности выпишем нашу матрицу в полном виде

$$\hat{C} = \begin{pmatrix} C_{ss} & C_{sd} & C_{sg} & C_{s1} & C_{s2} \\ C_{ds} & C_{dd} & C_{dg} & C_{d1} & C_{d2} \\ C_{gs} & C_{gd} & C_{gg} & C_{g1} & C_{g2} \\ C_{1s} & C_{1d} & C_{1g} & C_{11} & C_{12} \\ C_{2s} & C_{2d} & C_{2g} & C_{21} & C_{22} \end{pmatrix} \quad (1.15)$$

Поясним: здесь C_{ss} — собственная ёмкость истока, C_{dd} — стока, C_{gg} — затвора, C_{11} — собственная ёмкость сферы первого энергетического уровня, C_{22} — второго. К примеру, C_{sd} — взаимная ёмкость стока и истока и т.д. Элементы $C_{11}, C_{12}, C_{21}, C_{22}$ оставляем на потом, а с остальными разберёмся уже сейчас. Вычислять их будем по отдельности: Первая группа будет

состоять из элементов собственных и взаимных ёмкостей электродов (их всего 9, например C_{gg}, C_{ds}) а так же ещё шести элементов взаимной ёмкости первой сферы и электродов (это элементы вида C_{s1}, C_{d1}, C_{1g} и т.д.). Вторая группа будет состоять из тех же девяти коэффициентов, относящихся к электродам, и ещё шести, связанных со второй сферой (вида C_{s2}, C_{2g} и т.д.)

Разделив матрицу на 2 таких группы, мы можем рассчитать матрицу ёмкостей для двух систем четырёх непересекающихся и не лежащих внутри друг друга сфер. Сделать это можно с помощью метода изображений. Данный метод был хорошо описан в [4]. Поместив пробный заряд на одну из сфер, будем последовательно строить заряды-изображения в других сферах до тех пор, пока поправка на величину заряда-изображения в i -ой итерации не станет меньше выбранного ε *здесь будет хорошо вставить рисунок со схемой метода*

1.4 Потенциалы и заряды системы концентрических проводящих сфер

Пусть имеется система проводящих концентрических сфер с радиусами $r_1 < r_2 < \dots < r_N$ и зарядами q_i . Тогда потенциал внешней сферы по теореме Остроградского-Гаусса определяется как

$$\varphi_N = \frac{\sum_{i=1}^N q_i}{r_N}. \quad (1.16)$$

Потенциал $N - 1$ сферы определяется как

$$\varphi_N = \frac{\sum_{i=1}^{N-1} q_i}{r_{N-1}} + \phi_{N-1}, \quad (1.17)$$

где константа ϕ_{N-1} определяется из условия

$$\frac{\sum_{i=1}^{N-1} q_i}{r_N} + \phi_{N-1} = \frac{\sum_{i=1}^N q_i}{r_N}, \quad \phi_{N-1} = \frac{q_N}{r_N} \quad (1.18)$$

Таким образом, потенциалы и заряды на N концентрических сферах определены равенством:

$$\begin{pmatrix} \vec{\varphi}_1 \\ \vdots \\ \vec{\varphi}_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/r_1 & 1/r_2 & 1/r_3 & \dots & 1/r_{N-2} & 1/r_{N-1} & 1/r_N \\ 1/r_2 & 1/r_2 & 1/r_3 & \dots & 1/r_{N-2} & 1/r_{N-1} & 1/r_N \\ 1/r_3 & 1/r_3 & 1/r_3 & \dots & 1/r_{N-2} & 1/r_{N-1} & 1/r_N \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1/r_{N-2} & 1/r_{N-2} & 1/r_{N-2} & \dots & 1/r_{N-2} & 1/r_{N-1} & 1/r_N \\ 1/r_{N-1} & 1/r_{N-1} & 1/r_{N-1} & \dots & 1/r_{N-1} & 1/r_{N-1} & 1/r_N \\ 1/r_N & 1/r_N & 1/r_N & \dots & 1/r_N & 1/r_N & 1/r_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{q}_1 \\ \vdots \\ \vec{q}_N \end{pmatrix}. \quad (1.19)$$

Элементы потенциальной матрицы в этой системе определяются как

$$S_{ij} = \begin{cases} 1/r_i & \text{если } i > j, \\ 1/r_j & \text{если } i \leq j. \end{cases} \quad (1.20)$$

1.5 Расчёт темпа туннелирования

Распределение электронов по энергиям в электроде описывается распределением Ферми-Дирака:

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp(\frac{E-E_F}{kT})}, \quad (1.21)$$

где E_F — энергия Ферми. Ширина энергетических уровней в атоме описывается распределением Лоренца:

$$L(E) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma/2}{(E - E_0)^2 + (\gamma/2)^2} \quad (1.22)$$

Здесь γ — полуширина энергетического уровня. E_0 — энергия уровня. Прозрачность туннельного барьера оценивается:

$$\tau \approx \exp(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m\Delta\mu} l), \quad (1.23)$$

$\Delta\mu = \mu_d - \mu_e$ — изменение химического потенциала при туннелировании электрона с электрода на атом. l есть расстояние между примесным атомом и электродом. Беря во внимание плотность электронных состояний D

на границе электрода, значение темпа туннелирования можно оценить следующим образом:

$$\Gamma_{ed} = D\tau \int_{-\infty}^{\infty} f(E)L(E + \Delta E)dE, \quad (1.24)$$

Причём $\Delta E = dF$, где dF определяется из формулы (1.14). По физическому смыслу формула (1.24) представляет собой формулу нахождения вероятности наступления двух независимых событий: наличие электрона с энергией E в электроде «попадание» электрона после туннелирования в атомный уровень.

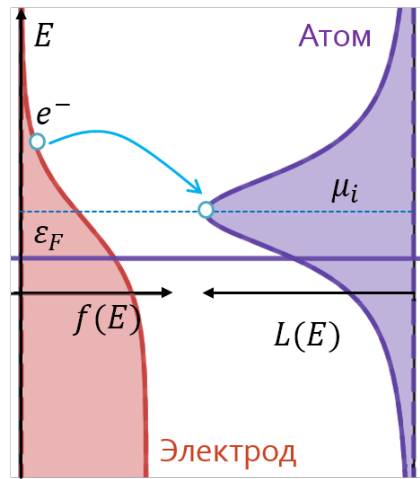


Рис. 1.4: Схематичное изображение зонной структуры

Темп туннелирования с примесного атома на электрод даётся в свою очередь формулой:

$$\Gamma_{de} = D\tau \int_{-\infty}^{\infty} (1 - f(E + \Delta E))L(E)dE, \quad (1.25)$$

1.6 Граф состояний двухуровневой системы

Рассмотрим следующую систему. Пусть на островке между двумя электродами электрон может находиться лишь в двух энергетических состояниях. Согласно принципу Паули на каждом из уровней может находиться максимум два электрона. Тогда система может находиться в одном из 16 состояний, причём возможны только строго определённые

переходы между этими состояниями в процессе актов туннелирования. Эти состояния и разрешённые переходы между ними изображены на рис. 1.5.

Пронумерованы они в двоичной системе счисления. Это очень удобно при численном моделировании данной системы, поскольку каждый разряд числа отвечает за наличие электрона с некоторым спином на данном энергетическом уровне.

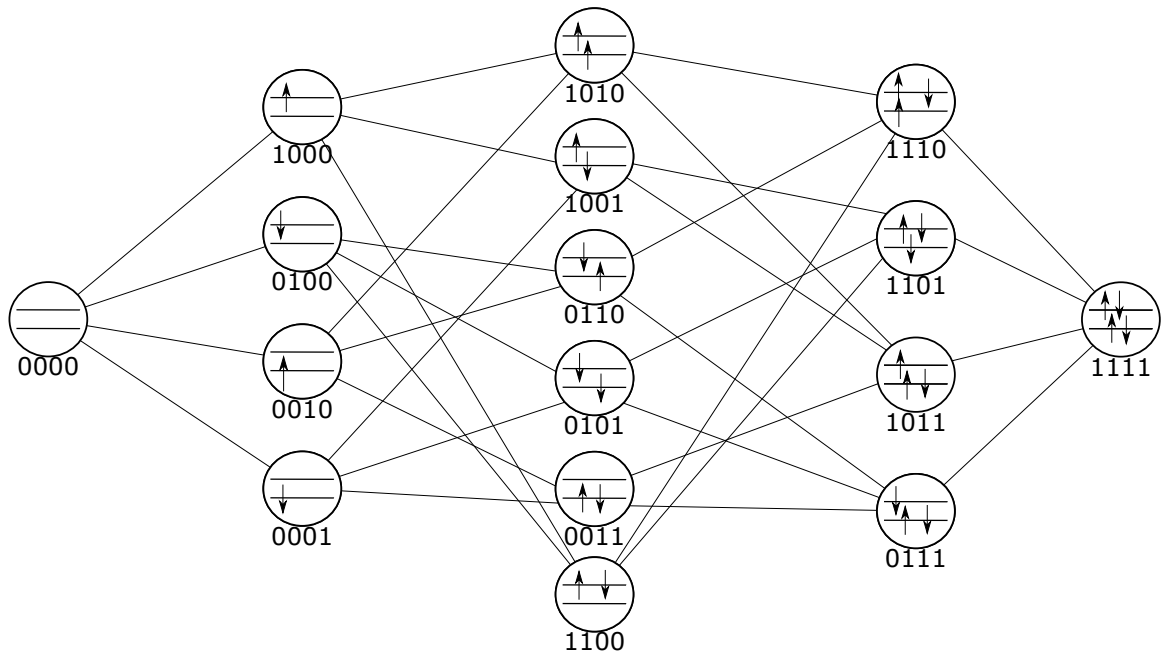


Рис. 1.5: Граф состояний двухуровневой системы

Таким образом можно сразу ввести эффективное, с точки зрения затрат вычислительных ресурсов, правило определения возможности перехода системы из одного зарядового состояния в другое: акт туннелирования возможен если побитовая запись номеров этих двух состояний отличается в одном и только в одном разряде. Для удобства дальнейшего повествования имеет смысл ввести логическую функцию $Graph(n, n')$, отвечающую правилу определения возможности перехода

$$Graph(n, n') = \begin{cases} 1 & \text{если переход } n \rightarrow n' \text{ возможен,} \\ 0 & \text{если переход } n \rightarrow n' \text{ невозможен.} \end{cases} \quad (1.26)$$

n и n' здесь номера некоторых зарядовых состояний.

1.7 Система кинетических уравнений

В данной работе для расчёта тока будет использоваться метод решения системы кинетических уравнений [14]. Изложим идею этого метода.

Введём в рассмотрение дискретную функцию $\sigma(n)$, определенную на множестве зарядовых состояний. Пускай в каждой точке она принимает значение, равное вероятности системы находится в зарядовом состоянии n . Отметим что для описанной двухуровневой системы данная функция будет определена в 16 точках. Вполне естественно требовать от значений данной функции выполнения условия нормировки:

$$\sum_{i=0}^{15} \sigma(i) = 1 \quad (1.27)$$

Для состояний, переходы между которыми разрешены, справедливо управляющее уравнение("master equation"):

$$\frac{d\sigma(n)}{dt} = \sum_{n \neq n'} \Gamma_{n,n'} \sigma(n') - \Gamma_{n',n} \sigma(n) \quad (1.28)$$

Здесь $\Gamma_{n',n}$ есть темп туннелирования из состояния n в состояние n' . Процесс с повышением номера зарядового состояния($n' > n$) эквивалентен туннелированию электрона на активный элемент. Следовательно, в таком случае:

$$\Gamma_{n',n} = \Gamma_{n',n}^{(L)} + \Gamma_{n',n}^{(R)} \quad (1.29)$$

где $\Gamma_{n',n}^{(L)}$, $\Gamma_{n',n}^{(R)}$ — рассчитанные по формуле 1.24 темпы туннелирования для левого и правого туннельного перехода соответственно. Для случая ($n' < n$) имеем обратную ситуацию:

$$\Gamma_{n',n} = \Gamma_{n',n}^{(L)} + \Gamma_{n',n}^{(R)} \quad (1.30)$$

Электрон покидает зарядовый остров, а темпы туннелирования входящие в последнее соотношения рассчитываются по формуле 1.25.

Вернёмся к управляющему уравнению. Будем рассматривать только

стационарный случай ($d\sigma(n)/dt = 0, \forall n$). Приближение стационарности справедливо, если частоты, на которых будет работать устройство, меньше $1/\tau_0$, где τ_0 — характерное время релаксации прибора. Левая часть уравнения 1.28 зануляется. Для наглядности выпишем управляющее уравнение для зарядового состояния $n = 0$.

$$\Gamma_{0,8}\sigma(8) + \Gamma_{0,4}\sigma(4) + \Gamma_{0,2}\sigma(2) + \Gamma_{0,1}\sigma(1) - (\Gamma_{8,0} + \Gamma_{4,0} + \Gamma_{2,0} + \Gamma_{1,0})\sigma(0) = 0 \quad (1.31)$$

Количество подобных уравнений равно количеству зарядовых состояний. Таким образом мы получаем однородную систему линейных уравнений относительно коэффициентов $\sigma(n)$:

$$\hat{\Gamma}\vec{\sigma} = \vec{\theta} \quad (1.32)$$

Пусть γ_{ij} — элемент матрицы $\hat{\Gamma}$. Тогда множители в уравнении 1.32 определены следующим образом:

$$\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma(0) \\ \sigma(1) \\ \vdots \\ \sigma(14) \\ \sigma(15) \end{pmatrix}, \gamma_{ij} = \begin{cases} \Gamma_{j,i} \text{ если } i \neq j \text{ и } Graph(n, n') = 1, \\ \sum_{Graph(i,k)=1} -\Gamma_{i,k} \text{ если } i = j, \\ 0 \text{ в любом другом случае} \end{cases} \quad (1.33)$$

Чтобы выделить однозначное решение, вспомним про условие нормировки 1.27 и заменим любую строку в системе на строку единиц. Данную систему можно решать стандартными численными методами линейной алгебры. Стоит отметить, что матрица системы кинетических уравнений 1.32 разрежена. Подробнее в главе о проблемах масштабирования структуры.

1.8 Расчёт транспортных характеристик

После решения системы 1.32 задача о нахождении тока не представляет сложности. Теперь нам известны вероятности нахождения системы в каждом из зарядовых состояний. Будем считать, что если

электрон движется по цепи в направлении от стока к истоку, он даёт положительный вклад в общую силу тока, а если наоборот, то отрицательный. Введём в рассмотрение две компоненты туннельного тока. Компонента I^+ будет равна суммарному туннельному току всех тех процессов, что идут с повышением номера зарядового состояния. Компонента I^- ответственна за туннельный ток процессов с понижением этого числа. Выпишем в явном виде формулы для расчёта этих компонент

$$I^+ = \sum_{\substack{Graph(i,j)=1 \\ j > i}} \sigma(i)(\Gamma_{j,i}^{(R)} - \Gamma_{j,i}^{(L)}) \quad (1.34)$$

$$I^- = \sum_{\substack{Graph(i,j)=1 \\ j < i}} \sigma(i)(\Gamma_{j,i}^{(L)} - \Gamma_{j,i}^{(R)}) \quad (1.35)$$

Очевидно, что интересующая нас полная сила тока даётся соотношением:

$$I = I^+ + I^- \quad (1.36)$$

Теперь, когда мы умеем рассчитывать силу тока при фиксированном значении параметров, имеет смысл рассчитать её при вариации внешних параметров в некотором диапазоне. Таким образом можно получить следующие типы диаграмм:

- (a) Диаграммы дифференциальной проводимости или, как их ещё называют: диаграммы зарядовой стабильности. Представляют собой зависимость производной плотности тока di/dv_t от напряжения смещения $v_t = \phi_d - \phi_s$ и напряжения на затворе v_g
- (b), (c) Срезы диаграммы стабильности будут полезны при анализе качества численных расчётов и отсутствии артефактов моделирования.
- (d), (e) Вольт-амперные характеристики и сигнальные характеристики демонстрируют естественные для одноэлектронных устройств явления кулоновской блокады и ступеней.

(f), (g) Зависимость среднего числа электронов на активном элементе $\langle n \rangle$ и его среднеквадратичного отклонения $\sqrt{D(n)}$ от тех же v_t и v_g

1.9 Обсуждение результатов

Раз мы для простоты начали рассматривать систему с двумя уровнями, то результаты для начала представим для неё. Как

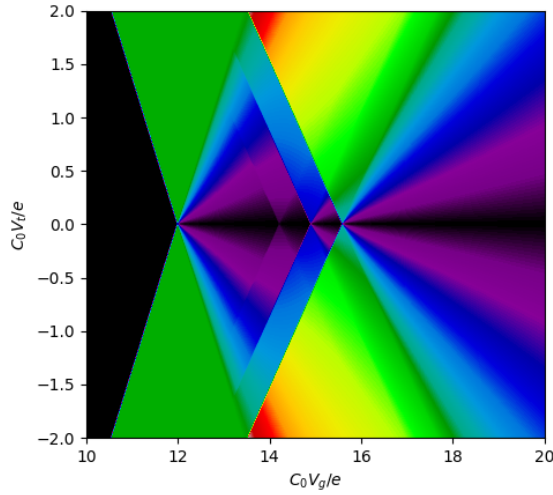


Рис. 1.6: Диаграмма стабильности системы с 2 уровнями

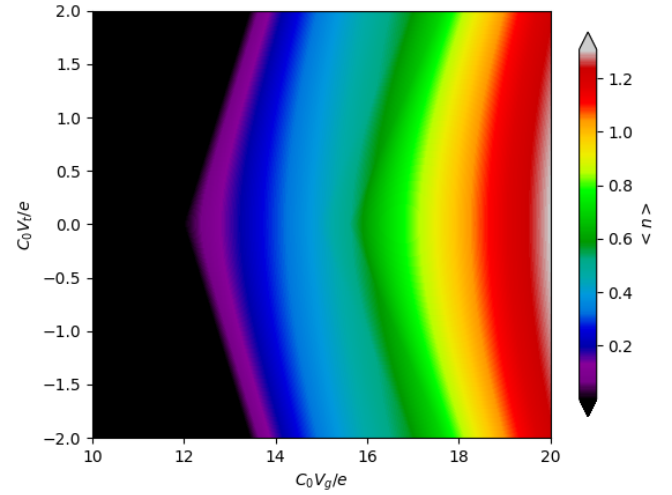


Рис. 1.7: Среднее число электронов для системы с 2 уровнями

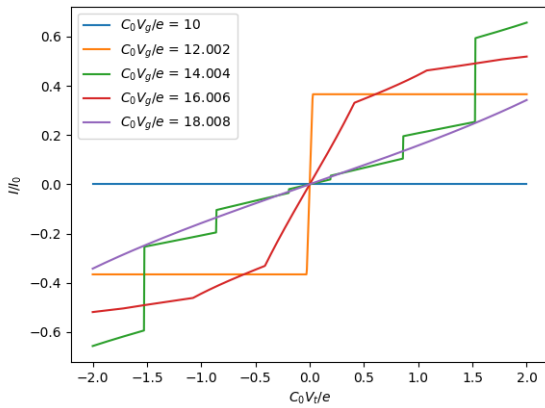


Рис. 1.8: ВАХ для системы с двумя уровнями

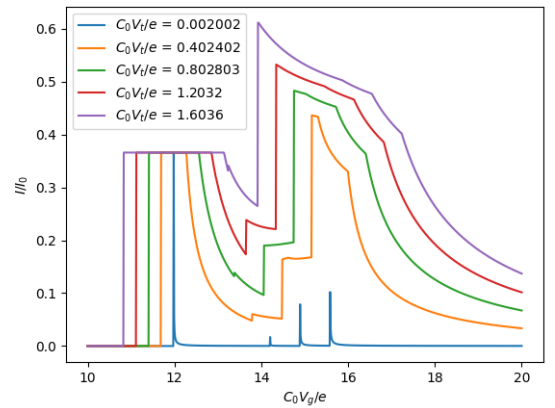


Рис. 1.9: Сигнальная характеристика для системы с 2 уровнями

можно заметить, использованные в данной работе методы позволяют строить любые необходимые диаграммы. Однако, модель с двумя

уровнями всё же является некоторой абстракцией, поведение которой на реальных системах заметить невозможно. Поэтому вниманию читателя представляется диаграмма стабильности для системы с 8 уровнями.

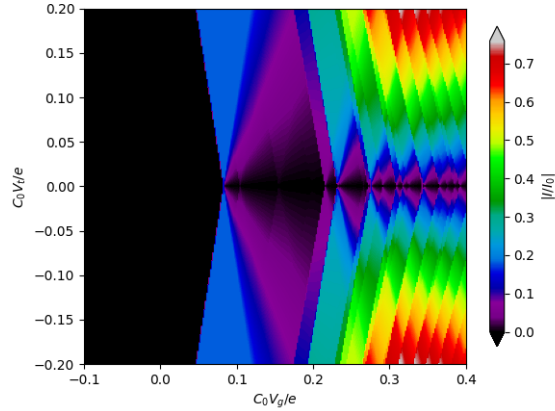


Рис. 1.10: Диаграмма стабильности для системы с 8 уровнями

стоит обратить внимание на экспериментальные диаграммы полученные в работе [8], изображённые на рис.1.11 и рис.1.12. Стоит заметить,

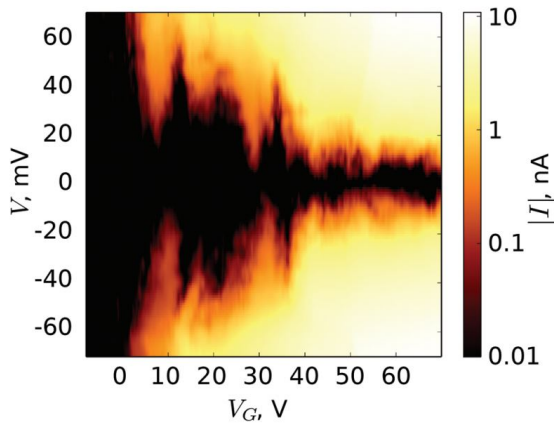


Рис. 1.11: Модуль тока из эксперимента

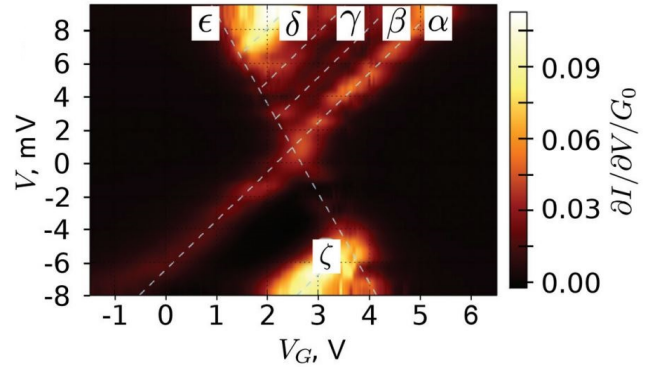


Рис. 1.12: Проводимость из эксперимента

что асимптотическое поведение экспериментальной диаграммы с рис.1.11 очень хорошо прослеживается на диаграмме, полученной с помощью моделирования на рис.1.10. А наклонные прямые на экспериментальной диаграмме проводимости на рис.1.12 можно проследить на рассчитанной диаграмме на рис.1.6.

Итоги

Программа, моделирующая работу одноатомного транзистора была написана на языке C++, без использования сторонних библиотек. Данное ПО является полностью оригинальным. Преобразование данных расчёта в изображения производилось с помощью языка Python и библиотек NumPy, Matplotlib.

В заключении следует отметить несколько моментов, требующих доработки. Во-первых, приближение для значения τ является очень грубым и предполагает, что электрод и атом разделяет прямоугольный потенциальный барьер, что разумеется не так см. рис.1.13.

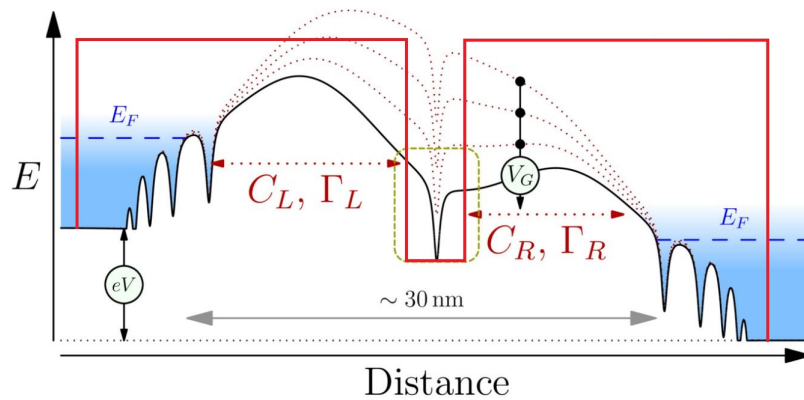


Рис. 1.13: Распределение потенциала в реальной системе и модели

Во-вторых, на вычисление интегралов в уравнениях (1.24) и (1.25) приходится огромная часть времени выполнения программы. Осмысленным является создание массива табличных значений данного интеграла и хранение его в виде отдельного файла для мгновенного доступа программы к значению интеграла.

В-третьих, необходимо применение алгоритмов работы с разреженными матрицами для решения системы кинетических уравнений, т.к. размер данной матрицы экспоненциально растёт с увеличением

количества свободных мест для электронов на атомных оболочках, а матрица системы остаётся заполненной преимущественно нулями.

Список литературы

- [1] T. A. Fulton and G. J. Dolan. Phys. Rev. Lett., 59:109–112, Jul 1987.
- [2] M. Amman, K. Mullen, and E. Ben-Jacob. Journal of Applied Physics, 65(1):339–346, 1989.
- [3] D.V. Averin and K.K. Likharev. Single electronics: A correlated transfer of single electrons and cooper pairs in systems of small tunnel junctions. In B.L. ALTSHULER, P.A. LEE, and R.A. WEBB, editors, Mesoscopic Phenomena in Solids, volume 30 of Modern Problems in Condensed Matter Sciences, chapter 6, pages 173–271. Elsevier, 1991.
- [4] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц Электродинамика сплошных сред М., Наука, 1982
- [5] J. P. Pekola, J. K. Suoknuuti, J. P. Kauppinen, M. Weiss, P. v. d. Linden, and A. G. M. Jansen. Coulomb blockade thermometry in the milli-kelvin temperature range in high magnetic fields. Journal of Low Temperature Physics, 128(5):263–269, Sep 2002.
- [6] K. Nakazato, R. J. Blaikie, and H. Ahmed. Single-electron memory. Journal of Applied Physics, 75(10):5123–5134, 1994.
- [7] Knobel, R., Cleland, A. Nanometre-scale displacement sensing using a single electron transistor. Nature 424, 291–293 (2003).
- [8] V. V. Shorokhov, D. E. Presnov, S. V. Amitonov, Yu. A. Pashkin, and V. A. Krupenin. Single-electron tunneling through an individual arsenic dopant in silicon Nanoscale, 9:613–620, 2017.

- [9] Kubatkin, S., Danilov, A., Hjort, M. et al. Single-electron transistor of a single organic molecule with access to several redox states. *Nature* 425, 698–701 (2003).
- [10] Bose, S., Lawrence, C., Liu, Z. et al. Evolution of a designless nanoparticle network into reconfigurable Boolean logic. *Nature Nanotech* 10, 1048–1052 (2015).
- [11] D. M. Dobrynin, V. V. Shorokhov, and V. A. Krupenin. Correlated parallel electron transport in double- and triple-island single-electron transistors. *Journal of Physics: Conference Series*, 1482:012027, mar 2020.
- [12] Park, J., Pasupathy, A. N., Goldsmith, J. I., Chang, C., Yaish, Y., Petta, J. R., . . . Ralph, D. C. (2002). Coulomb blockade and the Kondo effect in single-atom transistors. *Nature*, 417(6890), 722–725.
- [13] Dagesyan, S.A., Shorokhov, V.V., Presnov, D.E., Soldatov, E.S., Trifonov, A.S., and Krupenin, V.A. Sequential reduction of the silicon single-electron transistor structure to atomic scale. *Nanotechnology* 28 (2017), 225304.
- [14] Alexander N. Korotkov. Coulomb blockade and digital single-electron devices, 1996.