

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

<b>Введение</b>	<b>3</b>
<b>1 Двухуровневая система</b>	<b>5</b>
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
<b>Список литературы</b>	<b>14</b>

# Введение

Одноэлектронные устройства — это такие устройства, принцип работы которых основан на явлении коррелированного в пространстве и времени транспорта единичных электронов. Обязательным требованием к таким устройствам является достаточно высокое 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: сенсоры [7], термометрия [5], память [6].

Развитие технологических процессов в области изготовления полупроводниковых изделий и материалов, 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]. Уменьшение размеров островков ведёт к возможности работы устройств при более высоких температурах (**вплоть до комнатной? ссылка??????**).

Пока не существует технологического процесса, позволяющего в производственных масштабах изготавливать структуры из единичных атомов с допусками в единицы ангстрем. Однако, с точки зрения практических применений (создание сенсоров, логических элементов) проявляется к элементам из одиночных атомов и молекул, а в перспективе к элементам с атомной функциональной структурой. А значит, существование универсальных методик расчёта для таких структур

необходимо для проектирования устройств с реальными практическими применениями.

тут ещё желательно что-нибудь написать и отредактировать то, что выше

## 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

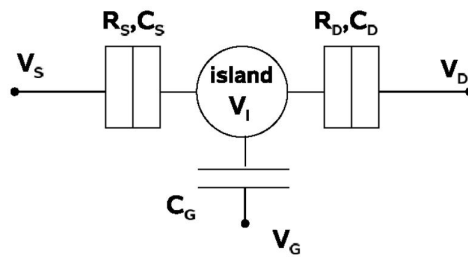


Рис. 1.1: Одноэлектронный транзистор

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. [10] 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 рабочую температуры, фигурирующую 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. 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 последних отвечают за представление электронных оболочек

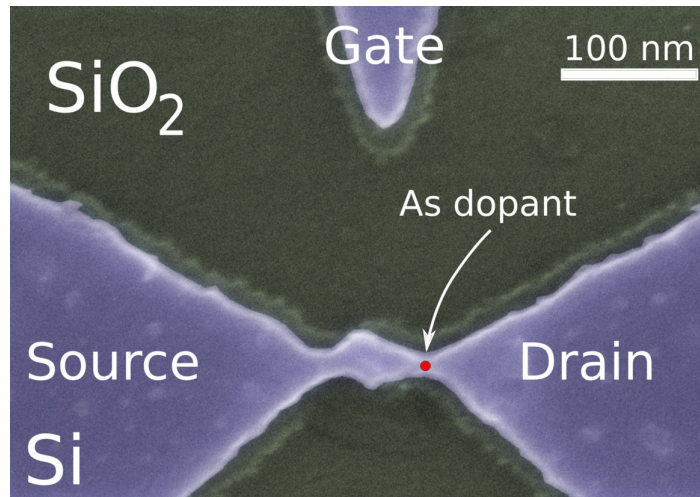


Рис. 1.2: Одноатомный одноэлектронный транзистор

атома. Все геометрические размеры представлены на рис. 1.3 Каждая

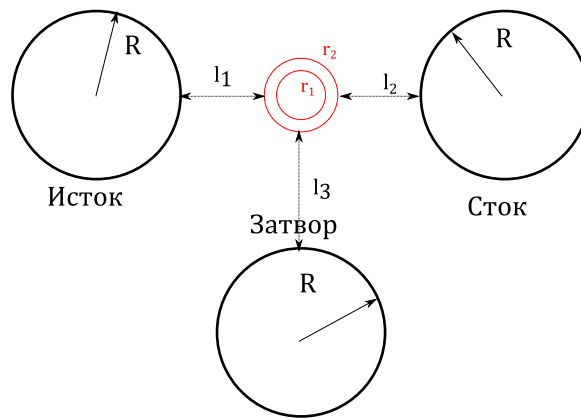


Рис. 1.3: Модель одноатомного одноэлектронного транзистора

сфера из набора концентрических будет соответствовать отдельной оболочке и отдельному энергетическому уровню. Для наглядности 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.

Учитывая уже сказанное можно дать некоторые оценки на геометрические параметры в модели.  $r_1, r_2 \sim 1-2 \text{ nm}$ ,  $l_1, l_2, l_3 \sim 1 \text{ nm}$ ,

$R \sim 7 \text{ nm}$ . При данных параметрах никакие из сфер не пересекаются.  
**Обоснование есть на бумаге надо дописать, ссылки?**

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  $\varepsilon_F$  для электрода и уровней атома  $\mu_1, \mu_2$ . Последние стоит отсчитывать от дна зоны проводимости для электрода. **\*вставить зонную структуру\***

Оканчивая постановку задачи, необходимо найти значение силы тока электронов с Истока на Сток.

## 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,  $dn_{tun}$  — 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 стока 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  $\varepsilon$

## 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

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

где константа  $C_{N-1}$  определяется из условия

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

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. Толщина 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  $\gamma$  — полуширина энергетического уровня.  $E_0$  — энергия уровня. Прозрачность туннельного барьера даётся формулой:

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

$\Delta\mu = \mu_d - \mu_e$  — 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  $\Delta E = dF + \Delta\mu$ , 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 и "попадание" электрона после туннелирования в атомный уровень. 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. 1.4.

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.

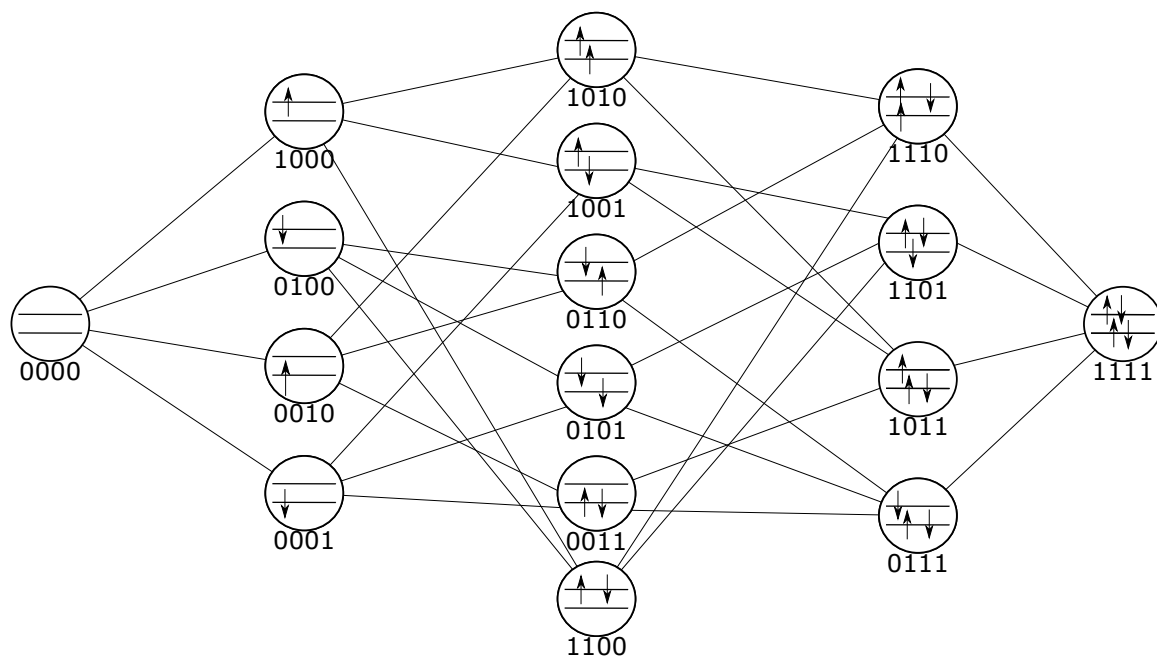


Рис. 1.4: Граф состояний двухуровневой системы

# 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] 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.