

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

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА ФИЗИКИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ И
КРИОЭЛЕКТРОНИКИ

«ИССЛЕДОВАНИЕ ТРАНСПОРТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
ОДНОЭЛЕКТРОННОГО ОДНОАТОМНОГО ТРАНЗИСТОРА»

Выполнил студент
416 группы:
Назаров Степан Сергеевич

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

МОСКВА

2021

Оглавление

Мотивация	2
Модель	3
Изменение свободной энергии системы	5
Темп туннелирования	7
Граф состояний	8
Обсуждение результатов	9
Итоги	10
Список литературы	12

Мотивация

Первые работы, сообщающие о реализации одноэлектронных устройств появились более 30 лет назад [1]. Одноэлектроника нашла применения в самых разных сферах: термометрия [2], память [3], сенсоры [4].

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 [5–7].

Нельзя не упомянуть резервуарные вычислительные нейросети, первые шаги к созданиям которых уже были проделаны в работе [8]. Сами авторы считают, что кластер наночастиц золота можно рассматривать, как набор туннельно связанных одноатомных одноэлектронных транзисторов.

Уже были проведены теоретические работы по созданию обобщённых алгоритмов расчёта обычных одноэлектронных устройств [9], где в роли зарядовых центров выступают металлические островки. Однако, с

точки зрения практических применений (создание сенсоров, логических элементов) большой 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.

Модель

Классическая (ортодоксальная) [1] теория одноэлектроники при рассмотрении одноатомных одноэлектронных транзисторов неприменима, ввиду дискретности энергетического спектра атома, как зарядового центра, и конечного числа зарядовых состояний. Соответственно, для расчёта характеристик таких устройств необходимо составление отдельной физической модели явления и её расчёт.

Необходимо смоделировать работу одноатомного одноэлектронного транзистора. Типичное его устройство представлено на рис.1. Этот транзистор исследовался в работе [10]. Кремниевые электроды на подложке из оксида кремния. Между электродами находится атом фосфора. Электроды представим как три относительно больших проводящих сферы. Примесный атом отождествим с двумя концентрическими проводящими сферами. Две последних отвечают за представление электронных оболочек атома, по сути энергетических уровней. Можно взять и больше, но мы ограничимся двумя, для простоты изложения. Все геометрические

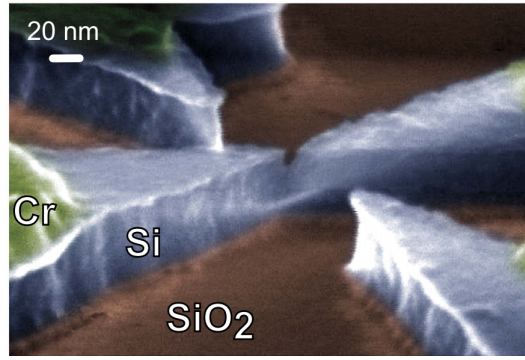


Рис. 1: Одноатомный одноэлектронный транзистор

размеры представлены на рис. 3. Каждая сфера из набора концентрических

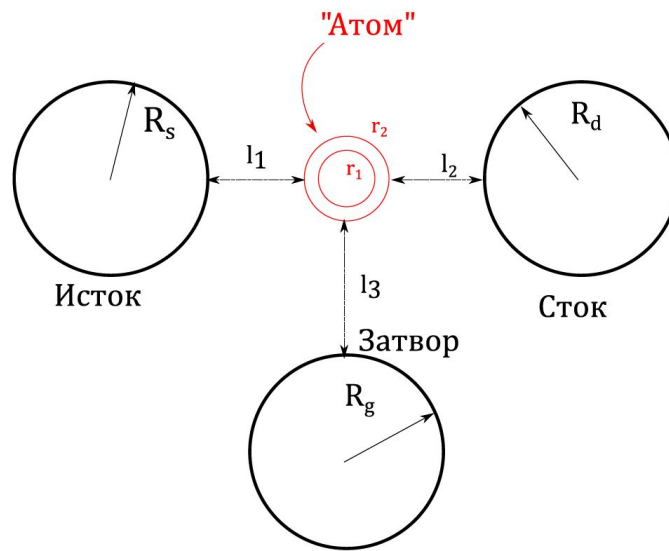


Рис. 2: Модель одноатомного одноэлектронного транзистора

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.

Изменение свободной энергии системы

Введём векторы зарядов и векторы потенциалов на рассматриваемых телах.

$$\vec{q} = \begin{pmatrix} q_s \\ q_d \\ q_g \\ q_1 \\ q_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{q}_e \\ \vec{q}_d \end{pmatrix}, \vec{\varphi} = \begin{pmatrix} \varphi_s \\ \varphi_d \\ \varphi_g \\ \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{\varphi}_e \\ \vec{\varphi}_d \end{pmatrix} \quad (1)$$

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:

$$\vec{q}_e = \begin{pmatrix} q_s \\ q_d \\ q_g \end{pmatrix}, \vec{\varphi}_d = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \quad (2)$$

Изменение электростатической энергии запишем в виде

$$dU = \frac{\vec{\varphi}_f^T \vec{q}_f - \vec{\varphi}_i^T \vec{q}_i}{2} = \frac{(\vec{\varphi}_i^T + d\vec{\varphi}^T)(\vec{q}_i + d\vec{q}) - \vec{\varphi}_i^T \vec{q}_i}{2} \quad (3)$$

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

$$d\vec{\varphi} = \vec{\varphi}_f - \vec{\varphi}_i = \begin{pmatrix} \vec{0}_e \\ d\vec{\varphi}_d \end{pmatrix} \quad (4)$$

Вектор изменения зарядов всех элементов

$$d\vec{q} = \vec{q}_f - \vec{q}_i = \begin{pmatrix} d\vec{q}_{ind} + d\vec{q}_{tun} \\ d\vec{q}_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d\vec{q}_{ind} + ed\vec{n}_{tun} \\ ed\vec{n}_d \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где $d\vec{q}_{ind}$ — вектор изменения индуцированных на электродах зарядов, $d\vec{n}_{tun}$ — 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

$$dU = \frac{\vec{\varphi}_1^T d\vec{q} + \vec{q}_1^T d\vec{\varphi} + d\vec{q}^T d\vec{\varphi}}{2} = \frac{(\vec{q}_d^T + d\vec{q}_d^T)d\vec{\varphi}_d + \vec{\varphi}_d^T d\vec{q}_d + \vec{\varphi}_e^T d\vec{q}_{ind}}{2} \quad (6)$$

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

$$\begin{pmatrix} \vec{q}_{ind} \\ \vec{q}_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{C}_{ee} & \hat{C}_{ed} \\ \hat{C}_{de} & \hat{C}_{dd} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\varphi}_e \\ \vec{\varphi}_d \end{pmatrix} \quad (7)$$

Обсуждение расчёта матрицы из последнего уравнения выходит за рамки нашего краткого повествования. Получим

$$\begin{aligned} \vec{\varphi}_d &= \hat{C}_{dd}^{-1}(\vec{q}_d - \hat{C}_{de}\vec{\varphi}_e) \\ \vec{q}_{ind} &= (\hat{C}_{ee} - \hat{C}_{ed}\hat{C}_{dd}^{-1}\hat{C}_{de})\varphi_e + \hat{C}_{ed}\hat{C}_{dd}^{-1}\vec{q}_d. \end{aligned} \quad (8)$$

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

$$\begin{aligned} d\vec{\varphi}_d &= \hat{C}_{dd}^{-1}d\vec{q}_d \\ d\vec{q}_{ind} &= \hat{C}_{ed}\hat{C}_{dd}^{-1}d\vec{q}_d. \end{aligned} \quad (9)$$

Получаем для изменения электростатической энергии

$$dU = \frac{(\vec{q}_d^T + d\vec{q}_d^T)\hat{C}_{dd}^{-1}d\vec{q}_d + (\vec{q}_d^T - \vec{\varphi}_e^T\hat{C}_{ed})\hat{C}_{dd}^{-1}d\vec{q}_d + \vec{\varphi}_e^T\hat{C}_{ed}\hat{C}_{dd}^{-1}d\vec{q}_d}{2} \quad (10)$$

Окончательно изменения электростатической энергии:

$$dU = \vec{q}_d^T \hat{C}_{dd}^{-1} d\vec{q}_d + \frac{d\vec{q}_d^T \hat{C}_{dd}^{-1} d\vec{q}_d}{2} = e^2 \vec{n}_d^T \hat{C}_{dd}^{-1} d\vec{n}_d + \frac{e^2}{2} d\vec{n}_d^T \hat{C}_{dd}^{-1} d\vec{n}_d \quad (11)$$

Изменение свободной энергии системы включает в себя работу источников

$$dF = dU + U = e^2 \vec{n}_d^T \hat{C}_{dd}^{-1} d\vec{n}_d + \frac{e^2}{2} d\vec{n}_d^T \hat{C}_{dd}^{-1} d\vec{n}_d + e \vec{\varphi}_e^T (\hat{C}_{ed} \hat{C}_{dd}^{-1} d\vec{n}_d + d\vec{n}_{tun}) \quad (12)$$

Темп туннелирования

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

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp(\frac{E - E_F}{kT})}, \quad (13)$$

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

$$L(E) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma/2}{(E - E_0)^2 + (\gamma/2)^2} \quad (14)$$

Здесь γ — полуширина энергетического уровня. E_0 — энергия уровня. Прозрачность туннельного барьера оценивается с помощью метода ВКБ:

$$\tau \approx \exp(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m\Delta\mu}l), \quad (15)$$

$\Delta\mu = \mu_d - \mu_e$ — 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:

$$\Gamma_{ed} = D\tau \int_{-\infty}^{\infty} f(E)L(E + \Delta E)dE, \quad (16)$$

Причём $\Delta E = dF$, где dF определяется из формулы (12). По физическому смыслу формула (16) представляет собой формулу нахождения вероятности наступления двух независимых событий: наличие электрона с энергией E в электроде «попадание» электрона после туннелирования в атомный уровень. Темп туннелирования с примесного

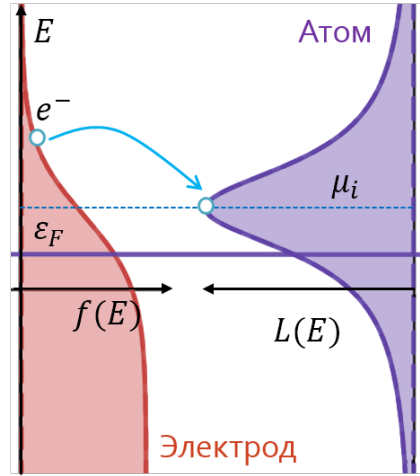


Рис. 3: Схематичное изображение зонной структуры

атома на электрод даётся в свою очередь формулой:

$$\Gamma_{de} = D\tau \int_{-\infty}^{\infty} (1 - f(E + \Delta E))L(E)dE, \quad (17)$$

Граф состояний

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. 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.

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

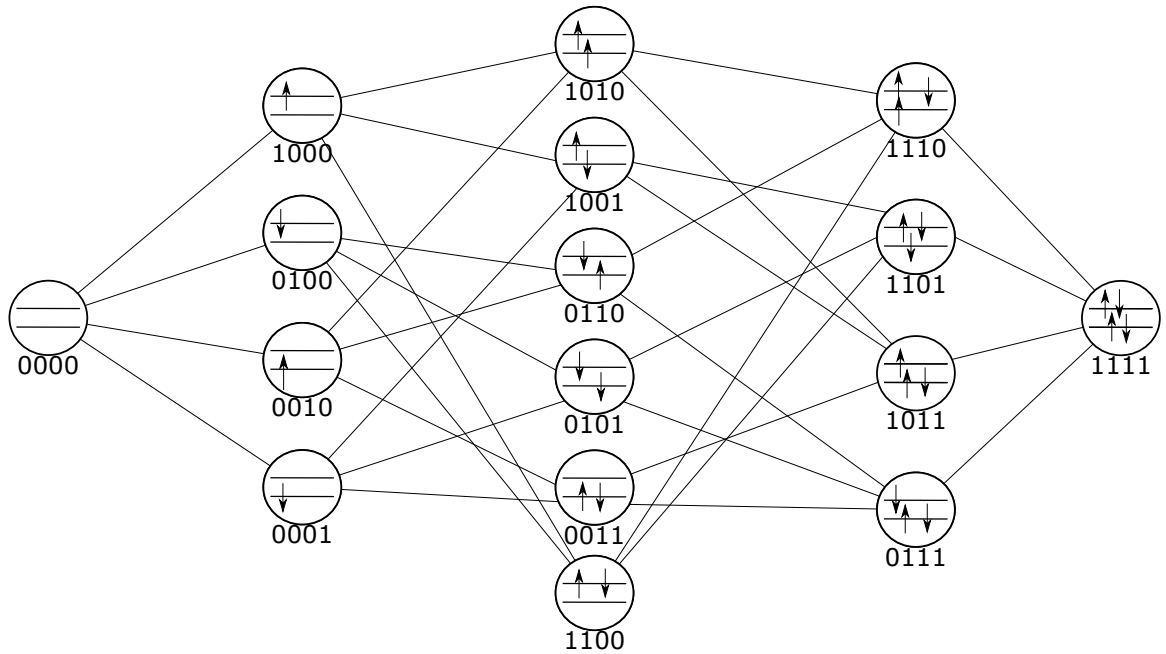


Рис. 4: Граф состояний двухуровневой системы

дальнейшего повествования имеет смысл ввести логическую функцию $Graph(n, n')$, отвечающую правилу определения возможности перехода

$$Graph(n, n') = \begin{cases} 1 & \text{если переход } n \rightarrow n' \text{ возможен,} \\ 0 & \text{если переход } n \rightarrow n' \text{ невозможен.} \end{cases} \quad (18)$$

n и n' здесь номера некоторых зарядовых состояний.

В данной работе для расчёта тока использован метод решения системы кинетических уравнений [11].

Обсуждение результатов

Раз мы для простоты начали рассматривать систему с двумя уровнями, то результаты для начала представим для неё. Как 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. Так же стоит обратить внимание на экспериментальные диаграммы полученные в работе [5], изображённые на рис.10 и рис.11. Стоит заметить,

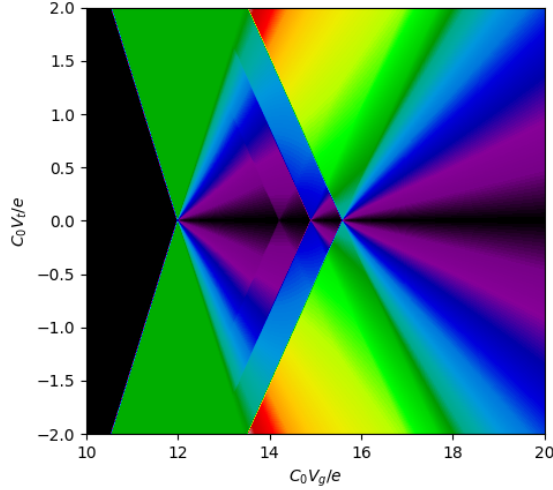


Рис. 5: Диаграмма стабильности системы с 2 уровнями

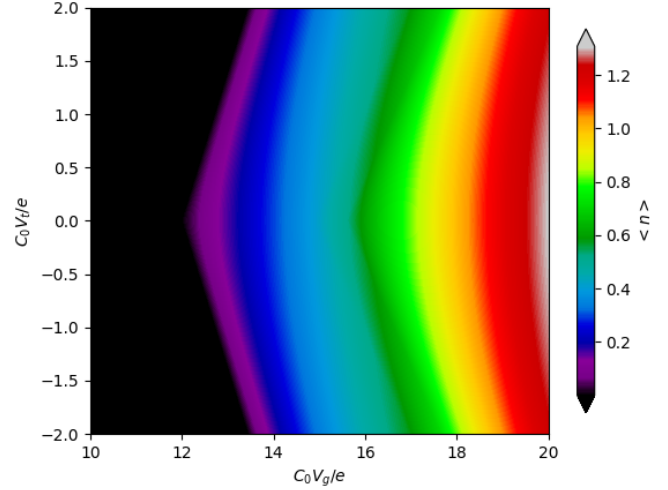


Рис. 6: Среднее число электронов для системы с 2 уровнями

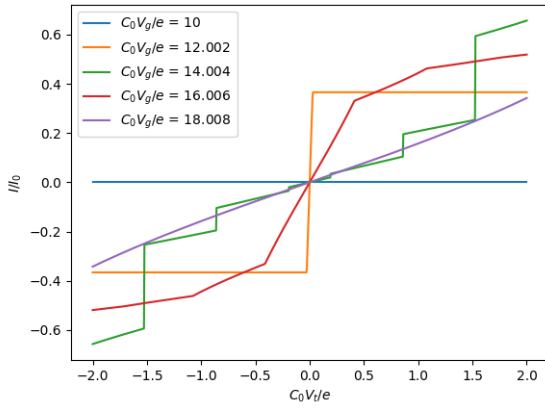


Рис. 7: ВАХ для системы с двумя уровнями

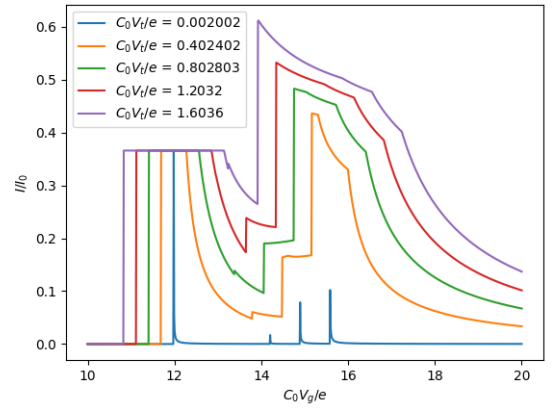


Рис. 8: Сигнальная характеристика для системы с 2 уровнями

что асимптотическое поведение экспериментальной диаграммы с рис.10 очень хорошо прослеживается на диаграмме, полученной с помощью моделирования на рис.9. А наклонные прямые на экспериментальной диаграмме проводимости на рис.11 можно проследить на рассчитанной диаграмме на рис.5.

Итоги

Программа, моделирующая работу одноатомного транзистора была написана на языке C++, без использования сторонних библиотек. Данное ПО является полностью оригинальным. Преобразование данных расчёта в

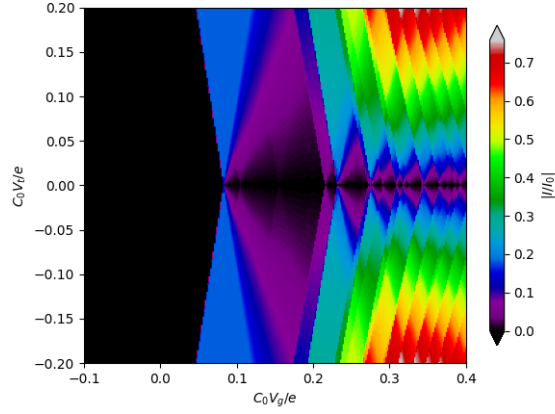


Рис. 9: Диаграмма стабильности для системы с 8 уровнями

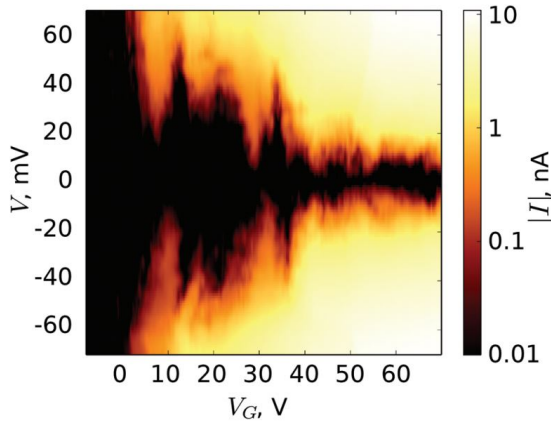


Рис. 10: Модуль тока из эксперимента

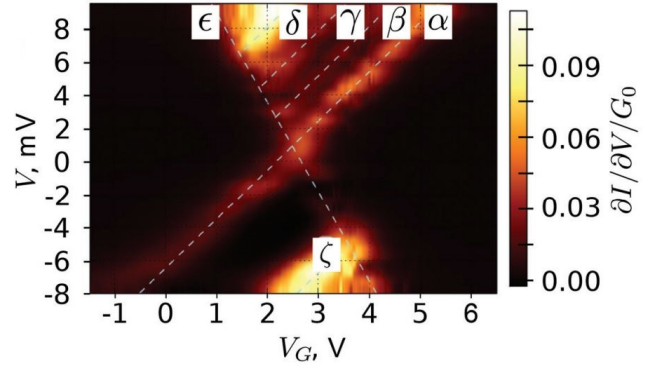


Рис. 11: Проводимость из эксперимента

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.12.

Во-вторых, на вычисление интегралов в уравнениях (16) и (17) 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,

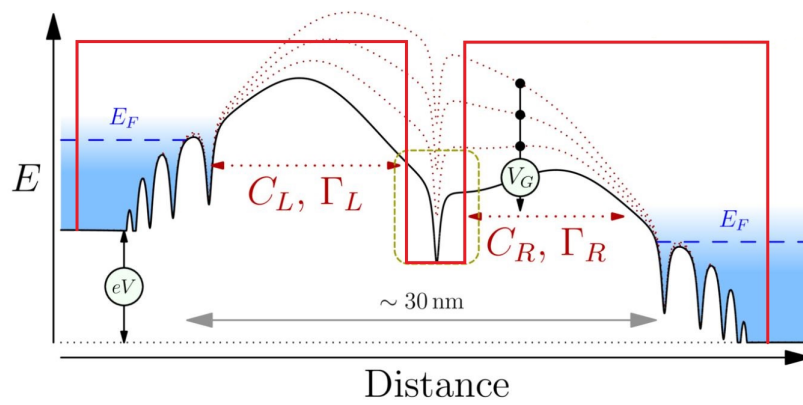


Рис. 12: Распределение потенциала в реальной системе и модели

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] 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.
- [2] 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.
- [3] K. Nakazato, R. J. Blaikie, and H. Ahmed. Single-electron memory. *Journal of Applied Physics*, 75(10):5123–5134, 1994.
- [4] Knobel, R., Cleland, A. Nanometre-scale displacement sensing using a single electron transistor. *Nature* 424, 291–293 (2003).
- [5] 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.
- [6] 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).
- [7] Fuechsle, M., Miwa, J., Mahapatra, S. et al. A single-atom transistor. *Nature Nanotech* 7, 242–246 (2012)

- [8] Bose, S., Lawrence, C., Liu, Z. et al. Evolution of a designless nanoparticle network into reconfigurable Boolean logic. *Nature Nanotech* 10, 1048–1052 (2015).
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] Alexander N. Korotkov. Coulomb blockade and digital single-electron devices, 1996.