

В.В. Погосов, Є.В. Васютін

## Про струмову щілину вольт-амперної характеристики одноелектронного транзистора на металевому кластері

*Запорізький національний технічний університет, вул. Жуковського, 64, Запоріжжя, 69063, Україна,  
тел. (0612) 64-67-33 e-mail: vpogosov@zntu.edu.ua*

Проводиться теоретичне дослідження одноелектронних ефектів в структурі з двох послідовно з'єднаних тунельних переходів з врахуванням дискретності спектра центрального кластера-електрода. Обговорюється походження струмової щілини, розраховується її величина і асиметрія по напрузі.

Робота виконана за підтримки Міністерства освіти і науки України і корпорації Samsung.

**Ключові слова:** одноелектронне тунелювання, металевий кластер, квантування спектра, струмова щілина.

*Стаття поступила до редакції 10.01.2005; прийнята до друку 25.06.2005.*

### I. Вступ

Цікавим об'єктом фізики низькорозмірних систем є металеві гранули, зв'язані слабкими тунельними взаємодіями (див. огляди [1,2] і посилання в них). Електрон в результаті переходу на гранулу своїм полем може перешкоджати переходу наступних електронів, створюючи "кулонівську блокаду", і таким чином корелюючи одноелектронне тунелювання. Блокування струму виражається в тому, що на вольт-амперній характеристиці структури виникають ступені "кулонівської сходинки" [3,4,5,6,7,8].

На перший погляд завдяки наявності між електродами гранули, ймовірність тунелювання електронів, а отже і струм, повинні бути значно вище, ніж у випадку її відсутності. Однак в експериментах з кластерами майже сферичної [9,11,12,13] і дископодібної форми [14,15] поблизу нульової напруги аж до деякого порогу спостерігається зворотна картина: ВАХ містить плато, на якому струм практично відсутній (струмова щілина).

Конструкція з двох тунельних переходів в роботах [11,12,13] являла собою плівку Au (111) з нанесеним діелектричним шаром товщиною  $\sim 10$  Å і діелектричною сталою  $\kappa = 3$ , на якій формувалися золоті кластери майже сферичної форми. Вольфрамова голка тунельного мікроскопа (з малою кривизною поверхні) покривалася плівкою Au товщиною приблизно  $10^3$  Å. Таким чином можна вважати, що всі три електроди (два з них з плоскою поверхнею) виготовлені із золота. З

експериментальної залежності  $I(V)$ , використовуючи схемотехнічний підхід роботи [7], автори експериментів визначили ємності тунельних переходів, їх опори і "залишковий" (дробовий) заряд  $Q_0$  гранули.

Вимірювання подібні до цих проводилися також в роботах [14,15]. Відмінні риси цих експериментів наступні: об'єктом дослідження були кластери дископодібної форми одноатомної висоти; товщина діелектричної плівки  $\sim 1,4$  nm, її  $\kappa = 2,7$ ; вістря мікроскопу виконувалося з Pt/Ir.

Узагальнюючи експериментальні залежності  $I(V)$ , можна виділити наступні характерні риси в поведінці плато ВАХ:

1. Ширина струмової щілини обернено пропорційна радіусу диска (рис. 4 в роботі [14]), що не дозволяє однозначно визначити її квантове чи класичне походження. Аналогічну залежність можна простежити і в структурах на сферичних кластерах [11,12,13]. З іншого боку, крім плато ВАХ для дисків діаметром 2,5 і 3,5 nm чітко видна тонка структура квантових сходинок (див рис. 3 в [14] і рис. 1 в [15]).
2. Ширина плато ВАХ тунельної структури (диск діаметра 3,5 nm) немонотонно змінюється зі зміною фракції напруги між кластером і електродами (див. рис. 3 у [15]).

Метою даної роботи є розрахунок струмової щілини вольт-амперної характеристики, а також інтерпретація її експериментальної поведінки в триелектродній структурі, центральним електродом якої є сферичний металевий кластер.

## II. Попередній аналіз і постановка задачі

Розглянемо сферичні кластери Au з радіусами  $R \approx 10 \div 30 a_0$ ,  $R = N_0^{1/3} r_s \Rightarrow N_0 = 36 \div 10^3$ ,  $r_s = 3,01 a_0$  – середня відстань між електронами,  $a_0$  – борівський радіус. Уведемо характерну зарядову енергію  $\tilde{E}_C = e^2 / C$ , де  $C$  – електрична ємність. Тоді  $\tilde{E}_C = 3 \div 0,9 \text{ eV}$ . Температура системи  $T = 30 \text{ K} \rightarrow 0,0026 \text{ eV}$ . Розрахунок величини дискретності спектра за методом, запропонованим в [21], дає для золотого кластера–куба таких же об'ємів (при  $T = 0$  поблизу верхнього зайнятого рівня  $E^{HO}$ ) значення  $\Delta \epsilon_p = 1 \div 0,1 \text{ eV}$ . Надалі будемо користуватися більш реалістичним спектром, розрахованим для сферично симетричного кластера. Таким чином, експериментам [11,12,13] для всього діапазону  $R$  відповідає режим

$$\frac{1}{2} \tilde{E}_C \approx \Delta \epsilon_p \gg k_B T. \quad (1)$$

Остання нерівність говорить про необхідність враховувати квантування рівнів у кластері.

Очевидно, в умовах експериментів [14,13] на ВАХ, співіснують дві тонкі структури: ефекти кулонівської блокади і квантування спектра. Теоретично вольт-амперна характеристика повинна являти собою суперпозицію *квантових* сходів з кроком  $\sim \Delta \epsilon_p / e$  і *класичних* кулонівських сходів електростатичної природи з кроком по напрузі  $\sim \tilde{E}_C / e$ .

Лівий і правий електроди (емітер і колектор) являють собою резервуари електронів з континуальними енергетичними спектрами, зайнятими відповідно до фермієвської функції розподілу:

$$f(\epsilon^{e,c}) = \left\{ 1 + \exp \left[ (\epsilon^{e,c} + W_0^{e,c}) / k_B T \right] \right\}^{-1}, \quad (2)$$

де  $W_0 > 0$  – робота виходу електронів з напівнескінченного металу. В усіх випадках енергії  $\epsilon < 0$  відраховуються від вакуумного рівня, тобто від потенціальної енергії електрона, віддаленого від усієї триелектродної структури, де поле відсутнє.

В квантовому випадку хімічний потенціал електронів кластера  $\mu_p$  знаходиться з умови нормування із урахуванням дворазового спінового виродження станів:

$$\sum_{p=1}^{\infty} g_p f(\epsilon_p) = N, \quad (3)$$

де  $g_p$  – фактор виродження станів,  $N$  – повне число термалізованих електронів провідності в гранулі (з урахуванням надлишкових або відсутніх) і

$$f(\epsilon_p) = \left\{ 1 + \exp \left[ (\epsilon_p - \mu_p) / k_B T \right] \right\}^{-1}. \quad (4)$$

Усі рівні нумеруються в порядку зростання енергії ( $p = 1, 2, 3, \dots$ ).

Між кластером і електродами виникає контактна різниця потенціалів

$$V_c = (W_0 + \mu_p) / e. \quad (5)$$

Рівновага буде досягатися шляхом зарядження кластера, оскільки його ємність є кінцевою величиною. Якщо  $|\mu_p| < W_0$ , то кластер заряджається позитивно з зарядом  $Q_0 = -e(N' - N_0) > 0$ , де  $N'$  визначається розв'язком рівняння (3) з заміною  $\mu_p \rightarrow -W_0$  і спектром  $\epsilon_p$ , зсунутим на  $-eV_c$  відповідно до теореми Купменса (див. коментарі до формули (38) у [23]). Таким чином одержимо

$$Q_0 = CV_c. \quad (6)$$

Визначення  $Q_0$  в цьому виразі відрізняється від його визначення в ортодоксальній теорії (див. вираз (29 b) у [6]).

У квазікласичному наближенні можна записати (див., наприклад, [21]):  $W_0 + \mu_p = \mu_1 / R$ ,  $\mu_1 = 1,9 \text{ eV} \times a_0$ , отже для всіх металів маємо  $Q_0 \approx +0,07e$ . У квантовому випадку при  $T = 0$  варто зробити заміну  $\mu_p \rightarrow \epsilon^{HO}$  – енергія найвищого зайнятого стану. Залежність  $Q_0(R)$  буде осцилюючою. У протилежному випадку, коли  $|\mu_p| > W_0$ , кластер заряджається негативно ( $\mu_p \rightarrow \epsilon^{LU}$ ,  $\epsilon^{LU}$  – енергія нижнього незайнятого стану).

Значення  $Q_0 \approx +0,5e$  краще всіх інших відповідає експерименту [9] (див. рис. 2в в [9]), в якому вимірялася ВАХ триелектродної структури, сформованої зі сплавів Pb і гранули In радіусом  $R = 100 \text{ nm}$ , розділених окисними плівками. Цікаво оцінити величину  $Q_0$  по (6). Оскільки робота виходу сплаву невідома, використовуємо відповідно 4 і 3,8 eV для Pb і In, одержимо величину, яка значно відрізняється:  $Q_0 \approx +13,6e$ . Однак, якщо прийняти правильною величину  $Q_0 \approx +0,5e$ , можна розв'язати зворотну задачу і знайти роботу виходу сплаву свинцю, який використовувався в експерименті: 3,8012 eV (замість 4 eV для Pb).

Розв'язуючи окремо електростатичну задачу для структури, коли між гранулою і емітером знаходиться шар діелектрика товщиною  $d_1$  (рис. 1),

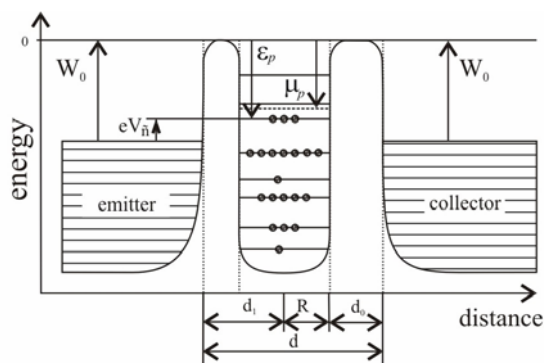


Рис. 1. Схематичне зображення структури Au/Au<sub>40</sub>/Au до подання напруги.

так що  $d - d_0 = d_1 + R$ , для фракції напруги маємо

$$\eta = \frac{1 + \kappa R/d_1}{1 + \kappa (d/d_1 - 1)}. \quad (7)$$

Вираз для енергії зарядженого  $n$  електронами кластера в зовнішньому електричному полі має вигляд:

$$\tilde{E} = \tilde{E}_{00} + \mu n - en\eta V + (-en)^2 \frac{\tilde{E}_c}{2}, \quad (8)$$

де  $\tilde{E}_{00}$  - енергія нейтрального кластера у відсутності поля.

Слід відзначити, що навіть зникаюче мале зовнішнє електричне поле приводить до нестабільності кластера через можливість тунелювання електронів у вакуум. Будемо вважати, що кластер релаксує у метастабільний стан за час, набагато менший, ніж проміжки між актами тунелювання [24]. В результаті зарядження виникають внутрішні механічні напруги, які можуть приводити до кулонівської нестабільності (кулонівського вибуху). Для відокремленого кластера у відсутності поля ця задача вирішена в [21]. Узагальнюючи ці результати, маємо, що у квазікласичному наближенні максимальний електронний або іонний надлишковий заряд дорівнює

$$\mp \left\{ (-\mu_{e,i} + |e\eta V|) \frac{R}{e} + \frac{e}{2} \right\}. \quad (9)$$

Для позитивної гілки вольт-амперної характеристики ( $V > 0$ ) в межах  $(0, 2V)$  треба розглядати два випадки:

а) випадок  $G_1 \gg G_2$  для провідностей переходів, тобто  $\eta \ll 1$ . Переходи електронів між емітером і кластером відбуваються частіше, ніж між кластером і колектором, тому на кластері накопичуються електрони. У цьому режимі максимально можливе їхнє число дорівнює:  $n_{\max} \approx W_e R / e^2 + 1/2$ , де  $W_e = W_{e0} - \mu_{e1} / R$  і  $n_{\max} \approx +2,5 \div +6,5$ .

б) випадок  $G_1 \ll G_2$ , тобто  $\eta \approx 1$ . Переходи електронів між кластером і колектором відбуваються частіше, ніж між кластером і емітером, тому на кластері спостерігається нестача електронів. Це число знаходиться через роботу виходу іонів:  $n_{\min} = -(W_i + |e\eta V|)R / e^2 - 1/2$ , де  $W_i = W_{i0} - \mu_{i1} / R$  і  $n_{\min} \approx -4 \div -11$ .

Аналогічно для негативної гілки вольт-амперної характеристики ( $V < 0$ ) в межах  $(0, -2V)$ :

а) випадок  $G_1 \gg G_2$ , тобто  $\eta \ll 1$ . На кластері спостерігається нестача електронів:  $n_{\min} = -W_i R / e^2 - 1/2 = -3,8 \div -10,6$ .

б) випадок  $G_1 \ll G_2$ , тобто  $\eta \approx 1$ , відповідає надлишку електронів:  $n_{\max} \approx (W_e + |e\eta V|)R / e^2 + 1/2 \approx +3 \div +8$ .

У розрахунках значення  $n_{\max}$  і  $n_{\min}$  необхідно обмежити цілими числами (надлишкових і відсутніх електронів). Врахування квантування рівнів може змінити ці числа не більш ніж на  $\pm 1$  відповідно до першої нерівності в (1) (див. також [21]).

### III. Основні енергетичні і кінетичні співвідношення

Встановимо зв'язок між енергією електронів у кластері, що буде фігурувати в процесах переносу, і енергією в одному з електродів. За початковий стан системи виберемо той, при якому на кластері знаходиться  $n$  надлишкових електронів. Будемо вважати, що при тунелюванні *повна* енергія всіх трьох електродів  $\tilde{E}$  не змінюється. Використовуючи (8), для переходу  $\delta N$  електронів з емітера на гранулу ( $\delta N = 1$ ) маємо:

$$\Delta \tilde{E} = \tilde{\varepsilon}^e (-\delta N) + \varepsilon_p (+\delta N) + \frac{(-e)^2}{2C} [(n + \delta N)^2 - e\delta N \eta V] = 0. \quad (10)$$

Цей вираз записаний в результаті циклу: сума енергії іонізації електрона з рівня  $\tilde{\varepsilon}^e$  на емітері (електрична ємність якого дорівнює нулю) і енергії прилипання його на рівень  $\varepsilon_p$  в гранулі з ємністю  $C$ , на якій вже знаходяться  $n$  електронів. Для цього переходу маємо:

$$\tilde{\varepsilon}^e = \varepsilon_p + \tilde{E}_c (n + 1/2) - e\eta V, \quad (11)$$

Стрілкою зверху позначаються енергії, що знаходяться в результаті відповідних переходів згідно рис. 1.

Якщо ж електрон переходить із гранули в емітер, то в результаті іонізації  $n$ -го надлишкового електрона з гранули і прилипання його до емітера, маємо

$$\tilde{\varepsilon}^e = \varepsilon_p + \tilde{E}_c (n - 1/2) - e\eta V. \quad (12)$$

Аналогічно і для переходів гранула-колектор і колектор-гранула:

$$\tilde{\varepsilon}^c = \varepsilon_p + \tilde{E}_c (n - 1/2) + e(1 - \eta)V, \quad (13)$$

$$\tilde{\varepsilon}^c = \varepsilon_p + \tilde{E}_c (n + 1/2) + e(1 - \eta)V, \quad (14)$$

відповідно. Незалежно від величини  $n$  дотримуються співвідношення

$$\tilde{\varepsilon}^e - \tilde{\varepsilon}^c = \tilde{E}_c = \tilde{\varepsilon}^e - \tilde{\varepsilon}^c,$$

які і підтверджують наявність циклів іонізації і прилипання, по аналогії з відомим співвідношенням  $IP - EA = \tilde{E}_c$  для кластерів (див., наприклад, [21]).

Тунелювання окремого електрона через бар'єр

завжди є випадковою подією, що протікає з певною швидкістю  $\Gamma$  – ймовірністю в одиницю часу. Будемо вважати, що тунельні швидкості малі, тобто

$$\hbar\Gamma(\varepsilon^{e,c}) \ll \min\{\Delta\varepsilon_p, \tilde{E}_c\}. \quad (15)$$

Якщо умова (15) виконується і температура  $\varepsilon$  не занадто низькою,  $k_B T \gg \hbar\Gamma \equiv \hbar(\Gamma^e + \Gamma^c)$ , динаміка тунелювання описується керуючим рівнянням. Уведемо повну швидкість тунелювання (з одного із електродів):

$$\tilde{\omega}_n^{e,c} = \sum_p g_p \Gamma(\tilde{\varepsilon}^{e,c}) f(\tilde{\varepsilon}^{e,c}) [1 - f(\varepsilon_p)], \quad (16)$$

Зміна  $P_n$  визначається приростом і збуванням густини ймовірності. Умова стаціонарності  $\partial P_n / \partial t = 0$  приводить до рекурентного співвідношення

$$P_{n+1} = P_n \tilde{\omega}_n / \tilde{\omega}_{n+1}. \quad (19)$$

Постійний струм, що протікає через квантову гранулу (з обмеженням на її нестійкість (9)), визначається як

$$I = \Gamma^e = \Gamma^c, \quad (20)$$

$$I^{e,c} = \pm e \sum_{n_{\min} < 0}^{n_{\max} > 0} P_n (\tilde{\omega}_n^{e,c} - \tilde{\omega}_{n+1}^{e,c}), \quad (21)$$

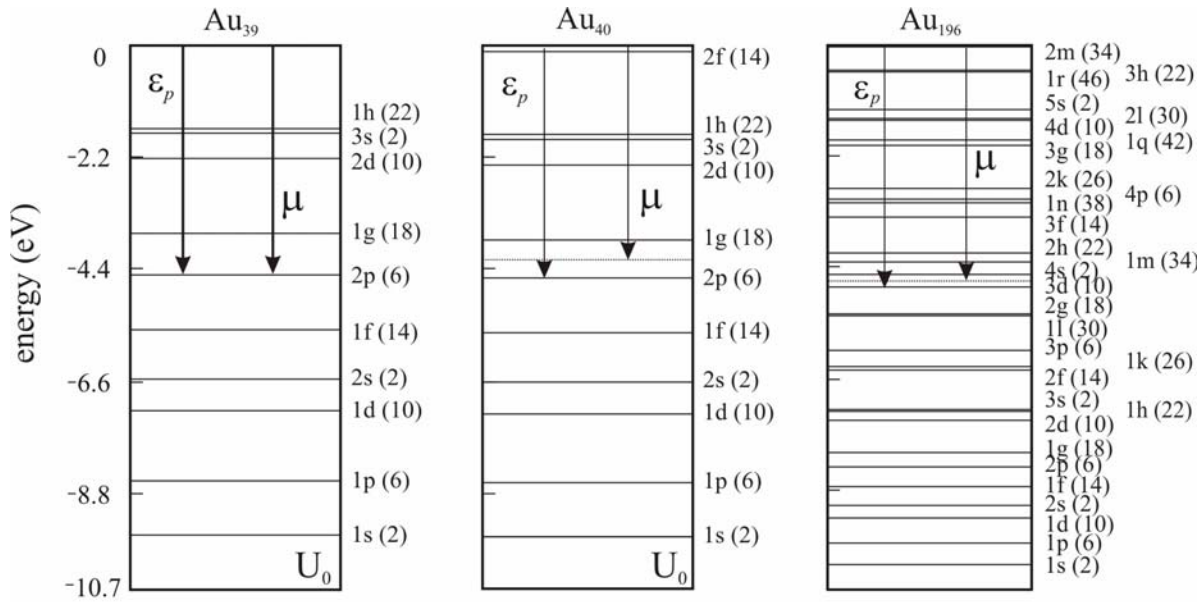


Рис. 2. Енергетичний спектр немагічного  $Au_{39}$  і магічних  $Au_{40}$  і  $Au_{196}$  кластерів сферичної форми.

$$\tilde{\omega}_n^{e,c} = \sum_p g_p \Gamma(\tilde{\varepsilon}^{e,c}) [1 - f(\tilde{\varepsilon}^{e,c})] f(\varepsilon_p). \quad (17)$$

З урахуванням прикладеної напруги спектри (див. (11) – (14)) автоматично зсуваються в розподілах (2) і в (4): на  $-eV$  для колектора і на  $-e\eta V$  для гранули;  $f$  і  $(1-f)$  – ймовірності того, що стан зайнятий чи вільний. Відповідно зсуваються і хімічні потенціали. У першому наближенні теорії збурювання [23] (при малих  $V$ )  $\mu_p$  буде визначатися не лише формальним зсувом глибини ями, але і відповідно до числа електронів провідності в даному стані ( $N = N_0 + n$ ). Використання хімічних потенціалів справедливо в квазірівноважному (метастабільному) стані, тобто в проміжках між актами тунелювання, коли час релаксації гранули набагато менший цих проміжків.

Позначимо швидкості переходів з обох електродів як:

$$\tilde{\omega}_n = \tilde{\omega}_n^e + \tilde{\omega}_n^c, \quad \tilde{\omega}_n = \tilde{\omega}_n^e + \tilde{\omega}_n^c.$$

Введемо ймовірність  $P_n$  перебування  $n$  надлишкових електронів на острівці. Вона знаходиться з рішення рівняння Паулі для матриці густини [25] або керуючого рівняння (master equation) [3, 4]:

$$\partial P_n / \partial t = \tilde{\omega}_{n+1} P_{n+1} + \tilde{\omega}_{n-1} P_{n-1} - (\tilde{\omega}_n + \tilde{\omega}_n^c) P_n. \quad (18)$$

де знаки “+” і “-” відповідають верхньому індексу “e” і “c”, відповідно.

Розглянемо випадок сильного квантування електронного спектра в гранулі,  $\Delta\varepsilon_p \gg \tilde{E}_c$  [6]. Такий режим досягається, наприклад, збільшенням ємності кластера за умови збереження його об’єму (форму кластера необхідно змінити на голко- чи дископодібну) [21] (див. також експерименти з плоскими золотими кластерами [14]). Для сферичного кластера випадок переваги квантування над кулонівською блокадою можна організувати досягненням умови  $\eta > 1/2$ , тобто коли на кластері не накопичуються електрони. Тоді в (11) – (14) членами  $\sim \tilde{E}_c$  можна знехтувати і стрілку для одночастинкових енергій ставити немає необхідності:  $\varepsilon^e = \varepsilon_p - e\eta V$ ,  $\varepsilon^c = \varepsilon_p + e(1-\eta)V$ . У цьому випадку при низьких температурах теоретична вольт-амперна характеристика являє собою ступені квантових сходів.

Припустимо, що тунельні швидкості є фіксованими при енергії Фермі електронів в емітері, що є справедливим у випадку невеликих напруг, прикладених до структури. Використовуючи вираз

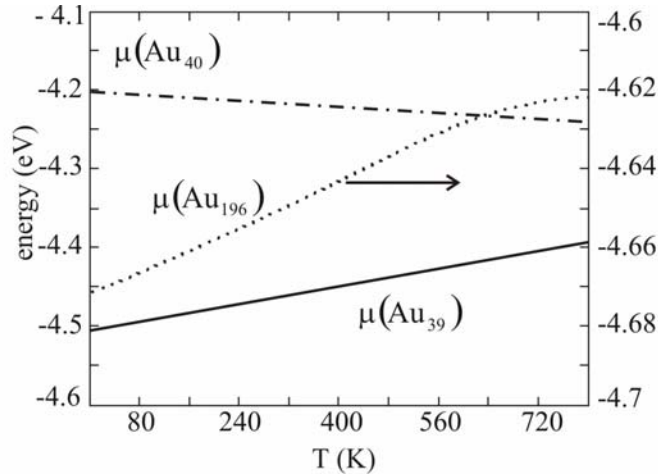


Рис. 3. Температурна залежність хімічного потенціалу кластерів різного розміру.

(11) – (17) і (4), знайдемо різниці

$$\bar{\omega}_n^c - \bar{\omega}_n^e = \Gamma^c \left[ \sum_p g_p f(\varepsilon^c) - N \right], \quad (22)$$

$$\bar{\omega}_n^c - \bar{\omega}_n^e = \Gamma^c \left[ N - \sum_p g_p f(\varepsilon^c) \right], \quad (23)$$

де  $N = N_0 + n$ . Підставимо ці вирази в (21), використовуючи (20) і нормування

$$\sum_n P_n = 1, \quad (24)$$

маємо

$$\begin{aligned} \sum_n P_n N &= \frac{1}{\Gamma^c + \Gamma^e} \sum_n P_n \sum_p g_p [\Gamma^c f(\varepsilon^c) + \Gamma^e f(\varepsilon^e)] = \\ &= N_0 + \langle n \rangle. \end{aligned} \quad (25)$$

Заміняючи  $N$  у (22) на  $N_0 + \langle n \rangle$ , а потім повертаючись до (21), одержимо

$$\Gamma^c = I_0^c \sum_p g_p [f(\varepsilon^c) - f(\varepsilon^e)], \quad (26)$$

де  $I_0^c = e\Gamma^c\Gamma^e / (\Gamma^c + \Gamma^e)$ . При  $T \rightarrow 0$  вираз (26) зручно представити у вигляді комбінації східчастих функцій:  $\Gamma^c / I_0^c \rightarrow \sum_p g_p [\theta(\xi_p - e\eta V) - \theta(\xi_p + e(1-\eta)V)]$ , (27)

де  $\theta(x) = \{1, x < 0; 0, x > 0\}$  і введене нове позначення  $\xi_p \equiv \varepsilon_p + W_0$  для перенормованого спектра.

У загальному випадку для обчислення ВАХ (21) необхідно знати ймовірності  $P_n$ . Їхнє статистичне визначення є складною задачею. У роботі [26] для сферичних кластерів величини  $P_0$  і  $P_{1+}$  розраховані в припущенні великого канонічного і канонічного ансамблів. При низьких температурах обидва підходи давали близькі результати.

#### IV. Результати обчислень та їх обговорення

Спочатку розв'язуванням рівняння Шредінгера і рівняння (3) обчислено спектр і хімічний потенціал нейтральних сферичних кластерів  $Au_N$ . Глибина ями

здавалася положенням дна зони провідності в метали [21]. На діаграмах рис. 2 представлено спектри і розташування енергії Фермі в кластерах  $Au_{39}$ ,  $Au_{40}$  і  $Au_{196}$ . Для аналізу проведені аналогічні обчислення для кластерів натрію. Енергія Фермі немагічних кластерів збігається з реальним рівнем у кластері. Для магічних – вона розташовується в заборонених проміжках між термами. Температурна залежність енергії Фермі, як і очікувалося, є слабкою (рис. 3) і цілком визначається систематикою рівнів у сферичному потенціалі, а також числом електронів. Однак температурний градієнт хімічного потенціалу при деяких температурах може змінювати знак, що узгоджується з висновками в [27], де самоузгоджено розраховувалася ця залежність для магічних кластерів  $Na_N$ . При кімнатних температурах залежність  $\mu(R, T)$  може помітно впливати на ВАХ тунельної структури.

Розглянемо проблему асиметрії плато ВАХ одноелектронних транзисторів. На перший погляд вона визначається контактною різницею потенціалів  $V_c$  (5) і фракцією напруги  $\eta$ , а саме: струм  $I$  через структуру практично дорівнює нулю в межах, здавалося б, наступних граничних напруг:

$$0 < V < V_{0+} = \eta V_c, \quad 0 > V > V_{0-} = -(1-\eta)V_c.$$

Насправді значення  $V_{0+}$  і  $V_{0-}$  можуть збігатися з вищенаведеними лише випадково. Для пояснення цього зручно скористатися формулою (27) і діаграмами на рис. 4. На діаграмах перетинання ліній  $e\eta V$  і  $e(1-\eta)V$  з термами вказує на ті характерні значення напруг, при яких виникають струмові сходи.

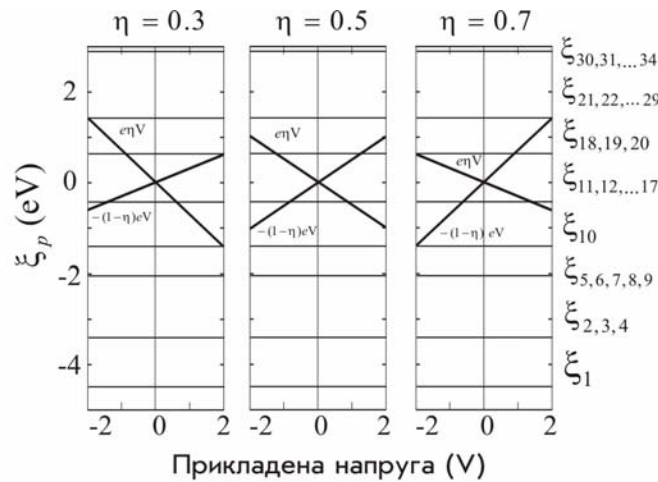
До прикладення поля кластер заряджений позитивно. З попереднього аналізу неважко зробити висновок, що при підвищенні різниці потенціалів у межах плато ВАХ відбувається повернення електронного заряду на кластер, так що він "у середньому" є нейтральним. Тому на величину плато кулонівська блокада впливає не дуже суттєво. На краю плато ця умова порушується і її границя (для магічних кластерів) визначається не вищезалюгаючим, а нижчезалюгаючим рівнем щодо

хімічного потенціалу, тобто характером спектра в гранулі. Обидва доданки у (27) є конкуруючими. Особливо ця конкуренція помітна для магічних кластерів через положення хімічного потенціалу електронів гранули, що і визначає неочевидний характер краю плато ВАХ.

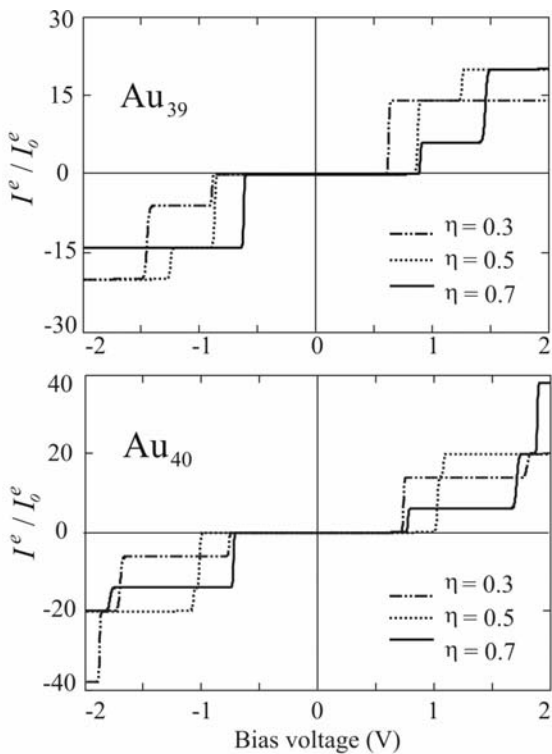
На рис. 5 представлені ВАХ структур на немагічному Au/Au<sub>39</sub>/Au і магічному Au/Au<sub>40</sub>/Au кластерах, розраховані за (25) для T = 30 К. Розмір плато характеристики  $\Delta V_g \equiv V_{0+} - V_{0-}$  знаходиться в повній відповідності з діаграмами на рис. 4.

Залежності I(V) обчислені для  $\eta = 0,3, 0,5, 0,7$ . Незважаючи на те, що у формулі (26) фігурують тільки розподіли в емітері й колекторі, плато неявно визначається наявністю вільних станів у кластері, через які електрони переміщуються з емітера в колектор. Ширина сходинок залежить від відстані між рівнями і фракції напруги, але зрештою визначається конкуренцією між обома доданками в (26) на кожній з гілок напруг.

Таким чином, ширина струмової щілини немонотонно залежить від фракції напруги, що узгоджується з експериментальними



**Рис. 4** Діаграми, що демонструють виникнення струмової щілини і квантових сходинок на вольтамперних характеристиках (Au<sub>40</sub>), розрахованих за формулою (27).



**Рис. 5** Вольт-амперні характеристики двох структур з центральним електродом – Au<sub>39</sub> і Au<sub>40</sub> при різних значеннях фракції напруги  $\eta$ .

спостереженнями. Її величина приблизно у 1,5 рази перевищує експериментальні значення, що свідчить про вплив кулонівської блокади.

Збільшимо напругу, наприклад, на позитивній гілці ВАХ, стартуючи від  $V_{0+}$  до  $V_{1+} \leq \tilde{E}_C / e$ , коли в кластері в середньому знаходиться один надлишковий електрон. Для цього етапу ненульовими є ймовірності  $P_0$  і  $P_{1+}$ . Задаючи  $\Gamma^{e,c}$  і використовуючи (19) і (24), можна розрахувати струм на цій ділянці. Аналогічно, у наступному інтервалі напруг  $V_{2+} - V_{1+} \leq \tilde{E}_C / e$ , де відмінними від нуля є ймовірності  $P_0, P_{1+}$  і  $P_{2+}$ . Оскільки  $P_0$  і  $P_{1+}$  знайдені на попередньому етапі,  $P_{2+}$  визначається за допомогою (19). Таким способом можна побудувати всю позитивну гілку ВАХ.

На негативній гілці першою ділянкою кулонівської блокади є:  $V_{0-} > V > V_{1-} = \tilde{E}_C / e$ . На цій ділянці ненульовими є ймовірності  $P_0$  і  $P_{1-}$ . Далі вся гілка ( $V < 0$ ) будується за тим же принципом, що і для  $V > 0$ .

Незважаючи на те, що емітер і колектор зроблені з одного матеріалу, хімічні потенціали електронів у цих електродах не рівні один одному: емітер уявляє собою товсту плівку Au (111), а колектор – полікристал Au, отже роботи виходу у них різні [28]. Робота ж виходу низькорозмірних структур (і кластерів у тому числі), очевидно, підкоряється



нерівності  $W < W_0$  [23]. До того ж, емітер покривається шаром діелектрика, що також впливає на роботу виходу електронів з емітера.

Обговоримо вплив навколишнього діелектричного середовища на роботу виходу електронів з емітера. Виходячи з непрямих експериментальних вимірювань [29], робота виходу зменшується з ростом діелектричної сталої  $\kappa$ . В [30] обчислені роботи виходу  $W_d$  електронів для циліндричних нанодротикув лужних металів, занурених в діелектрик:  $W_d$  зменшується приблизно на 20% при збільшенні  $\kappa$  від 1 до 4. Основний

внесок при цьому можна віднести до зміни величини електростатичного дипольного бар'єра, внесок якого в роботу виходу системи золото-вакуум складає до 30% [28]. Отже, ця цифра і складає верхню границю зміни роботи виходу  $W_d$  системи метал-діелектрик-вакуум. Внаслідок  $W_d < W_0$ , принципово, можливе досягнення зворотної нерівності  $W_d > W_0$ , що приведе до зарядження кластера негативним зарядом ще до прикладення зовнішнього поля. Недавно виявлений [31] перехід метал-діелектрик для золотих кластерів певного розміру також може вплинути на енергетичну діаграму структури.

- [1] К.К. Likharev. Single-electron devices and their applications // *Proc. IEEE*, **87**(4), pp. 606-632 (1999).
- [2] J. von Delft, D.C. Ralph. Spectroscopy of discrete energy levels in ultrasmall metallic grains // *Phys. Rep.*, **345**(2-3), pp. 61-173 (2001).
- [3] И.О. Кулик, Р. И. Шехтер. Кинетические явления и эффекты дискретности заряда в гранулированных средах // *ЖЭТФ*, **68**(2), сс. 623-640. (1975).
- [4] Д.В. Аверин, А.Н. Коротков. Влияние дискретности энергетического спектра на коррелированное одноэлектронное туннелирование через мезоскопическую малую металлическую груду // *ЖЭТФ*, **97**(5), сс. 1661-1673. (1990).
- [5] C.W. J. Beenakker. Theory of Coulomb-blockade oscillations in the conductance of a quantum dot // *Phys. Rev. B*, **44**(4), pp. 1646-1656 (1991).
- [6] D.V. Averin, A.N. Korotkov, K.K. Likharev. Theory of single-electron charging of quantum wells and dots // *Phys. Rev. B*, **44**(12), pp. 6199-6211 (1991).
- [7] A.N. Korotkov, Yu.V. Nazarov. Single-electron tunneling coexisting with the barrier suppression // *Physica B*, **173**, pp. 217-222 (1991).
- [8] H.D. Jensen, J.M. Martinis. Accuracy of the electron pump // *Phys. Rev.*, **B**, **46**(20), pp. 13407-13427 (1992).
- [9] Л.С. Кузьмин, К.К. Лихарев. Непосредственное экспериментальное наблюдение дискретного коррелированного одноэлектронного туннелирования // *Письма в ЖЭТФ*, **45**(8), сс.389-390 (1987).
- [10] S.T. Ruggiero, T.B. Ekkens. Single-electron tunnelling in few-atom systems: size of single atoms and geometry of few-atom clusters // *J. Phys.: Cond. Matt.*, **13**(9), pp. 1819-1826 (2001).
- [11] T. Ohgi, H.-Y. Sheng, Z.-C. Dong, H. Nejo, D. Fujita. Charging effects in gold nanoclusters grown on octanedithiol layers // *Appl. Phys. Lett.*, **79**(15), pp. 2453-2455 (2001).
- [12] T. Ohgi, D. Fujita. Consistent size dependency of core-level binding energy shifts and single-electron tunneling effects in supported gold nanoclusters // *Phys. Rev. B*, **66**(11), p. 115410 (2002).
- [13] T. Ohgi, Y. Sakotsubo, Y. Ootuka, D. Fujita. Electrochemical potential arrangement of nanoclusters weakly coupled with metal surface // *Appl. Phys. Lett.*, **84**(4), pp. 604-606 (2004).
- [14] B. Wang, X. Xiao, X. Huang, J. G. Hou, P. Sheng. Single-electron tunneling of two-dimensional gold clusters // *Appl. Phys. Lett.*, **77**(8), pp. 1179-1181 (2000).
- [15] J.G. Hou, B. Wang, J. Yang, X.R. Wang, H.Q. Wang, Q. Zhu, X. Xiao Nonclassical behavior in the capacitance of a nanojunction // *Phys. Rev. Lett.*, **86**(23), pp. 5321-5324 (2001).
- [16] Э.Л. Нагаев. Малые металлические частицы // *УФН*, **162**(9), сс.49-124 (1992).
- [17] V.V. Pogosov. On some tenzoemission effects of the small metal particles // *Sol. St. Commun.*, **81**(1), pp. 129-133 (1992).
- [18] Э.М. Баскин, М.В. Энтин. Равновесный заряд малых металлических частиц и прыжковый транспорт в металл-диэлектрическом композите // *Письма в ЖЭТФ*, **70**(8), сс. 510-515 (1999).
- [19] D.M. Kaplan, V.A. Sverdlov, K.K. Likharev. Coulomb gap, Coulomb blockade, and dynamic activation energy in frustrated single-electron arrays // *Phys. Rev. B*, **68**(4), id. 045321 (2003).
- [20] R. Parthasarathy, X.-M. Lin, K. Elteto, T.F. Rosenbaum, H.M. Jaeger. Percolating through networks of random thresholds: finite temperature electron tunneling in metal nanocrystal arrays // *Phys. Rev. Lett.*, **92**(7), id. 076801 (2004).
- [21] V.V. Pogosov, V.P. Kurbatsky, E.V. Vasyutin. Energetics of metal slabs and clusters: the rectangle-box model // *Phys. Rev. B*, **71**(19), id. 195410 (2005).
- [22] Е.С. Солдатов, В.В. Ханин, А.С. Трифонов, С.П. Губин, В.В. Колесов, Д.Е. Преснов, С.А. Яковенко, Г.Б. Хомутов, А.Н. Коротков. Молекулярный одноэлектронный транзистор, работающий при комнатной температуре // *УФН*, **168**(2), сс. 217-219 (1998).
- [23] В.П. Курбацкий, В.В. Погосов. Аналитическая модель размерных осцилляций энергетических и силовых характеристик субатомных металлических пластинок // *ФТТ*, **46**(3), сс. 526-533 (2004).

- [24] В.П. Курбацкий, В.В. Погосов. Низкочастотное оптическое поглощение малыми металлическими частицами // *Письма в ЖТФ*, **26**(22), сс. 84-88 (2000).
- [25] С. Фудзита. *Введение в неравновесную квантовую статистическую механику*. Мир, М. 207 с. (1969).
- [26] M. Brack, O. Genzken, K. Hansen. Thermal properties of the valence electrons in alkali metal clusters // *Z. Phys. D*, **21**. pp.65-81. (1991).
- [27] L.I. Kurkina, O.V. Farberovich. Electronic structure and chemical potential of small jellium clusters at nonzero temperature // *Sol. St. Commun.*, **98**(5), pp. 469-473 (1996).
- [28] V.V. Pogosov, O.M. Shtepa. Effect of Deformation on Surface Characteristics of Finite Metallic Crystals // *УФЖ*, **47**(11), сс. 1065-1071 (2002); (cond-mat/0310176).
- [29] А. Модинос. *Авто-, термо- и вторично-электронная эмиссионная спектроскопия*. Наука, М. 319 с. (1990).
- [30] А.Н. Смогунов, Л.И. Куркина, О.В. Фарберович. Электронная структура и поляризуемость квантовых металлических нитей // *ФТТ*, **42**(10), сс. 1848-1856 (2000).
- [31] H.-G. Boyen, A. Ethirajan, G. Kastle, F. Weigl, P. Ziemann, G. Schmid, M.G. Garnier, M. Buttner and P. Oelhafen. Alloy Formation of Supported Gold Nanoparticles at Their Transition from Clusters to Solids: Does Size Matter? // *Phys. Rev. Lett.*, **94**(1) id. 016804 (2005).

V.V. Pogosov, E.V. Vasuytin

## Zero conductance gap of the single-electron transistor based on the metal cluster

*Zaporozhye National Technical University,  
64, Zhukovski Str., Zaporozhye, 69063, Ukraine  
tel. (0612) 64-67-33 e-mail: vpogosov@zntu.edu.ua*

We have carried out a theoretical investigation of single-electron effects in the structure consisting of two coupled tunnel junctions. A quantization of spectra of the central electrode was taking into account. We discussed an origin of the zero conductance gap, calculated its value and voltage asymmetry.

This work was supported by the Ministry of Education and Science of Ukraine and Samsung Corporation.