

Эффекты уширения уровней и перегрева электронов в туннельных структурах на металлических кластерах

© А.В. Бабич, В.В. Погосов

Запорожский национальный технический университет,
Запорожье, Украина

E-mail: vpogosov@zntu.edu.ua

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 4 мая 2009 г.)

Исследовано влияние уширения уровней и перегрева электронной подсистемы золотых кластеро-островков дискообразной и сферической формы на характер вольт-амперной характеристики трехэлектродной структуры. Предложена схема расчета уширения электронных уровней в одномерном случае прямоугольных барьеров. В двухтемпературной электрон-ионной модели металлического кластера с учетом размерной зависимости дебаевской частоты оценена кинетическая температура электронов в зависимости от напряжения смещения. При низких температурах ионов эффекты уширения и перегрева электронов приводят к исчезновению ступеней квантовой и кулоновской лестниц, т.е. к сильной сглаженности вольт-амперной характеристики даже в структурах на кластерах, состоящих из счетного числа атомов, что и наблюдается в экспериментах.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Украины.

1. Введение

В молекулярных приборах в качестве ключевых компонент используются островки-кластеры атомов. На экспериментальных вольт-амперных характеристиках (ВАХ) наблюдается щель тока и сглаженные ступени кулоновской и квантовой лестниц, которые еще больше размываются с повышением температуры системы (см., например, [1]).

В качестве примера можно привести туннельный сэндвич [2–5]: толстая пленка Au (111)/ультратонкая диэлектрическая пленка/„островок“ Au/вакуумный промежуток/поликристалл Au. Организованные на диэлектрической пленке в [2,3] островки одноатомной высоты для удобства можно рассматривать как диски, а в [4,5] — как сферические кластеры. Принципиальные особенности измеренных зависимостей $I(V)$ описаны в [6], а щель тока в низкотемпературном пределе — в [7].

Общей чертой экспериментальных ВАХ молекулярных структур является тот факт, что зависимости $I(V)$ представляют собой плавные линии вне щели тока. Даже при низких температурах кулоновская блокада и квантовая лестница значительно размывты [1–5].

В эксперименте [2] было обнаружено, что щель тока в структуре на диске радиусом ~ 2 nm почти исчезает с ростом температуры от 5 до 300 K. Такая „аномальная“ температурная зависимость режима кулоновской блокады и сильного квантования не находит объяснения в рамках концепции квазиравновесного электронного газа и резонансного протекания тока через стационарные состояния электронов в кластере. Однако для сферических гранул радиусом ~ 1 nm сравнение щелей ВАХ при $T = 30$ [4] и 300 K [5] не обнаруживает подобной особенности.

Целью работы является оценка двух механизмов: уширения электронных уровней за счет туннельного

эффекта и нагрева электронного газа в металлических островках дискообразной и сферической формы при наличии напряжения смещения. На основании этих эффектов объясняется отсутствие ярко выраженных ступеней кулоновской и квантовой лестниц на экспериментальных ВАХ одноэлектронных приборов при низких температурах.

Динамика релаксации неравновесных электронов рассматривалась в металлах, нанопленках, нанопроволках, свободных кластерах, в том числе под действием пико- и фемтосекундных лазерных импульсов [8–14]. Небольшое число работ относится к прямым экспериментам со свободными металлическими кластерами в поле фемтосекундного излучения (см. [15,16] и ссылки в них). Импульсный режим позволяет непосредственно исследовать кинетику релаксации электронов в массивных металлических образцах и металлических кластерах.

Предсказанная ранее размерная зависимость дебаевской температуры [17] экспериментально подтверждена в [18] и затем уточнена температурной зависимостью в [19]. Следствием деформации фононного спектра гранул является ослабление электрон-фононного взаимодействия в них. Это взаимодействие может быть подавлено настолько, что электрон-электронное взаимодействие оказывается основным механизмом рассеяния вводимой в частицу энергии. Эта энергия приводит к перегреву электронной подсистемы, которая описывается фермиевской статистикой с некоторой эффективной (повышенной) температурой, а температура ионной подсистемы меняется незначительно.

Предполагается, что релаксация нетермализованных электронов в малых металлических частицах и проволках происходит за счет возбуждения рэлеевских волн или поверхностных акустических фононов [11–13]. Однако полученные выражения в цитируемых работах не имеют предельного перехода к бесконечным системам.

Согласно теореме Вейля (см. [20]), только для больших частиц или толстых нитей возможно разделить объемные и поверхностные акустические колебания. Для малых частиц моды перемешиваются, скорость звука становится неопределенной и, как правило, используется в качестве подгоночного параметра. С другой стороны, как показали измерения электрон-ионного энергообмена в свободных кластерах Na_{16-250}^+ [16], для разумных оценок вполне можно использовать концепцию объемных фононов, но с учетом размерной зависимости дебаевской частоты. Такой подход для малых объектов следует рассматривать как экстраполяционный.

2. Уширение уровней

Электронные состояния свободного кластера в вакууме не распадаются и являются стационарными. Стационарным состояниям соответствуют полоса матрицы рассеяния $S(k)$, расположенные на действительной оси плоскости комплексных значений волновых чисел k .

Если кластер поместить между электродами, электронные состояния кластера становятся квазистационарными. Уширение уровней происходит за счет туннельного эффекта по аналогии с образованием зон в кристалле. При включении поля между электродами уширение уровней в кластере-квантовой точке увеличивается [21]. Туннельный барьер является трехмерным, и расчет уширения в общем случае оказывается далеко не тривиальной задачей. Приближенное аналитическое решение задачи о туннельном уширении уровней можно провести только в отдельных одномерных случаях для прямоугольных барьеров (см. [22]).

Уширение одноэлектронного уровня, согласно принципу неопределенности, связано с конечным временем жизни. Квазистационарным состояниям соответствуют полюса матрицы рассеяния $S(k)$, расположенные в нижней полуплоскости комплексной плоскости волнового вектора k . Энергии квазистационарных состояний становятся комплексными, их мнимая часть описывает уширение. Состояние с хорошо определенной энергией соответственно заменяется нормированной кривой Лоренца с естественной шириной энергетического уровня γ_p , характеризующей величину разброса энергии

$$L_p(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \frac{\gamma_p}{(\varepsilon - \varepsilon_p)^2 + \gamma_p^2/4}, \quad (1)$$

где индекс p обозначает набор квантовых чисел (кроме спинового), характеризующих одноэлектронное состояние, энергия которого ε_p (рис. 1).

С учетом уширения получаем модифицированную функцию плотности состояний

$$\bar{\rho}(\varepsilon) = 2 \sum_p L_p(\varepsilon). \quad (2)$$

Коэффициент 2 учитывает вырождение по знаку проекции спина.

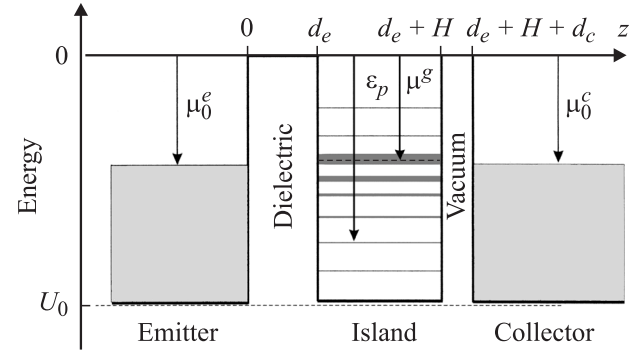


Рис. 1. Энергетическая схема структуры на немагической грануле-диске при нулевом напряжении смещения.

Ток, который протекает через квантовую гранулу (с ограничением на ее кулоновскую неустойчивость [6]), определяется равенством эмиттерного и коллекторного токов ($I^e = I^c \equiv I$) или

$$-e \sum_{n_{\min}}^{n_{\max}} P_n (w_n^e \leftarrow w_n^e) = -e \sum_{n_{\min}}^{n_{\max}} P_n (w_n^c \leftarrow w_n^c), \quad (3)$$

где P_n — вероятность нахождения „в среднем“ n избыточных ($n > 0$) или недостающих ($n < 0$) электронов на островке. P_n определяется решением управляющего уравнения для стационарного случая. Фактически рассчитывается приведенный ток $\tilde{I} \equiv I/(eP_0\Gamma^e)$, где $\Gamma^{e,c}$ — туннельные скорости, $(-e)$ — заряд электрона. Для нахождения величин $P_{n \neq 0}/P_0$ используются рекуррентные соотношения

$$P_{n+1} = P_n \frac{w_n^{\text{in}}}{w_{n+1}^{\text{out}}}, \quad (4)$$

где $w_n^{\text{in}} = w_n^e + w_n^c$ и $w_n^{\text{out}} = w_n^e + w_n^c$ — полные „потоки“ электронов с левого и правого электродов на центральный островок и обратно, а $w_n^{e,c}$ — парциальные „потоки“ соответственно (расчетные формулы представлены в Приложении). Стрелками и верхними индексами e, c обозначаются переходы эмиттер–островок, коллектор–островок и обратные им, стрелки указывают направление перехода.

Спектр волновых чисел в сферической и цилиндрической потенциальной яме глубиной U_0 определяется из условия непрерывности логарифмической производной волновой функции на границе ямы. Пренебрегая областью вблизи ребер оснований, спектр электронов в диске можно вычислить как

$$\varepsilon_p = U_0 + \frac{\hbar^2}{2m_e} (k_{n_z}^2 + k_{\perp}^2), \quad (5)$$

где $U_0 < 0$ — положение дна зоны проводится в металле [6], k_{\perp} — решение волнового уравнения для радиального направления. Квантование компоненты волнового вектора k_{n_z} вдоль оси z (рис. 1) диска толщиной H

определяется решениями уравнения

$$k_{n_z} H = n_z \pi - 2 \arcsin(k_{n_z}/k_0), \quad (6)$$

где n_z — целые числа, $\hbar k_0 \equiv \sqrt{2m_e|U_0|}$. Вследствие того, что туннелирование происходит в основном в направлении z , искомое уширение для спектра k_{n_z} будет оценкой уширения для всего спектра ε_p [23].

Для расчета уширения уровней в кластере-диске рассмотрим распад состояний в потенциале, который представлен на рис. 1. В качестве решения уравнения Шредингера выберем волновые функции в виде

$$\overrightarrow{\psi}(z) = \begin{cases} e^{ik_{n_z}z} + B_1 e^{-ik_{n_z}z}, & z < 0, \\ A_1 e^{\kappa_{n_z}z} + B_2 e^{-\kappa_{n_z}z}, & 0 < z < d_e, \\ A_2 e^{ik_{n_z}z} + B_3 e^{-ik_{n_z}z}, & d_e < z < d_e + H, \\ A_3 e^{\kappa_{n_z}z} + B_4 e^{-\kappa_{n_z}z}, & d_e + H < z < d_e + H + d_c, \\ A_4 e^{ik_{n_z}z}, & z > d_e + H + d_c \end{cases} \quad (7)$$

для потока электронов, падающих слева направо, и

$$\overleftarrow{\psi}(z) = \begin{cases} e^{ik_{n_z}z} + B_5 e^{-ik_{n_z}z}, & z > d_e + H + d_c, \\ A_5 e^{-\kappa_{n_z}z} + B_6 e^{\kappa_{n_z}z}, & d_e + H < z < d_e + H + d_c, \\ A_6 e^{-ik_{n_z}z} + B_7 e^{ik_{n_z}z}, & d_e < z < d_e + H, \\ A_7 e^{-\kappa_{n_z}z} + B_8 e^{\kappa_{n_z}z}, & 0 < z < d_e, \\ A_8 e^{-ik_{n_z}z}, & z < 0 \end{cases} \quad (8)$$

для потока электронов, падающих справа налево, соответственно. В (7) и (8) $\hbar \kappa_{n_z} = \sqrt{2m_e|U_0| - \hbar^2 k_{n_z}^2}$.

Сшивая волновые функции в точках $z = 0, d_e, d_e + H, d_e + H + d_c$, получим систему уравнений относительно коэффициентов A и B , которую решаем численно методом LU-разложения.

Полная волновая функция может быть записана с помощью S -матрицы рассеяния как

$$\psi(z) \sim \{\overleftarrow{\psi}(z) - S\overrightarrow{\psi}(z)\}.$$

В континуумах, т.е. в любой из точек $z = z^* \leq 0$ или $z^* \geq d_e + H + d_c$ (рис. 1), находим матрицу рассеяния

$$S = (\overleftarrow{\psi}/\overrightarrow{\psi})|_{z=z^*}. \quad (9)$$

В нижней полуплоскости комплексных волновых чисел в окрестности точки k_{n_z} методом Мюллера вычисляем полюс матрицы рассеяния. Мнимая часть энергии $\hbar^2 k_{n_z}^2/2m_e$ дает величину уширения.

Метод несложно обобщить на случай ненулевого напряжения смещения. В этом случае подбарьерные волновые функции выражаются через функции Эйри.

Вследствие того что в экспериментах имеет место неравенство $d_c \ll d_e$, для оценки уширения уровней в сферическом кластере можно использовать решение задачи о распаде состояний в сферически-симметричном потенциале глубиной U_0 и шириной R (радиус кластера)

с толщиной барьера d_c . Поступая аналогично тому, как это сделано в [22], для резонансных уровней величину уширения можно определить как

$$\gamma_p \approx 8e^{-2\kappa_p d_c} \frac{\hbar^2 k_p^3 \kappa_p^3}{m_e k_0^4 (1 + \kappa_p d_c)}. \quad (10)$$

3. Уравнение баланса

В двухтемпературной модели уравнение баланса энергии в кластере при наличии напряжения смещения имеет вид

$$\begin{aligned} \Omega \frac{\partial(c_e T_e)}{\partial t} &= P(T_e, T_i) - Q(T_e, T_i), \\ \Omega \frac{\partial(c_i T_i)}{\partial t} &= Q(T_e, T_i), \end{aligned} \quad (11)$$

где $c_{e,i}$ — удельная теплоемкость электронной и ионной подсистем (с температурами T_e и T_i) кластера объемом Ω , $P(T_e, T_i)$ — мощность, поглощаемая кластером, $Q(T_e, T_i)$ — энергия обмена между электронами и ионами в единицу времени. Вследствие того что равновесие в первую очередь устанавливается в электронной подсистеме ($dT_e/dt = 0$), в условиях установившегося процесса

$$P(T_e, T_i) - Q(T_e, T_i) = 0. \quad (12)$$

Для подсчета Q воспользуемся результатом работы [8], полученным для массивного металла на основе решения кинетического уравнения

$$\begin{aligned} Q(T_e, T_i) &= \Omega \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{m_e^2 U_{e-ph}^2 k_B^5 T_{D0}^5}{\hbar^7 \rho s^4} \\ &\times \left\{ \left(\frac{T_e}{T_{D0}} \right)^5 \int_0^{T_{D0}/T_e} \frac{x^4 dx}{e^x - 1} - \left(\frac{T_i}{T_{D0}} \right)^5 \int_0^{T_{D0}/T_i} \frac{x^4 dx}{e^x - 1} \right\}. \end{aligned} \quad (13)$$

Здесь U_{e-ph} — константа электрон-фононного взаимодействия, T_{D0} — температура Дебая в массивном металле, плотность которого ρ , s — „средняя“ скорость звука [19]. При условии $T_e, T_i \gg T_{D0}$ выражение (13) в литературе принято записывать в виде

$$Q(T_e, T_i) = \Omega \alpha (T_e - T_i).$$

В квазиклассическом приближении для низкоразмерного объекта объемом Ω и площадью поверхности S выражение для размерной зависимости температуры Дебая имеет вид [17]

$$T_D = T_{D0} \frac{1 + \pi \xi / 8}{1 + \pi \xi / 4 + (\xi / 3)^2}, \quad \xi = \frac{1}{k_{WS}} \frac{S}{\Omega}, \quad (14)$$

где $k_{WS} = (6\pi^2/v)^{1/3}$ — граничный волновой вектор в массивном металле, $v = 4\pi r_0^3/3$, r_0 — радиус ячейки Вигнера–Зейтца ($r_0 = 3a_0$ для Au). Результаты экспериментов по рассеянию рентгеновских лучей на кластерах Au диаметром 1.5–4.3 nm [18] хорошо описываются выражением (14).

На прямой ветви ВАХ мощность, которая закачивается в островок, подсчитывается по экспериментальной зависимости $I(V)$ с учетом (П5) как $P = I\eta^+V$. Затем выражение (13), в котором делается замена $T_{D0} \rightarrow T_D$, согласно (14), подставляется в (12). Полагая температуру T_i равной температуре термостата T , из решения (12) можно найти электронную температуру T_e , которая и характеризует распределение электронов по энергиям в островке (см. (П1) и (П4)).

4. Результаты вычислений

Монослойные островки-диски Au, диаметры которых находятся в диапазоне $\approx 1-8.5$ nm, содержат $\approx 14-10^3$ атомов. Сферические островки, диаметры которых находятся в диапазоне $\approx 1.4-2.8$ nm, содержат $\approx 100-600$ атомов. (В цитируемых работах размер кластера приводится в монослоях, поэтому при пересчете в nm нами использовалась нормировочная кривая из рис. 1 работы [24]).

Характеристическая энергия зарядки кластера \tilde{E}_C определяется как $\tilde{E}_C = e^2/C_{\text{eff}}$. Эффективная электрическая емкость сферического кластера $C_{\text{eff}} = (R + \delta)$, где величина δ характеризует выплывание электронного зарядового облака за геометрические размеры кластера. Для золота $\delta \approx 1.8a_0$. В случае диска C_{eff} оценивается как емкость сплюснутого сфероида, малая ось которого равна H . Большая ось a находится из условия $\pi R^2 H = 4\pi a(H/2)^2/3$. При этом учитывается тот факт, что диск почти половиной площади своей поверхности находится в контакте с диэлектрической пленкой, проницаемость которой $\epsilon = 3$. Поэтому использовано выражение

$$C_{\text{eff}} = \frac{1 + \epsilon}{2} \frac{\sqrt{a^2 - (H/2)^2}}{\arccos(H/2a)}.$$

В настоящей работе расчеты проведены для структур на кластерах, для которых измерены ВАХ при различных температурах: диска с диаметром $2R = 4 \pm 0.5$ nm и толщиной $H \approx 0.3$ nm [2] и сферы с диаметром $2R = 2 \pm 0.35$ nm [4,5]. Вследствие неопределенности точных размеров кластеров и способа подсчета числа атомов нами использована модель желе и взяты значения 240 и 248 атомов для диска и сферы соответственно. Для этих островков рассчитанные значения \tilde{E}_C равны 0.44 и 1.31 eV соответственно. Вследствие того, что объемы кластеров близки, значительное различие величин \tilde{E}_C обусловлено различием формы поверхности.

Указанные островки являются немагическими. Энергии низшего незанятого состояния ϵ^{LU} , высшего занятого состояния ϵ^{HO} и положение химического потенциала электронов μ^s в них совпадают.

Исходя из условий экспериментов [2-5] и вида симметрии прямой и обратной веток измеренных туннельных ВАХ, в качестве исходных параметров для расчетов были выбраны значения $d_e = 10 \text{ \AA}$, $d_c = 2 \text{ \AA}$ (рис. 1),

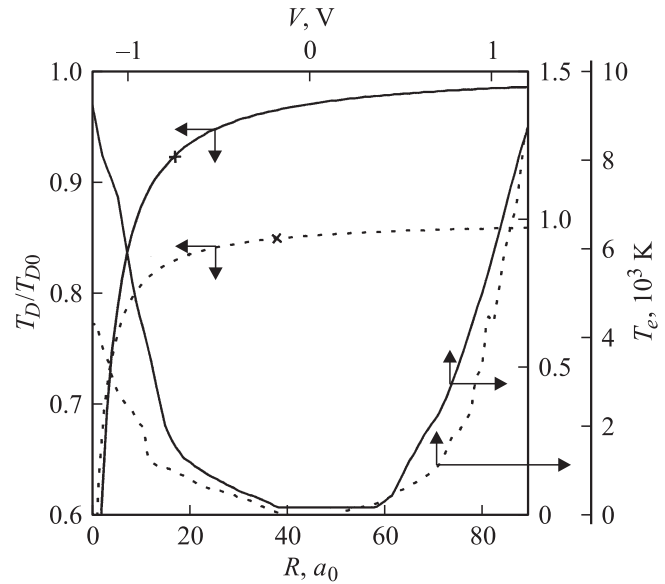


Рис. 2. Размерные зависимости дебаевской температуры $T_D(R)$ в кластерах-сферах (сплошная линия) и кластерах-дисках (пунктирная линия). На кривых крестиками указаны значения величин $T_D(R)$, которые используются в дальнейшем для расчетов перегрева в сфере с $R = 1$ nm и в диске с $R = 2$ nm. Для этих двух кластеров приведены зависимости электронной кинетической температуры $T_e(V)$ в островке от напряжения смещения.

а также значения параметра $\beta \equiv \Gamma^e/\Gamma^c = 2$ и $1/2$ для структур на диске и сфере соответственно.

Расчетная зависимость ВАХ от параметра β без учета уширения и перегрева была проанализирована в [6]. Как видно из формулы для щели тока

$$\Delta V_g = \frac{\tilde{E}_C}{2e} \left(\frac{1}{2 - \eta^+} + \frac{1}{2 - \eta^-} \right),$$

в структуре на немагическом кластере зависимость от параметра β отсутствует. С ростом β уменьшалась/увеличивалась крутизна прямой/обратной веток ВАХ. Для гранулированной пленки теория в [25] дает похожий результат, однако измерения ВАХ в [25] демонстрируют влияние туннельных сопротивлений (другими словами, параметра β) на величину щели тока.

При расчете перегрева использованы для Au: константа электрон-фононного взаимодействия $U_{e-ph} = 1$ eV [13], температура Дебая $T_{D0} = 150$ K, плотность $\rho = 19.3 \cdot 10^3$ kg/m³, „средняя“ скорость звука $s = 1500$ m/s [19].

На рис. 2 приведены размерные зависимости дебаевской температуры $T_D(R)$ (14) для широкого диапазона размеров кластеров золота. Различие асимптотического поведения этих кривых обусловлено тем, что в выражении (14) при $R \rightarrow \infty$ для сфер и дисков величина $S/\Omega \rightarrow 0$ и $2/H$ соответственно.

На рис. 2 для двух структур на сфере и диске (температура ионов 5 и 30 K соответственно) приведены

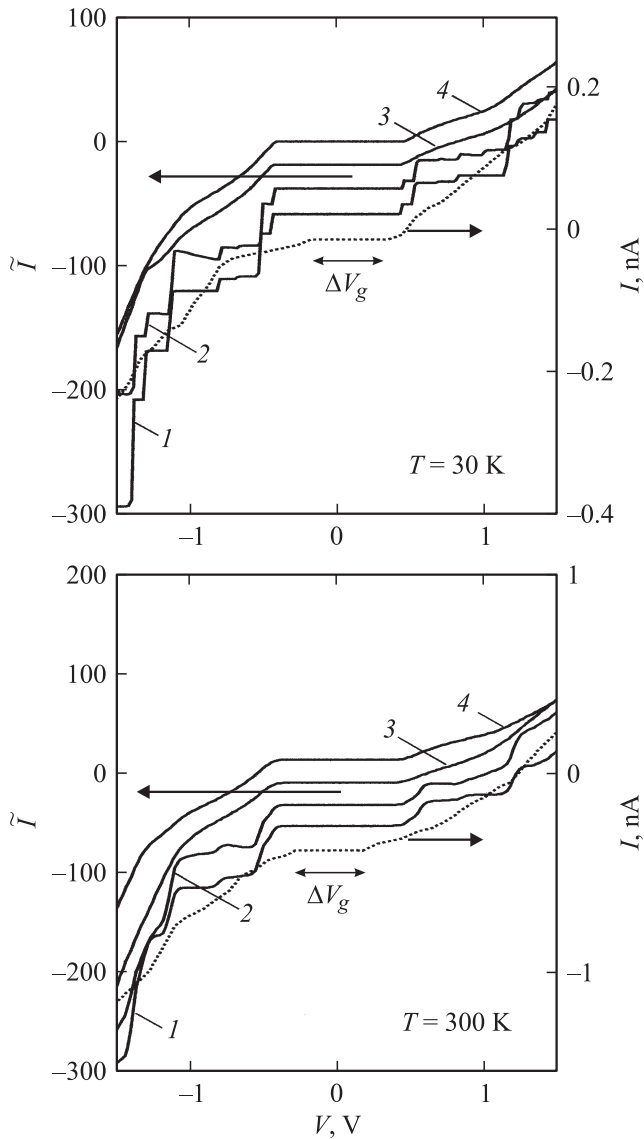


Рис. 3. Расчетные зависимости приведенного тока от напряжения смещения $\bar{I}(V)$ для структуры на сфере радиусом 1 нм при двух значениях температуры термостата: 1 — $T_e = T_i = T$ (т.е. без учета уширения и перегрева), 2 — с учетом только перегрева, 3 — с учетом только уширения, 4 — с учетом уширения и перегрева. Пунктирные линии — экспериментальные кривые $I(V)$ [4,5]. Измеренное значение щели тока для этого кластера $\Delta V_g = 0.55 \pm 0.1$ eV при $T = 30$ [24] и 300 К [5].

зависимости $T_e(V)$. Наблюдается сильная зависимость электронной температуры от напряжения смещения. Нагрев электронов в диске почти на порядок превышает аналогичный эффект в сфере и достигает тысяч градусов. Интересно отметить, что туннельный ток всего в 1 pA обеспечивается числом $\sim 10^6$ электронов, что является значительной величиной для гранулы, содержащей сотни атомов.

На рис. 3, 4 приведены результаты вычислений ВАХ (для удобства кривые слегка сдвинуты по вертикали). При низких температурах термостата расчетные значе-

ния токовой щели ΔV_g хорошо согласуются с экспериментальными значениями для структуры на дискообразном кластере (рис. 4). Различие (примерно в 1.5 раза) для структуры на сферическом кластере (рис. 3), по-видимому, обусловлено неучтенными взаимными емкостями.

Уширение уровней „имитирует“ непрерывный спектр в кластере. Расчет уширения уровней в дисках выполнен в отсутствие напряжения смещения, поэтому его следует рассматривать как нижнюю оценку уширения для всей ВАХ. В яме дискообразной формы реализуются только состояния с „подзонами“ $n_z = 1$ и 2. Состояния с $n_z = 1$ почти не распадаются. Уширение уровней с $n_z = 2$ составляет примерно 0.7 eV. Оценка уширения

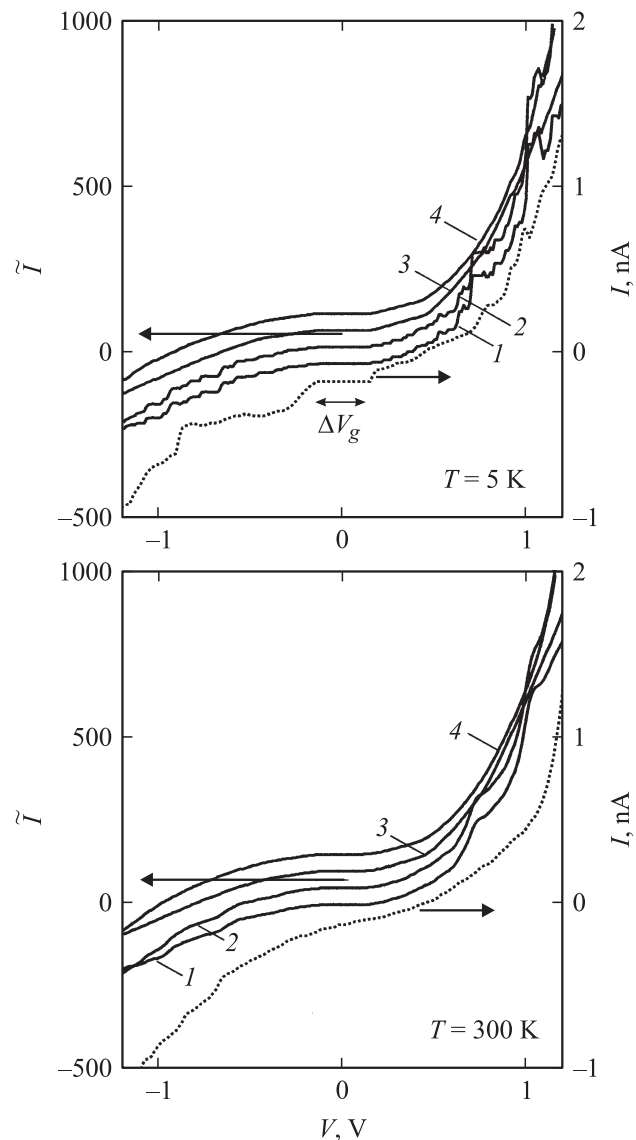


Рис. 4. Расчетные ВАХ для структуры на диске радиусом 2 нм. Пунктирные линии — экспериментальные ВАХ [2]. Измеренное значение щели тока $\Delta V_g = 0.3 \pm 0.075$ eV при $T = 5$ К и $\Delta V_g \rightarrow 0$ при $T = 300$ К [2]. Обозначения кривых те же, что на рис. 3.

энергетических термов в сферах сделана достаточно грубо и не учитывает явную трехмерность задачи.

Величина щели тока ΔV_g для немагических островков определяется лишь величиной энергии зарядки \tilde{E}_C . Перегрев несуществен в области щели тока, так как заканчиваемая энергия минимальна. При $T = 300$ К расчетные и экспериментальные величины ΔV_g удовлетворительно согласуются для структур со сферами. Емкость структуры на диске, однако, чувствительна к температуре термостата. Это может быть обусловлено изменением формы островка одноатомной высоты и его металлических свойств вследствие термических флуктуаций.

На ВАХ, рассчитанных без учета уширения и перегрева, заметны мелкие ступени квантовой лестницы (вследствие дискретности уровней) и широкие ступени кулоновской блокады. С ростом напряжения смещения протекание тока происходит на фоне роста температуры электронного газа и для анализа удобно пользоваться дифференциальными зависимостями $dI(V)/dV$. Уширение и перегрев приводят к одному и тому же результату — сглаживанию ВАХ. Однако роль уширения гораздо более значительна. С учетом уширения и перегрева электронов островка квантовая лестница становится вообще незаметной. Малозаметны также кулоновские эффекты зарядки островка.

5. Заключение

В настоящей работе проведены полуэмпирические оценки двух возможных механизмов, влияющих на протекание туннельного тока через квантовую металлическую гранулу: уширение дискретных уровней и перегрев электронной подсистемы. Вычисления выполнены для двух островков золота, близких по объему и разных по форме (цилиндрического и сферического).

Предложена схема вычисления полюсов S -матрицы и соответственно уширения уровней в дискообразном кластере, основанная на простейшей модели прямоугонных барьеров. Для цилиндрического островка одноатомной высоты, содержащего примерно 250 атомов, уширение „рабочей подзоны“ составило 0.7 eV при дискретности уровней вблизи энергии Ферми $\Delta \epsilon_F \simeq 0.2$ eV.

В предположении подавления электрон-фононного взаимодействия оценен нагрев электронной подсистемы в грануле. Наблюдается сильная зависимость электронной температуры от напряжения смещения. Перегрев электронной подсистемы в диске почти на порядок превышает подобный эффект в сфере и достигает тысяч градусов. С ростом напряжения смещения протекание тока происходит на фоне роста температуры электронной жидкости. Уширение и перегрев приводят к сглаживанию вольт-амперной характеристики одноэлектронных приборов и некоторому уменьшению щели тока, что и наблюдается в экспериментах.

Указанные механизмы имеют отношение к основному неравенству для одноэлектронных приборов

$$\tilde{E}_C, \Delta \epsilon_F \gg k_B T,$$

в котором необходимо заменить $\Delta \epsilon_F$ на $\Delta \epsilon_F + \gamma_F$ и T на T_e (γ_F — „среднее“ уширение уровней вблизи фермиевского).

Одна из основных задач одноэлектроники — создание устойчивых по форме и размеру ключевых компонент элементарной базы. Структуры на металлических кластерах создать пока не удастся. Возможно, эту задачу удастся выполнить на кластерах типа $Zn@C_{28}$ [26]. Они удобны тем, что туннельные переходы могут быть достаточно точно организованы, так как диэлектрическая оболочка вокруг атома металла устойчива. Описание работы прибора на таком кластере в простых моделях затруднено, в частности, из-за невозможности использования величины \tilde{E}_C на прямой и обратной ветках ВАХ. Для этого необходимо знать энергию прилипания электронов и потенциал ионизации атома металла в оболочке атомов углерода. Эффект перегрева будет отсутствовать из-за отсутствия коллектива электронов проводимости.

Когда работа была завершена, мы познакомились с недавней публикацией [27]. В ней всесторонне исследованы термо- и фотоэмиссионные характеристики гранулированных пленок Ag и Au в поле фемтосекундных лазерных импульсов. Один из выводов в [27] — нагрев электронной подсистемы увеличивается с уменьшением размеров гранул. Например, для гранулы Ag размером в 5 nm оценка электронной температуры дает 2800 K при комнатной температуре всей системы.

Термоэмиссионный ток экспоненциально зависит от отношения работы выхода электронов гранулы к кинетической температуре. Изменение тока будет существенным при изменении температуры в десятки раз. Мы полагаем, что и уширение уровней также должно быть учтено при моделировании термо- и фотоэмиссии в подобных структурах.

Приложение.

Некоторые детали расчета ВАХ

С учетом уширения уровней для прямой ветки ВАХ

$$\begin{aligned} \vec{w}_n^e &= \frac{1}{\pi} \Gamma^e \sum_p \int_{U_0 + \vec{U}^e}^{+\infty} \frac{\gamma(\vec{\epsilon}^e)}{(\epsilon' - \vec{\epsilon}^e)^2 + (\gamma(\vec{\epsilon}^e)/2)^2} \\ &\times f(\epsilon' - \mu_V^e; T) [1 - f(\epsilon' - \vec{\mu}_C^e; T_e)] d\epsilon', \quad (\text{П1}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \overleftarrow{w}_n^c &= \frac{1}{\pi} \Gamma^c \sum_{U_0 + \overleftarrow{U}^c}^{+\infty} \frac{\gamma(\overleftarrow{\epsilon}^c)}{(\epsilon' - \overleftarrow{\epsilon}^c)^2 + (\gamma(\overleftarrow{\epsilon}^c)/2)^2} \\ &\times f(\epsilon' - \mu_V^c; T) [1 - f(\epsilon' - \overleftarrow{\mu}_C^c; T_e)] d\epsilon', \quad (\text{П2}) \end{aligned}$$

$$\overleftarrow{w}_n^e = \frac{1}{\pi} \Gamma^e \sum_p \int_{u_0 + \overleftarrow{U}^e}^{+\infty} \frac{\gamma(\overleftarrow{\varepsilon}^e)}{(\varepsilon' - \overleftarrow{\varepsilon}^e)^2 + (\gamma(\overleftarrow{\varepsilon}^e)/2)^2} \times [1 - f(\varepsilon' - \mu_V^e; T)] f(\varepsilon' - \overleftarrow{\mu}_C^e; T) d\varepsilon', \quad (\text{П3})$$

$$\overrightarrow{w}_n^c = \frac{1}{\pi} \Gamma^c \sum_p \int_{u_0 + \overrightarrow{U}^c}^{+\infty} \frac{\gamma(\overrightarrow{\varepsilon}^c)}{(\varepsilon' - \overrightarrow{\varepsilon}^c)^2 + (\gamma(\overrightarrow{\varepsilon}^c)/2)^2} \times [1 - f(\varepsilon' - \mu_V^c; T)] f(\varepsilon' - \overrightarrow{\mu}_C^c; T) d\varepsilon', \quad (\text{П4})$$

где $f(\varepsilon - \mu; T) = \{1 + \exp[(\varepsilon - \mu)/k_B T]\}^{-1}$ — функция распределения Ферми–Дирака.

С учетом приложенного напряжения и зарядки спектры и химические потенциалы для островка записываются как [6]

$$\overleftarrow{\varepsilon}^e = \varepsilon_p + \tilde{E}_C(n \pm 1/2) - e\eta^+ V,$$

$$\overrightarrow{\varepsilon}^c = \varepsilon_p + \tilde{E}_C(n \mp 1/2) + e(1 - \eta^+) V,$$

$$\overleftarrow{U}^e = -e\delta\phi + \tilde{E}_C(n \mp 1/2) - e\eta^+ V,$$

$$\overrightarrow{U}^c = -e\delta\phi + \tilde{E}_C(n \pm 1/2) + e(1 - \eta^+) V,$$

$$-\mu_V^e \equiv W_0^e, \quad \overleftarrow{\mu}_C^e = \mu^g + \overleftarrow{U}^{e,c}, \quad \mu_V^c = \mu_0^c - eV,$$

где ε_p — спектр электронов в кластере в отсутствие напряжения смещения и зарядки, верхние/нижние стрелки слева соответствуют верхним/нижним знакам справа, $W_0^e \equiv -\mu_0^e$ — работа выхода электронов из полубесконечного металла, μ^g — химический потенциал электронов гранулы, $\delta\phi = (\mu^g - \mu_0^{e,c})$ — контактная разность потенциалов между кластером и электродами.

Фракция напряжения η^+ на прямой ветке ВАХ равна

$$\eta^+ = \frac{d_e + \epsilon L/2}{\epsilon(d_c + L) + d_e}, \quad (\text{П5})$$

где $L \equiv 2R$ и H для сферы и диска соответственно; ϵ — диэлектрическая проницаемость пленки, которая покрывает левый электрод. Величина $\eta^+ V$ является потенциалом в точке $d_e + L/2$ в случае отсутствия кластера (предполагается, что электрическое поле в островке полностью экранировано). Аналогично описывается и обратная ветка ВАХ структуры ($\eta^- = 1 - \eta^+$).

Список литературы

- [1] J. von Delft, D.C. Ralph. Phys. Rep. **345**, 61 (2001).
- [2] B. Wang, X. Xiao, X. Huang, P. Sheng, J.G. Hou. Appl. Phys. Lett. **77**, 1179 (2000).
- [3] J.G. Hon, B. Wang, J. Yang, X.R. Wang, H.Q. Wang, Q. Zhu, X. Xiao. Phys. Rev. Lett. **86**, 5321 (2001).
- [4] T. Ohgi, D. Fujita. Physica E **18**, 349 (2003).

- [5] T. Ohgi, D. Fujita. Surf. Sci. **532–535**, 294 (2003).
- [6] В.В. Погосов, Е.В. Васютин, В.П. Курбацкий, А.В. Коротун. ФТТ **48**, 1849 (2006); V.V. Pogosov, E.V. Vasyutin. Nanotechnology **17**, 3366 (2006).
- [7] В.В. Погосов, Е.В. Васютин, А.В. Бабич. Письма в ЖТФ **33**, 1 (2007).
- [8] М.И. Каганов, И.М. Лифшиц, Л.В. Танатаров. ЖЭТФ **31**, 232 (1956).
- [9] Z. Lin, L.V. Zhigilei, V. Celli. Phys. Rev. B **77**, 075 133 (2008).
- [10] M. Galperin, M.A. Ratner, A. Nitzan. J. Phys.: Cond. Matter. **19**, 103 201 (2007).
- [11] Е.Д. Белоцкий, С.П. Лукьянец, П.М. Томчук. ЖЭТФ **101**, 163 (1992).
- [12] Y. Bilotsky, P.M. Tomchuk. Surf. Sci. **602**, 383 (2008).
- [13] N. Singh. arXiv:cond-mat/0702331.
- [14] L. Jiang, H.-L. Tsai. J. Heat Transfer **127**, 1167 (2005).
- [15] G. Gantefor, W. Eberhardt, H. Weidele, D. Kreisle, E. Recknagel. Phys. Rev. Lett. **77**, 4524 (1996).
- [16] M. Maier, M. Schatze, G. Wrigge, M.A. Hoffmann, P. Didier, B.V. Issendorff, Int. J. Mass Spectr. **252**, 157 (2006).
- [17] P.R. Couchman, F.E. Karasz. Phys. Lett. A **62**, 59 (1977).
- [18] A. Balerna, S. Mobilio. Phys. Rev. B **34**, 2293 (1986).
- [19] M.X. Gu, C.Q. Sun, Z. Chen, T.C. Au Yeung, S. Li, C.M. Tan, V. Nosik. Phys. Rev. B **75**, 125 403 (2007).
- [20] A. Maradudin, R. Wallis. Phys. Rev. **148**, 945 (1966).
- [21] О.Л. Лазаренкова, А.Н. Пихтин. ФТП **32**, 1108 (1998).
- [22] А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.В. Переломов. Реакции, расщепление и распады в нерелятивистской квантовой механике. Наука, М. (1971). С. 302.
- [23] Д.В. Поздняков, В.М. Борздов. ФТТ **45**, 2238 (2003).
- [24] T. Ohgi, H.-Y. Sheng, Z.-C. Dong, H. Nejo, D. Fujita. Appl. Phys. Lett. **79**, 2453 (2001).
- [25] H. Imamura, J. Chiba, S. Mitani, K. Takanashi, S. Takahashi, S. Maekawa, H. Fujimori. Phys. Rev. B **61**, 46 (2000).
- [26] А.Н. Еняшин, В.В. Ивановская, Ю.Н. Макурин, А.Л. Ивановский. ФТТ **46**, 1522 (2004).
- [27] A. Gloskovskii, D.A. Valdaitsev, M. Cinchetti, S.A. Nepijko, J. Lange, M. Aeschlimann, M. Bauer, M. Klimentov, L.V. Viduta, P.M. Tomchuk, G. Schönhense. Phys. Rev. B **77**, 195 427 (2008).