

УДК 621.382.323

Аналіз оптимальних параметрів наночастки Au для створення одноелектронного транзистора

Зозюк М.О., к.т.н., доц. Волхова Т.Л.

У статті було проведено аналіз параметрів наночастки золота для створення одноелектронного транзистора. Побудовані графіки залежності повної енергії системи від параметрів наночастки золота і на їх основі проведений аналіз оптимальних параметрів наночастки золота для одноелектронного транзистора.

Ключові слова: наночастка золота, одноелектронний транзистор, повна енергія.

Вступ

На даний час, дуже перспективним напрямом дослідження є створення одноелектронного транзистора [1]. Одною з проблем створення одноелектронного транзистора є відбір нанооб'єктів з потрібними властивостями на роль «кулонівського острова» [2]. На даний момент в якості «кулонівського острова» дуже перспективним матеріалом є золото. Вибір золота в якості матеріалу наночастки пояснюється тим, що методи отримання наночасток золота доведені до серійного виробництва: їх розмір може контролюватись з точністю до $\pm 10\%$, а розміри синтезованих наночасток лежать в межах 2-500 нм,

що дозволяє вибрати найбільш зручні для експерименту варіанти [3].

Вплив параметрів наночастки на транспорт електронів у одноелектронному транзисторі

Для визначення такого впливу було використано модель тунелювання електронів на основі роботи [4]. Дана модель враховує дискретність енергетичного спектру наночастки. Встановлено, що повна енергія тунелюючого електрона з умови резонансного тунелювання залежить від зміни її повної енергії $\Delta E_{\text{повн}}^{n_1, n_2}$ при переході переходів зарядового стану від n_1 до n_2 , та від ємностей тунельних переходів [5]. Зарядовий стан (n) - це величина, яка дорівнює кількості додаткових електронів на наночастинці. Також, в свою чергу, було встановлено, що зміна повної енергії залежить від E_c та від χ (E_c - кулонівська енергія контакту, χ - електронегативність) [5].

В роботі [6] було доведено, що при величинах наночастинки менше ніж 1 нм, потрібно враховувати дискретність енергетичного спектру наночастинки, тобто $\Delta \sim E_c$, де Δ - характерна відстань між

електронними рівнями енергетичного спектру, e - заряд електрону. Методи знаходження ємностей тунельних переходів, електронегативності та зарядової енергії, описані в роботах [4]. В даній роботі було використано наближення, для частинки з розмірами більшими за 1 нм) [4].

Результати досліджень

В роботі [4] було обчислено значення електронегативності та зарядової енергії для наночасток з різною кількістю атомів квантовими методами [7].

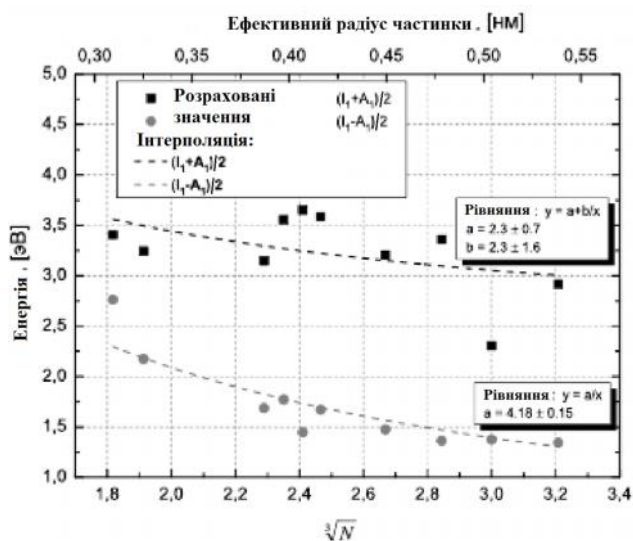


Рис.1 Графік залежності величин $(I_1 + A_1)/2$, $(I_1 - A_1)/2$, від $\sqrt[3]{N}$ в золотих наночастках.

Ефективний радіус наночасток оцінений по класичній формулі

$$r_{\text{эф}} = \frac{C}{4\pi\epsilon\epsilon_0} [5], \text{ де } I_1 - \text{перший}$$

потенціал іонізації, A_1 - енергія спорідненості до електрону, N - кількість атомів [8].

Для нашого дослідження ми використовуємо інтерполяцію залежності цих параметрів [4]. Так як:

$$\chi = \frac{(I_1 + A_1)}{2}, \quad (1)$$

$$E_c = \frac{(I_1 - A_1)}{2}. \quad (2)$$

то E_c та χ залежать від $\sqrt[3]{N}$ таким чином:

$$E_c = \frac{4,18 \pm 0,15}{\sqrt[3]{N}}, \quad (3)$$

$$\chi = (2,13 \pm 0,15) + \frac{2,3 \pm 1,6}{\sqrt[3]{N}} \quad (4)$$

Маємо рівняння для зміни повної енергії нанооб'єкта при переході наночастки з стану n_1 в стан n_2 :

$$\Delta E_{\text{повн}}^{n_1, n_2}(n_2, n_1) = E_c(n_2^2 - n_1^1) + \chi(n_2 - n_1) + \Delta E_{\text{повн}}^{n_1, n_2}(0), \quad (5)$$

Де $\Delta E_{\text{повн}}^{n_1, n_2}(0)$ - різниця вільних членів функцій повної енергії для станів із степенями збудження n_1 і n_2 або різниця енергій додаткових рівнів для збуджених станів. Із збільшенням N $\Delta E_{\text{повн}}^{n_1, n_2}(0)$ - майже не змінюється [4] і можна взяти середнє значення результатів [4] різниці енергій додаткових рівнів для збуджених станів $\Delta E_{\text{повн}}^{n_1, n_2}(0) = 4,5$ eВ.

Отже маємо:

$$\Delta E_{\text{повн}}^{n_1, n_2}(n_2, n_1, N) = \frac{4,18}{\sqrt[3]{N}}(n_2^2 - n_1^1) + \left(2,13 + \frac{2,3}{\sqrt[3]{N}}\right)(n_2 - n_1) + 4,5, \quad (6)$$

Побудуємо графіки для таких переходів: 0 в -1 або +1, -1 в -2 або +1 в +2.

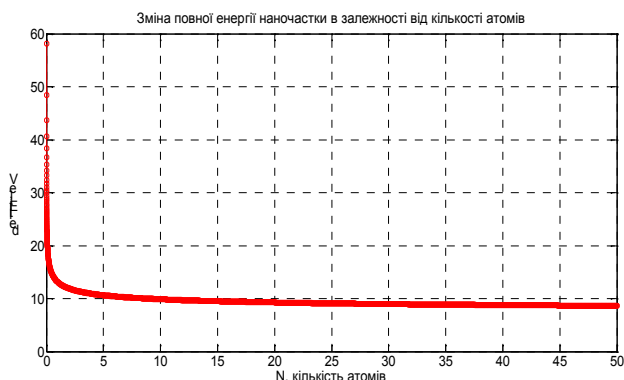


Рис. 2 Графік залежності зміни енергії наночастки із зміною кількості атомів при переході із незбудженого стану в збуджений стан ($n_1 = 0$, $n_2 = +1$)

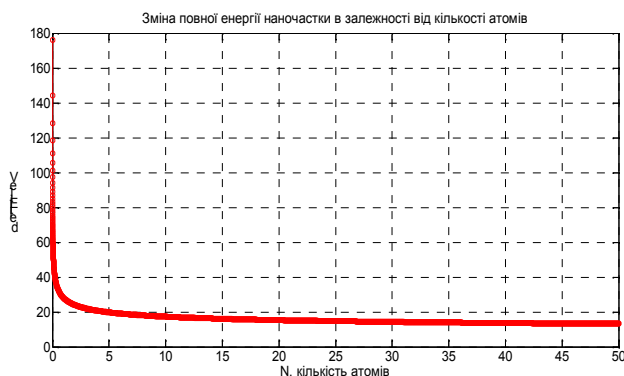


Рис.3 Графік залежності зміни енергії наночастки із зміною кількості атомів при переході із незбудженого стану в збуджений стан ($n_1 = 0$, $n_2 = -2$)

Як видно з графіку при наближенні при кількості атомів до 0, зміна енергії зростає до безкінечності. При порівнянні Рис. 1 і Рис. 2 видно, що на другому графіку залежність стає прийнятно лінійно від 20 атомів, де на першому стає прийнятно лінійною від 10 атомів.

Висновки

Як видно із графіків, зміна енергії при кількості атомів менше 10 атомів, для ($n_1 = 0, n_2 = +1$), стає сильно нелінійною і стрімко зростає до безкінечності, що говорить про те, що повна енергії вже стає дуже залежною від зарядності наночастки. Отже, швидше за все при кількості атомів менше визначеного числа, потрібні квантові методи розрахунку енергетичних параметрів наночастки, тому що енергетичний спектр стає дискретним. Також, очевидно, що на першому графіку ця залежність не така стрімка, як на другому графіку, по причині більшої зміни зарядності (кількості електронів поміщених на наночастку). Тому оптимальні властивості наночастки (кількість атомів, зарядність) для створення одноелектронного транзистора лежать в межах від 10-20 атомів, до тої кількості атомів (розмір наночастки), коли тунельні ефекти не спостерігаються.

Література

1. Аверин Д. В., Лихарев К. К. Когерентные колебания в туннельных переходах малых размеров // ЖЭТФ. 1986. Т. 90, № 2. С. 733–743.
2. Khomutov G.B, Kislov V.V, Antipina M.N et al. Interfacial nanofabrication strategies in development of new functional nanomaterials and planar supramolecular nanostructures for nanoelectronics and nanotechnology // Microelectronic

- Engineering. 2003. Vol. 69, no. 2–4. P. 373–383.
3. Sardar R., Funston A. M., Mulvaney P., Murray R. W. Gold Nanoparticles: Past, Present, and Future,, // Langmuir. 2009. Vol. 25, no. 24. P. 13840–13851.
 4. Герасимов Я.С. Теоретическое исследование электронного транспорта в молекулярном одноэлектронном транзисторе: диссертация ... кандидата физико-математических наук: 01.04.04, 01.04.07 / Герасимов Ярослав Сергеевич, 2014.- 172 С.
 5. Шорохов В.В., Солдатов Е.С., Губин С.П. Собственная емкость наноразмерных объектов // Радиотехника и электроника. 2011. Т. 56, № 3. С. 352–369.
 6. Аверин Д. В., Коротков А. Н. Влияние дискретности энергетического спектра на коррелированное одноэлектронное туннелирование через мезоскопически малую металлическую гранулу // ЖЭТФ. 1990. Т. 97, № 5. С. 1661–1673.
 7. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Теория строения молекул. Москва: Высшая школа, 1979.
 8. Зефирова Н. С. Химическая энциклопедия. Москва: Большая российская энциклопедия, 1995. Т. 4. С. 411.