

---

# ФІЗИЧНІ, ХІМІЧНІ ТА ІНШІ ЯВИЩА, НА ОСНОВІ ЯКИХ МОЖУТЬ БУТИ СТВОРЕНІ СЕНСОРИ

---

## PHYSICAL, CHEMICAL AND OTHER PHENOMENA, AS THE BASES OF SENSORS

---

---

УДК 538.935+539.186 ; PACS numbers: 31.15.E-, 71.15.Mb, 85.30.Tv, 85.65.+h  
DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.111403>

### КУЛОНІВСЬКА БЛОКАДА ТА ОДНОЕЛЕКТРОННИЙ ТРАНЗИСТОР У РАМКАХ КОНЦЕПЦІЇ «ЗНИЗУ – ВГОРУ» СУЧАСНОЇ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ ТА В ТРАДИЦІЙНІЙ КОНЦЕПЦІЇ «ЗГОРИ – ВНИЗ»

*Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха\**

Одеський державний екологічний університет,  
факультет комп'ютерних наук,  
вул. Львівська, 15, Одеса, Україна  
тел. (067) 725 2209, *E-mail: quantumnet@yandex.ua*  
\* Київський національний університет ім. Т. Шевченка,  
факультет радіофізики, електроніки і комп'ютерних систем,  
пр. Глушкова, 4г, Київ, Україна, тел. (044) 526 0532;  
Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є.Лашкарьова НАН України,  
пр. Науки, 41, Київ, Україна, тел. (044) 525 6033,  
*E-mail: maksym\_strikha@hotmail.com*

### КУЛОНІВСЬКА БЛОКАДА ТА ОДНОЕЛЕКТРОННИЙ ТРАНЗИСТОР У РАМКАХ КОНЦЕПЦІЇ «ЗНИЗУ – ВГОРУ» СУЧАСНОЇ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ ТА В ТРАДИЦІЙНІЙ КОНЦЕПЦІЇ «ЗГОРИ – ВНИЗ»

*Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха*

**Анотація.** У методичній оглядовій статті, розрахованій на науковців, викладачів та студентів вищої школи, проаналізовано явище кулонівської блокади в одноелектронному транзисторі на одній молекулі з позицій двох різних підходів: в концепції «знизу – вгору» наноелектроніки і, для порівняння, в традиційній концепції «згори – вниз» з застосуванням макроскопічних властивостей і понять, як-от ємність провідного каналу тощо. В рамках побудованої елементарної теорії одноелектронного транзистора ми отримали чисельні оцінки для меж напруг, у яких можливе

перенесення струму з витоку на стік, а також умов і параметрів, за яких можливе експериментальне спостереження явища «кулонівської блокади», коли струм не протікає за ненульової напруги між витоком і стоком.

**Ключові слова:** нанофізика, наноелектроніка, кулонівська блокада, одноелектронний транзистор

## COULOMB BLOCADE AND SINGLE-ELECTRON TRANSISTOR WITHIN “BOTTOM – UP” APPROACH IN MODERN NANOELECTRONICS AND WITHIN TRADITIONAL “UP – BOTTOM” CONCEPT

*Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha*

**Abstract.** In a tutorial review article directed to serve researchers, university teachers and students, Coulomb blockade in one-molecule single-electron transistor SET is discussed under the «bottom – up» approach of modern nanoelectronics, and, for comparison, within the traditional “up-bottom” concept, using macroscopic characteristics, such as the capacitance of conducting channel etc. In a developed elementary theory of SET we obtained numeric estimations for limits of voltages for possible electronic transport from source to drain electrodes, as well as for conditions and parameters, under which experimental observation of Coulomb blockade effect with zero current through SET under non-zero voltage between source and drain is possible.

**Keywords:** nanophysics, nanoelectronics, Coulomb blockade, single-electron transistor SET

## КУЛОНОВСКАЯ БЛОКАДА И ОДНОЭЛЕКТРОННЫЙ ТРАНЗИСТОР В РАМКАХ КОНЦЕПЦИИ «СНИЗУ – ВВЕРХ» СОВРЕМЕННОЙ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ И В ТРАДИЦИОННОЙ КОНЦЕПЦИИ «СВЕРХУ – ВНИЗ»

*Ю. А. Кругляк, М. В. Стриха*

**Аннотация.** В методической обзорной статье, рассчитанной на исследователей, преподавателей и студентов высшей школы, проанализировано явление кулоновской блокады в одноэлектронном транзисторе на одной молекуле с позиций двух разных подходов: в концепции «снизу – вверх» наноелектроники и, для сравнения, в традиционной концепции «сверху – вниз» с использованием макроскопических свойств и понятий, таких, как емкость проводящего канала и пр.. В рамках построенной элементарной теории одноэлектронного транзистора мы получили численные оценки для пределов напряжений, в которых возможен перенос тока от истока к стоку, а также условий и параметров, при которых возможно экспериментальное наблюдение явления «кулоновской блокады», когда ток не протекает при ненулевом напряжении между истоком и стоком.

**Ключевые слова:** нанофізика, наноелектроніка, кулоновська блокада, одноелектронний транзистор

## 1. Вступ

Продовжуючи знайомити вітчизняних викладачів, аспірантів і студентів, які читають курси або навчаються на різних спеціалізаціях фізичного й інженерного профілю, із сучасною концепцією «знизу-вгору» викладання фізики наносистем, автором якої є проф. Супрійо Датта (Supriyo Datta), до певної міри альтернативною традиційній, що відштовхується від розгляду аналогічних явищ у великих об'ємних провідниках, ми розглянули в [1] модель Ландауера – Датта – Лундстрома (ЛДЛ), яка вже знайшла широке застосування при аналізі як електронного, так і фононного транспорту в резисторах як нанорозмірних, так і довгих чи об'ємних.

При цьому розгляд у [1] здійснювався для випадку, коли температура контактів резистора однакова. У [2] натомість ми розглянули термоелектричні ефекти Зеєбека і Пельть'є в моделі ЛДЛ, а також якісно обговорили закон Відемана-Франца й основні рівняння термоелектрики з відповідними транспортними коефіцієнтами. Потому в [3] ми отримали доведення для результатів, постульованих у [2], причому зробили це для 1D, 2D и 3D провідників з довільним законом дисперсії і будь-яким режимом провідності: балістичним, дифузійним, або ж перехідним.

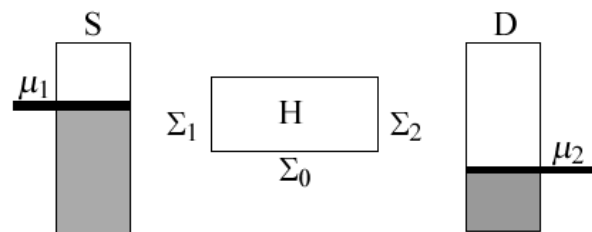
З позицій транспортної моделі Ландауера – Датта – Лундстрома у [4] побудовано узагальнену модель переносу тепла фононами. У [5] ми розглянули, як узагальнена транспортна модель ЛДЛ описує провідність графену. Надалі, в [6] ми розглянули роль розсіювання в моделі ЛДЛ й продемонстрували, що при описі транспорту електронів у провіднику в дифузійному режимі важливу роль відіграє середня довжина вільного пробігу  $\lambda$ , яка визначає коефіцієнт проходження  $T$ . Нарешті, в [7] було розглянуто кінетичне рівняння Больцмана (КРБ), яке в застосуванні до наноелектроніки розв'язує ті ж завдання, що й узагальнена транспортна модель ЛДЛ. Ми продемонстрували: для одних задач краще використовувати КРБ, а для других – модель ЛДЛ.

Статтю [8] було присвячено методам ви-

мірювання провідності й ефекту Холла в слабких та сильних магнітних полях, зокрема й за наявності перепаду температур на контактах провідника. В ній ми також обговорили, як уникнути при вимірюванні впливу артефактів, таких, як опір на контактах, та неконтрольованих термоелектричних ефектів, та продемонстрували, як здійснюється обробка результатів при конкретних вимірюваннях.

Глибший розгляд концепції «знизу-вгору» сучасної наноелектроніки та інших аспектів використання моделі ЛДЛ читач знайде в [9, 10]. У цій статті ми натомість проаналізуємо явище кулонівської блокади в одноелектронному транзисторі на одній молекулі в рамках концепції «знизу – вгору» і, для порівняння, в традиційній концепції «згори – вниз» з застосуванням макроскопічних властивостей і понять, як-от ємність провідного каналу тощо.

Раніше ми розглядали квантовий транспорт електронів у пружному провіднику методом нерівноважних функцій Гріна (НРФГ) в матричному зображенні [11, 12]. Провідник описувався матрицею гамільтоніану  $[H]$ , взаємодія між каналом провідності й контактами 1 та 2 описувалися матрицями власної енергії  $[\Sigma_1]$  та  $[\Sigma_2]$ , а взаємодія електрона в каналі з його довкіллям описувалася матрицею власної енергії  $[\Sigma_0]$ , яка може розглядатися як додатковий віртуальний контакт (рис.1).



**Рис. 1.** Провідник взаємодіє з контактами ( $[\Sigma_1]$  та  $[\Sigma_2]$ ) і навколишнім середовищем ( $[\Sigma_0]$ ). Прикладена до провідника напруга визначається різницею електрохімічних потенціалів

$$\mu_1 - \mu_2 = qV.$$

Якщо перелічені вхідні матриці визначені, то задача зводиться до чотирьох рівнянь (6), (13), (14) і (16) у [11], розв'язок яких визначає всю електрофізику нашого резистора. Однак взаємодію всередині каналу  $[\Sigma_0]$  ми або взагалі не враховували (когерентний транспорт), або розглядали тільки процеси пружного дефазування, описувані рівняннями (1) в [12] та (176) – (178) у [13]. Такий вибір  $[\Sigma_0]$  не дозволяє врахувати обміну енергією з навколишнім середовищем, і вплив на транспорт електронів це середовище чинить тільки внаслідок врахування обміну імпульсами та «фазами» [12, 13]. Фактично в цих роботах ішлося про пружні резистори з урахуванням квантовомеханічних ефектів. Загальний метод НРФГ застосовувався до пружних резисторів за аналогією до розгляду пружних провідників з використанням кінетичного рівняння Больцмана (КРБ) [7, 14 – 16].

Як можна вийти за межі моделі пружного резистора? Для квазікласичного електронного транспорту непружні взаємодії можна врахувати в рамках формалізму КРБ. Аналогічно це можна зробити для квантового транспорту в рамках методу НРФГ. Розгляд пружного дефазування в [12, 13] враховує лише окремі взаємодії, більш повний розгляд можна знайти в класичних роботах [17 – 19].

Моделювання провідників із симетричними контактами (рис. 28 в [10]) не може слугувати критерієм відмінності між доброю теоретичною моделлю та незадовільною. Ефективною перевіркою моделей непружного розсіяння може слугувати канал провідності, зображений на рис. 29 в [10], в якому весь струм на обох контактах обумовлено непружними процесами.

А взагалі, які межі застосування методу НРФГ?

Метод НРФГ було розроблено на початку 60-х років на основі квантової багаточастинкової теорії збурень (БЧТЗ) [20 – 22]. Здавалося, що БЧТЗ може, в принципі, врахувати будь-які взаємодії. Але це не зовсім так, бо це все ж таки теорія збурень, яка в певному розумінні нагадує обчислення  $(1-x)^{-1}$  через розклад  $1+x+x^2+x^3+\dots$ , що можна робити, коли  $|x|<1$ . В зворотному випадку цей розклад незастосовний, і потрібні

інші підходи, не пов'язані з теорією збурень (або ж потрібно шукати інший малий параметр теорії збурень).

До рівноважних задач замість БЧТЗ можна ефективно застосовувати, наприклад, методи теорії функціоналу густини, які широко використовують у квантовій хімії [23]. Моделювання нерівноважних задач значно складніше, бо за відсутності рівноваги виникає цілий спектр багаточастинкових станів, які складним чином взаємодіють із контактами. Однак зазвичай у тій або іншій спеціальній задачі фізику транспортного процесу вдається так або інакше успішно моделювати.

Існують, однак, експериментально спостережувані факти, як-от явище кулонівської блокади при транспорті одного електрона [24 – 26], коли традиційна хартрі–фоківська модель врахування міжелектронної взаємодії в рамках теорії самоузгодженого поля не працює. Хоча не виключено, що в майбутньому пощастить побудувати такі матриці власної енергії  $[\Sigma]$  та  $[\Sigma^{in}]$  в методі НРФГ, щоб розповсюдити його і на ці явища.

## 2. Кулонівська блокада при транспорті одного електрона

Дотримуючись базових положень концепції «знизу – вгору», за аналогією з найпростішим однорівневим резистором з однією модою провідності з енергією  $\varepsilon$  (§3.1 в [27]), розгляньмо двомодовий резистор, кожний з двох рівнів якого зайнято одним електроном – одним зі спіном «угору», другим – зі спіном «униз», що мають одну й ту саму енергію  $\varepsilon$  (рис. 2).

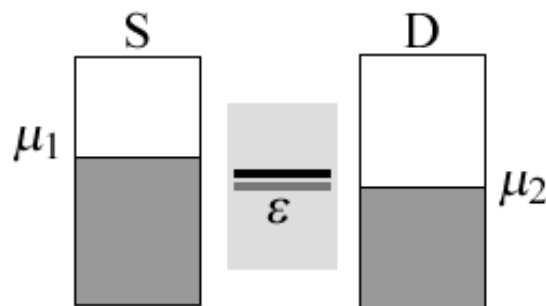
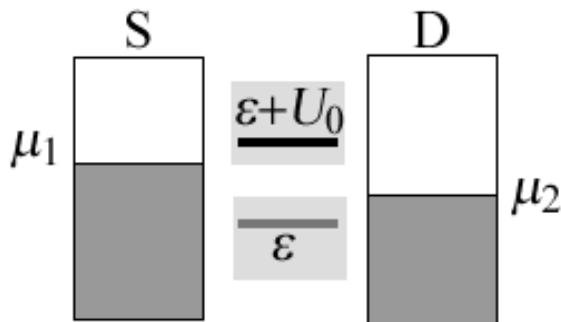


Рис. 2. Вихідна схема напівзаповнених станів у явищі кулонівської блокади.

Також припустімо, що електрохімічний потенціал  $\mu$  збігається точно з енергією рівнів  $\varepsilon$ , і тому кожний з рівнів заповнено наполовину,

оскільки фермівська функція  $f_0|_{\varepsilon=\mu} = 0.5$  [1]. Слід очікувати високого значення провідності, бо електрохімічний потенціал лежить посередині кожного з двох однаково розширених рівнів енергії  $\varepsilon$  [1, 27].

Однак, якщо питома (в перерахунку на один електрон) енергія заряджування провідника (переміщення ззовні додаткового електрона в цей провідник)  $U_0$  [10] достатньо велика, то спектр енергій у провіднику зміниться: один із рівнів із цим додатковим електроном підніметься вище на величину  $U_0$  (рис. 3).



**Рис. 3.** Кулонівська блокада з позиції концепції «знизу – вгору»: двохмодовий канал провідності (рис. 2) з урахуванням енергії заряджування має суттєву меншу густину станів в околі енергії  $E = \mu$ , а, отже, й суттєво більший опір, якщо питома енергія заряджування провідника

$U_0$  достатньо велика.

Чому вгору не зсувається й другий рівень з електроном? Тому, що рівень енергії з електроном не може «відчувати» потенціал, створений цим таки електроном. Цей ефект самовзаємодії не враховується в обмеженому методі самоузгодженого поля Хартрі – Фока, і тому ми вважали [10], що для системи  $N$  електронів  $U = U_0 N$ . Натомість у позбавленому цього обмеження підході в методі самоузгодженого поля [28 – 30], коли кожний рівень  $i$  відчуває дію потенціалу  $U_i$ , який залежить від зміни числа електронів, які займають усі рівні, крім

$i$ -го, маємо:

$$U_i = U_0(N - N_i). \quad (1)$$

Якщо використати (1) замість  $U = U_0 N$ , ми одержимо картину заселеності, зображену на рис. 3, з електрохімічним потенціалом  $\mu$  поблизу моди провідника, заселеної одним електроном. Тому самоузгоджений розв’язок у рамках підходу без обмежень виглядатиме так:

$$N_{dn} = 1, \quad U_{up} = U_0, \quad N_{up} = 0, \quad U_{dn} = 0, \quad (2)$$

що означає: нижній рівень заселено ( $N_{dn} = 1$ ), а результуючий потенціал ( $U_{up} = U_0$ ) зсуває рівень для електрона зі спіном «вгору», і цей рівень буде порожнім ( $N_{up} = 0$ ). Оскільки зсунутий угору рівень не заселений, то потенціал, який «відчуває» нижній рівень, дорівнює нулеві ( $U_{dn} = 0$ ), і цей рівень не зазнає зсуву.

Ця картина симетрична щодо заміни «вгору» на «вниз»:

$$N_{up} = 1, \quad U_{dn} = U_0, \quad N_{dn} = 0, \quad U_{up} = 0. \quad (3)$$

Цей набір (3) також є розв’язком. Чисельно процедура самоузгодження прямуватиме до одного чи до другого розв’язку (2) чи (3) в залежності, зокрема, від того, характеризуватиметься початкове наближення в ітераційному процесі більшим значенням  $N_{up}$  чи  $N_{dn}$ .

Явище кулонівської блокади можна спостерігати, якщо питома енергія заряджування  $U_0$  набагато перевищує теплову енергію  $kT$  і відповідне розмивання спектральних ліній провідника. При додаванні одного електрона до провідника його потенціал збільшується на  $U_0/q$ . Для масивних провідників цей потенціал складає мікрвольти чи навіть менше, і його не можна спостерігати навіть при дуже низьких температурах, – адже будь-який енергетичний параметр провідника розмивається на  $kT$ , що становить  $\sim 25$  меВ при кімнатній температурі і  $\sim 200$  мкеВ при температурі  $\sim 1$  К. Отже, ефект заряджування провідника, що спричиняє явище кулонівської блокади, можна спостерігати для достатньо малих провідників (якщо енергія  $U_0$ ,

наприклад, стає порядку  $1\text{ meV}$ , це можна зробити за гелієвих температур). Але для провідників молекулярного розміру енергія  $U_0$  може складати сотні меВ, що дає можливість спостерігати явище кулонівської блокади навіть при кімнатній температурі.

Є ще й другий фактор, який обмежує можливість спостереження ефекту кулонівської блокади. Окрім температурного розмивання всіх енергетичних параметрів резистора  $\sim kT$  існує ще й більш фундаментальне розширення  $\gamma \sim h/t$ , пов'язане з часом прольоту  $t$  електрона через пристрій. Ефект заряджування провідника можемо спостерігати тільки тоді, коли кулонівська щілина  $U_0$  суттєво перевищує це розширення  $U_0 \gg h/t$ . Спостереження ефекту кулонівської блокади навіть для найменших провідників передбачає наявність добрих контактів у вимірювальній схемі.

Згодом ми обговоримо умови спостереження кулонівської блокади в традиційному контексті через контактні опори й параметризацію всіх взаємодій в каналі провідності сумарною ємністю [31, 32]. А зараз перейдемо до розгляду вольт-амперних характеристик (ВАХ) згаданої двохрівневої моделі.

### 2.1. Вольт-амперні характеристики

Ми спростимо розгляд двохмодової моделі провідника: нехай його рівні енергії фіксовані щодо витоку S і не зазнають електростатичного впливу [10] з боку стоку D. Нехтуючи електрон-електронною взаємодією ( $U = 0$ ), одержимо якісний хід ВАХ, зображений на рис. 4.

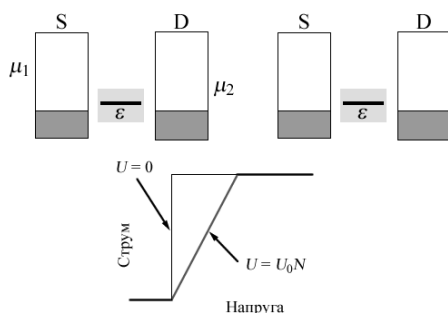


Рис. 4. Якісний хід ВАХ двохмодового резистора при  $U = 0$  і  $U = U_0N$ .

Щойно електрохімічний потенціал  $\mu_2$  перетне енергію рівнів  $\varepsilon$ , як струм відразу ж досягне свого максимального значення.

Якщо на наступному етапі врахувати ефект заряджування провідника через самоузгоджений потенціал  $U = U_0$ , то зростання струму відбуватиметься в межах певного діапазону за шкалою напруг порядку  $\sim U_0/q$ , оскільки заряджування зсуває рівні вгору й потрібна більша напруга, щоб цілком покрити рівні енергії провідника.

Якщо ж урахувати ефект самовзаємодії в підході без обмежень (1), ми одержимо ВАХ з проміжним плато, походження якого ілюструє рис. 5.

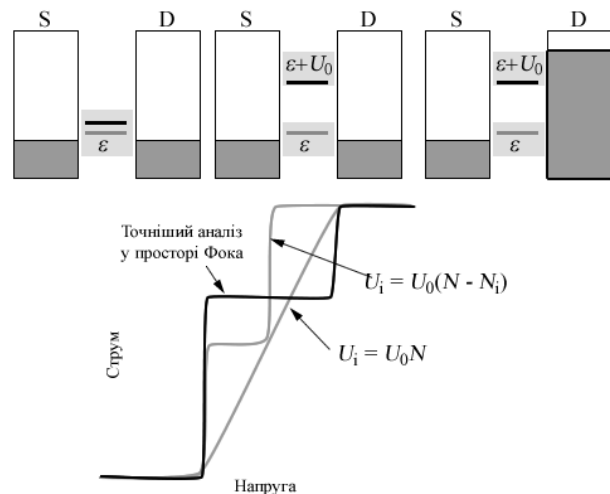


Рис. 5. Точніше розташування плато на ВАХ згідно з аналізом у просторі Фока.

Як видно з зонних діаграм на рис.5, спершу половинний внесок у повну провідність дає тільки нижній рівень (діаграма посередині), а повного струму ми досягнемо тільки тоді (діаграма праворуч), коли подано достатній потенціал  $\mu_2$ , щоб рівень хімпотенціалу праворуч опинився вище від рівня з енергією  $\varepsilon + U_0$ .

Це проміжне плато справді неодноразово спостерігали експериментально, але кількісно його висота дорівнює не половині, а двом третинам від повного струму  $2q/t$ . Цю відмінність неможливо пояснити в рамках одночастинкової моделі провідника. Однак, її можна природним чином отримати при переході до простору Фока.

**2.2. Моделювання заряджування провідника в фоківському просторі**

Ми вже використовували опис квантового стану провідника в просторі Фока [33, 34]. Якщо в одночастинковій моделі ми говоримо про заповнення чи спустошення рівнів енергії провідника електронами через контакти, то фоківське зображення дає можливість говорити про перехід усієї системи електронів провідника з одного стану в другий.

Так, рис. 6 демонструє однорівневий резистор в одночастинковому зображенні і в просторі Фока: стан 0 – порожній, а стан 1 – заселений.

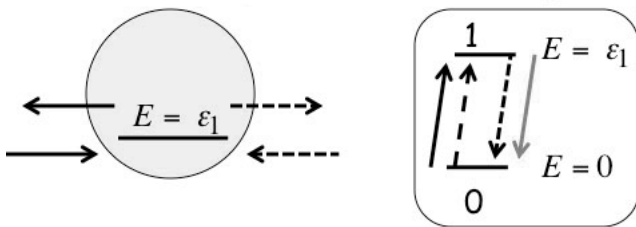


Рис. 6. Одномодовий резистор в одночастинковому зображенні (ліворуч) і в фоківському просторі (праворуч).

На рис. 7 одночастинкову модель двохрівневого резистора зіставлено з його ж фоківським зображенням, яке демонструє чотири можливі стани провідника, які відрізняються заселеністю цих станів електронами.

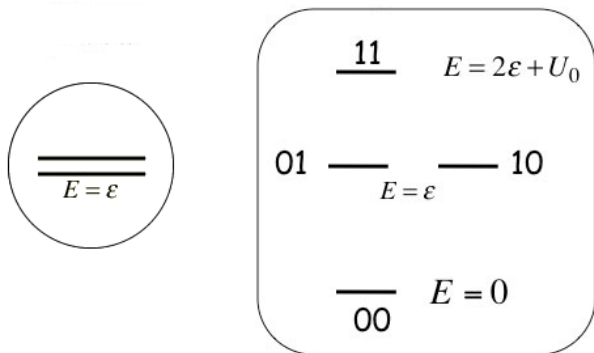


Рис. 7. Двохмодовий резистор в одночастинковому зображенні (ліворуч) і в фоківському просторі (праворуч).

В загальному випадку  $N$ -рівневий резистор має  $2^N$  станів у просторі Фока. Ми ще повернемося до розгляду цього загального випадку.

А зараз розглянемо рівноважний стан у просторі Фока. Процедура обчислення ймовірності того, що система перебуватиме в стані  $i$ , в умовах рівноваги добре відома [33, 34]:

$$p_i = \frac{1}{Z} e^{-(E_i - \mu N_i)/kT}, \quad (4)$$

де  $Z$  – нормувальна стала.

Нехай ми хочемо знайти рівноважне число електронів  $n$  у двохмодовому провіднику (рис. 7) в залежності від електрохімічного потенціалу  $\mu$ . Для  $n$  у фоківському просторі маємо:

$$n = \sum_i N_i p_i = p_{01} + p_{10} + 2p_{11}, \quad (5)$$

де ймовірності  $p_i$  обчислюються за (4). Нехай  $\varepsilon = 10kT$  і  $U_0 = 20kT$ . Обчислення дають графіки, зображені на рис. 8.

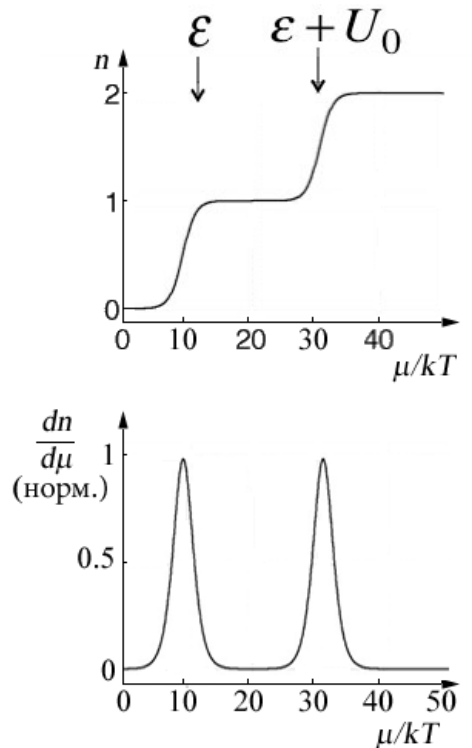


Рис. 8. Рівноважне число електронів  $n$  у двохмодовому провіднику (рис. 7) як функція  $\mu/kT$  при  $\varepsilon = 10kT$  та  $U_0 = 20kT$  [9].

Провідність пропорційна  $dn/d\mu$  і, згідно з формулою Ландауера [1], набуває пікових значень при  $\mu = \varepsilon$  та  $\mu = \varepsilon + U_0$ . Звернімо увагу на те, що число електронів у каналі змінюється на одиницю, щойно  $\mu$  набуває значення  $\varepsilon$ , і далі значення  $\varepsilon + U_0$ , як і слід було очікувати з рис. 3. Зазначмо, однак, що при цьому ми не розглядали, як на рис. 3, два одноелектронні стани з різними енергіями. Ми натомість розглядали два одноелектронні стани з тією ж самою енергією, але врахували енергію взаємодії в просторі Фока (рис. 7).

Саме пікові значення провідності спостерігають експериментально в низьковольтовому режимі кулонівської блокади для нанорезисторів за умови, що  $U_0$  перевищує як теплову енергію  $kT$ , так і фундаментальне розширення ( $U_0 \gg h/t$ ).

Низьковольтна провідність є рівноважною властивістю [9, 10], і для її опису досить рівноважної статистичної механіки. Струм за межами режиму лінійного відгуку при вищій напрузі потребує вже методів нерівноважної статистичної механіки. Далі ми покажемо, як одержати плато на рівні дві третини від повного струму (рис. 5) шляхом обчислення струму при високій напрузі в фоківському зображенні.

### 2.3. Обчислення струму в фоківському просторі

Для обчислення струму потрібно записати рівняння для ймовірності того, що система перебуває в одному з доступних станів, при цьому сума ймовірностей за всіма можливими станами повинна дорівнювати одиниці. Так, для струму в однорівневому резисторі в напівкласичній моделі (§3 у [13]) ми мали:

$$v_1 p_0 = v_2 p_1 \Rightarrow p_1/p_0 = v_1/v_2 \Rightarrow p_1 = v_1/(v_1 + v_2), \quad (6)$$

де лівий контакт переводить систему зі стану 0 в стан 1 зі швидкістю  $v_1$ , а правий контакт повертає систему в початковий стан зі швидкістю  $v_2$ , при цьому обидва процеси в стані рівноваги повинні врівноважувати один одного, і має місце співвідношення  $p_0 + p_1 = 1$ . В кінце-

вому підсумку струм дорівнює

$$I = qv_2 p_1 = q \frac{v_1 v_2}{v_1 + v_2}, \quad (7)$$

що відповідає результатів, отриманому раніше в одночастинковій моделі (§3 в [13]).

Такий підхід особливо ефективний при розгляді систем з декількома станами, які взаємодіють. Розгляньмо, наприклад, двоірвневий резистор, на який подано таку напругу, що електрони, які входять у провідник з лівого контакту, переводять систему зі стану 00 у стан 01 або 10, але не в 11 - через велике значення питомої енергії заряджування  $U_0$  (рис. 9).

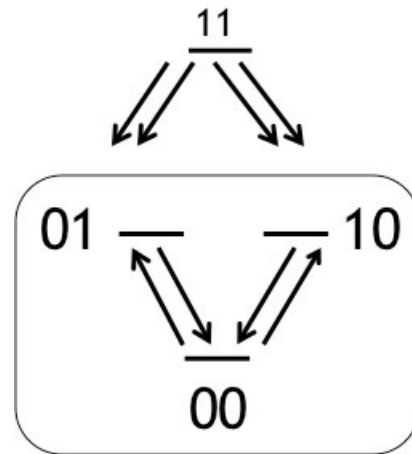


Рис. 9. Умови появи плато на рівні дві третини від повного струму (див. рис. 5).

Покажемо, що плато на рівні дві третини від значення повного струму (рис. 5) з'являється саме за умов, коли система не може перейти в стан 11, а може тільки залишити його.

З кінетики процесів за участю тільки трьох станів 00, 01 та 10 за умов динамічної рівноваги маємо:

$$2v_1 p_{00} = v_2 (p_{01} + p_{10}) \Rightarrow \frac{p_{01} + p_{10}}{p_{00}} = \frac{2v_1}{v_2}, \quad (8)$$

звідки з урахуванням нормування  $p_{00} + p_{01} + p_{10} = 1$  одержуємо:

$$p_{01} + p_{10} = \frac{2v_1}{2v_1 + v_2}, \quad (9)$$



тож у кінцевому підсумку струм дорівнює

$$I = qv_2(p_{01} + p_{10}) = q \frac{2v_1v_2}{2v_1 + v_2}. \quad (10)$$

За умови однаковості прямих і зворотних потоків електронів у провіднику ( $v_1 = v_2$ ) з (10) з очевидністю випливає, що струм дорівнюватиме саме  $2/3$  від його максимального значення:

$$I = \frac{2}{3} qv_1. \quad (11)$$

Такий результат неможливо отримати в одночастинковій моделі. Наш двохмодовий резистор за умов, які ми розглядаємо, може перебувати в станах 00, 01 та 10, але не в стані 11. В одночастинковій моделі електрон може перебувати в будь-якому з цих станів з імовірністю  $1/3$ . Якщо електрони не взаємодіють один з одним, то ймовірність заселити стан двома електронами (зі спінами «вгору» та «вниз») становитиме  $1/9$ . Насправді ж така ймовірність дорівнює нулеві, що вказує на сильно корельований рух електронів (рис. 10).

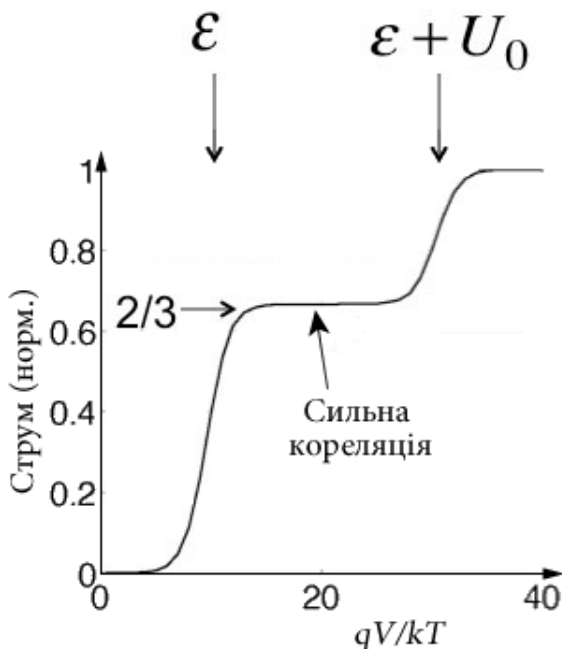


Рис. 10. Проміжне плато на ВАХ (рис. 5) відповідає сильно корельованому станів електронів.

Дотримуючись позицій концепції «знизу – вгору» [9, 10, 33], ми розглянули явище ку-

лонівської блокади в молекулярній електроніці в пристрої, базованому на русі одного-єдиного електрона. Традиційно, однак, явище кулонівської блокади розглядають з позицій концепції «згори – вниз», застосовуючи таке поняття, як ємність нанопровідника. Розгляньмо фізику кулонівської блокади у межах і цього підходу.

### 3. Одноелектронний транзистор на одній молекулі

Упродовж першого десятиліття XXI століття успіхи молекулярної електроніки втілюються, зокрема, в створення одноелектронного польового транзистора (Single-Electron Transistor/SET) на одній молекулі - наприклад, на молекулі бензолу - [35 – 43], схематично зображеного на рис. 11.

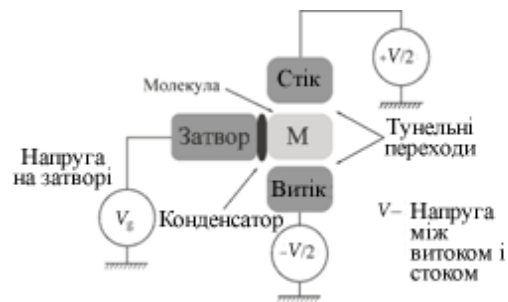


Рис. 11. Принципова схема SET. Енергія електронних станів молекули М контролюється електростатичним полем затвору.

Розглядають два механізми перенесення електронів у SET: когерентне тунелювання й послідовне тунелювання. Когерентне тунелювання реалізується в випадку сильного зв'язку молекули М з металевою поверхнею електродів, наприклад, через сульфідні містки. Час життя електронів на М короткий, електрони не встигають локалізуватися й рухаються когерентно до стокового електроду. При когерентному тунелюванні наявність електронних станів молекули М у вікні тунелювання не обов'язкова, електрони можуть здійснювати транспорт через «хвости» короткоживучих розширених станів молекули, наприклад, найнижчого незаповненого стану (Lowest Unoccupied Molecular Orbital/LUMO) (рис. 12).

Послідовне тунелювання реалізується в випадку слабого зв'язку молекули з поверхнею електродів. Хвильові властивості електрона дозволяють йому долати тунельний бар'єр, а його корпускулярна природа призводить до дискретності перенесення заряду, внаслідок чого за певних умов у тунельних наноконтактах виникає пригнічення електронного транспорту, коли за ненульової напруги між витоком і стоком струм між ними дорівнює нулеві (це явище отримало назву «кулонівської блокади» [24]).

Молекули – це нанорозмірні провідники. Зі зменшенням розмірів провідника зменшується і його електрична ємність. Сьогодні вже можна експериментально досліджувати настільки малі провідники, що для них ємність  $C$  уже така, що навіть кулонівська енергія  $q^2/C$  одного додаткового електрона на молекулі може виявитися істотною. За таких умов слід враховувати вплив кулонівських ефектів на перенесення заряду через молекулу. Через ці ефекти може реалізуватися явище кулонівської блокади, коли до електродів прикладено ненульову напругу, а струм через провідник не проходить.

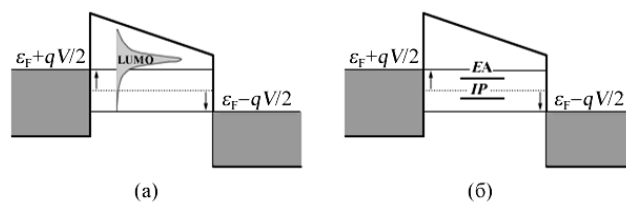
Наведемо простий приклад кулонівської блокади. Розглянемо конденсатор з ємністю  $C$  й зарядами  $+Q$  та  $-Q$  на обкладках. Електростатична енергія такого конденсатора дорівнює  $Q^2/2C = CV^2/2$ , де напруга між обкладками  $V = Q/C$ . Поставмо питання: за якої напруги стає можливе тунелювання електрона з однієї обкладки на другу? Якщо електрон тунелює з негативно зарядженого електрода на позитивно заряджений, то заряд на обкладці стає рівним  $Q - |q|$ , а зміна енергії, що дорівнює

$$(Q - |q|)^2/2C - Q^2/2C = (q^2 - 2|q|Q)/2C, \quad (12)$$

повинна бути від'ємна, щоб процес перенесення електрона супроводжувався виграшем енергії й став можливим. Тому з (12) видно, що електронний транспорт стає можливий за напруг  $V > |q|/2C$ , і, навпаки, він неможливий за

$|V| < |q|/2C$ . У цьому другому випадку маємо нульовий тунельний струм за ненульової напруги на обкладках, що і є найпростішим прикладом явища кулонівської блокади.

Тунелювавши з витоку на молекулу  $M$ , електрон живе на ній достатньо довго, встигає локалізуватися і, таким чином, «втрачає» всю інформацію про свою передісторію. Подальше тунелювання цього електрона на стік вже ніяк не пов'язане з його тунелюванням з витоку на молекулу. Це – механізм послідовного тунелювання. Експериментально показано [37], що реалізуватися він може тільки за наявності дискретного електронного стану молекули  $M$  у вікні тунелювання, наприклад, стану  $EA$  (від Electron Affinity – електронна спорідненість), що відповідає захопленню молекулою додаткового електрона і переходу її в заряджений стан  $M^-$ , енергія якого визначається спорідненістю молекули до електрона  $EA$ , або ж стану  $IP$  (від Ionization Potential – потенціал іонізації), що відповідає втраті одного електрона молекулою, що переходить у заряджений стан  $M^+$ , енергія якого визначається потенціалом іонізації молекули  $IP$  (рис. 12).



**Рис. 12. Когерентне (а) і послідовне (б) тунелювання електрона в SET. LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) – стани найнижчої незаселеної молекулярної орбіталі.**

Розташування рівнів енергії  $EA$  та  $IP$  одночасно заряджених станів молекули  $M^-$  та  $M^+$ , так само як і вищих кратних заряджених станів у каналі тунелювання, регулюється потенціалом на затворі  $V_g$ , що дозволяє «зачиняти» і «відчиняти» канал тунелювання електронів.

### 3.1. Елементарна теорія SET

Зв'язок молекули М з усіма трьома електродами (рис. 11) ємнісний: зміна потенціалу будь-якого з електродів тягне за собою зміну електростатичної енергії молекули М. Два електроди (витік S і стік D) пов'язані з М тунельно й перенесення електрона можливе тільки між цими електродами. Тунельний зв'язок означає, що електрон, який бере участь у процесі транспорту, перебуває або на М, або на одному з цих двох електродів. Спростимо ситуацію. Припустимо, що всі взаємодії між електроном, який переноситься на молекулу М, та рештою електронів як молекули М, так і обох електродів, можна параметризувати сумарною ємністю  $C$ . Припустимо так само, що значення  $C$  не залежить від того, в якому зарядовому стані перебуває молекула М. Тоді електростатична енергія молекули М з  $N$  електронами дорівнює

$$Q^2 / 2C = (Nq)^2 / 2C. \quad (13)$$

Повна енергія молекули М з  $N$  електронами дорівнює

$$E(N) = \sum_{i=1}^N E_i + (Nq)^2 / 2C, \quad (14)$$

де  $E_i$  – енергія  $i$ -го електрона в самоузгодженому полі решти електронів. При появі в молекули М додаткового електрона повна енергія стає рівною

$$E(N+1) = \sum_{i=1}^{N+1} E_i + \frac{[(N+1)q]^2}{2C}, \quad (15)$$

а коли електрон залишає молекулу М –

$$E(N-1) = \sum_{i=1}^{N-1} E_i + \frac{[(N-1)q]^2}{2C}, \quad (16)$$

тож різниця  $E(N) - E(N-1)$  дорівнює електростатичному потенціалу  $N$ -го електрона

$$\mu_N \equiv E(N) - E(N-1) = E_N + (N-1/2)q^2 / C, \quad (17)$$

що визначається як мінімальна енергія, необхідна для додавання в систему  $N$ -го електрона. Щодо  $\mu_N$  виявиться меншою від  $\mu_S$  та  $\mu_D$ ,

$N$ -й електрон перейде на М. Для додавання до молекули М з  $N$  електронами ще одного електрона електростатичний потенціал становить

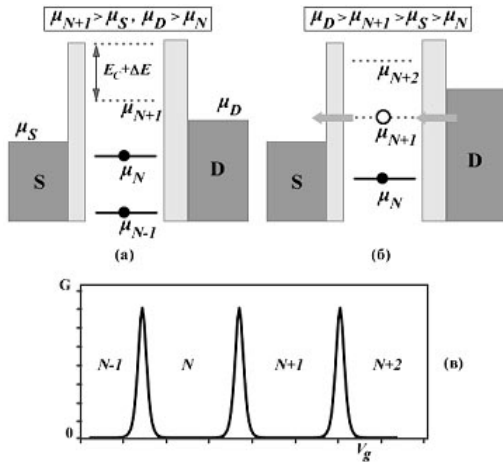
$$\mu_{N+1} = \mu_N + \frac{q^2}{C} + \Delta E_N, \quad (18)$$

де  $\Delta E_N = E_{N+1} - E_N$  повинне бути менше від  $\mu_S$  і  $\mu_D$ , щоб таке додавання стало можливе. Для спрощення реальної ситуації припустимо, що  $\Delta E_N$  слабо залежить від величини заряду на молекулі М, так що далі ми опустимо індекс  $N$  у  $\Delta E_N$ . Таким чином, енергія  $N+1$ -го електрона повинна бути більшою від енергії  $N$ -го електрона на величину енергії заряджування  $q^2 / C + \Delta E$ . Перший доданок в енергії заряджування молекули М – це енергія  $q^2 / C \equiv E_C$ , необхідна для долання кулонівського відштовхування між електронами. Другий доданок  $\Delta E$  – це результат дискретності спектру молекули.

Проілюструємо отримані висновки на рис. 13 для двох ситуацій: (а) перенесення електрона неможливе (стан транзистора «off») і (б) перенесення дозволене (стан транзистора «on»). Нехай у першому випадку енергетична діаграма SET така:  $\mu_{N+1} > \mu_D > \mu_S > \mu_N$ , а в другому випадку  $\mu_D > \mu_{N+1} > \mu_S > \mu_N$ . В першому випадку каналом тунелювання є молекула М з  $N$  електронами. Найближчий рівень з енергією  $\mu_{N+1}$  не заповнений електронами й лежить вище від енергії Фермі електродів витоку й стоку, в каналі тунелювання немає жодного вільного рівня, перенесення електрона «блоковане», стан транзистора – «off».

Протилежна ситуація зображена на рис. 13б.

В каналі тунелювання є стан з енергією  $\mu_{N+1}$ , електрон може перейти зі стокового електроду на витік. Електричний струм можна забезпечити шляхом періодичної зміни зарядового стану молекули в каналі тунелювання з  $N$  на  $N+1$ . Змінити число електронів на молекулі М можна зміною потенціалу затвору  $V_g$ , оскільки саме від нього залежить енергія заряджування молекули.



**Рис. 13.** Перенесення електрона в SET. Діаграми енергії зображені для двох різних ситуацій. У випадку (а) число електронів молекули М фіксоване зі значенням  $N$ , перенесення електрона на М «блоковане», стан транзистора – «off»; у випадку (б) число електронів на молекулі М осцилює між значеннями  $N$  та  $N + 1$ , стан – «on»; (в) кулонівські осциляції (умовн. од.).

Характерна залежність провідності  $G$  від потенціалу затвору  $V_g$  в SET у вигляді послідовності різких піків та долин, що спостерігається експериментально за невеликих значень різниці потенціалів на електродах витоку й стоку, зображена на рис. 13в. В долинах число електронів молекули М дорівнює  $N - 1, N, N + 1, N + 2$  тощо, й струм блокується енергією заряджування  $q^2/C + \Delta E$ , що відповідає ситуації на рис. 13а. Піки провідності відповідають ситуації на рис. 13б, коли зарядовий стан молекули в каналі тунелювання осцилює між двома своїми значеннями. Наприклад, пік провідності між долинами з  $N$  та  $N + 1$  електронами відповідає осциляції молекули М між її зарядовими станами з  $N$  та  $N + 1$  електронами. Це – кулонівські осциляції.

Для спостереження кулонівських осциляцій енергія заряджування молекули  $q^2/C + \Delta E$  повинна бути набагато більшою від теплової енергії  $kT$ . В іншому разі теплові флуктуації «перекривають» кулонівські осциляції.

Також необхідно, щоб число електронів молекули було надійно визначеною спостережуваною величиною, що не флуктує в рівноважному стані. Покажемо, що це тягне за собою вимогу високої резистивності контактів

між молекулою та електродами витоку й стоку. Для спрощення вважатимемо опори контактів між витоком і молекулою, і між молекулою і стоком симетричними і рівними  $R_c$ . Тоді час входження електрона в молекулу через контакт (або виходу з неї) можна оцінити за порядком величин за відомою формулою:

$$\Delta t \sim R_c C. \quad (19)$$

З іншого боку, входячи в молекулу (або виходячи з неї) електрон змінює її енергію на

$$\Delta \varepsilon \sim \frac{q^2}{C}. \quad (20)$$

Звернімо увагу на те, що величини, описувані (19) і (20), входять у фундаментальне співвідношення невизначеностей:

$$\Delta \varepsilon \Delta t \sim q^2 R_c \geq h. \quad (21)$$

З (21) випливає, що, для унеможливлення флуктуацій заряду в рівноважному стані, кількісно опір контакту  $R_c$  повинен набагато перевищувати квант електричного опору, який визначається сталою фон Клітцинга  $\frac{h}{q^2} \approx 25,812$  кОм [1]. Отже, для експериментального спостереження кулонівських осциляцій необхідно, щоб виконувалися дві умови одночасно:

$$q^2/C + \Delta E \gg kT, \quad (22)$$

$$R_c \gg \frac{h}{q^2}. \quad (23)$$

Теорію одноелектронного польового транзистора вже розроблено достатньо глибоко [24 – 26, 44, 45]. Явище одноелектронного переносу вивчено експериментально для різних нанорозмірних систем: металічних наночастинок [46], напівпровідникових гетероструктур [47, 48], напівпровідникових нанокристалів [49], вуглецевих нанотрубок [50, 51] і окремих молекул [35 – 43].

### 3.2. Умови перенесення електрона з витоку на стік

Для знаходження умов, за яких можливе перенесення електрона в одноелектронному транзисторі з витока на стік, випишемо очевидні співвідношення між енергією  $E_M(N)$  молекули с числом електронів  $N$  у початковому незарядженому стані та енергіями  $E_S(N')$  і  $E_D(N'')$  електронів у витоці та стоці, враховуючи ту обставину, що при переході одного електрона з витоку на молекулу енергія системи повинна знизитися [42]:

$$E_S(N') + E_M(N) \geq E_S(N' - 1) + E_M(N + 1) \quad (24)$$

Аналогічна нерівність повинна виконуватися й при переході одного електрона з молекули на стік:

$$E_M(N + 1) + E_D(N'') \geq E_M(N) + E_D(N'' + 1). \quad (25)$$

Якщо роботу виходу електрона з металу позначити  $W$ , то максимальна енергія електрона в електроді стоку становитиме  $-W + qV/2$ , де  $V$  – різниця потенціалів, прикладена до молекули  $M$ . Якщо припустити, що з витоку на молекулу тунелює електрон з максимальною енергією, то з очевидністю, маємо

$$E_S(N') - E_S(N' - 1) = -W + qV/2. \quad (26)$$

Тоді умова тунелювання одного електрона з витоку на молекулу набуде подальшого вигляду:

$$-W + qV/2 + E_M(N) \geq E_M(N + 1). \quad (27)$$

Оскільки мінімальна енергія електрона в електроді стоку це  $-W - qV/2$ , то при переході електрона з молекули на стік одержуємо:

$$E_M(N + 1) \geq -W - qV/2 + E_M(N). \quad (28)$$

Запровадимо енергію заряджування молекули

$$\Delta E_M(N) = E_M(N + 1) - E_M(N). \quad (29)$$

Тоді з двох останніх нерівностей отримаємо умови перенесення електрона з витоку на стік як:

$$q|V|/2 \geq \Delta E_M(N) + W \geq -q|V|/2. \quad (30)$$

У цьому виразі не враховано тільки вплив потенціалу затвору  $V_g$  на спектр молекули, використовуюваної як канал для електронного транспорту. Нехай у першому наближенні має місце лінійна залежність енергії заряджування від потенціалу затвору:

$$\Delta E_M(N, V_g) = \Delta E_M(N) + \alpha q V_g, \quad (31)$$

де константа зв'язку  $\alpha$  є параметром теорії. Остаточно умови перенесення електрона з витоку на стік запишуться як:

$$q|V|/2 \geq \Delta E_M(N, V_g) + W \geq -q|V|/2. \quad (32)$$

Самоузгоджені розрахунки з урахуванням поляризації молекули електростатичним полем затвору показали [31, 32], що значення константи зв'язку затвору в випадку молекули бензолу близька до 1, а залежність енергії заряджування молекули від потенціалу затвору справді близька до лінійної (31). З використанням цих співвідношень, один з авторів (ЮОК) розрахував діаграми зарядової стабільності одноелектронного польового транзистора на молекулі бензолу, які показують залежність числа заряджених станів молекули в каналі тунелювання від напруги, що подається на електроди витоку і стоку, і від потенціалу затвору, виходячи з першопринципів [52, 53]. Енергію заряджування молекули було обчислено в наближенні теорії функціоналу густини, а взаємодію молекули з її довкіллям у реалістичній моделі нанотранзистора було враховано самоузгоджено. Було знайдено умови функціонування такого одномолекулярного польового нанотранзистора на молекулі бензолу.

### 4. Висновки

Ми проаналізували явище кулонівської блокади в одноелектронному транзисторі на одній

молекулі з позицій двох, здавалося б, принципово різних підходів: в концепції «знизу – вгору» наноелектроніки, в якій важливу роль відіграє підхід у теорії самоузгодженого поля без обмеження за спіном у фоківському просторі, і, для порівняння, в традиційній концепції «згори – вниз» з застосуванням макроскопічних властивостей і понять, як-от ємність провідного каналу тощо.

При цьому ми брали до уваги два механізми перенесення електронів у SET: когерентне тунелювання й послідовне тунелювання. Когерентне тунелювання реалізується в випадку сильного зв'язку молекули М з металевою поверхнею електродів, наприклад, через сульфідні містки. Час життя електронів на М короткий, електрони не встигають локалізуватися й рухаються когерентно до стокового електроду. При когерентному тунелюванні наявність електронних станів молекули М у вікні тунелювання не обов'язкова, електрони можуть здійснювати транспорт через «хвости» короткоживучих розширених станів молекули.

Послідовне тунелювання реалізується в випадку слабого зв'язку молекули з поверхнею електродів. Хвильові властивості електрона дозволяють йому долати тунельний бар'єр, а його корпускулярна природа призводить до дискретності перенесення заряду, внаслідок чого за певних умов у тунельних наноконтактах виникає пригнічення електронного транспорту, коли за ненульової напруги між витоком і стоком струм між ними дорівнює нулеві (це явище отримало назву «кулонівської блокади»).

В рамках побудованої елементарної теорії одноелектронного транзистора ми отримали чисельні оцінки для меж напруг, у яких можливе перенесення струму з витоку на стік, а також умов і параметрів, за яких можливе експериментальне спостереження явища кулонівської блокади.

На завершення наголосімо: стаття в першій частині є наслідком прослуховування одним з нас (ЮОК) курсів лекцій «Fundamentals of Nanoelectronics, Part II: Quantum Models», прочитаних он-лайн в 2012 і 2015 роках проф. Супрійо Датта (Supriyo Datta) в рамках ініціативи

Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u]. В ній також використано напрацювання авторського курсу «Фізика конденсованого середовища», який інший автор (МВС) упродовж останніх років читає для магістрів факультету радіофізики, електроніки і комп'ютерних систем Київського національного університету імені Т. Г. Шевченка.

Авторі щиро вдячні Н. Ю. Кругляк за допомогу в роботі над статтею і в підготовці її до друку.

#### Список використаної літератури

- [1]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. Uzahalnena model elektronnoho transportu v mikro- i nanoelektronitsi // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2015. – t. 12, No. 3. S. 4 – 27 (in Ukrainian).
- [2]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. Termoelektrychni yavyscha ta prystroi z pozytsii uzahalненоi modeli transportu elektroniv // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2015. – t. 12, No. 4. S. 5 – 18 (in Ukrainian).
- [3]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. Termoelektrychni koefitsiienty v uzahalnenii modeli transportu elektroniv // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2016. – t. 13, No. 1. S. 5 – 23 (in Ukrainian).
- [4]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. *Transport tepla fononamy v uzahalnenii modeli Landauera-Datta-Lundstroma* // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2016. – t. 13, No. 2. S. 16 – 35 (in Ukrainian).
- [5]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. *Transportni yavyscha v hrafeni v uzahalnenii modeli Landauera-Datta-Lundstroma* // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2016. – t. 13, No. 3. S. 5 – 29 (in Ukrainian).
- [6]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. *Urakhuvannia rozsiannia v uzahalnenii modeli Landauera-Datta-Lundstroma* // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2016. – t. 13, No. 4. – S. 5-18. (in Ukrainian).
- [7]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. Kinetychne rivniannia Boltsmana v uzahalnenii modeli transportu elektroniv u mikro- ta nanoelektronitsi // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2017. – t. 14, No. 1, – S. 5 – 20. (in Ukrainian).

- [8]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. Vymiriuvannia providnostei y analiz elektrofizychnykh kharakterystyk tranzystoriv u ramkakh uzahalnoi modeli transportu elektroniv // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2017. – t. 14, No. 2, – S. 27 – 45. (in Ukrainian).
- [9]. Datta Supriyo. *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport*. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2012; www.nanohub.org/courses/FoNI.
- [10]. Yu. A. Kruglyak. *Nanoehlektronika «snizu - vverh»*, Odessa: TES, 2015. (in Russian).
- [11]. Kruglyak Yu. O., Strikha M. V. Uroky nanoelektroniky: Metod nerivnovazhnykh funktsii Hriny u matrychnomu zobrazhenni. 1. Teoriia // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2013. – V. 10, N 3. – P. 22 – 35 (in Ukrainian).
- [12]. Kruglyak Yu. O., Strikha M. V., Urokynanoelektroniky: Kvantova interferentsiia i defazuvannia v metodi nerivnovazhnykh funktsii Hriny // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2014. – V. 11, N 3. – P. 5 – 18. (in Ukrainian).
- [13]. Kruglyak Yu. A., Nanoelektronika «snizu – vverkh»: Metod neravnovesnykh funktsiy Griny, modelnye transportnye zadachi i kvantovaya interferentsiya // *ScienceRise.* – 2015. – t. 9, N 2(14). – s. 41 – 72. (in Russian).
- [14]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha, *Uroky nanoelektroniky: efekt Kholla i vymiriuvannia elektrokhimichnykh potentsialiv u kontseptsii «znyzu-vhoru»*. *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2014. – t. 11, No 1: s. 5 – 27 (in Ukrainian).
- [15]. Kruglyak Yu. O., Strikha M. V., Uroky nanoelektroniky: Rol elektrostatyky y kontaktiv u kontseptsii «znyzu – vhoru» // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2014. – V. 11, N 4. – P. 27 – 42 (in Ukrainian).
- [16]. Kruglyak Yu. A., Model provodimosti Landauera – Dattya – Lundstroma i transportnoe uravnenie Boltsmana // *ScienceRise.* – 2015. – t. 3, N 2(8). – s. 108 – 116 (in Russian).
- [17]. Danielewicz P., Quantum Theory of Non-Equilibrium Processes, *Ann. Phys.*, **152**, 239 (1984).
- [18]. Mahan G. D., Quantum Transport Equation for Electric and Magnetic Fields, *Phys. Rep.*, **145**, 251 (1987).
- [19]. Datta Supriyo. *Quantum Transport: Atom to Transistor*. – Cambridge: Cambridge University Press. – 2005.
- [20]. Martin P. C., Schwinger J. Theory of many-particle systems. I // *Phys. Rev.* – 1959. – V. 115, N 6. – P. 1342 – 1373.
- [21]. Kadanoff L. P., Baym G. *Quantum Statistical Mechanics*. – New York: W. A. Benjamin. – 1962.
- [22]. Keldysh L. V. Diagrammnaya tekhnika dlya neravnovesnykh protsessov // *ZhETF.* – 1964. – T. – 47. – S. 1515 – 1527; Keldysh L. V. Diagram Technique for Non-Equilibrium Processes // *Sov. Phys. JETP.* – 1965. – V. 20. – P. 1018.
- [23]. Kryachko E. S., Ludena E. V., Density functional theory: Foundations reviewed, *Physics Rep.*, **544**, 123 – 239 (2014).
- [24]. Averin D. V., Likharev K. K. Single electrons: A correlated transfer of single electrons and Cooper pairs in systems of small tunnel junctions // In Altshuler B. L., Lee P. A., Webb R. A. (Eds. ). *Mesoscopic Phenomena in Solids*. - New York: Elsevier. - 1991.
- [25]. Beenakker C. W. J. Theory of Coulomb-Blockade Oscillations in the Conductance of a Quantum Dot // *Phys. Rev. B.* - 1991. - V. 44. - N 4. - P. 1646 – 1656.
- [26]. Grabert H., Devoret M. H. (Eds. ). *Single Charge Tunneling. Coulomb Blockade Phenomena In Nanostructures*. - New York: Plenum Press. - 1992. - 347 p.
- [27]. Yu. A. Kruglyak, N. Yu. Kruglyak, M. V. Strikha. Uroky nanoelektroniky: vynyknennia strumu, formuluvannia zakonu Oma i mody providnosti v kontseptsii «znyzu – vhoru» // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2012. – V. 9, N 4. – P. 5 – 30 (in Ukrainian).
- [28]. Kruglyak Yu. A., Obobshchennyi metod Khartri – Foka i ego versii: ot atomov i molekul do polimerov // *ScienceRise.* – 2014. – t. 5, N 5(3). – s. 6 – 21. (in Russian).
- [29]. Kruglyak Yu. A., Quantum-chemical studies of quasi-one-dimensional electron systems. 1. Polyenes // *ScienceRise.* – 2015. – t. 5, N 2(10). – C. 69 – 105.

- [30]. Kruglyak Yu. A., Quantum-mechanical studies of quasi-one-dimensional electron systems, Chapter 2 in Kruglyak Yu. A., Glushkov A. V. et al, *Calculational Methods in Quantum Geometry and Chaos Theory, Part 4*, Odessa, TES Publishing House, 2015, pp. 28 – 180.
- [31]. Kruglyak Yu. A. *Kvantovaya khimiya*. Kiev: 1963 – 1991. Odessa: TES, 2016. (in Russian).
- [32]. Kruglyak Yu. A., Kruglyak N. Yu., Odnoelektronnyy odnomolekulyarnyykh polevoy tranzistor: kvantovomekhanicheskoe i elektrodinamicheskoe rassmotrenie na primere molekuly benzola // *Vestnik Odesskogo gos. ekologicheskogo un-ta*, Vyp. 12, str. 201 – 214 (2011). (in Russian).
- [33]. Kruglyak Yu. O., Strikha M. V., Uroky nanoelektroniky: Elektrychnyi strum i druihi zakon termodynamiky u kontseptsii «znyzu – vhoru» // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2015. – V. 12, N 2. – P. 5 – 26. (in Ukrainian).
- [34]. Kruglyak Yu. A., Nanoelektronika «snizu – vverkh»: Termodinamika provodnika s tokom, informatsionno-upravlyaemyy akumulyator i kvantovaya entropiya // *ScienceRise*. – 2015. – t. 11, N 2(16). – S. 55 – 71. (in Russian).
- [35]. Park J., Pasupathy A. N., Goldsmith J. I., Chang C., Yaish Y., Petta J. R., Rinkoski M., Sethna J. P., Abruna H. D., McEuen P. L., Ralph D. C. Coulomb blockade and the Kondo effect in single-atom transistors // *Nature*. - 2002. - V. 417. - P. 722 – 725.
- [36]. Liang W., Shores M. P., Bockrath M., Long J. R., Park H. Kondo resonance in a single-molecule transistor // *Nature*. - 2002. - V. 417. - N 13. - P. 725 – 729.
- [37]. Kubatkin S., Danilov A., Hjort M., Cornil J., Bredas J. -L., Stuhr-Hansen N., Hedegard P., Bjornholm T. Single Electron Transport Through a Single Conjugated Molecule Visiting Several Redox States // *Nature*. - 2003. - V. 425. - P. 698 – 701.
- [38]. Osorio E. A., O'Neill K., Stuhr-Hansen N., Nielsen O. F., Bjornholm T., van der Zant H. S. Addition energies and vibrational fine structure measured in electromigrated single-molecule junctions based on an oligophenylenevinylene derivative // *Adv. Mater.* - 2007. - V. 19. - P. 281 – 285.
- [39]. Danilov A., Kubatkin S., Kafanov S., Hedegard P., Stuhr-Hansen N., Moth-Poulsen K., Bjornholm T. Electronic Transport in Single Molecule Junctions: Control of the Molecule-Electrode Coupling through Intramolecular Tunneling Barriers // *Nano Lett.* - 2008. - V. 8. - N 1. - P. 1 – 5.
- [40]. Thijssen J. M., van der Zant H. S. Charge transport and single-electron effects in nanoscale systems // *Phys. Status Solidi B*. - 2008. - V. 245. - N 8. - P. 1455 – 1470.
- [41]. Kaasbjerg K., Flensberg K. Strong Polarization-Induced Reduction of Addition Energies in Single-Molecule Nanojunctions // *Nano Lett.* - 2008. - V. 8. - N 11. - P. 3809 – 3814.
- [42]. Stokbro K. First-Principles Modeling of Molecular Single-Electron Transistors // *J. Phys. Chem. C*. - 2010. - V. 114. - N 48. - P. 20461 – 20465.
- [43]. Liang W. J., Shores M. P., Bockrath M., Long J. R., Park H. Kondo resonance in a single-molecule transistor // *Nature*. - 2002. - V. 417. - N 6890. - P. 725 – 729.
- [44]. Kouwenhoven L. P., Marcus C. M., McEuen P. L., Tarucha S., Westervelt R. M., Wingreen N. S. Electron transport in quantum dots // *Mesoscopic Electron Transport*, L. L. Sohn, L. P. Kouwenhoven, G. Schön (Eds. ). - N. Y. : Kluwer. - 1997.
- [45]. Meirav U., Foxman E. B. Single-electron phenomena in semiconductors // *Semiconductor Science and Technology*. - 1996. - V. 11. - N 3. - P. 255 – 284.
- [46]. Fulton T. A., Dolan G. J. Observation of Single-Electron Charging Effects in Small Tunnel-Junctions // *Phys. Rev. Lett.* - 1987. - V. 59. - N 1. - P. 109 – 112.
- [47]. Scott-Thomas J. H. F., Field S. B., Kastner M. A., Smith H. I., Antoniadis D. A. Conductance Oscillations Periodic in the Density of a One-Dimensional Electron Gas // *Phys. Rev. Lett.* - 1989. - V. 62. - N 5. - P. 583 – 586.
- [48]. Reed M. A., Randall J. N., Aggarwal R. J., Matyi R. J., Moore, T. M.



- Observation of Discrete Electronic States in a Zero-Dimensional Semiconductor Nanostructure // *Phys. Rev. Lett.* - 1988. - V. 60. - N 6. - P. 535 – 537.
- [49]. Klein D. L., Roth R., Lim A. K. L., Alivisatos A. P., McEuen P. L. A single-electron transistor made from a cadmium selenide nanocrystal // *Nature*. - 1997. - V. 389. - N 6652. - P. 699 – 701.
- [50]. Tans S. J., Devoret M. H., Dai H., Thess A., Smalley R. E., Geerligs L. G., Dekker C. Individual single-wall carbon nanotubes as quantum wires // *Nature*. - 1997. - V. 386. - N 6624. - P. 474 – 477.
- [51]. Bockrath M., Cobden D. H., McEuen P. L., Chopra N. G., Zettl A., Thess A., Smalley R. E. Single-electron transport in ropes of carbon nanotubes // *Science*. - 1997. - V. 275. - N 5308. - P. 1922 – 1925.
- [52]. Kruglyak Yu., Configuration interaction in the second quantization representation: basics with applications up to full CI // *ScienceRise*. – 2014. – Т. 4, N 2(4). – С. 98 – 115.
- [53]. Kruglyak Yu. A., Configuration interaction in the second quantization representation: basics with applications up to full CI, Chapter 2 in Glushkov A. V., Khetselius O. Yu., Kruglyak Yu. A. et al, *Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos Theory, Part 3*, Odessa, TES Publishing House, 2015, pp. 43 – 84.
- Стаття надійшла до редакції 29.07.2017 р.

УДК 538.935+539.186 ; PACS numbers: 31.15.E-, 71.15.Mb, 85.30.Tv, 85.65.+h  
DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.111403>

**COULOMB BLOCAGE AND SINGLE-ELECTRON TRANSISTOR WITHIN  
“BOTTOM – UP” APPROACH IN MODERN NANOELECTRONICS AND WITHIN  
TRADITIONAL “UP – BOTTOM” CONCEPT**

*Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha*

Odesa State Environmental University,  
Faculty of Computer Sciences  
15 Lvivska Str, Odesa, Ukraine  
\* Taras Shevchenko Kyiv National University  
Faculty of Radiophysics, Electronics and Computer Sciences,  
4g Hlushkov Av, Kyiv, Ukraine  
V. E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine,  
41 Nauky Av, Kyiv, Ukraine

**Summary**

In a tutorial review article directed to serve researchers, university teachers and students, Coulomb blockade in one-molecule single-electron transistor SET is discussed under the «bottom – up» approach of modern nanoelectronics, and, for comparison, within the traditional “up-bottom” concept, using macroscopic characteristics, such as the capacitance of conducting channel etc.

We took into consideration two mechanisms of electron transport in SET: coherent tunneling and serial tunneling. Coherent tunneling occurs in the case of strong binding between molecule M and metallic electrode surface. The lifetime of electron at M is short, electrons have no time to localize

there and they move in coherent way towards the drain electrode. Under coherent tunneling there is no necessity for electronic states of M molecule in tunneling window; electrons can provide transport through the “tails” of the molecule short-living broadened states.

Serial tunneling occurs in the case of weak binding between molecule M and metallic electrode surface. Electron’s wave properties enables this electron to overpass the potential barrier, while its corpuscular properties determine the discrete character of charge transport; therefore under certain conditions at tunneling nanocontacts the suppression of electron transport occurs, with zero current through SET under non-zero voltage between source and drain (this effect is known as Coulomb blockade).

In a developed elementary theory of SET we obtained numeric estimations for limits of voltages for possible electronic transport from source to drain electrodes, as well as for conditions and parameters, under which experimental observation of Coulomb blockade effect is possible.

**Keywords:** nanophysics, nanoelectronics, Coulomb blockade, single-electron transistor

UDC 538.935+539.186 ; PACS numbers: 31.15.E-, 71.15.Mb, 85.30.Tv, 85.65.+h  
DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.111403>

## КУЛОНІВСЬКА БЛОКАДА ТА ОДНОЕЛЕКТРОННИЙ ТРАНЗИСТОР У РАМКАХ КОНЦЕПЦІЇ «ЗНИЗУ – ВГОРУ» СУЧАСНОЇ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ ТА В ТРАДИЦІЙНІЙ КОНЦЕПЦІЇ «ЗГОРИ – ВНИЗ»

*Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха\**

Одеський державний екологічний університет,  
факультет комп’ютерних наук,  
вул. Львівська, 15, Одеса, Україна  
тел. (067) 725 2209, *E-mail: quantumnet@yandex.ua*  
\* Київський національний університет ім. Т. Шевченка,  
факультет радіофізики, електроніки і комп’ютерних систем,  
пр. Глушкова, 4г, Київ, Україна, тел. (044) 526 0532;  
Інститут фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова НАН України,  
пр. Науки, 41, Київ, Україна, тел. (044) 525 6033,  
*E-mail: maksym\_strikha@hotmail.com*

### Реферат

У методичній оглядовій статті, розрахованій на науковців, викладачів та студентів вищої школи, проаналізоване явище кулонівської блокади в одноелектронному транзисторі на одній молекулі з позицій двох різних підходів: в концепції «знизу – вгору» наноелектроніки і, для порівняння, в традиційній концепції «згори – вниз» з застосуванням макроскопічних властивостей і понять, як-от ємність провідного каналу тощо.

Ми брали до уваги два механізми перенесення електронів у SET: когерентне тунелювання й послідовне тунелювання. Когерентне тунелювання реалізується в випадку сильного зв’язку молекули М з металевою поверхнею електродів. Час життя електронів на М короткий, електрони не встигають локалізуватися й рухаються когерентно до стокового електроду. При когерентному

тунелюванні наявність електронних станів молекули  $M$  у вікні тунелювання не обов'язкова, електрони можуть здійснювати транспорт через «хвости» короткоживучих розширених станів молекули.

Послідовне тунелювання реалізується в випадку слабкого зв'язку молекули з поверхнею електродів. Хвильові властивості електрона дозволяють йому долати тунельний бар'єр, а його корпускулярна природа призводить до дискретності перенесення заряду, внаслідок чого за певних умов у тунельних наноконтактах виникає пригнічення електронного транспорту, коли за ненульової напруги між витоком і стоком струм між ними дорівнює нулеві (це явище отримало назву «кулонівської блокади»).

В рамках побудованої елементарної теорії одноелектронного транзистора ми отримали чисельні оцінки для меж напруг, у яких можливе перенесення струму з витоку на стік, а також умов і параметрів, за яких можливе експериментальне спостереження явища кулонівської блокади.

**Ключові слова:** нанофізика, наноелектроніка, кулонівська блокада, одноелектронний транзистор