

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Національний університет «Запорізька політехніка»

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

до виконання

КОМПЛЕКСНОГО КУРСОВОГО ПРОЄКТУ

з дисципліни «**Нанокластерні і плівкові структури**»

для студентів спеціальності: 153 «Мікро- та наносистемна техніка»,
магістерського рівня, освітня програма: «Мікро- та наноелектронні
прилади і пристрої» денної і заочної форм навчання

Методичні вказівки до виконання **комплексного** курсового проєкту з дисципліни «**Нанокластерні і плівкові структури**» для студентів спеціальності 153 «Мікро- та наносистемна техніка», магістерського рівня, освітня програма: «Мікро- та наноелектронні прилади і пристрої» денної і заочної форм навчання/ Укл.: В.В. Погосов. - Запоріжжя: Національний університет «Запорізька політехніка», 2022. - 70 с.

Укладач: В. В. Погосов, проф., д-р фіз.-матем. наук

Рецензент: В. П. Курбацький, доц., канд. фіз.-матем. наук

Відповідальний за випуск: А.В. Коротун, доц., канд. фіз.-матем. наук

Затверджено
на засіданні кафедри
мікро- та наноелектроніки

Протокол №1
від “ 30 “ серпня 2022 р.
Рекомендовано до видання
НМК ФРЕТ
Протокол №1
від “ 10 “ жовтня 2022р.

ЗМІСТ

ЗМІСТ	3
ПРЕАМБУЛА	5
МЕТА І ЗАВДАННЯ КУРСОВОГО ПРОЄКТУ	6
ОРГАНІЗАЦІЙНІ ВКАЗІВКИ.....	7
1 РОЗРАХУНОК ВАХ ОДНОЕЛЕКТРОННОГО ТРАНЗИСТОРА (ОЕТ).....	8
1.1 Вступ.....	8
1.2 Енергетика зарядження окремого металевого кластеру (гранули).....	10
1.3 Виготовлення одноелектронного транзистора	13
1.4 Тунельна структура до прикладення різниці потенціалів	15
1.5 Закони Кірхгофа і умови кулонівської блокади в ОЕТ.....	17
1.6 Основні енергетичні і кінетичні співвідношення.....	20
1.7 Результати вимірювань і вихідні дані.....	27
1.8 Завдання на курсовий проєкт	28
РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА.....	30
2 РОЗРАХУНОК ВИСОТИ БАР'ЄРА ШОТТКІ ДЛЯ МЕТАЛ-ДІЕЛЕКТРИЧНОГО САНДВІЧА МЕТОДОМ ФУНКЦІОНАЛА ГУСТИНИ	31
2.1 Вступ.....	31
2.2 Енергетичні характеристики чистої поверхні.....	33
2.2.1 Поверхнева енергія.....	33
2.2.2 Потенціал іонізації, робота виходу	34
2.3 Основні співвідношення методу функціонала густини (метод Рітца) для розрахунку характеристик металів вкритих шаром ізолятора	38
2.3.1 Поверхнева енергія.....	38

2.3.2 Робота виходу	42
2.4 Бар'єр Шотткі метал-діелектричного сандвіча	42
2.5 Завдання до курсового проекту	45
2.6 Питання, які виносяться на захист проекту	48
РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА	49
3 КУЛОНІВСЬКА НЕСТІЙКІСТЬ МЕТАЛЕВИХ КЛАСТЕРІВ	50
3.1 Вступ	50
3.2 Методи отримання кластерних пучків	51
3.3 Методи дослідження кластерів	53
3.4 Визначення потенціалу іонізації	55
3.5 Задача Релея: кулонівська нестійкість зарядженої краплі	56
3.6 Негативно і позитивно заряджені кластери	61
3.7 Завдання до курсового проекту: розрахунок критичного заряду металевих кластерів	65
3.8 Питання, які виносяться на захист проекту	68
РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА	69
ДОДАТОК А	70

ПРЕАМБУЛА

Комплексний курсовий проект складається з трьох тем.

- **Тема 1** “Розрахунок ВАХ одноелектронного транзистора”, ґрунтується, переважно, на дисциплінах: “Фізична хімія”, “Фізика твердого тіла” і “Квантова механіка”.

- **Тема 2** “Розрахунок висоти бар’єра Шотткі для метал-діелектричного сандвіча методом функціонала густини”, ґрунтується, переважно, на дисциплінах: “Матеріали мікро- та наноелектроніки”, “Квантова механіка”, “Фізика твердого тіла”, “Фізика діелектриків”, “Основи фізики поверхні та ультрадисперсних середовищ” і “Вступ до мезоскопічної фізики”.

- **Тема 3** “Кулонівська нестійкість металевих кластерів”, ґрунтується, переважно, на дисциплінах: “Фізика”, “Фізична хімія”, “Матеріали мікро- та наноелектроніки”, “Фізика твердого тіла”, “Нанокластерні структури” і “Елементи фізики колоїдних, аерозольних та пилових систем”.

МЕТА І ЗАВДАННЯ КУРСОВОГО ПРОЄКТУ

Мета курсового проєкту - поглибити і розширити теоретичні знання в галузі фізики поверхні і мезофізики низькорозмірних структур, сформувати у студентів навички орієнтування в потоці науково-технічної інформації та забезпечити їм можливість використання фізичних законів в своїй галузі техніки по застосуванню сучасних, найбільш ефективних методів розрахунків і засобів обчислювальної техніки, по користуванню спеціальною науковою і довідковою літературою, діючими стандартами.

Розвиток наноелектроніки та нанотехнологій пов'язані з успіхами багатьох наукових напрямків сучасної науки.

При роботі над курсовим проєктом студент набуває досвід для подальшої роботи над дипломним проєктом і у майбутній інженерній діяльності.

В результаті виконання даного курсового проєкту студент повинен знати:

- ❖ основні фізичні явища в низькорозмірних структурах;
- ❖ фундаментальні закони природи;
- ❖ методи сучасної теоретичної фізики;
- ❖ метод функціоналу густини, методи фізики поверхні та мезоскопічної фізики;
- ❖ методи фізичних досліджень;
- ❖ внутрішні зв'язки між окремими розділами науки;
- ❖ основні числові значення фізичних величин у природі та у техніці.

Після виконання курсового проєкту студент повинен вміти:

- проводити розрахунки характеристик одноелектронних транзисторів;
- проводити розрахунки характеристик поверхні;
- обчислювати критичний заряд металевих кластерів;
- використовувати фізичні моделі для рішення практичних задач.

ОРГАНІЗАЦІЙНІ ВКАЗІВКИ

Тема курсового проєкту і варіант задається студенту керівником курсового проекту.

Підписане викладачем завдання на курсовий проєкт видається студенту на початку семестру за типовою формою.

Робота над курсовим проєктом повинна проводитись згідно з календарним планом. Приблизний календарний план виконання курсового проєкту розробляється керівником проєкту сумісно із студентом після видачі завдання на проєкт.

У процесі виконання проєкту студент повинен доповідати керівнику про поетапне виконання ним робіт.

1 РОЗРАХУНОК ВАХ ОДНОЕЛЕКТРОННОГО ТРАНЗИСТОРА (ОЕТ)

1.1 Вступ

Мініатюрний рефрижератор (рис. 1.1). Широкому використанню деяких типів електронних пристроїв з наноструктурами і дуже низькими робочими температурами перешкоджає ВІДСУТНІСТЬ надійних і ПОРІВНЯНО дешевих систем для їх охолодження. Співробітники Nat. Inst. Standards and Technology повідомили про виготовлення мікрорефрижератора, за допомогою якого вдалося остудити кубик з Ge довжиною ребра 250 мкм до $T = 220$ мК. Принцип його дії заснований на ефекті тунелювання в контактi NIS (N - нормальний метал, I - ізолятор, S - надпровідник). У надпровідника у густині електронних станів є щілина, причому в термодинамічній рівновазі рівень Фермі металу попадає в центр цієї щілини, тому тунелювання електронів через діелектричний прошарок з металу в надпровідник неможливе. При досить великій напрузі на контактi хімічний потенціал металу попадає в центр цієї щілини, і електрони можуть тунелювати у незайняті стани, розміщені вище щілини (рис. 1.1). Оскільки в надпровідник тунелюють лише електрони з енергіями, близькими до рівня Фермі (тобто найвисокоенергетичніші), сумарна енергія електронів, які залишилися, зменшується, і метал охолоджується. Це - так само, як випаровування найрозігрітіших молекул викликає охолодження в кондиціонері зі зволоженням повітря. Розроблювачі використовували чотири пари приладів з розмірами 25×15 мкм², для охолодження об'єкту - з розмірами 450×450 мкм² від температури 320 мК до 225 мК.

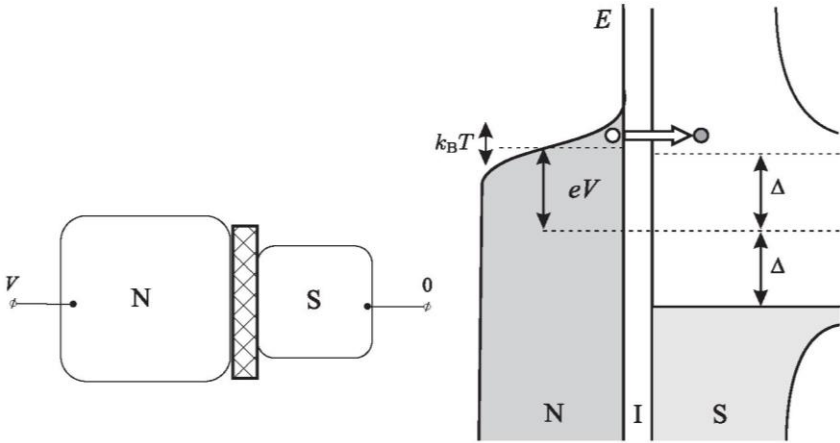


Рисунок 1.1 – Ілюстрація принципу роботи NIS-мікрорефрижератора.
Пунктирна лінія - хімічний потенціал; V - напруга на контакту;
 Δ - ширина надпровідної щілини [1]

Комбінація He^3 холодильників і пристроїв з електронним тунелюванням могла б охолоджувати об'єкти сантиметрового розміру до 100 мК і нижче. Така комбінація була б корисною для багатьох кріогенних задач, наприклад, у рентгенівських датчиках для виявлення дефектів матеріалів напівпровідникової промисловості, у детекторах фотонів на космічних апаратах. На практиці зазвичай приходиться вирішувати низку проблем з метою збільшення потужності охолодження і т.п.

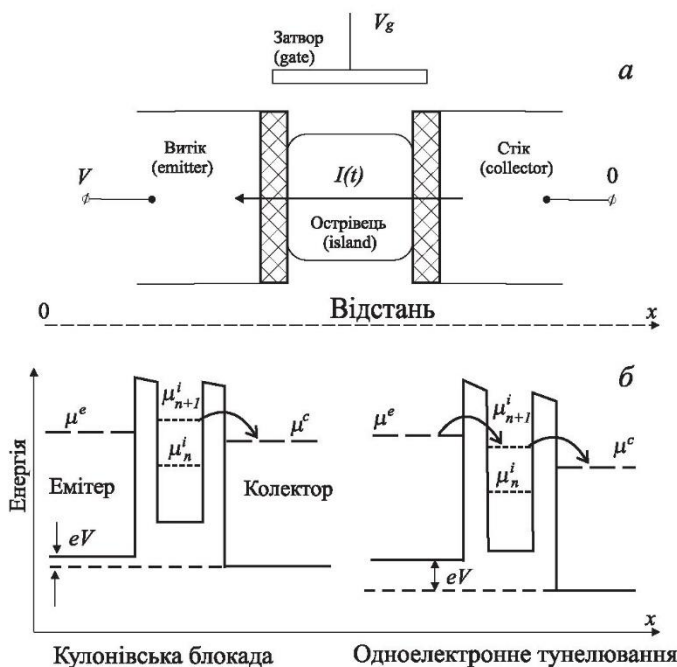
Одноелектронний транзистор. Цікавими об'єктами фізики низькорозмірних систем є металеві острівці, зв'язані слабкими тунельними взаємодіями. Тунельним струмом між двома масивними електродами-берегами можна керувати, якщо між ними помістити острівець (рис. 1.2). В цьому випадку ймовірність тунелювання електронів між берегами значно вище, ніж у її відсутності через те, що тунелювання йде не безпосередньо між електродами, а через острівець. Струм в цьому випадку обумовлюється перескоками окремих електронів. В результаті переходу електрона на острівець, за той період часу поки він знаходиться на ній, своїм полем він блокує перехід для наступних електронів ("кулонівська блокада"). На вольт-амперній характеристиці контакту *дискретність заряду* яскраво виявляється у

вигляді "кулонівських сходинок" [2,3]. Принцип утворення сходинок схематично показаний на енергетичних схемах рис. 1.2.

Для ясності розуміння даних явищ розглянемо декілька простих прикладів і проведемо основні оцінки.

1.2 Енергетика зарядження окремого металевого кластеру (гранули)

Видалимо обидва електроди (емітер і колектор) на рис. 1.2.



а - острівць, що зв'язаний двома тунельними переходами з масивними електродами;
б - енергетична діаграма транзистора;

зліва - тунелювання електрона на острівць приводить до блокади переміщення інших електронів (перехід замкнений);

справа - при підвищенні зовнішньої напруги (між емітером і колектором) блокада знімається;

суцільні лінії - профіль потенційної енергії електронів;

угорі пунктиром позначено відлік енергії

Рисунок 1.2

Тепер розглянемо ізолювану острівця у формі кульки, на якій вже знаходиться n "зайвих" електронів, переміщених з нескінченності¹. Хімічний потенціал електронів нейтральної кульки дорівнює $\mu^i < 0$, а відповідна робота виходу електронів $W^i = -\mu^i$. Вільна енергія острівця зарядженого n електронами дорівнює

$$F_n = F_0 + \mu^i n + \frac{(-en)^2}{2C},$$

де F_0 - вільна енергія нейтрального кластера, C - електрична ємність острівця; сума другого і третього доданка - робота по перенесенню n електронів з нескінченності на острівця. При цьому заряд потрібно внести в острівця (другий доданок), а потім перерозподілити його по поверхні острівця (третій доданок). При додаванні чи видаленні одного електрона ця енергія зміниться на

$$\begin{aligned} \Delta F &= F_{n\pm 1} - F_n = \\ &= \mu^i (n \pm 1) + \frac{e^2(n \pm 1)^2}{2C} - \mu^i n - \frac{e^2 n^2}{2C} = \pm \mu^i + \tilde{E}_C(\pm n + 1/2), \end{aligned} \quad (1.1)$$

де введена характеристична зарядова енергія

$$\tilde{E}_C \equiv e^2/C$$

(the Coulomb energy).

Якщо електрони переносяться не з нескінченності, а з емітера, ємність якого дорівнює нескінченності², вираз (1.1) переписеться

$$\Delta F = F_{n\pm 1} - F_n = \mp \mu^e \pm \mu^i + \tilde{E}_C(\pm n + 1/2). \quad (1.2)$$

Але величина n у цій формулі не може бути довільною. Це визначається конкуренцією суми перших двох доданків з останнім доданком у (1.2) (вони різного знаку). При визначеному $n = n^*$ величина ΔF стає негативною, тобто $n^* + 1$ -ий електрон не може «прилипнути» до острівця, тому що її ємність «переповнена». Цікаво відзначити, що критичний заряд $-en^*$ навіть для острівців, що містять більше тисячі атомів, не перевищує декількох одиниць елементарного заряду.

¹ Енергія електронів в нескінченності прийнята рівною нулю (відлік енергії).

² Хімічний потенціал електронів $\mu^e < 0$ на емітері підтримується постійним, і тепер відлік енергії варто змінити з 0 на μ^e .

Цей ефект для триелектродної структури блокує протікання струму (рис. 1.2). Підвищуючи різницю потенціалів V між крайніми електродами, можна домогтися зняття блокади з острівця після протікання першого електрона, потім другого і т.д., тому ВАХ такої структури являє собою чергу сходинок.

Спостереження одноелектронних зарядових ефектів можливе при таких кінцевих температурах, які задовольняють нерівності $\tilde{E} \gg k_B T$. В противному випадку ці ефекти будуть непомітними на тлі теплових флуктуацій. Наприклад, для тунельного контакту, утвореного окисною плівкою площею $S \approx 0,1 \text{ мкм} \times 0,1 \text{ мкм}$, товщиною $d \approx 0,1 \text{ нм}$ і діелектричною сталою $\varepsilon \approx 10$, використовуючи вираз для ємності $C = \varepsilon \varepsilon_0 d \approx 10^{-15} \text{ Ф}$, одержимо оцінку одноелектронної зарядової енергії $\tilde{E}_C \approx 10^{-4} \text{ еВ}$, що відповідає температурі, приблизно рівній 1 К . В доповненні до цієї умови є інша вимога для спостереження кулонівської блокади: опір тунельного переходу повинен бути набагато більшим, ніж квант опору $R_Q \approx 26 \text{ кОм}$, тим самим уникається вплив квантових флуктуацій заряду. Величину кванту опору $R_Q \approx 26$ можна знайти використовуючи принцип невизначеності Гейзенбера $\Delta E \Delta t = \hbar$, де $\Delta E = \tilde{E}_C = e^2/C$, а $\Delta t = CR_Q$ - час зарядки конденсатору, звідси маємо $R_Q = 2\pi\hbar/e^2$.

Теорія одноелектронних приладів використовує декілька основних припущень:

1) квантуванням енергетичного спектра електронів в острівці нехтують (спектр вважається неперервним);

2) час τ_t електронного тунелювання через бар'єр вважається нехтовно малим порівняно з іншим характерним часом (включаючи інтервали між сусідніми тунельними подіями). Це припущення виконується для тунельних бар'єрів, які представляють практичний інтерес у якості одноелектронних приладів, де $\tau_t \sim 10^{-15} \text{ с}$;

3) когерентні квантові процеси, що складаються з декількох одночасних тунельних подій, не враховуються. Це припущення виконується, якщо опір R всіх тунельних бар'єрів системи набагато більший за квантову одиницю опору R_Q

$$R \gg R_Q. \quad (1.3)$$

Останнє співвідношення є принципово важливим для одноелектроніки в цілому.

Головне положення теорії може бути сформульоване в наступному вигляді: тунелювання окремого електрона через бар'єр є завжди випадковою подією, яка протікає з визначеною швидкістю Γ (тобто ймовірністю в одиницю часу), і залежить тільки від зменшення ΔF вільної (електростатичної) енергії острівця, як результату цієї тунельної події.

Для приладів, в яких всі електроди зроблені з одного металу розмірами ~ 100 нм (типових для одноелектроніки), ΔF за рахунок $\tilde{E}_C$ має порядок 1 меВ або 10 К (в температурних одиницях). В цьому випадку, незважаючи на те, що термічні флуктуації блокуються одноелектронними ефектами, одноелектроніка може функціонувати тільки при дуже низьких (гелієвих) температурах $T \leq 1$ К.

З іншого боку, якщо розмір острівця знизити до 10 нм, ΔF буде мати порядок 100 меВ, а одноелектронні ефекти будуть спостерігатись при кімнатних температурах. Однак робота цифрових одноелектронних приладів вимагає величин ΔF навіть більших, ніж декілька еВ з розмірами приладів менш ніж 1 нм. В цьому інтервалі розмірів енергія квантування стає порівняною з енергією зарядки $\tilde{E}_C$ для більшості матеріалів³. Тому маленькі острівці часто називають *квантовими точками*. Їхнє використання вимагає залучення не тільки надзвичайно складної нанотехнології (особливо при великому ступені інтеграції приладів в мікросхемі), але і вирішення деяких фундаментальних проблем фізики, включаючи високу чутливість транспортних властивостей до малих варіацій розмірів і форми квантових точок. Ось чому дуже важливий розвиток одноелектронних приладів, здатних до операцій з найбільшими можливими швидкостями (або найменшими величинами $\Delta F/k_B T$).

1.3 Виготовлення одноелектронного транзистора

ОЕТ можна назвати фундаментальним винаходом по використанню зарядових ефектів (кулонівської блокади).

Для підвищення робочої температури одноелектронного приладу, наприклад, до $T = 300$ К, необхідно зменшити ширину

³ Енергія квантування проявляється в тому, що навіть якщо всі три електроди на рис. 1.2 зроблені з одного металу, квантування спектра в острівцевому електроді приводить до $\mu \neq \mu_e = \mu_c$.

переходу до декількох нанометрів, зменшивши тим самим ємність до 10^{-18} Ф. Це реалізовано на установках з використанням скануючого тунельного мікроскопа (СТМ). Голка мікроскопу, острівцеві (невеликий кластер атомів золота Au_N) і підшарок являють собою одноелектронний ланцюг із двох послідовно з'єднаних тунельних переходів [3].

Розглянемо *експериментальних приклад* ОЕТ, реалізований на практиці, до складу якого входить затвор [4]. Досліджувались структури наступного типу:

емітер/острівцеві/колектор: $Cu/Al/Cu$, $Al/Cu/Al$ і $Al/Al/Al$.

Електроди ОЕТ доцільно виготовляти з двох різних металів. Широко застосовується Al , тому що тонкий діелектричний шар для тунельного бар'єра може бути легко сформований термічним окислюванням Al . У [4] пробували використовувати Cu і Au , але знайдена сполука $Au/Al_x/Al$ не була стійкою, її тунельний опір мінявся мимовільно в межах від декількох хвилин до декількох годин. Також виявилось, що структура $Cu/Al_x/Al$ ще більш нестійка, ніж $Al/Al_x/Al$ (дрейф параметрів продовжувався більше однієї доби). Було вирішено використовувати мідь і зробити $Cu/Al/Cu$ і $Al/Cu/Al$ - ОЕТи. Для тестових цілей також виготовлялися $Al/Al/Al$ - ОЕТ.

Для виготовлення всіх структур використовувалася фото- і електроннопроменева літографія, плазмове сухе травлення та методика кутового напилення.

Схематичне зображення цієї конструкції приводиться на рис. 1.3. острівцевий електрод зв'язаний із двома масивними електродами (емітер і колектор) невеликими тунельними контактами, а електрод затвора «з'єднаний» з острівцевим електродом ємнісним способом. Напруга затвора на ОЕТ регулює провідність через обидва контакти, змінюючи електростатичний потенціал острівцевого електрода. Еквівалентна схема такої конструкції показана на рис. 1.4: острівцевий електрод зв'язаний за допомогою двох тунельних контактів з генератором напруги V , що і забезпечує протікання струму. Острівцевий електрод ємнісно зв'язаний з електродом затвора, через який подається напруга V_g .

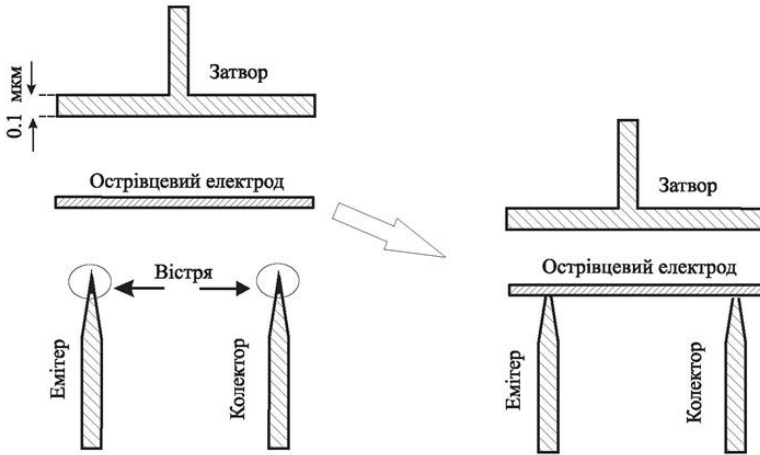


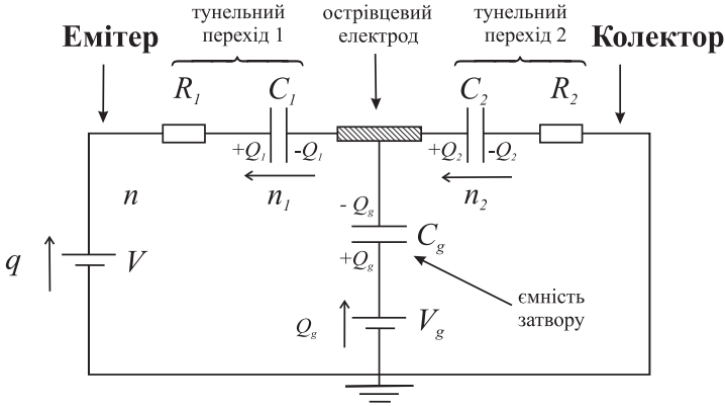
Рисунок 1.3 – Конструкція ОЕТ [4]. Зовнішні електроди (емітер і колектор) виготовлялися у вигляді «олівців», що лежали на підшарку. Потім кінчики олівців окислялися для створення ізолюючої плівки. Острівцевий електрод (у вигляді «перемички») переносився й укладався поверх окисного шару на кінцях олівців. Тим самим конструювалися два точкових тунельних контакти

1.4 Тунельна структура до прикладення різниці потенціалів

Лівий і правий електроди (емітер і колектор) є резервуарами електронів з неперервними енергетичними спектрами, зайнятими відповідно до фермієвської функції розподілу:

$$f(\varepsilon^{e,c}) = \{1 + \exp[\beta(\varepsilon^{e,c} - \mu_0^{e,c})]\}^{-1}, \quad (1.4)$$

де $(-\mu_0^{e,c}) = W_0^{e,c} > 0$ - робота виходу електронів з емітера або колектора (нижній індекс «0» означає напівнескінченний метал), $\beta \equiv 1/k_B T$. В усіх випадках енергії електронів $\varepsilon < 0$ відраховуються від вакуумного рівня, тобто від потенційної енергії електрона вдалині від усієї триелектродної структури, де поле відсутнє (див. рис. 1.4).

Рисунок 1.4 – Еквівалентна електрична схема **ОЕТ-II**

Хімічний потенціал електронів острівця μ^i , якщо він квазімакроскопічний, можна прирівняти до хімічного потенціалу електронів напівскінченного металу, з атомів якого складається острівець, тобто $\mu^i = \mu_0 < 0$. Але якщо розміри частинки менші, тобто якщо вона складається з тисячі і менше атомів, проявляються розмірні ефекти і

$$\mu^i = \mu_0 + \frac{\mu_1}{R}, \quad (1.5)$$

де μ_1/R - розмірна поправка до хімічного потенціалу, а R - радіус цієї сферичної гранули,

$$\mu_1 = 1,9 \text{ eV} \times a_0 \quad (1.6)$$

для всіх металів [5]. Електрони в острівці підпорядковуються розподілу по енергіям

$$f(\varepsilon_p) = \{1 + \exp[\beta(\varepsilon_p - \mu^g)]\}^{-1} \quad (1.7)$$

Усі рівні енергії ε_p нумеруються в порядку зростання.

Між острівцем і електродами виникає контактна різниця потенціалів

$$\delta\phi = (\mu^i - \mu_0^e)/e. \quad (1.8)$$

Рівновага буде досягатися шляхом електричної зарядки острівця, якщо його електрична ємність є кінцевою. Одержимо

$$Q_0 = C_\Sigma \delta\phi. \quad (1.9)$$

де C_{Σ} - сумарна ємність всіх контактів. Оцінімо Q_0 для сферичного острівця, що знаходиться далеко від електродів. Тоді C_{Σ} трансформується в його власну ємність $C_{\text{self}} = 4\pi\epsilon_0 R$ ($\epsilon_0 = 8,82 \cdot 10^{-12} \text{Ф/м}$), а взаємні ємності дорівнюють 0. Використовуючи (1.5), маємо $Q_0 \simeq +0,07 e$, якщо усі три електрода зроблено з одного і того ж металу. Дробність заряду пояснюється тим, що в структурах із проникними бар'єрами хвильові функції електронів не зовсім локалізовані, і електрони не можуть трактуватися як класичні частинки, тому фракція електрона (і його заряду) може бути виявлена в іншому електроді.

1.5 Закони Кірхгофа і умови кулонівської блокади в ОЕТ

Позначимо ємності двох тунельних контактів, через які тече струм, як C_1 і C_2 , а ємність переходу затвор - острів, як C_g ; відповідні заряди, як Q_1 , Q_2 і Q_g ; число електронів, що проходять через кожен тунельний перехід в напрямку стрілок, як n_1 і n_2 , відповідно. Використовуючи закон Кірхгофа для двох електричних контурів, знаходимо

$$\frac{Q_1}{C_1} + \frac{Q_2}{C_2} = V, \quad (1.10)$$

$$\frac{Q_g}{C_g} + \frac{Q_2}{C_2} = V_g. \quad (1.11)$$

Острівцевий електрод "переносить" заряд

$$-Q_1 + Q_2 - Q_g = -e(n_2 - n_1), \quad (1.12)$$

який міняється тільки тунелюванням електронів через нього. Повна вільна енергія ОЕТ дорівнює

$$F(n_1, n_2) = \frac{Q_1^2}{2C_1} + \frac{Q_2^2}{2C_2} + \frac{Q_g^2}{2C_g} - qV - Q_g V_g. \quad (1.13)$$

Тут перші три доданки - зарядові енергії, інші два - роботи, виконані генераторами напруги. q - загальний заряд, 'перенесений' генератором напруги V через ланцюг,

$$q = Q_1 + en_1, \quad (1.14)$$

Використовуючи рівняння (1.10) - (1.13), виключаємо Q_1 , Q_2 і Q_g , замінюючи їх на n_1 , n_2 , V і V_g у рівнянні (1.13), таким чином одержуємо

$$F(n_1, n_2) = \frac{1}{2C_\Sigma} [C_g V_g - e(n_2 - n_1)]^2 - en_1 V \frac{C_2 + C_g}{C_\Sigma} - en_2 V \frac{C_1}{C_\Sigma} + \text{const}, \quad (1.15)$$

де введена ємність

$$C_\Sigma = C_g + C_1 + C_2, \quad (1.16)$$

а const - доданки, незалежні від n_1 і n_2 .

Можливість тунелювання залежить від того, збільшується чи зменшується вільна енергія острівця внаслідок тунелювання. Якщо стан системи з меншою вільною енергією існує, то тунелювання можливе. Умова заборони (кулонівською блокадою) тунелювання в контакт 1 полягає в тому, що при цьому вільна енергія збільшиться. Ця умова може бути записана як

$$F(n_1 \pm 1, n_2) > F(n_1, n_2) \Rightarrow \Rightarrow \frac{1}{C_2 + C_g} \left(Q_g - \frac{e}{2} \right) < V < \frac{1}{C_2 + C_g} \left(Q_g + \frac{e}{2} \right), \quad (1.17)$$

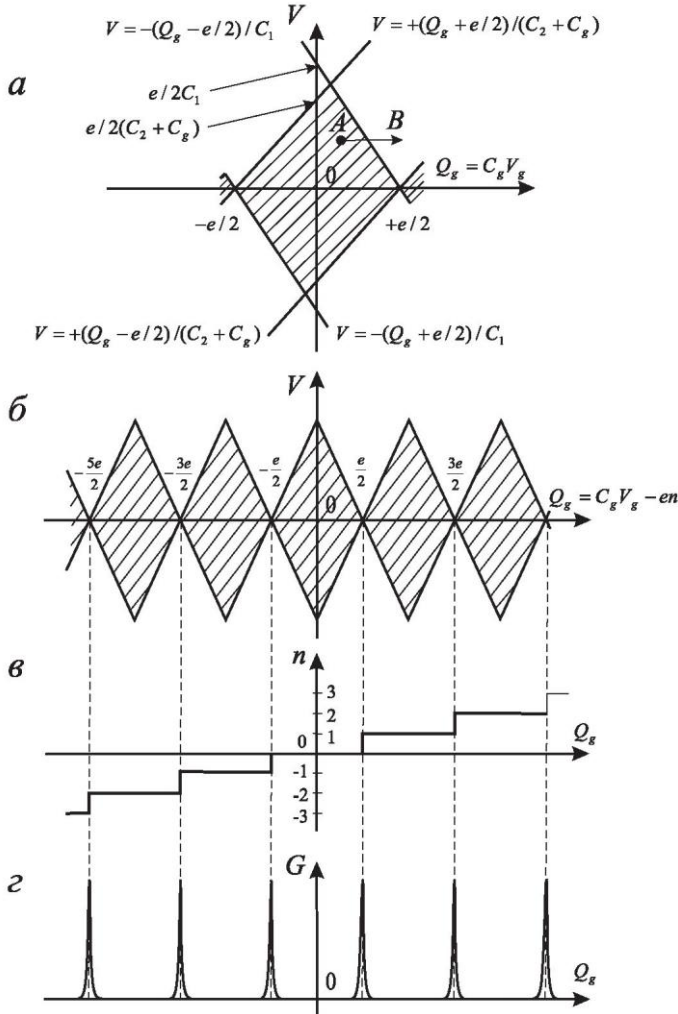
де ми вводимо визначення внутрішнього заряду на гранулі як

$$Q_g \equiv C_g V_g + e(n_1 - n_2). \quad (1.18)$$

Таким же чином записується умова заборони кулонівською блокадою тунелювання через контакт 2:

$$F(n_1, n_2 \pm 1) > F(n_1, n_2) \Rightarrow \Rightarrow -\frac{1}{C_1} \left(Q_g + \frac{e}{2} \right) < V < -\frac{1}{C_1} \left(Q_g - \frac{e}{2} \right), \quad (1.19)$$

Кулонівська блокада ефективна, коли обидві нерівності (3.17) і (3.19) виконуються. Рис. 1.5 показує кулонівську діаграму блокади ("кулонівський алмаз"). Кулонівська блокада відповідає заштрихованій частині "алмаза" (ромба). Тому при параметрах ОЕТ, що відповідають точці А на рис. 1.5, струм протікати не може. Коли ми збільшуємо напругу затвора V_g , то значення параметрів зміщуються від т. А до т. В, кулонівська блокада тунельного переходу 2 "проривається" і один електрон тунелює від стоку до гранули (острівцевого електроду) ($n_2 \rightarrow n_2 + 1$).



а - діаграма ("кулонівський алмаз") ОЕТ, б - розширений кулонівський алмаз: електронне тунелювання блокується в режимі очікування, в - число надлишкових електронів на острівцевому електроді, г - провідність (кондактанс) ОЕТ
Рисунок 1.5 – Кулонівські осциляції (періодичний кулонівський алмаз)

Якщо нерівність $F(n_1, n_2 + 1) > F(n_1 + 1, n_2 + 1)$ виконується, тунелювання через 1 можливе. Отже струм протікає при напрузі затвора, що відповідає т. В. Величина заряду на електроді затвора, яка

необхідна для включення струму, може бути меншою елементарного заряду e . Тому структура і називається одноелектронним транзистором.

При зміні напруги затвора V_g провідність міняється періодично, як показано на рис. 1.5, *г*. Це явище називають кулонівськими осциляціями. В області нульової провідності число електронів n на острівцевому електроді фіксоване. Максимумам провідності (кондактанс) відповідає східчаста зміна n , як показано на рис. 1.5, *в*. Отже східчасте збільшення числа електронів на острові є іншим яскравим проявом кулонівських осциляцій.

Для початку розглянемо *пряму гілку* ВАХ ОЕТ.

1.6 Основні енергетичні і кінетичні співвідношення

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

$$\Delta \tilde{E} = \vec{\varepsilon}^e(-\delta n) + \varepsilon_p(+\delta n) + \frac{(-e)^2}{2C_\Sigma}[(n+\delta n)^2 - n^2] - e\delta n \eta V = 0. \quad (1.20)$$

Величина ηV є тим потенціалом, який створюють зовнішні електроди при прямому включенні (пряма гілка ВАХ) на острівці, η - фракція напруги [5-8].

Вираз (3.20) є результатом закону збереження енергії усієї триелектродної структури: робота при іонізації електрона з рівня $\vec{\varepsilon}^e$ на емітері (електрична ємність якого дорівнює нескінченості) дорівнює енергії прилипання цього електрона на рівень ε_p в острівці ємністю C_Σ , на якому вже знаходяться n надлишкових електронів.

Стрілкою зверху позначаються енергії, що знаходяться в результаті відповідних переходів згідно рис. 1.4.

Для прямої гілки ВАХ з урахуванням контактної різниці потенціалів, користуючись правилом (1.20) і формулою (1.8), маємо:

$$\vec{\varepsilon}^e = \varepsilon_p + U_1, \quad (1.21)$$

$$\Rightarrow U_1 = -e\delta\phi + \tilde{E}_C(n+1/2) - e\left(\eta V + \frac{C_g}{C_\Sigma}V_g\right), \quad \tilde{E}_C = e^2/C_\Sigma, \quad C_1 = C_2 \equiv C, \quad C_g \ll C \Rightarrow C_\Sigma \simeq 2C, \quad \eta = C_1/C_\Sigma.$$

При цьому ще до прикладення поля гранула заряджена зарядом Q_0 . Ми припускаємо, що $n = n(V)$ і $n = 0$ при $V = 0$, тому будемо трактувати n як число, обумовлене прикладеною напругою.

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

$$\overleftarrow{\varepsilon}^e = \varepsilon_p + U_2, \quad (1.22)$$

$$\Rightarrow U_2 = -e\delta\phi + \tilde{E}_C(n - 1/2) - e\left(\eta V + \frac{C_g}{C_\Sigma} V_g\right).$$

Для переходів острівця-колектор:

$$\overrightarrow{\varepsilon}^e = \varepsilon_p + U_3, \quad (1.23)$$

$$\Rightarrow U_3 = -e\delta\phi + \tilde{E}_C(n - 1/2) + e\left((1 - \eta)V + \frac{C_g}{C_\Sigma} V_g\right).$$

Для переходів колектор-острівця:

$$\overleftarrow{\varepsilon}^c = \varepsilon_p + U_4. \quad (1.24)$$

$$\Rightarrow U_4 = -e\delta\phi + \tilde{E}_C(n + 1/2) + e\left((1 - \eta)V + \frac{C_g}{C_\Sigma} V_g\right).$$

Тунелювання окремого електрона через бар'єр із стану $\varepsilon^{e,c}$ на емітері/колекторі в стан ε_p на острівці (і навпаки) є завжди випадковою подією, що протікає з визначеною швидкістю Γ - ймовірністю в одиницю часу.

Уведемо парціальні сумарні потоки електронів при тунелюванні (з електродів) на острівця:

$$\overrightarrow{w}_n^e = 2 \sum_p \Gamma(\overrightarrow{\varepsilon}^e) f(\overrightarrow{\varepsilon}^e - \mu_V^e) [1 - f(\overrightarrow{\varepsilon}^e - \mu_C^e)], \quad (1.25)$$

$$\overleftarrow{w}_n^c = 2 \sum_p \Gamma(\overleftarrow{\varepsilon}^c) f(\overleftarrow{\varepsilon}^c - \mu_V^c) [1 - f(\overleftarrow{\varepsilon}^c - \mu_C^c)] \quad (1.26)$$

із острівця на електроди:

$$\overleftarrow{w}_n^e = 2 \sum_p \Gamma(\overleftarrow{\varepsilon}^e) [1 - f(\overleftarrow{\varepsilon}^e - \mu_V^e)] f(\overleftarrow{\varepsilon}^e - \mu_C^e), \quad (1.27)$$

$$\overrightarrow{w}_n^c = 2 \sum_p \Gamma(\overrightarrow{\varepsilon}^c) [1 - f(\overrightarrow{\varepsilon}^c - \mu_V^c)] f(\overrightarrow{\varepsilon}^c - \mu_C^c), \quad (1.28)$$

де множник 2 обумовлений спіновим виродженням рівнів в електродах. З урахуванням прикладеної напруги спектри (див. (1.21) – (1.41)) автоматично зсуваються в (1.4) і в (1.7): на $-eV$ для колектора і на $-e\eta V$

для гранули; f і $(1 - f)$ - ймовірності того, що стан зайнятий або вільний. Відповідно зсуваються і хімічні потенціали:

$$\mu_V^e \equiv \mu_0^e = -W_0^e, \quad \mu_V^c = \mu_0^c - eV = -W_0^c - eV.$$

$$\overrightarrow{\mu_C^e} = \mu^i + U_1, \quad \overleftarrow{\mu_C^e} = \mu^i + U_2.$$

$$\overrightarrow{\mu_C^c} = \mu^i + U_3, \quad \overleftarrow{\mu_C^c} = \mu^i + U_4.$$

Нагадаємо, що $U_1, U_2, U_3, U_4 \in \text{функціями } n \text{ і } V$.

У першому наближенні теорії збурень (при малих $|V| \ll |\mu^i|$) хімічний потенціал буде визначатися не тільки формальним зсувом глибини ями, але і числом електронів провідності в даному стані ($n_0 + n$, $n_0 = Q_0/e$). Використання хімічних потенціалів справедливо лише в квазірівноважному (метастабільному) стані, тобто в проміжках між актами тунелювання, коли час релаксації гранули набагато менший цих проміжків.

Нагадаємо, що ми розглядаємо металеві системи, в яких спектр електронів є квазінеперервним. Це означає, що підсумовування по індексу можна замінити інтегруванням, помножуючи вираз на густину станів електронів у острівці, тобто

$$2 \sum_p \cdots = \int_{U_0+U_i}^{\infty} d\varepsilon_p \rho \cdots, \quad \rho = 2^{1/2} m^{3/2} \pi^{-2} \hbar^{-3} \sqrt{\varepsilon_p - U_0 - U_i},$$

де ε_p - позначає спектр в порядку зростання енергії. Перехід від підсумовування до інтегрування, враховує, що спектр стартує від дна потенційної ями глибиною $U_0 + U_i$. Нижній індекс p опускаємо. $U_0 + U_i$ - це положення дна потенційної ями, відповідної електронам провідності концентрації $\bar{n}$ в зарядженому металевому острівці під електричною напругою. Для нейтрального острівця у відсутності електричного поля

$$-U_0 = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} - \mu^i, \quad k_F = (3\pi^2 \bar{n})^{1/3},$$

$\bar{n} = (4\pi r_s^3/3)^{-1}$, r_s - середня відстань між електронами у металі (таблична величина).

Покажемо, як тепер проводити розрахунки. Нехтуючи енергетичною залежністю тунельних швидкостей Γ , одержимо (див. рис. 1.6):

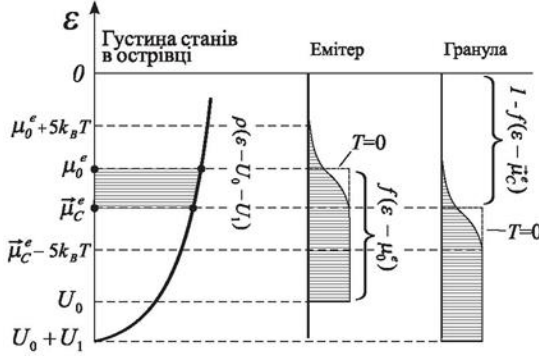


Рисунок 1.6 – Енергетична діаграма, що демонструє визначення потоку $\vec{w}_n^e$.

При $T = 0$ потік є ненульовим лише в діапазоні енергій $\vec{\mu}_C^e < \varepsilon < \mu_0^e$. Внаслідок температурного «розмиття» функцій розподілу цей діапазон розширюється

$$\begin{aligned} \vec{w}_n^e &= \Gamma^e \int_{U_0+U_1}^{\infty} \frac{\rho(\varepsilon - U_0 - U_1)}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu_0^e)}} \left[1 - \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \vec{\mu}_C^e)}} \right] d\varepsilon \simeq \\ &\simeq \frac{2^{1/2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \Gamma^e \int_{\vec{\mu}_C^e - 5k_B T}^{\mu_0^e + 5k_B T} \frac{\sqrt{\varepsilon - U_0 - U_1}}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu_0^e)}} \left[1 - \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \vec{\mu}_C^e)}} \right] d\varepsilon. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Аналогічно

$$\begin{aligned} \overleftarrow{w}_n^e &= \Gamma^e \int_{U_0+U_4}^{\infty} \frac{\rho(\varepsilon - U_0 - U_4)}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu_V^e)}} \left[1 - \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \overleftarrow{\mu}_C^e)}} \right] d\varepsilon \simeq \\ &\simeq \frac{2^{1/2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \Gamma^e \int_{\overleftarrow{\mu}_C^e + 5k_B T}^{\mu_V^e - 5k_B T} \frac{\sqrt{\varepsilon - U_0 - U_4}}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu_V^e)}} \left[1 - \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \overleftarrow{\mu}_C^e)}} \right] d\varepsilon, \end{aligned} \quad (1.30)$$

$$\overleftarrow{w}_n^e \simeq \frac{2^{1/2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \Gamma^e \int_{\mu_0^e - 5k_B T}^{\overleftarrow{\mu}_C^e + 5k_B T} \left[1 - \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu_0^e)}} \right] \frac{\sqrt{\varepsilon - U_0 - U_2}}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \overleftarrow{\mu}_C^e)}} d\varepsilon, \quad (1.31)$$

$$\vec{w}_n^e \simeq \frac{2^{1/2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \Gamma^c \int_{\mu_V^e - 5k_B T}^{\mu_C^e + 5k_B T} \left[1 - \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu_V^e)}} \right] \frac{\sqrt{\varepsilon_p - U_0 - U_3}}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu_C^e)}} d\varepsilon. \quad (1.32)$$

Позначимо повні потоки електронів з обох електродів на острівця і назад на електроди:

$$w_n^{\text{in}} = \vec{w}_n^e + \overleftarrow{w}_n^e, \quad w_n^{\text{out}} = \overleftarrow{w}_n^e + \vec{w}_n^e.$$

Нагадаємо, що на гранулі в початковому стані знаходиться n надлишкових електронів.

Введемо ймовірність P_n перебування n надлишкових електронів на острівці. Вона знаходиться з рішення керуючого рівняння (master equation)

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_n}{\partial t} = & w_{n+1}^{\text{out}} P_{n+1} + w_{n-1}^{\text{in}} P_{n-1} - (w_n^{\text{in}} + w_n^{\text{out}}) P_n \equiv \\ & \frac{1}{-e} \left(\overrightarrow{I}_{n+1}^e + \overleftarrow{I}_{n+1}^e \right) P_{n+1} + \frac{1}{-e} \left(\overleftarrow{I}_{n-1}^e + \overrightarrow{I}_{n-1}^e \right) P_{n-1} - \\ & \frac{1}{-e} \left(\overrightarrow{I}_n^e + \overleftarrow{I}_n^e - \overrightarrow{I}_n^e - \overleftarrow{I}_n^e \right) P_n, \end{aligned} \quad (1.33)$$

де $\overrightarrow{I}^e$ і $\overleftarrow{I}^e$ - струми через обидва тунельні переходи на острівця і $\overleftarrow{I}^e$, $\overrightarrow{I}^e$ - у зворотному напрямку. Зміна P_n визначається приростом і збуванням густини ймовірності. Доданки зі знаком плюс відповідають зростанню ймовірності знайти на острівці n електронів. Знак мінус показує, що позначені переходи зменшують ймовірність знайти n електронів (тому що вони це n або збільшують або зменшують).

Умова стаціонарності $\partial P_n / \partial t = 0$ приводить до рекурентного співвідношення

$$P_{n+1} = P_n \frac{w_n^{\text{in}}}{w_{n+1}^{\text{out}}}. \quad (1.34)$$

Наприклад, припускаючи $n = 0$, ми знаходимо ймовірність P_{+1} , виразивши її через P_0 :

$$P_{+1} = P_0 \frac{w_0^{\text{in}}}{w_{+1}^{\text{out}}}. \quad (1.35)$$

При $n = +1$ ми знаходимо P_{+2} , виразивши через P_{+1} :

$$P_{+2} = P_{+1} \frac{w_{+1}^{\text{in}}}{w_{+2}^{\text{out}}} \quad (1.36)$$

і використовуючи потім (1.35). Аналогічно, припускаючи $n = -1$, знаходимо P_{-1} :

$$P_0 = P_{-1} \frac{w_{-1}^{\text{in}}}{w_0^{\text{out}}} \quad (1.37)$$

і т.д.

Постійний струм, що протікає через квантову гранулу, визначається як

$$I = -e \sum_{n_{\min}}^{n_{\max}} P_n \left(\vec{w}_n^e - \overleftarrow{w}_n^e \right) = -e \sum_{n_{\min}}^{n_{\max}} P_n \left(\vec{w}_n^c - \overleftarrow{w}_n^c \right). \quad (1.38)$$

В розрахунках достатньо обмежитися $n_{\min} = -3$, $n_{\max} = +3$.

Насправді будемо розраховувати приведений струм (безрозмірну величину) $\tilde{I} = I / (e P_0 \Gamma^e)$:

$$\tilde{I} = -\frac{1}{P_0 \Gamma^e} \left[P_0 \left(\vec{w}_0^e - \overleftarrow{w}_0^e \right) + \sum_{n \neq 0} P_n \left(\vec{w}_n^e - \overleftarrow{w}_n^e \right) \right]. \quad (1.39)$$

Відношення Γ^e / Γ^c для ОЕТ дорівнює 1, тому що обидва переходи однакову $C_1 = C_2$, тобто $\eta = 1/2$. Використовуємо значення C_g , взяті з експерименту для кожного варіанта.

Нагадаємо, що вирази в даному розділі записані для прямої гілки напруги на ВАХ.

Оскільки ОЕТ симетрична конструкція, то її пряма і зворотна гілки є дзеркально симетричними відносно $V = 0$. Відповідні вирази в тому ж порядку, що і (1.21) – (1.23), тепер мають вигляд:

$$\overrightarrow{\varepsilon}^e = \varepsilon_p + U_5,$$

$$U_5 = -e\delta\phi + \tilde{E}_C(n + 1/2) - e \left((1 - \eta)V + \frac{C_g}{C_\Sigma} V_g \right), \quad \tilde{E}_C = e^2 / C_\Sigma, \quad C_2 = C_1.$$

$$\overleftarrow{\varepsilon}^e = \varepsilon_p + U_6,$$

$$U_6 = -e\delta\phi + \tilde{E}_C(n - 1/2) - e \left((1 - \eta)V + \frac{C_g}{C_\Sigma} V_g \right).$$

Для переходів острівцець-колектор:

$$\overrightarrow{\varepsilon^c} = \varepsilon_p + U_7, \quad (1.40)$$

$$U_7 = -e\delta\phi + \tilde{E}_C(n - 1/2) + e \left(\eta V + \frac{C_g}{C_\Sigma} V_g \right).$$

Для переходів колектор-острівцець:

$$\overleftarrow{\varepsilon^c} = \varepsilon_p + U_8, \quad (1.41)$$

$$U_8 = -e\delta\phi + \tilde{E}_C(n + 1/2) + e \left(\eta V + \frac{C_g}{C_\Sigma} V_g \right).$$

Використовуючи також

$$\begin{aligned} \mu_V^c &\equiv \mu_0^c - eV, \quad \mu_V^e = \mu_0^e, \\ \overleftarrow{\mu_C^c} &= \mu^i + U_8, \quad \overrightarrow{\mu_C^c} = \mu^i + U_7, \\ \overleftarrow{\mu_C^e} &= \mu^i + U_6, \quad \overrightarrow{\mu_C^e} = \mu^i + U_5, \end{aligned}$$

цю отриману залежність $I(V)$ при $V > 0$ необхідно дзеркально відобразити відносно $V = 0$ на область $V < 0$.

Таблиця 1.1 – Перелік зразків ОЕТ. Експериментальні значення: $\tilde{E}_C$ – одноелектронна зарядова енергія, R_t – опір обох тунельних контактів ОЕТ, C_g – ємність між острівцевим електродом і затвором. (аФ = 10^{-18} Ф)

Серія ОЕТ	Структура	$\tilde{E}_C$ [меВ]	R_t [МОм]	C_g [аФ]
A	Cu/Al/Cu	0.478	4.5	11.0
B	Al/Cu/Al	0.490	5.0	8.0
C	Al/Al/Al	0.471	3.1	8.4
D	Al/Cu/Al	0.368	5.0	16.0
E	Cu/Al/Cu	0.300	12.0	14.0
F	Al/Al/Al	0.409	3.1	16.0
G	Al/Al/Al	0.546	2.0	22.8

Таблиця 1.2 – Експериментальні значення фізичних величин для металів з плоскою поверхнею. W_0 - робота виходу, r_s - середня відстань між електронами в металі, Z - валентність.

Метал	Z	$r_s[\alpha_0]$	W_0 [eV]
Al	3	2,07	4,28
Au	1	3,01	5,10
Cu	2	2,11	4,65

1.7 Результати вимірювань і вихідні дані

Експериментальні дані для транзисторів цієї конструкції узяті з роботи [4] і приведені в табл. 1.1.

1.8 Завдання на курсовий проект

Спочатку оформити титул проекту, одержати завдання, підписати лист завдання у викладача.

Номер варіанта співпадає з номером у списку групи.

Курсовий проект складається з двох частин: Теоретична частина та Практична частина.

Теоретична частина:

Використовуючи ресурси Internet, підготувати реферат на тему “Нанофізика” чи “Нанoeлектроніка” обсягом 15-20 сторінок. Вибрати одне чи два явища, описаних у реферата (теми рефератів див. нижче) і докладно описати їх.

Теми рефератів

Елементи квантової інформатики.

Резонансно-тунельний діод і транзистор.

Молекулярні одноелектронні транзистори.

Квантовий комп’ютер.

Нанoeлектромеханічні системи.

Кремнієві одноелектронні прилади. Одноелектронні прилади на кластерах і в точкових структурах та особливості їх вольт-амперних характеристик.

Квантовий ефект Холла.

Застосування наноматеріалів у польових транзисторах.

Наноантиени. Нанопровода. Наноконтакти.

Мемрістори.

Пояснити формулу (1.2), використовуючи вираз (1.1) і рис. 1.2.

За формулою (1.9) розрахувати надлишковий заряд і число надлишкових електронів на острівці. Для цього скористатися деякими з виразів (1.4)–(1.9). Прокоментувати знак заряду.

За формулами (1.10)–(1.16) докладно вивести умови кулонівської блокади (1.17) і (1.19). На підставі цих нерівностей пояснити рис. 1.5.

Практична частина:

В цій частині необхідно дослідити вольт-амперні характеристики одноелектронного транзистора в залежності від номеру варіанта

Таблиця 1.3 – Номера варіантів завдань для студентів (збігаються з номером у списку групи). Використати дані табл. 1.1, 1.2.

Серія	A	B	C	D	E	F	G
№	1,8,15	2,9,16	3,10,17	4,11,18	5,12,19	6,13,20	7,14

Всі розрахунки слід виконувати в атомній системі одиниць, в якій $\hbar = e = m = 4\pi\epsilon_0 = 1$. При цьому 1 атомна одиниця енергії дорівнює 27,21 еВ.

Вольт-амперні характеристики $\tilde{I}(\tilde{V})$ та їх похідні $d\tilde{I}/d\tilde{V}$ розраховувати в величинах приведеної напруги, $\tilde{V} \equiv V/\tilde{E}_C$. Розрахунки провести в інтервалі напруги $V = -2\tilde{E}_C \dots 0 \dots 2\tilde{E}_C$, з кроком $0,1\tilde{E}_C$.

Значення температури визначити із співвідношень

$$k_B T / \tilde{E}_C = 0,01; 0,05; 0,1,$$

які демонструють наявність чи відсутність кулонівської блокади (якщо $k_B T / \tilde{E}_C \geq 1$ кулонівська блокада зникає).

Обчислити і побудувати вольт-амперні характеристики $\tilde{I}(\tilde{V})$ та їх похідні $d\tilde{I}/d\tilde{V}$ для трьох значень температури.

Обчислити і побудувати залежності $\tilde{I}(\tilde{V})$, $d\tilde{I}/d\tilde{V}$ при трьох значеннях $V_g = -5\tilde{E}_C$; 0 ; $5\tilde{E}_C$ і найменшому значенні температури.

По кожному пункту зробити висновки.

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. *Clark A.M., Miller N.A., Williams A., Ruggiero S.T., Hilton G.C., Vale L.R., Beall J.A., Irwin K.D., Ullom J.N.* - Appl. Phys. Lett., 2005, 86, 173508.
2. *Кузьмин Л. С., Лихарев К. К.* Прямое экспериментальное наблюдение дискретного одноэлектронного туннелирования // Письма в ЖЭТФ, 1987, Т. 45, с.389.
3. *Ohgi T., Fujita D.* Consistent size dependency of core-level binding energy shifts and single-electron tunneling effects in supported gold nanoclusters // Phys. Rev. 2002, V. B66, id.115410.
4. <http://lt.px.tsukuba.ac.jp/users/kitada/>
5. *Погосов В.В.* Введение в физику зарядовых и размерных эффектов. Поверхность, кластеры, низкоразмерные системы - 2006 - Москва: Физматлит, 328 с.
6. *Погосов В.В., Куницький Ю.А., Бабіч А.В., Коротун А.В.* Нанофізика і нанотехнології - 2011 - Навчальний ПОСІБНИК (з грифом МОН), Запоріжжя: ЗНТУ, 380 с.
7. *Pogosov V.V., Vasyutin E.V.* Effects of charging and tunneling in structure based on magic and non-magic metal clusters // Nanotechnology, 2006, V.17, P.3366-3374.
8. *Погосов В.В., Васютин Е.В., Курбацкий В.П., Коротун А.В.* Эффекты одноэлектронного заряжения в туннельной структуре на металлическом кластере // Физика твердого тела, 2006, Т.48, №10, С.1849-1857.
9. *Babich A.V., Pogosov V. V.* Effects of electron levels broadening and electron temperature in tunnel structures based on metal nanoclusters // Surface Science, 2010, V.604, P. 210-216.

2 РОЗРАХУНОК ВИСОТИ БАР'ЄРА ШОТТКІ ДЛЯ МЕТАЛ-ДИЕЛЕКТРИЧНОГО САНДВІЧА МЕТОДОМ ФУНКЦІОНАЛА ГУСТИНИ

2.1 Вступ

Успіхи сучасної мікро- і наноелектроніки, а також функціональної електроніки базуються на фундаментальних дослідженнях фізики поверхні твердого тіла. Різноманітні електронні, атомні і молекулярні процеси, що відбуваються на поверхні твердих тіл, гостро цікавлять спеціалістів в області конструкційних матеріалів, технологів, оптиків, магнітологів, радіофізиків, що мають справу з плівками і шаровими структурами, що мають розвинуті межі поділу фаз.

Настільки ж значимі проблеми поверхні і для хімії, біології, медицини. Поверхневі процеси грають основну роль у явищах адсорбції, електродних процесах, складних міжфазових процесах клітин, пористих органічних і неорганічних речовинах. Такі найважливіші сучасні технологічні процеси, як молекулярна епітаксія, іонне легування, стимульована дифузія, тісно пов'язані з явищами на поверхні твердого тіла.

У зв'язку з цим вивчення електронної структури плоскої поверхні і поверхні малих часток є невід'ємною складовою у підготовці спеціалістів електронної техніки.

Ультрадисперсні середовища. Молекули, що знаходяться у внутрішніх шарах речовини, відчувають у середньому однаковий в усіх напрямках вплив з боку навколишніх молекул, молекули ж приповерхневого шару піддаються неоднаковому впливу з боку внутрішніх шарів речовини і з боку, що граничить із поверхневим шаром середовища. Так, на поверхні поділу рідина -повітря молекули рідини, що знаходяться в поверхневому шарі, відчувають більший вплив з боку сусідніх молекул внутрішніх шарів рідини, ніж із боку молекул газу. Тому властивості поверхневих шарів речовини завжди дещо відрізняються від властивостей об'єму.

Поверхневі властивості впливають і на інші характеристики речовини. Для речовин, поверхня яких порівняно невелика, ці впливи виявляються слабо. Але в міру збільшення поверхні, що відбувається

внаслідок підвищення ступеня дисперсності (ступеня роздробленості) речовини, або збільшення його пористості, вплив поверхневих властивостей починає виявлятися усе сильніше і стає значним для речовин, що мають сильно розвинуту поверхню.

Дослідження ультрадисперсного стану речовини, його властивостей, пов'язано з найважливішими практичними застосуваннями у різноманітних областях науки, таких, як хімія каталізу, матеріалознавство, фізична електроніка, мікроелектроніка, оптика, магнетизм тощо. Не дивно, що окремі аспекти фізики малих часток (багатоатомних комплексів або агрегатів) розглядалися і продовжують обговорюватися на різноманітних конференціях.

У літературі виклад теоретичного й експериментального матеріалу, як правило, ставиться до розгляду властивостей окремої частки. Адже зрозуміло, що ансамбль малих часток у кінцевому рахунку характеризується тими властивостями, що одержує тверде тіло при зменшенні його розмірів. При цьому зміни фізичних властивостей спостерігаються лише при досягненні своїх характерно малих розмірів. І навіть якщо якась властивість ансамблю малих часток має кооперативний (колективний) характер, то і тоді в якості початкового наближення важливо знати, що відбувається з окремо взятою малою часткою твердого тіла. На перший погляд несподіваним є така електронна властивість, як надпровідність. Пояснюється це необхідністю показати, якими змінами супроводжується перехід у надпровідний стан за рахунок деформації фононного спектра металевих часток при зменшенні їхнього розміру. Характерні розміри малості стосовно різноманітних фізичних властивостей розташовуються в основному в інтервалі від декількох ангстрем, коли виявляється квантування електронного енергетичного спектра, до декількох сотень ангстрем для ефектів, обумовлених сумірністю внесків поверхневого й об'ємного компонентів у вільну енергію частки. Використовувані у порошковій металургії частки мають набагато більші розміри, оскільки відомі на сьогоднішній день технологічні прийоми дозволяють одержувати в достатніх для практичних застосувань кількостях частки розмірами, які тільки наближаються до вказаного інтервалу.

Маленькі металеві частинки (кластери), які знаходяться в точковому (квантовому) контакті з підшарком можуть бути використані в одноелектроніці, зокрема, при конструюванні квантових

транзисторів та діодів. Струм у цих приладах переноситися окремими електронами по черзі.

Термін «**мезоскопічний**» вживають для позначення фізичних систем, які мають проміжний розмір між мікроскопічним та макроскопічним. Це звичайно розміри порядку кількох нанометрів і системи з тисячами атомів. Мезоскопічні системи втрачають частину мікроскопічних характеристик і квантових ефектів, але водночас число частинок у них не досить велике для того, щоб коректно працювала статистична фізика, яка успішно описує макроскопічні системи. На мезоскопічному рівні макроскопічні характеристики системи сильно флюктуують. В мезоскопії принциповим є порівняння розміру системи з довжиною збою фази електрона. В системах, розмір яких не перевищує довжину збою фази, є необхідним розгляд інтерференції електронних хвиль, тобто ефекти слабкої локалізації та електрон-електронної взаємодії в мезоскопічній фізиці відіграють винятково важливу роль. Межі макроскопічної області суттєво залежать від температури і балістичного або дифузійного руху електронів. До мезоскопічних відносяться не тільки явища в пристроях з мезоскопічними розмірами, а й явища в макроскопічних пристроях, які визначаються інтерференцією. До мезоскопічних задач відносять знаходження квантових поправок до опору макроскопічних зразків. Комбінація квантового шуму, квантового зворотного впливу резистивного контуру та коливань провідності одноелектронного транзистора охоплює надзвичайно широкий спектр мезоскопічних явищ. Експерименти у вакуумі з використанням стандартного холодильника для розведення кріогенів, прокладає шлях до діапазону субмілікельвіна за допомогою додаткових технологій термалізації та охолодження. Тому вивчення навчальної дисципліни «Вступ до мезоскопічної фізики» дозволить студентові здійснити концептуальний виклад мети, змісту, методів дослідження, які забезпечують отримання максимально об'єктивної, точної, систематизованої інформації про процеси та явища.

2.2 Енергетичні характеристики чистої поверхні

2.2.1 Поверхнева енергія

Поверхнева енергія σ (Surface Energy), кристалічної грані дорівнює роботі (віднесеної до одиниці площі знову сформованої

поверхні), що необхідно затратити, щоб розколоти кристал на дві частини уздовж цієї кристалічної площини. Розглянемо макроскопічний кристал і будемо вважати обидві частини, на які розколотий кристал, однаковими (рис. 2.1).

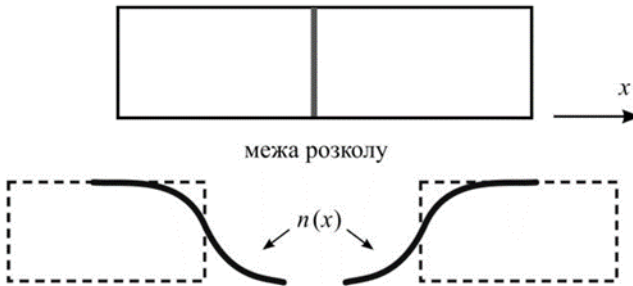


Рисунок 2.1 – Схематичне уявлення енергетичної картини

Після утворення 2-х *нових* поверхонь електронна хмара уздовж межі розколу впливає назовні, а іонний розподіл залишається у вигляді сходинки.

Нехай S - площа знову сформованої грані кожного з осколків, $E[n(x)]$ — повна енергія кожного осколка, а $\bar{E}$ - повна енергія нерозколотого кристалу. Тоді

$$\sigma = \frac{1}{2S} (2E[n(x)] - \bar{E}) > 0 \quad (2.1)$$

2.2.2 Потенціал іонізації, робота виходу

У атомній фізиці вводиться таке поняття як потенціал іонізації IP (Ionization Potential). За аналогією, для малих часток також використовується це поняття. Для напівнескінченних зразків із плоскою поверхнею замість IP використовується робота виходу W (Work Function). Для металевої кульки радіуса R

$$IP(R) = W_0 + \frac{e^2}{2R}. \quad (2.2)$$

Знання розмірної залежності $IP(R)$, де R - радіус частки ($R \propto N^{1/3}$, N - число атомів у кластері), є важливими для розуміння контактних явищ у системі малих часток, їхніх емісійних властивостей. Для металевих часток розміром до $10 \text{ \AA}$ при кімнатній температурі така

залежність з'являється через квантові розмірні ефекти, оскільки при цьому збільшується енергія Фермі (енергія найвищого заповненого рівня щодо дна потенційної ями). Дно потенційної ями, якою «апроксимується» частка, також залежить від її розміру. Звідси випливає, що ІР повинний би знижуватися зі зменшенням розміру часток, якби глибина потенційної ями залишалася фіксованою (яка насамперед залежить від розміру), що, узагалі говорячи, не вірно. Квантування електронних станів зручно простежити з розрахунків електронної структури, що для дуже малих часток можуть бути проведені методами квантової хімії. Такий підхід виявляє тенденцію до збільшення відстані між рівнем вакууму (нуль для відліку енергії) і найвищим заповненим рівнем (рівнем Фермі) при зменшенні числа атомів у частці. Так, ІР 55- атомної частки срібла складає 6,1 еВ проти 4,5 еВ у масивному стані. Аналогічно і для часток натрію.

Більш того, обчислення, виконані, наприклад, для берилію, показують, що ріст ІР із зменшенням розміру часток не є монотонним, ІР робить загасаючі осциляції з амплітудою для часток берилію до 20 % і періодом порядку міжатомної відстані. У таких розрахунках відстані між атомами перших декількох координаційних сфер не можна вже ототожнювати з відомими для масивного кристала. Крім того, в основному виміри роботи виходу носять інтегральний характер, тому що проводяться для великої кількості часток, що мають розкид по розмірах, тому може мати сенс усереднити осциляції по міжатомній відстані.

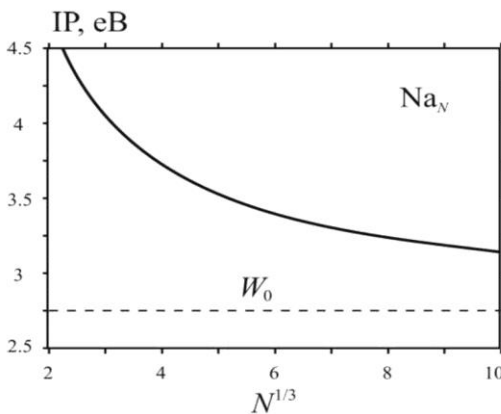


Рисунок 2.2 – Розмірна залежність потенціалу іонізації

Внаслідок того, що електронна густина $n(x)$ не обривається на геометричній межі металу (див. рис. 2.1), а виступає назовні, кінетична енергія електронів зменшується (тому що ефективний об'єм, у якому знаходяться електрони збільшується). Розмиття електронної густини обмежено відповідним збільшенням потенційної енергії. У результаті утворюється подвійний заряджений прошарок атомних розмірів. Створений ним електростатичний бар'єр можна записати (далі у курсовому проєкті використовується атомна система одиниць Хартрі, $e = m = \hbar = 1$, див. Додаток)

$$D = \varphi(+\infty) - \varphi(-\infty) = 4\pi \int_{-\infty}^{+\infty} [n(x) - n_+(x)] x dx > 0, \quad (2.3)$$

де $\varphi(x)$ – електростатичний потенціал.

Цей кулонівський бар'єр, локалізований у мікроскопічному околі межі металу, по суті є поверхневою компонентою роботи виходу і не є єдиною перешкодою на шляху електрона з металу (див. рис.2.3).

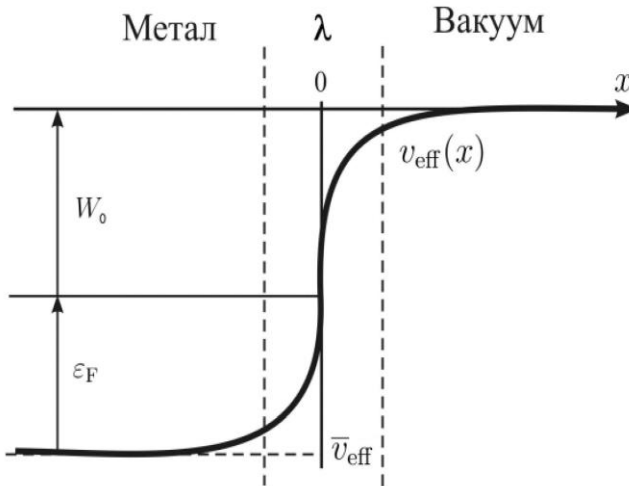


Рисунок 2.3 – Енергетична діаграма для електронів.
Зліва знаходиться метал, справа – вакуум

Усередині металу, енергія кожного електрона є зниженою на величину $\delta E_{xc}(n)/\delta n < 0$ за рахунок утворення обмінно-кореляційної дірки – “порожнини” (*exchange-correlation hole*) навколо нього (утворення порожнини зумовлено не класичним кулонівським

відштовхуванням електронів друг від друга, а ефективним квантовим відштовхуванням за рахунок принципу Паулі). Таким чином, якщо визначити роботу виходу W як мінімальну, необхідну для видалення електрона з об'єму металу на нескінченність, то з урахуванням поверхневого й об'ємного компонентів її можна записати

$$W_0 = D - \varepsilon_F - \frac{\delta E_{xc}(n)}{\delta n}. \quad (2.4)$$

$$\varphi_{\text{eff}}(x) = \varphi(x) + \frac{\delta E_{xc}[n(x)]}{\delta n(x)}. \quad (2.5)$$

Усі електрони при $T = 0$ знаходяться на рівнях енергії ε в інтервалі $\varepsilon \in (\bar{\varphi}_{\text{eff}}, \bar{\varphi}_{\text{eff}} + \varepsilon_F)$, $\bar{\varphi}_{\text{eff}}$ - енергія дна зони провідності електронів у металі (рис. 2.4),

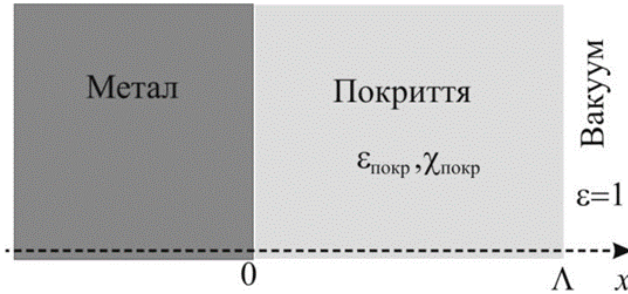


Рисунок 2.4 – Металева поверхня з покриттям

У глибині металу, де градієнт від $U_{\text{eff}}(x)$ дорівнює 0, електричне поле відсутнє.

Саме таку кінетичну енергію (рівну по величині W_0) варто передати фермієвському електрону, щоб він переборює сумарний потенціальний бар'єр $\bar{\varphi}_{\text{eff}} - \varepsilon_F = W_0$, що утримує його в металі. До недоліків цієї моделі варто віднести неможливість пояснення анізотропії роботи виходу монокристалів [1]. Далі нижній індекс у W_0 опускаємо.

2.3 Основні співвідношення методу функціонала густини (метод Рітца) для розрахунку характеристик металів вкритих шаром ізолятора

2.3.1 Поверхнева енергія

Використовується наближення суцільного середовища: структура покриття задається $\epsilon_{\text{покр}}$ і $\chi_{\text{покр}}$ - діелектричною константою і глибиною залягання зони провідності електронів у покритті, відповідно. Нагадаємо, що використовується атомна система одиниць ($e = \hbar = m = 1$).

Звернемося до розгляду моделі однорідного фону для поверхні металу (модель нестабільного желе, Jellium model). Це поверхневий аналог моделі, що широко використовується для вивчення об'ємних властивостей простих металів, зона провідності яких формується з s- і p- атомних рівнів.

Розглянемо випадок нескінченного кристала у припущенні, що заряд ґратки іонів рівномірно розмазаний по усьому об'єму і утворює однорідний позитивний фон із густиною $\bar{n}$, що різко обривається на координатній площині ZY. Інакше кажучи, візьмемо густину зарядів у виді:

$$\rho(x) = \bar{n}\Theta(-x) = \bar{n} \begin{cases} 1, x \leq 0 \\ 0, x > 0 \end{cases}, \quad (2.6)$$

де $\Theta(-x)$ - одинична сходянка функція Хевісайда.

Густина $\bar{n}$ - це середня густина позитивного заряду іонної ґратки; зручною одиницею її виміру є радіус r_s , обумовлений формулою:

$$\bar{n} = \frac{1}{\frac{4}{3}\pi r_s^3} \quad (2.7)$$

(в простих металах r змінюється від 2 до 6 a_0 , a_0 - борівський радіус).

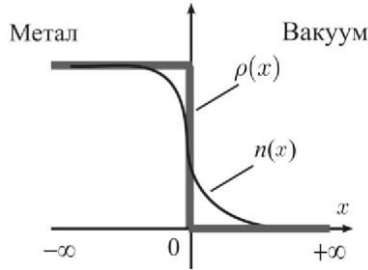


Рисунок 2.5 – Розподіл концентрації зарядів на поверхні металу

Для однорідного металу, повна неелектростатична енергія:

$$G = \bar{g}V, \quad (2.8)$$

де V - об'єм металу, $\bar{g}$ - об'ємна густина неелектростатичної енергії однорідного електронного газу, що виглядає як:

$$\bar{g} \equiv g(\bar{n}). \quad (2.9)$$

У наближенні локальної густини повна енергія металу із урахуванням поверхні є

$$E = G + E_q = S \int_{-\infty}^{\infty} dx g(n(x)) + E_q, \quad (2.10)$$

де E_q - електростатична енергія взаємодії усіх електронів і іонів.

У квантово-статистичному варіанті методу функціоналу густини об'ємна густина енергії в моделі желе (J) складається з наступних складових

$$g_J(n) = g_t(n) + g_{ex}(n) + g_{cor}(n) + g_g(n), \quad (2.11)$$

де $g_t(n)$ - об'ємна густина кінетичної енергії електронів

$$g_t(n) = n \frac{3}{10} k_F^2, \quad (2.12)$$

де $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$ - імпульс Фермі, $\epsilon_F = k_F^2/2$ (в одиницях Хартрі); g_{ex} - об'ємна густина обмінної енергії електронів

$$g_{ex} = -n \frac{3}{4\pi} k_F; \quad (2.13)$$

$g_{cor}(n)$ - об'ємна густина кореляційної енергії електронів

$$g_{cor} = -n(0.0474 + 0.0155 \ln k_F); \quad (2.14)$$

$g_g(n)$ - градієнтні поправки Вейцзеккера-Кіржніца-Ходжа для кінетичної енергії електронів

$$g_g = g_{g1} + g_{g2} + g_{g3} + g_{g4} = \frac{|\nabla n|^2}{72n} + \frac{n^{1/3}}{540(3\pi^2)^{2/3}} \left[\left(\frac{\nabla^2 n}{n} \right)^2 - \frac{9}{8} \frac{\nabla^2 n}{n} \left| \frac{\nabla n}{n} \right|^2 + \frac{1}{3} \left| \frac{\nabla n}{n} \right|^4 \right]; \quad (2.15)$$

$$E_q \equiv S\sigma_q = S \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi(x) [n(x) - \rho(x)], \quad (2.16)$$

де $\varphi(x)$ - електростатичний потенціал, який визначається рівнянням Пуассона. Тоді поверхнева енергія складається з тих же компонент:

$$\sigma_q = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi(x) [n(x) - \rho(x)], \quad (2.17)$$

$$\sigma_t = \int_{-\infty}^0 dx \left[g_t(n(x) - g_t(\bar{n})) \right] + \int_0^{\infty} dx g_t(n(x)), \quad (2.18)$$

$$\sigma_{ex} = \int_{-\infty}^0 dx \left[g_{ex}(n(x) - g_{ex}(\bar{n})) \right] + \int_0^{\infty} dx g_{ex}(n(x)), \quad (2.19)$$

$$\sigma_{cor} = \int_{-\infty}^0 dx \left[g_{cor}(n(x) - g_{cor}(\bar{n})) \right] + \int_0^{\infty} dx g_{cor}(n(x)). \quad (2.20)$$

$$\sigma_g = \sigma_{g1} + \sigma_{g2} + \sigma_{g3} + \sigma_{g4} = \frac{1}{72} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{|\nabla n|^2}{n} + \dots \quad (2.21)$$

Для знаходження оптимального виду функції $n(x)$ застосуємо варіаційний метод Рітца. Він полягає в завданні $n(x)$ параметричним рівнянням із варіаційним параметром λ , а потім із наступною мінімізацією поверхневої енергії по цьому параметру. Виберемо електронний профіль у вигляді

$$n(x) = \begin{cases} \bar{n} \left(1 - \frac{1}{2} e^{x/\lambda} \right), & x \leq 0 \\ \bar{n} \frac{1}{2} e^{-x/\lambda}, & x > 0 \end{cases}, \quad (2.22)$$

де λ приблизно дорівнює ширині поверхневого шару (рис. 2.5).

Проаналізуємо (3.22): при $x \rightarrow -\infty$, $e^{x/\lambda} \rightarrow 0$, $n(x) \rightarrow \bar{n}$; при $x \rightarrow +\infty$, $e^{-x/\lambda} \rightarrow 0$, $n(x) \rightarrow 0$. Це збігається з зображенням на рис. 2.5.

Тоді, для електростатичного потенціалу маємо

$$\varphi(x) = \begin{cases} -2\pi\bar{n}\lambda^2 \left(1 + \frac{1}{\varepsilon_{\text{покр}}} - e^{x/\lambda} \right), & x \leq 0 \\ -2\pi\bar{n}\lambda^2 \left(\frac{1}{\varepsilon_{\text{покр}}} e^{-x/\lambda} \right), & x > 0 \end{cases}, \quad (2.23)$$

Підставляючи (3.22) і (3.23) в (3.17) - (3.21), одержуємо

$$\sigma_J = \sigma_q + \sigma_t + \sigma_g + \sigma_{ex} + \sigma_{cor}, \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned} \sigma_q &= C_q \left(1 + \frac{1}{\varepsilon_{\text{покр}}} \right) \bar{n}^2 \lambda^3, \quad \sigma_t = C_t \bar{n}^{5/3} \lambda, \quad \sigma_{ex} = C_{ex} \bar{n}^{4/3} \lambda, \quad \sigma_{cor} = C_{cor} \bar{n} \lambda, \\ \sigma_g &= C_{g1} \frac{\bar{n}}{\lambda} + (C_{g2} + C_{g3} + C_{g4}) \frac{\bar{n}^{1/3}}{\lambda^3}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

У моделі стабільного желе (Stabilized Jellium Model) вираз для поверхневої енергії має вигляд

$$\sigma_{SJ} = \sigma_J + \langle \delta V \rangle_{\text{ws}} \int_{-\infty}^0 dx [n(x) - \bar{n}], \quad (2.26)$$

$$\langle \delta V \rangle_{\text{ws}} = -\bar{n} \frac{d\varepsilon_J(\bar{n})}{d\bar{n}}, \quad (2.27)$$

де $\varepsilon_J = g_J / \bar{n}$ – енергія, яка приходить на 1 електрон. Стабілізаційний потенціал $\langle \delta V \rangle_{\text{ws}}$ враховує дискретність іонів та електрон-іонну взаємодію у елементарній комірниці Вігнера-Зейца (Wigner-Seitz) в псевдопотенціальному наближенні. Тоді

$$\sigma_{SJ} = \sigma_J + \bar{n} \lambda C_{\text{ws}} \langle \delta V \rangle_{\text{ws}}. \quad (2.28)$$

В результаті інтегрування одержано (табл. 2.1) значення для коефіцієнтів C в (2.24) - (2.28).

Таблиця 2.1 – Значення для коефіцієнтів C

C_q	C_t	C_{ex}	$C_{cor} \cdot 10^3$	$C_{g1} \cdot 10^3$	$C_{g2} \cdot 10^4$	$C_{g3} \cdot 10^4$	$C_{g4} \cdot 10^4$	C_{ws}
0.785	-1.842	0,2502	6,589	9,627	5.115	-4.832	1.611	-1/2

Варіаційний параметр λ знаходиться з мінімуму поверхневої енергії. При оптимальному розподілі густини $n(x)$ значення σ менше, ніж при будь-якому іншому розподілі густини електронів.

2.3.2 Робота виходу

Якщо визначити роботу виходу W як мінімальну, необхідну для видалення електрона з об'єму металу на нескінченність у ізолятор, то з урахуванням поверхневого й об'ємного компонентів її можна записати в моделі желе:

$$W_J(\epsilon) = D(\epsilon) - \epsilon_F - \frac{\delta E_{xc}(n)}{\delta n} = -\bar{\phi}(\epsilon) - \frac{d\bar{g}}{d\bar{n}}, \quad (2.29)$$

де $\bar{\phi} = -2\pi\bar{n}\lambda^2(1 + \epsilon_{\text{покр}}^{-1})$. У моделі стабільного желе:

$$W_{SJ}(\epsilon) = W_J(\epsilon) - \langle \delta V \rangle_{WS}. \quad (2.30)$$

2.4 Бар'єр Шотткі метал-діелектричного сандвіча

Висота бар'єру Шотткі Φ контакту метал-ізолятор оцінюється на основі правила Шотткі-Мотта з характеристик ізолюваних один від одного металу і ізолятора

$$\Phi \approx W - \chi, \quad (2.31)$$

де W і $(-\chi)$ - робота виходу електронів з металу в вакуум і глибина залягання зони провідності електронів в ізоляторі до контакту, відповідно. При малих зазорах металу і ізолятора хвіст просторового розподілу електронів металу знаходиться під впливом поляризації ізолятора. Для уточнення (2.31) можна ввести залежність $W(\epsilon)$, де ϵ - діелектрична константа ізолятора (рис. 2.4). Тоді

$$\Phi = W(\epsilon) - \chi. \quad (2.32)$$

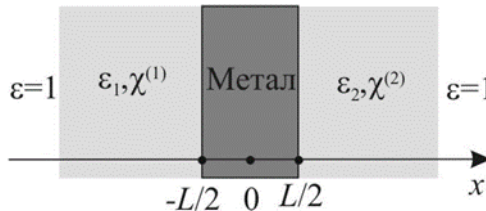


Рисунок 2.6 – Геометрична схема метал-діелектричного сандвіча

Розглянемо структуру: металева плівка товщиною L у діелектричному оточенні, метал-діелектричний сандвіч (рис. 2.6).

Позначимо такий сандвіч на рис. 3.6 символічно так

$$\{\epsilon_1, \chi_1 | \text{Метал} | \epsilon_2, \chi_2\}. \quad (2.33)$$

Виберемо електронний розподіл у вигляді

$$n(x) = \bar{n} \begin{cases} \frac{1}{2} e^{(x+L/2)/\lambda}, & x < -L/2 \\ 1 - \frac{1}{2} e^{-(x+L/2)/\lambda}, & -L/2 \leq x \leq 0 \\ 1 - \frac{1}{2} e^{-(x-L/2)/\lambda}, & 0 \leq x \leq L/2 \\ \frac{1}{2} e^{-(x-L/2)/\lambda}, & x > L/2 \end{cases}, \quad (2.34)$$

де λ приблизно дорівнює ширині поверхневих шарів зліва і праву. Тоді, для електростатичного потенціалу маємо

$$\varphi(x) = -2\pi\bar{n}\lambda^2 \begin{cases} \frac{1}{\langle \epsilon \rangle} e^{(x+L/2)/\lambda}, & x < -L/2 \\ 1 + \frac{1}{\langle \epsilon \rangle} - e^{-(x+L/2)/\lambda}, & -L/2 \leq x \leq 0 \\ 1 + \frac{1}{\langle \epsilon \rangle} - e^{-(x-L/2)/\lambda}, & 0 \leq x \leq L/2 \\ \frac{1}{\langle \epsilon \rangle} e^{-(x-L/2)/\lambda}, & x > L/2 \end{cases}, \quad (2.35)$$

де

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2}. \quad (2.36)$$

Послідовність дій для розрахунку роботи виходу електронів сандвіча:

- якщо використовується тільки модель желе, то вибираємо

$$\sigma_J = C_q \left(1 + \frac{1}{\langle \varepsilon \rangle} \right) \bar{n}^2 \lambda^3 + C_f \bar{n}^{5/3} \lambda + C_{ex} \bar{n}^{4/3} \lambda + C_{cor} \bar{n} \lambda + C_{g1} \frac{\bar{n}}{\lambda} + \left(C_{g2} + C_{g3} + C_{g4} \right) \frac{\bar{n}^{1/3}}{\lambda^3}. \quad (2.37)$$

Далі з умови $d\sigma_J/d\lambda = 0$ знаходимо λ^* , яке відповідає мінімуму $\sigma_J(\lambda^*) = \sigma_J^*$. Потім це значення λ^* підставляємо у формулу

$$W_J(\langle \varepsilon \rangle) = 2\pi \bar{n} (\lambda^*)^2 \left(1 + \langle \varepsilon \rangle_{\text{покр}}^{-1} \right) - \frac{d\bar{g}}{d\bar{n}}, \quad (2.38)$$

а потім у

$$\sigma_{SJ} = \sigma_J + \bar{n} \lambda C_{ws} \langle \delta V \rangle_{ws}, \quad (2.39)$$

• якщо використовується модель стабільного желе, то вибираємо

$$\Phi_J = W_J(\langle \varepsilon \rangle) - \chi. \quad (2.40)$$

де використовуємо (2.37) для σ_J . Далі з умови $d\sigma_{SJ}/d\lambda = 0$ знаходимо λ^{**} , яке відповідає мінімуму $\sigma_{SJ}(\lambda^{**}) = \sigma_{SJ}^{**}$. Потім це значення λ^{**} підставляємо у формулу

$$W_{SJ}(\langle \varepsilon \rangle) = 2\pi \bar{n} (\lambda^{**})^2 \left(1 + \langle \varepsilon \rangle^{-1} \right) - \frac{d\bar{g}}{d\bar{n}}, \quad (2.41)$$

а потім у

$$\Phi_{SJ} = W_{SJ}(\langle \varepsilon \rangle) - \chi. \quad (2.42)$$

2.5 Завдання до курсового проекту

Спочатку оформити титульний лист проекту і лист завдання. Курсовий проект складається з теоретичної та практичної частин.

Теоретична частина:

- для кожного варіанту підготувати реферат на 15-20 с;
- теми рефератів наведено у табл. 2.1.

Практична частин:

- по варіантам (табл. 2.2) перерахувати таблицю 1.1, розібравшись з програмою розрахунку, яка додається.

Таблиця 2.2 – Теми рефератів за варіантами

№ варіанта	Теми рефератів
1, 11	Елементи квантової інформатики
2, 12	Резонансно-тунельний діод і транзистор
3, 13	Молекулярні одноелектронні транзистори
4, 14	Квантовий комп'ютер
5, 15	Нанoeлектромеханічні системи
6, 16	Кремнієві одноелектронні прилади. Одноелектронні прилади на кластерах і в точкових структурах та особливості їх вольт-амперних характеристик
7, 17	Квантовий ефект Холла
8, 18	Застосування наноматеріалів у польових транзисторах
9, 19	Наноантиени. Нанопровода. Наноконтакти
10, 20	Мемрістори

Таблиця 2.3 – Вихідні дані за варіантами

№ варіанта	Метал	$r_s, \text{\AA}$
1, 11	Cs	5,63
2, 12	Na	3,99
3, 13	Al	2,07
4, 14	Cu	2,11
5, 15	Ni	1,81
6, 16	Au	2,09
7, 17	Ti	1,92
8, 18	Ca	3,27
9, 19	Mg	2,65

10, 20	Ni	1,81
--------	----	------

Розрахувати поверхневу енергію, роботу виходу, бар'єр Шотткі для металу, вкритого діелектриком з константою $\varepsilon = 1, 2, 3, 5, 8, 10$ в моделях желе [по формулах (2.24), (2.25), (2.29), (2.32)] і стабільного желе ([по формулах (2.26) - (2.28), (2.30), (2.32)]). Заповнити таблицю 2.3 (в атомних одиницях)

Таблиця 2.4 – Таблиця для запису розрахунків

$\varepsilon_{\text{покр}}$	1	2	3	5	8	10
λ^*						
σ_J^*						
W_J^*						
Φ_J^*						
λ^{**}						
σ_{SJ}^{**}						
W_{SJ}^{**}						
Φ_{SJ}^{**}						

Для $\varepsilon = 1$ (вакуум) порівняти значення σ і W у системі СІ з експериментальними величинами взятими з Інтернету.

Прокоментувати ці розрахунки і зробити висновки.

Порівняти побудувавши на одному рисунку у інтервалі $x \in (-2, +2)$ приведений електронний профіль $\tilde{n}(x) \equiv n(x)/\bar{n}$ (2.22) при λ^* і λ^{**} для фіксованого значення $\varepsilon = 1^4$.

Зробити теж саме для фіксованого значення λ^* , але при $\varepsilon = 1$ і $\varepsilon = 3$.

Прокоментувати ці рисунки і зробити висновки.

Використовуючи дані табл. 2.4 розрахувати і заповнити свою строку таблиці для *сандвіча* по варіантам (табл. 2.5)

⁴ На одному рисунку буде дві залежності. Якщо різниці між залежностями не буде видно, розміри рисунків збільшити до сторінки.

Таблиця 2.5 – Дані для розрахунків

	Вак. I	Ne	Ar	Kr	Xe	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Si	Ge
ε	1	1.20	1.50	1.65	1.90	4	9	13	16
χ , eV	0	0.10	0.20	0.45	0.68	1.1	1.35	4.05	4

Таблиця 2.6 – Таблиця для запису розрахунків

№ вар.	Метал	Сандвіч	$\langle \varepsilon \rangle$	λ^{**}	σ_{SJ}^{**}	$\mathcal{W}_{SJ}^{**}$	Φ_{SJ}^{**}
1, 11	Cs	{Ne Метал Ge}					
2, 12	Na	{Al ₂ O ₃ Метал Вакуум}					
3, 13	Al	{Вакуум Метал Si}					
4, 14	Cu	{Al ₂ O ₃ Метал SiO}					
5, 15	Ni	{SiO ₂ Метал Ar}					
6, 16	Au	{SiO ₂ Метал Xe}					
7, 17	Ti	{Si Метал Ge}					
8, 18	Ca	{Ne Метал Al ₂ O ₃ }					
9, 19	Mg	{Si Метал SiO}					
10, 20	Ni	{Al ₂ O ₃ Метал Kr}					

Побудувати графік приведенного електронного профілю (2.32)

$\tilde{n}(x) \equiv n(x)/\bar{n}$ для $L = 4 \alpha_0$ і $x \in [-(2 + 2\lambda^{**}), (2 + 2\lambda^{**})]$ при λ^{**} .
 α_0 - борівський радіус, у атомних одиницях $\alpha_0 = 1$.

Орієнтуючись по рис. 2.6, вибрати достовірне значення Φ_{SJ}^{**} для таблиці. Чи вправо, чи вліво від металевої плівки будуть переважно виходити електрони? З якого боку висота бар'єру Шотткі більше, з якого менше?

2.6 Питання, які виносяться на захист проекту

Огляд енергетичних властивостей у напрямку атом-кластер-конденсоване середовище. Рамки дії методів фізики твердого тіла та рідини, квантової хімії. Метод Хартрі-Фока.

Використання методу функціоналу густини для опису неоднорідного електронного газу поблизу металевої поверхні. Теорема Хоенберга-Кона-Мерміна.

Електронний газ майже постійної густини. Електронний газ з густиною, яка повільно змінюється. Метод Кона-Шема. Визначення питомої поверхневої енергії та роботи виходу електронів.

Експерименти де Хіра. Розмірна залежність потенціалу іонізації заряджених металевих кластерів. Функціональний розклад енергії кластера по варіаціям електронної густини. Розмірні залежності хімічного потенціалу електронів, енергії когезії. Явище кулонівського вибуху заряджених кластерів. Критичний заряд кластерів.

Енергія зв'язку електронів і позитронів в діелектричних кластерах. Експеримент Хаберланда. Вплив самостискання (під дією поверхневої напруги) на критичні розміри кластерів. Енергія зв'язку позитронів в вакансіях металу.

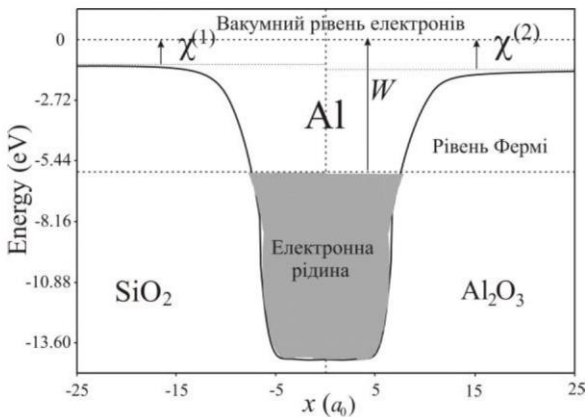


Рисунок 2.7 – Енергетична діаграма сандвіча з роботи [3]. Енергія електронів відраховується від їхнього вакуумного рівня, де потенційна енергія дорівнює нулю

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. В.В. Погосов, К вопросу о влиянии неоднородного диэлектрического покрытия на характеристики металлической поверхности, Физика твердого тела.- 2022.- Т. 64.- № 1.- С. 125133.
2. В.В. Погосов, О.М. Штепа. Метод. вказ. до курс. проекту з дисц.
«Фізичні основи теорії ультрадисперсних середовищ і наносистем» - ЗНТУ, 2001. - 25с.
3. Погосов, В.В. Влияние сил изображения на характеристики металл-диэлектрических сандвичей [Текст]/В.В.Погосов, П.В. Вакула, А.В.Бабич // Физика твердого тела.- 2013.- Т. 55.- № 10.- С. 2004-2007.
4. Погосов, В.В. Введение в физику зарядовых и размерных эффектов. Поверхность, кластеры, низкоразмерные системы [Текст] / В. В. Погосов. - М.: Физматлит, 2006. - 328 с.
5. Шпак, А. П. Введение в физику ультрадисперсных сред [Текст] / А. П. Шпак, В. В. Погосов, Ю. А. Куницкий. - К: Академперіодика, 2006. - 424 с.
6. Погосов, В. В. Нанофізика і нанотехнології [Текст] / В. В. Погосов, Ю. А. Куницький, А. В. Бабіч, А. В. Коротун, А. П. Шпак. - Запоріжжя: ЗНТУ, 2011. - 384 с.
7. Петров, Ю. И. Кластеры и малые частицы [Текст] / Ю. И. Петров. - М.: Наука, 1986. - 368 с.
8. Непийко, С. А. Физические свойства малых металлических частиц [Текст] / С. А. Непийко. - К.: Наукова думка, 1985. - 248 с.
9. Теория неоднородного электронного газа / ред. Лунквист С., Марч Н.М., М.: Мир. 1987.
10. Зенгуил, Э. Физика поверхности [Текст] / Э. Зенгуил. - М.: Мир, 1990. - 536 с.
11. Модинос, А. Авто-, термо- и вторично-электронная эмиссионная спектроскопия [Текст] / А. Модинос. - М.: Наука, 1990. - 320 с.
12. Леонтович, М. А. Введение в термодинамику. Статистическая физика [Текст] / М. А. Леонтович. - М.: Наука, 1983. - 416 с.

З КУЛОНІВСЬКА НЕСТІЙКІСТЬ МЕТАЛЕВИХ КЛАСТЕРІВ

3.1 Вступ

На сьогоднішній день фізика кластерів є одним з перспективних напрямків сучасної фізики. Під терміном “кластер” розуміють атомну агрегацію, яка містить від декількох одиниць до декількох десятків і сотень тисяч атомів. Кластери часто називають “ новою фазою речовини”, оскільки завдяки дискретній структурі енергетичних рівнів і великому значенню відношення поверхня/об’єм, вони виявляють нові властивості, відмінні як від властивостей окремих атомів, з яких вони складаються, так і від властивостей масивної речовини. Фізичні властивості кластерів залежать від типу і кількості складових атомів. Зменшення інтенсивності розмірних залежностей зі збільшенням кількості атомів у кластері свідчить про перехід матеріалу з кластерного стану в масивний. Розуміння закономірностей цих залежностей дозволяє не лише отримувати фундаментальні знання, але й використовувати ці знання в прикладних цілях.

Серед кластерів простих речовин особливе місце займають кластери металів, що пояснюється особливостями їх електронної структури і відносною простотою отримання. При цьому дослідження їх електронних і оптичних властивостей, процесів утворення, взаємодії і розпаду супроводжується застосуванням до них досить наочних теоретичних моделей і вже існуючих методів розрахунків. В металевих кластерах з декількох атомів може реалізовуватися як ковалентний, так і металевий зв’язок. Металеві кластери є важливим прикладом кінцевої Фермі-системи і за своїми властивостями багато в чому аналогічні атомним ядрам.

Металеві кластери мають перспективи використання в якості ключового елемента в приладах нано- і оптоелектроніки, масиви розмірно-селективних кластерів представляють інтерес для біотехнологій, гетерогенного каталізу. З точки зору практичного використання цікавими також є кластерні пучки та їх застосування в процесах напilenня тонких плівок, обробки поверхонь, отримання нових матеріалів, зокрема, композитів з упродовженою кластерною фазою.

3.2 Методи отримання кластерних пучків

За умов термодинамічної рівноваги газ або пара завжди містить певну кількість кластерів. В основному, це кластери малого розміру, переважно димери. Частка кластерів більшого розміру експоненційно зменшується зі зростанням розміру кластера, якщо енергія зв'язку в кластері є функцією його розміру. На сьогодні застосовують різні методи отримання кластерних пучків, класифікація яких має умовний характер, оскільки доволі часто використовують їх комбінацію.

Агрегація газу. Суть методу агрегації газу полягає в тому, що твердий або рідкий матеріал випаровується в середовище, яке представляє собою холодний газ. Речовина випаровується або в спеціальних печах, або в дуговому розряді, використовують також імпульсні розряди. Атоми або молекули випаровуваної речовини охолоджуються за рахунок зіткнень з частинками холодного газу, внаслідок чого випаровувані частинки конденсуються і утворюють кластери. Методом агрегації газу отримують кластери великого розміру ($N > 10000$, N - число атомів, з яких складається кластер).

Кластер металу позначають як Me_N ("Me" - від слова "Metal").

Ерозія поверхні. У цьому методі застосовується видалення атомів або молекул з поверхні твердого тіла або рідини за рахунок зіткнення з поверхнею важких іонів, впливу інтенсивного лазерного випромінювання, імпульсного дугового розряду або електричного поля високої напруги.

Іонне розпилення. В основі методу розпилення лежать процеси, які відбуваються при зіткненні важких високоенергетичних іонів з твердою мішенню. В якості мішені використовується твердий (заморожений) газ або рідина. Зіткнення високоенергетичного іона з поверхнею викликає розпилення мішені. Потік розпиленої речовини разом з атомами і молекулами містить деяку частину нейтральних або іонізованих кластерів. Методом розпилення переважно отримують кластери невеликого розміру, які мають досить широкий розкид за енергією (приблизно до 10 eV).

Імпульсні дугові розряди. У цьому методі для випаровування частинок з поверхні електроду використовують імпульсний дуговий розряд. Кластери, отримані цим методом, переважно іонізовані. В комбінації з методом агрегації газу отримують інтенсивні пучки кластерів.

Агрегація кластерів. Метод полягає в тому, що кластери інертних газів конвертуються в кластери металів внаслідок захоплення атомів металу великими кластерами інертних газів. Процес захоплення атомів або молекул великими кластерами інертних газів також успішно використовують для отримання змішаних кластерів.

Отримання кластерних пучків в соплових джерелах. На сьогодні однорідна конденсація газу при розширенні в процесі витоку сопла є одним з найбільш поширених методів отримання кластерів. Він дає можливість отримати досить щільні пучки кластерів невеликим розкидом за швидкостями. Газ спочатку знаходиться над соплом в рівноважному стані. Коли через отвір у соплі цей газ витікає у вакуумну камеру, він розширюється, прискорюється й адіабатично охолоджується. Коли за рахунок охолодження газ стає пересиченим, починається утворення кластерів. В результаті у потоці речовини утворюється суміш кластерів і газу.

Для отримання заряджених кластерів надзвуковий потік газу, який містить нейтральні кластери різного розміру, опромінюється потоком електронів або ультрафіолетовим випроміненням, яке викликає фотодисоціацію нейтральних кластерів. Кластери різного розміру і заряду, які утворюються при цьому, детектуються за допомогою мас-спектрометра.

Лазерний метод отримання металевих кластерів. Цей метод використовують для отримання кластерів металів, напівпровідникових матеріалів, фулеренів, а також кластерних і атомних пучків тугоплавких елементів.

Існує декілька варіантів імпульсних лазерних джерел, але всі вони базуються на лазерному випаровуванні матеріалу, з якого потім формуються атомні або кластерні пучки. На рис. 3.1 наведено поперечний переріз імпульсного джерела для отримання кластерних пучків.

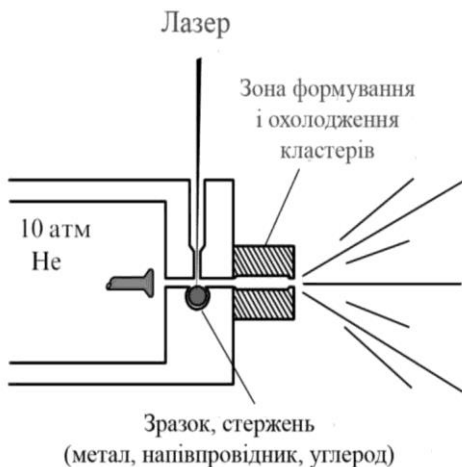


Рисунок 3.1 – Імпульсне джерело для отримання кластерних пучків металів

3.3 Методи дослідження кластерів

Всі вище розглянуті методи дозволяють отримувати пучки кластерів різного розміру, що пов'язано з суто статистичним характером процесу формування кластерів. Найбільш поширеним методом діагностики кластерних пучків є мас-спектрометричний аналіз.

В даному методі кластерний пучок пропускається через іонне джерело, де кластери іонізуються електронним ударом або фотонами (рис. 3.1). Мас-аналіз продуктів іонізації дозволяє визначити розмірний розподіл кластерів, іонізованих в іонному джерелі. Важливо враховувати, що внаслідок фрагментації, яка має місце в іонному джерелі, в мас-спектрі спостерігаються не лише піки, що відповідають первинному кластеру, але й піки, які відповідають його фрагментам. Типові розмірні залежності потенціалу іонізації наведено на рис. 3.2.

Фрагментація кластерів є результатом двох причин: структурної релаксації і надлишку енергії, яка передається кластеру в процесі іонізації. Перехід в основний стан іонізованого кластера, який вимагає мінімальної енергії збудження, є адіабатичним (форма кластера не змінюється).

Вертикальний потенціал іонізації реалізує принцип Франка-Кондона (тобто викид електрона здійснюється без супутньої зміни

геометрії) і завжди перевищує адіабатичний, що пов'язано зі збудженням коливальних ступенів вільності. На рис. 3.3 наведено діаграму фотоіонізаційного процесу $Me_N \equiv Na_9 \rightarrow Na_9^+ + e^-$, тобто з 9-ти атомного кластеру після іонізації вилетів вільний електрон (e^-). Залишився 9-ти атомний одноразово позитивно заряджений кластер (кластерний іон).

За визначенням потенціал іонізації (або адіабатичний потенціал іонізації (AIP)) кластера відповідає різниці енергій нейтрального й іонізованого кластерів в їх основних станах. Інформацію про AIP можна отримати при дослідженні фотоіонізації.

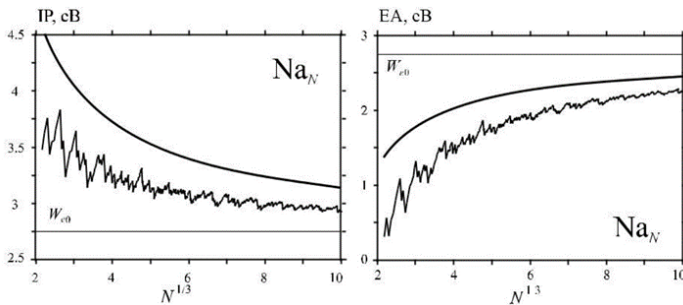


Рисунок 3.2 – Монотонні лінії - квазикласичні розмірні залежності потенціалу іонізації IP кластерів Na і енергії прилипання електронів EA до них, $IP = W_{e0} + e^2/2R$, $EA = W_{e0} - e^2/2R$. Немонотонні лінії - квантоворозмірні залежності

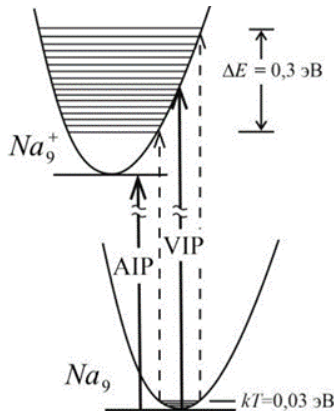


Рисунок 3.3 – Енергетична схема, яка демонструє відмінність адіабатичного (AIP) і вертикального (VIP) потенціалів іонізації молекули Na_9

3.4 Визначення потенціалу іонізації

Розглянемо ізольований нейтральний металевий кластер, що складається з N атомів, які дисоціюють на електрони провідності й іони. Отже, кластер вміщує N_e електронів провідності, N_i іонів, $N_e/Z = N_i = N$, Z - валентність металу.

Повну енергію кластера позначимо як EN_e . Будемо вважати, що кластер має сферично симетричну форму радіусом R . Радіус R визначається з рівняння

$$\frac{4}{3}\pi R^3 = N_e \frac{4}{3}\pi r_s^3,$$

де r_s - середня відстань між електронами (таблична величина). Тобто

$$R^3 = N_e r_s^3.$$

Внаслідок додавання або видалення N_e електронів, кластер заряджається, що призводить до зміни енергії кластера на величину

$$\Delta E(\Delta N_e) = E_{N_e + \Delta N_e} - E_{N_e}.$$

Зокрема, якщо $N_e = -1$, то $E(-1)$ визначає перший потенціал іонізації (IP), якщо ж $N_e = +1$, то $E(+1)$ буде визначати енергію прилипання електронів до кластера (EA). Тому

$$IP = E(-1) = E_{N_e - 1} - E_{N_e}, \quad EA = E(+1) = E_{N_e + 1} - E_{N_e}.$$

Для плоскої поверхні $IP = EA = W_{e0} = -dE/dN_e$, де W_{e0} - робота виходу електронів з плоскої поверхні. Для обмеженої системи IP, EA і W_{5Q} є різними величинами (IP - від слова "Ionization Potential", EA - від слова "Electron Affinity").

При фотоіонізації фотон спричинює переміщення електрона. Це - безпосередньо електронний процес, який не змінює положення іонних ядер: при видаленні електрона відбувається лише корекція електронної системи. Якщо припустити, що на початку процесу фотоіонізації кластер перебуває в основному стані, і нульова точка коливального руху ігнорується, то мінімальна енергія фотона, здатного іонізувати кластер, відповідає вертикальному потенціалу іонізації (VIP).

Як правило, геометрія нейтрального кластера в основному стані й в іонізованому відрізняються, оскільки іонізований кластер відразу після іонізації отримує коливальне збудження. Отже, вимірювання фотоіонізації охолоджених кластерів дає VIP, а не AIP. Для великих кластерів відмінності форми нейтрального й іонізованого кластерів

незначні, тому адіабатичний і вертикальний потенціали іонізації практично ідентичні. Для малих кластерів відмінність між VIP і AIP може бути суттєвою.

Зупинимося коротко на експерименті з вимірювання $IP(R)$ лужних металів. У піч, нагріту до 1075 K, поміщали лужний метал, наприклад, натрій, і нагнітали буферний газ (Ne, Ar, Xe), тиск якого підтримували постійним ($\sim 10^5$ Па). В пічній стінці розташовували малий отвір (сопло), який з'єднував піч із камерою, тиск газу в якій був набагато нижчим. Так досягався надзвуковий витік пари натрію і буферного газу в камеру. У процесі фотоіонізації нейтральні комплекси NaN втрачали електрони і, будучи позитивно зарядженими, потрапляли в квадрупольний мас-аналізатор, де одночасно вимірювалося відношення $M/(eN_e)$ і струм (M - маса кластера, $-eN_3$ - його заряд, $-e$ - заряд електрона). Розмірні залежності $IP(N)$ виміряні для: K_N ($N < 40$), Li_N ($N < 25$), Mg_N ($N < 25$), Zn_N ($N < 25$); Al_N ($N < 70$); Bi_N ($N < 60$)

3.5 Задача Релея: кулонівська нестійкість зарядженої краплі

Нейтральний кластер може випаровуватися. Цей процес називають дисоціацією. Для заряджених кластерів можливим є механізм розпаду через відділення заряджених фрагментів (теж кластерів).

Існує так звана задача Релея, в якій показано, що при наданні краплі достатньо великого заряду, вона втрачає стабільність і розпадається (вибухає) на дрібні краплі. При відомих значеннях радіусу краплі та енергії поверхневого натягу потрібно визначити заряд, при якому крапля ще залишається стабільною.

Для вирішення цієї задачі Релей порівняв енергію сферичної краплі з енергією деформованої краплі, яка має форму витягнутого сфероїда [2] (див. рис. 3.4). Потенціальну енергію зарядженої краплі Релей записав так:

$$U = \frac{Q^2}{2C} + \tau S, \quad (3.1)$$

де C – електрична ємність краплі-сфероїда, Q – заряд краплі, τ – поверхневий натяг, S – площа поверхні краплі.

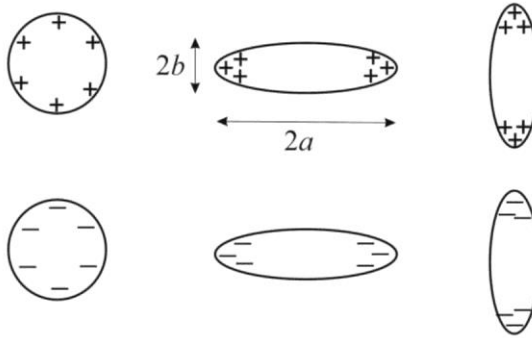


Рисунок 3.4 – Якісна схема деформації зарядженої сферичної краплі у витягнутий або сплюснений сфероїди. Схема деформації для ідеальної сфери не залежить від знаку (однойменні заряди відштовхуються)

Ємність краплі залежить від її форми. Електрична ємність кластерів сферичної форми $C = R$ (в атомних одиницях), де ε - діелектрична проникність середовища, в якому перебуває сфера.

Ємність і площу поверхні сплюсненого еліпсоїда обертання - сфероїда ($a = b > c$) визначають за формулами [2]:

$$C = \frac{\varepsilon \sqrt{a^2 - b^2}}{\arccos(c/a)}, \quad S = 2\pi a \left(a + \frac{b^2}{2ap} \ln \frac{1+p}{1-p} \right). \quad (3.2)$$

Для витягнутого сфероїда ($a > b = c$):

$$C = \frac{\varepsilon \sqrt{a^2 - b^2}}{\ln \left(\frac{a + \sqrt{a^2 - b^2}}{b} \right)}, \quad S = 2\pi b \left(b + \frac{a}{p} \arcsin p \right), \quad (3.3)$$

де $a^2 - p^2 a^2 = a^2 - c^2 = b^2$, p - ексцентриситет [2, 3].

Виконуючи в цих виразах перехід $b = a = R$, отримуємо формулу для ємності сфери $C = R$ і площі поверхні сфери $S = 4\pi R^2$.

Застосовуючи описану модель, розглянемо змінення ємності кластера-диска при зміні його форми від сильно сплюсненої до сильно витягнутої. Отже, на початку маємо диск одноатомної товщини, а в кінці - одноатомну нитку. Об'єм кластера протягом такої еволюції залишається незмінним. З рисунку 3.5 видно, що розмірна залежність ємності C від висоти H (півосі a еквівалентного сфероїда) має мінімум

у точці, що відповідає еквівалентній сфері; в граничних випадках диска і нитки ємності приблизно в 2 і 5 разів відповідно більші.

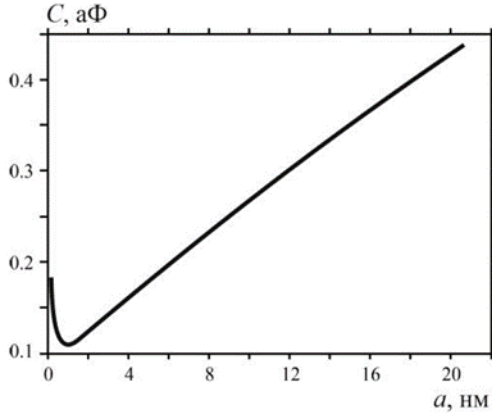


Рисунок 3.5 – Залежність ємності кластера-циліндра Au₂₄₈ у вакуумі при зміні його форми від диска до нитки при фіксованому об'ємі 1 нм³

Підставляючи (3.2) і (3.3) у (3.1), маємо для сфероїда:

$$U(p) = \frac{Q^2 \sqrt[3]{1-p^2}}{2R\epsilon p} \ln \left(\frac{1+p}{1-p} \right) + 2\pi R^2 \tau \left(\sqrt[3]{1-p^2} + \frac{\arcsin p}{p \sqrt[6]{1-p^2}} \right). \quad (3.4)$$

Через параметр p позначено ексцентриситет, який виражає ступінь відхилення сфероїда від сфери:

$$p = \sqrt{1 - \frac{b^2}{a^2}},$$

де a, b - півосі сфероїда ($a > b = c$ - витягнутий, $a = b > c$ - сплющений).

Якщо об'єм сфери дорівнює об'єму сфероїда, то

$$\frac{4}{3} \pi R^3 = N_e \frac{4}{3} \pi a^2 b \rightarrow a^2 b = R^3,$$

де R - радіус сфери.

Для відповіді на питання про стабільність зарядженої краплі з'ясуємо характер залежності (3.4) при малих значеннях ексцентриситету. Вираз (3.4) розкладемо в ряд за малим значенням параметру $p \ll 1$. Розкладання залежності $U(p)$ (6.4) до 4-го порядку за p має вигляд:

$$U(p) = \frac{Q^2}{2R\epsilon} + 4\pi R^2 \tau + \frac{p^4}{45} \left(8\pi R^2 \tau - \frac{Q^2}{2R\epsilon} \right). \quad (3.5)$$

Поняття критичного заряду краплі Q_R , при якому крапля втрачає стабільність, вперше було введено Релеєм (Rayleigh).

Змінюючи Q до критичного заряду Q_R , при якому вираз у скобці рівняння (3.5) дорівнює нулю, маємо:

$$Q_R = \pm \sqrt{16\pi\epsilon R^2 \tau}. \quad (3.6)$$

Для $Q < Q_R$ при малих деформаціях крапля прагне повернутися до сферичного стану

$$dU(p)/dp \geq 0$$

і залежність $U(p)$ є мінімальною при $p = 0$, тобто крапля є сферою. При $Q > Q_R$ крапля є нестабільною:

$$dU(p)/dp \leq 0$$

залежність $U(p)$ мінімальна при $p \rightarrow \infty$, тобто крапля розпадається на декілька дрібних стійких сферичних крапель.

Нестабільність багаторазово заряджених кластерів. Мас-спектрометричні дослідження процесів зарядження в кластерних пучках яскраво демонструють розмірний ефект кулонівської нестійкості заряджених металевих кластерів з певною кількістю атомів [4-6].

Коротко зупинимось на експерименті, в якому досліджували явище кулонівського вибуху заряджених кластерів PbN . У цьому експерименті при вильоті із сопла з надзвуковою швидкістю насичена пара Pb розширювалась і охолоджувалась, внаслідок чого атоми конденсувались в кластери. Під час взаємодії кластерного пучка з пучком високоенергетичних електронів кластери іонізувались і втрачали електрони. Потім струмінь іонізованої пари потрапляв у мас-аналізатор. Далі вимірювали залежність інтенсивності сигналу від часу (рис. 3.6). По суті, вимірювали залежність кількості заряджених кластерів від їх розмірів (маси). З рис. 3.6 витікає, що існує критичний розмір кластера (критична кількість атомів, яку він може містити), починаючи з якого двозарядні кластери стають стійкими і проявляють себе в мас-аналізаторі. Це є прямим свідченням існування критичного надлишкового заряду, який може містити частинка.

Внаслідок фотоіонізації кластерного пучка утворюються також як одноразово, так і дворазово заряджені кластери. В усіх експериментах через деякий час після іонізації проводили вторинний мас-аналіз кластерів. Отже, вимірювали кількість іонізованих фракцій кластерів, які за цей час встигли дисоціювати або розпастися. За їх інтенсивністю визначали ймовірність розпаду і коефіцієнт дроблення.

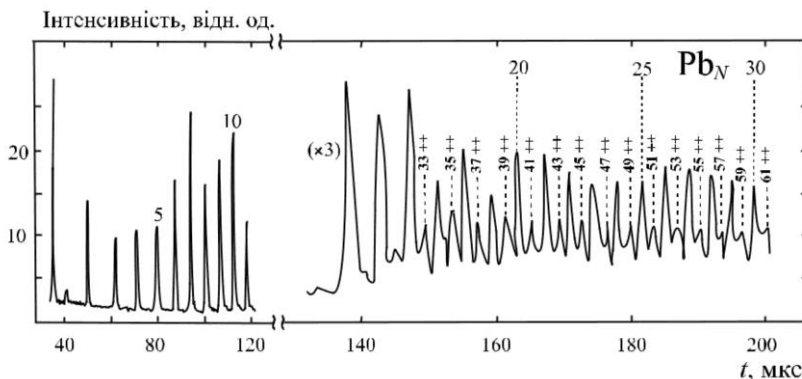


Рисунок 3.6 – Типовий мас-спектр кластерів Pb^zN^+ . Над піками проставлена кількість атомів в одно- ($z = 1$) і двозарядних ($z = 2$) кластерах Pb^zN^+

Для дворазово заряджених кластерів натрію виявлено два ефекти. Суть першого полягає в тому, що найменшим дворазово зарядженим кластером виявляється Na^{2+}_{27} . Також виявлено, що Na^{2+}_{27} може розпадатися на $Na^{+}_{13}+Na^{+}_{14}$, або дисоціювати на $Na^{2+}_{26}+Na$. Ці процеси відбуваються з приблизно однаковою ймовірністю. Для кластерів з більшою кількістю атомів більш імовірним стає другий процес. За допомогою простих аргументів було показано, що для Na^{2+}_{27} бар'єр розпаду приблизно дорівнює енергії видалення одного атома (тобто теплоті випаровування).

В одній з робіт досліджували нестабільність більш ніж *дворазово* заряджених кластерів натрію. Кластери формували в газоагрегаційному джерелі, після чого багаторазово іонізували ексимерним лазером ArF (6,4 еВ). Іонізовані кластери нагрівали для зменшення впливу процесів випаровування. Кінцевий мас-спектр показав наявність стабільних кластерів Na^zN^+ , заряд яких z відповідав критичному “розміру” N_c . Критичні розміри для $z = 2, 3, 4, 5, 6$ і 7 приблизно дорівнюють 27, 64, 123, 208, 321 і 448, відповідно.

Розглянемо нейтральний кластер, який містить $N_e/Z = N_i = N$ атомів.

3.6 Негативно і позитивно заряджені кластери

Квазікласичне наближення

Енергію кластера $E_{N_e+\Delta N_e}$, зарядженого $|N_e|$ електронами, можна зв'язати з енергією нейтрального кластера

$$E_{N_e}: E_{N_e+\Delta N_e} = E_{N_e} + \mu_e \Delta N_e + \frac{(-e \Delta N_e)^2}{2C}, \quad (3.7)$$

де μ_e - хімічний потенціал електронів. Кластер утримуватиме ΔN_e “зайвих” електронів у тому випадку, коли його стану з кількістю електронів $N_e + \Delta N_e$ буде відповідати менш повна, ніж стану з $N_e + \Delta N_e - 1$ електронами.

Позначимо як критичну кількість електронів N_e^* , для яких реакція іонізації

$$\text{Me}_{N_i}^{(\Delta N_e^*)-} = \text{Me}_{N_i}^{(\Delta N_e^*-1)-} + e^-$$

стає зворотною:

$$\Delta E(\Delta N_e^*) = E_{N_e+\Delta N_e^*-1} - E_{N_e+\Delta N_e^*} \equiv \text{IP}^* \rightarrow 0, \quad (3.8)$$

тобто потенціал іонізації $\text{IP}^* > 0$ такого кластера близький до нуля. Слід зазначити, що наявність ще одного надлишкового електрона стає можливою лише в метастабільному стані, оскільки енергія прилипання електрона виявляється менше нуля

$$\text{EA}^* \equiv E_{N_e+\Delta N_e^*} - E_{N_e+\Delta N_e^*+1} < 0. \quad (3.9)$$

З (3.8) і (3.9) отримуємо потенціал іонізації і енергію прилипання

$$\text{IP}(\Delta N_e) = -\mu_e - \frac{(-e)^2}{2C} (2\Delta N_e - 1), \quad (3.10)$$

$$\text{EA}(\Delta N_e) = -\mu_e - \frac{(-e)^2}{2C} (2\Delta N_e + 1) \quad (3.11)$$

кластера, зарядженого ΔN_e електронами. У випадку $\Delta N_e = 1$ і 2 ці вирази представляють перший і другий потенціал іонізації та енергію прилипання, відповідно [4-6, 8].

Якщо $\Delta N_e > \Delta N_e^*$, частинка перезаряджена. Від вільних станів надлишкові електрони відокремлені бар'єром і можуть перебувати у

зв'язаному стані деякий час. Час життя кожного з них визначатиметься конкретними умовами в нерівноважній системі.

Слід ще раз підкреслити, що ми розглядаємо не дуже великі надлишкові заряди $|\Delta N_e|$ N_e . Перебудова енергетичного спектру, зумовлена зарядом $-e\Delta N_e$, зводиться, в першу чергу, до його електростатичної самодії.

Використовуючи (3.8) і (3.7), для критичного надлишкового електронного заряду отримаємо:

$$\Delta N_e^* = \frac{W_{e0} - \mu_{e1}}{e^2} + \frac{1}{2}, \quad (3.12)$$

де $W_{e0} = -\mu_{e0}$ - робота виходу електрона з плоскої поверхні, $\mu_e = \mu_{e0} + \mu_{e1}/R$, μ_{e1}/R - перша поправка на кривизну поверхні хімічного потенціалу виродженої електронної рідини у випадку сфери радіуса

$$R = N_e^{1/3} r_0, \quad r_0 = Z^{1/3} r_s, \quad (3.13)$$

r_0 — середня відстань між іонами.

Змінення знаку енергії прилипання електронів можна інтерпретувати як кулонівську “блокаду” для наступних надлишкових електронів [7,8].

Фотоелектрон-спектрометричні дослідження відокремлених кластерів чітко продемонстрували кулонівські “східці” при послідовній іонізації Al_{2000}^- до Al_{2000}^{2+} , а також Al_{32000}^- до Al_{32000}^{5+} .

Слід зазначити, що критичний заряд навіть для частинок, які утримують більше тисячі атомів, не перевищує декількох одиниць.

Це пов'язано з тим, що надлишковий електронний заряд ефективно розподіляється по поверхні кластера, внаслідок чого виникає сильне кулонівське відштовхування між окремими частинами заряду (“самодія” надлишкового заряду). Це не спостерігається при утворенні негативних іонів окремими атомами і молекулами, в яких надлишковий електрон не колективізується.

Розглянемо позитивно заряджений кластер атомів металу, який містить $N_e = ZN_i$ електронів і $N_i + \Delta N_i$ іонів. Це аналогічно випадку, коли крапля з N іонами містить $\Delta N_e < 0$ (недостатніх) електронів. При цьому $|\Delta N_e|$ повинно бути кратним Z .

Енергію зарядженого кластера $E_{N_i + \Delta N_i}$ можна пов'язати з повною енергією нейтрального кластера:

$$E_{N_i + \Delta N_i} = E_{N_i} + \mu_i \Delta N_i + \frac{(+eZ \Delta N_i)^2}{2C}. \quad (3.14)$$

Як і в (3.7), основна залежність від R дається членом, який описує розштовхування надлишкового заряду $+eZ \Delta N_i$. Насправді іони малорухливі, а розштовхування позитивного заряду імітується перерозподілом рухомої електронної підсистеми.

Змінення енергії, пов'язано з відривом одного з іонів, складає

$$\Delta E(\Delta N_i) = E_{N_i + \Delta N_i} - E_{N_i} = -\mu_i - \frac{(+eZ)^2}{2C} (2\Delta N_i - 1). \quad (3.15)$$

Кластер із зарядом $+eZ \Delta N_i$ буде стабільним, якщо $\Delta E(\Delta N_i) > 0$. Назвемо критичною кількість іонів ΔN_i^* , для яких реакція стає

$$\text{Me}_{N_i + \Delta N_i}^{Z(\Delta N_i^*)+} = \text{Me}_{N_i + \Delta N_i^* - 1}^{Z(\Delta N_i^* - 1)+} + \text{Me}_1^{Z+}$$

зворотною. У цьому разі для критичного позитивного заряду маємо:

$$\Delta N_i^* = \frac{W_{i0} - \mu_l}{(Ze)^2} + \frac{1}{2}, \quad (3.16)$$

де $W_{i0} = -\mu_{i0}$ - робота виходу іона з плоскої поверхні. Для сфери радіусу $R = (N_i + \Delta N_i)^{1/3} r_0$, використовуючи правило сум [5], запишемо:

$$\mu_{l1} = \frac{2\tau}{\bar{n}} - \mu_{e1}, \quad \bar{n} = \frac{1}{\frac{4}{3}\pi r_s^3}, \quad (3.17)$$

де τ - поверхневий натяг, $\bar{n}$ - концентрація електронів. Для досліджуваних металів $\mu_{e1} = 1,9 \text{ eV} \times a_0$ [5], a_0 - боровський радіус.

Роботу виходу іона за допомогою циклу Борна (див. рис. 3.7) можна виразити через потенціал іонізації окремого атома $\text{IP}(1)$, енергію когезії $\epsilon_{\text{coh}0}$ (або теплоту випаровування атома) і роботу виходу електрона W_{e0} :

$$W_{i0} = \epsilon_{\text{coh}0} + \text{IP}(1) - W_{e0}. \quad (3.18)$$

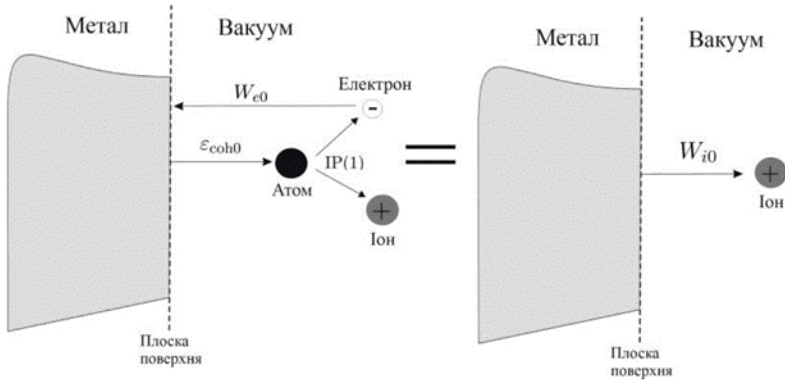


Рисунок 3.7 – Енергетична схема циклу Борна

Щоб визначити роботу виходу іона W_{i0} , треба видалити у вакуум нейтральний атом з металу (витрачається енергія роботи виходу атома ϵ_{coh0}), потім атом іонізується (витрачається енергія іонізації $IP(1)$). Тепер маємо у вакуумі електрон та іон. Потім електрон переносимо у метал (виділяється енергія, яка дорівнює роботі виходу електрона $-W_{e0}$). У вакуумі залишається лише іон.

Якщо $N_i > N_i^*$, кластер позбавляється зайвого іона, переходячи в стан з меншою енергією. При такому підході краплю можна розглядати як двокомпонентну електрон-іонну систему з відповідними хімічними потенціалами. У випадку свинцю: $\epsilon_{coh0} = 1,5$; $W_{e0} = 4,0$; $IP(1) = 7,4$ eV, звідки маємо $W_{i0} = 4,9$ eV. Для $R = 12$ а критичний заряд виявляється рівним $+2,7 e$, що непогано узгоджується як з результатами експериментальних вимірювань, так і з складними самоузгодженими розрахунками.

При застосуванні даного підходу вважають, що форма кластера під час його зарядження залишається незмінною. Вирази (3.12) для N_e^* і (3.16) для N_i^* враховують і розрізняють емісію (прилипання) електрона або іона. Це зумовлено необхідністю витрат енергії на внесення частинки даного типу в кластер і “перерозподілу” її заряду по поверхні. Даний механізм вибуху зарядженого атомного кластера можна розглядати як альтернативу релеєвському. Оцінки показують, що $NR > N_i^* > N_e^*$, тобто при зарядженні кластерів має переважно реалізовуватися не релеєвська нестійкість, а одностинкова емісія [4-6, 8].

3.7 Завдання до курсового проекту: розрахунок критичного заряду металевих кластерів

Спочатку оформити титул проекту і лист завдання.

Використовуючи ресурси Internet, підготувати реферат обсягом до 20 сторінок. Вибрати одне чи два явища, описаних у рефераті, докладно описати їх і розповісти.

Теми реферату:

- дифракційні методи та методи електронної мікроскопії для дослідження наноматеріалів і композитів;
- одноелектронні прилади на кластерах: технології виробництва та особливості їх вольт-амперних характеристик;
- розмірний ефект температури плавлення плівок та кластерів;
- квантові точки: технології вирощування, структура, фізичні властивості, практичне застосування;
- кластери атомів: технології виробництва, структура, фізичні властивості, практичне застосування;
- застосування наноматеріалів у польових транзисторах;
- принцип роботи скануючої тунельної та силової мікроскопії. приклади практичного застосування;
- вплив розмірних ефектів на параметри матеріалів і приладів наноелектроніки. фізичні і технологічні межі мініатюризації об'єктів наноелектроніки;
- технології створення запам'ятовуючих пристроїв з елементами пам'яті нанометрових розмірів;
- принципи скануючої тунельної, атомно-силової і магнітно-силової мікроскопії;
- фізичні основи зондової нанотехнології і електросилової мікроскопії;
- традиційні методи аналізу поверхні: електронна ожеспектроскопія та дифракція повільних електронів;
- ультрафіолетова фотолітографія;
- проблеми субмікронної кремнієвої технології.

Основна частина

Розрахунки проводити в атомній системі одиниць. Необхідні дані наведені у табл. 3.1.

Провести порівняльний аналіз значень потенціальної енергії $U(p)$ за формулами (3.4) і (3.5) для точок в інтервалі значень $p = 0; 0,01; 0,02; \dots; 0,1$.

На одному графіку для кластера радіусом $R = 20a_0$ побудувати залежності $F(p) = U(p) - U(0)$ (3.5) для тих же значень p і $Q > Q_R$. Наприклад, $Q = 1,1Q_R; 1,2Q_R; 1,3Q_R$.

Зробити те саме для $Q < Q_R$. Наприклад, $Q = 0,9Q_R; 0,8Q_R; 0,7Q_R$. Порівняти розрахунки при $Q > Q_R$ і $Q < Q_R$.

Зробити те саме для $R = 40, 60a_0$.

Як зміниться характер залежностей при різних R ?

Аналітично вирішити задачу для металевого кластера-кулі радіуса R і зарядом $Q < Q_R$, яка розділяється на $j = 2, 3, 4$ однакових куль. Вивести формули для порівняння (у вигляді відношення) через індекс j :

- енергії вихідної кулі і енергії однієї із новоутворених крапель;
- критичного заряду нової краплі з критичним зарядом вихідної краплі.

Для якого значення j потенціальна енергія вихідної краплі в $2^{2/3}$ рази більше ніж енергія однієї з утворених крапель?

На одному графіку для кластерів радіусами $R = 10 - 50a_0$ побудувати залежності критичного заряду за Релеєм $Q_R(R)$, а також за формулами (3.12) або (3.16). Студенти, в яких варіанти № 1 - 10, розраховують негативно зарядженні кластери. Студенти, в яких варіанти № 11 - 25 розраховують позитивно зарядженні кластери. Зробіть висновок: який канал кулонівського вибуху (розпаду) кластера при заданому R є найбільш ймовірним?

Таблиця 3.1 – Експериментальні значення фізичних величин для металів з плоскою поверхнею

Варіант	Метал	r_s	τ	W_{e0}	ϵ_{coh0}	IP(1)
1,8,15,22	Cs	5,63	79	2,142	0,78	3,89
2,9,16,23	Na	3,99	191	2,75	1,1	5,14
3,10,17,24	Al	2,07	1160	4,28	3,32	5,98
4,11,18,24	Cu	2,11	1351	4,40	3,40	7,73
5,12,19,25	Ni	1,81	1810	4,50	4,20	7,63
6,13,20,26	Au	3,01	1134	4,30	3,77	9,23
7,14,21,27	Ti	1,92	1081	4,2	4,3	6,83
r_s [a_0] - середня відстань між електронами у металі, τ [ерг/см ²] - поверхневий натяг, W_{e0} [eV] - робота виходу електрона з металу, ϵ_{coh0} [eV] - енергія когезії (випаровування атома), IP(1) [eV] - потенціал іонізації атома металу						

Атомні одиниці Хартрі

1 а.о. заряду = заряду e протона =1 (заряд електрона = $-e$).

1 а.о. маси = масі m_e електрона =1.

Стала Дірака (перекреслена стала Планка) = 1.

1 а.о. довжини = боровський радіус $a_0 = 0,529 \times 10^{-8}$ см.

1 а.о. поверхневого натягу = $1,6558 \times 10^3$ Дж/м².

1 а.о. концентрації = $6,76 \times 10^{24}$ см⁻³

3.8 Питання, які виносяться на захист проекту

1. Опишіть експериментальні методи досліджень кластерних пучків.
2. Дайте принциповий опис мас-спектрометра, мас-аналізатора, явища фотоіонізації.
3. Наведіть реакцію електронної іонізації, випаровування атома.
4. Дайте визначення потенціалу іонізації та поверхневого натягу.
5. Накресліть енергетичну діаграму для електронів у кластері.
6. Наведіть експериментальну залежність потенціалу іонізації кластерів різного розміру і прокоментуйте її.
7. Прокоментуйте експерименти з дослідження кулонівського вибуху багаторазово заряджених металевих кластерів.
8. У чому суть релеєвської моделі нестійкості зарядженої краплі?
9. Як формулюється критерій нестійкості за Релеєм?
10. Виведіть вираз для критичного заряду металевого кластера у квазікласичному наближенні.
11. Покажіть відмінність результатів двох моделей нестійкості.

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Pogosov, V.V. Energetics of charged metal clusters containi-ng vacancies [Текст] / V.V. Pogosov, V.I. Reva // Journal of Chemical Physics. - 2018 - V. 148. - 044105.
2. Батыгин В.В., Топтыгин И.Н. Сборник задач по электродинамике. - М.: НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, 2010.-640 с.
3. Фихтенгольц Г.М. Курс дифференциального и интегрального исчисления. Т.2 - Москва: Физматлит, 1959 с. 220.
4. Pogosov, V.V. Energetics of metal slabs and clusters: the rectanglebox model / V.V. Pogosov, V.P. Kurbatsky, E.V. Vasyutin // Phys. Rev. - 2005 - V. B71.- 195410.
5. Погосов В.В. Введение в физику зарядовых и размерных эффектов. Поверхность, кластеры, низкоразмерные системы - М.: Физматлит, 2006. 328 с.
6. Шпак А.П., Погосов В.В., Куницкий Ю.А. Введение в физику ультрадисперсных систем - К.: Академперіодика, 2006.-423 с.
7. В.В.Погосов, Є.В.Васютін, Мартинюк Р.В., Коротун А.В. Методичні вказівки до курсового проекту “Одноелектронний транзистор” з дисципліни “Фізика твердого тіла” - ЗНТУ, 2006. - 30 с.
8. В.В.Погосов, В.Г. Корніч, Є.В.Васютін, К.В.Пугіна, В.І.Кіпріч. Основи нанофізики і нанотехнологій (електронний підручник). - Запоріжжя: ЗНТУ, 2008. - 650 с.

ДОДАТОК А

У курсовому проекті усі розрахунки виконуються у атомній системі одиниць. Щоб перевести у систему СІ треба використати таблицю.

Атомні одиниці	СІ
Довжини	$0,529 \cdot 10^{-8} \text{ см}$
Енергії	27,21 еВ
Поверхневого натягу	$1,558 \cdot 10^{-3} \text{ Дж/м}^2$
Концентрації	$6,76 \cdot 10^{24} \text{ см}^{-3}$

Таблиця коефіцієнтів переведення одиниць

Приклад:

$$\lambda \text{ (в см)} = \lambda \text{ (в атомних одиницях довжини)} \times 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ см}$$