Università degli Studi di Napoli “Federico II”

Scuola Politecnica e delle Scienze di Base
Area Didattica di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali

Dipartimento di Fisica “Ettore Pancini”

Laurea triennale in Fisica

Fenomeni di trasporto in nanostrutture metalliche

Relatori:
Dott. Carmine Antonio Perroni
Prof. Vittorio Cataudella

Candidato:
Lorenzo Gentile
Matricola N85/947

A.A. 2017/2018

Introduzione

La fisica descrive il mondo in due modi diversi. Esiste una fisica del macroscopico, che è la descrizione di un osservatore (reale o immaginario non ha importanza) di sistemi fisici i cui costituenti sono trascurabili, e una fisica del microscopico, dove invece l'osservatore non trascura gli effetti dovuti ai costituenti elementari del mondo fisico (atomi, molecole, elettroni, fotoni ecc.). Da questi due punti di vista si originano la meccanica quantistica da una parte, e tutte le teorie che non incorporano il principio di indeterminazione (meccanica newtoniana, teorie della relatività ecc.) e che non tengono conto né che esiste una scala di lunghezza minima per i costituenti elementari della materia e dei campi, né che esiste una perturbazione minima intrinseca alla natura delle cose che rende gli osservatori non neutrali. Per il momento non è chiaro come la meccanica quantistica e quella classica si colleghino. Ciò che si osserva è che esistono comunque dei fenomeni in cui gli effetti classici e quelli quantistici coesistono, e questo dominio di fenomeni viene detto fisica mesoscopica. Non è ben chiaro dove cominci e dove finisca questo reame della fisica, i suoi confini sono essenzialmente convenzionali. A seconda dei fenomeni studiati vengono individuate delle grandezze fisiche che a seconda del loro valore possono portare a discriminare i tre domini, ma non è un qualcosa di molto preciso. Ciò che si osserva comunque, ed è anche il caso del fenomeno analizzato nel presente lavoro, è che gli effetti mesoscopici si osservano meglio a basse temperature. Esistono tutta una serie di fenomeni di trasporto di elettroni in nanostrutture che sono descritti indipendentemente dal materiale in cui avvengono.
Essenzialmente sono quattro le strutture studiate dalla fisica mesoscopica: nanostrutture metalliche, quelle con semiconduttori, molecole collegate ad elettrodi e materiali bidimensionali come il grafene. Il modello che illustrerò è valido per nanostrutture metalliche.
Un cristallo ideale, perfettamente periodico, avrà una conducibilità ed un cammino libero medio infiniti; ma tutte le deviazioni dalla perfetta periodicità, come la presenza di impurità oppure di oscillazioni di reticolo tali da determinare scattering elettrone-fonone, faranno sì che le suddette grandezze siano sempre finite. Da questi fatti si può pensare che la descrizione dei fenomeni di trasporto nei cristalli sia molto complesso, eppure, in moltissimi casi, è possibile trascurare l'interazione tra gli elettroni e considerare ognuno di essi immersi in un campo medio generato da tutti gli altri. In questo modo dovremo limitarci a risolvere delle equazioni di Schrodinger indipendenti, ognuna col suo potenziale. Concettualmente ciò è simile a quello che si fa nello studio degli atomi isolati ad N elettroni. Si trascurano le correlazioni tra elettroni, e in quel caso si procede poi con un approccio di campo autoconsistente che trova la sua massima espressione nelle equazioni di Hartree-Fock. Ci sono anche altri approcci, come quello semiclassico che io non discuterò. Gli effetti di singolo elettrone che analizzerò non possono essere trattati in questo modo e dovrò tener conto delle interazioni elettrone-elettrone, però, sarà possibile mettersi in un regime tale da poter adottare un modello semplificato per la descrizione dei fenomeni di conduzione di singolo elettrone e del Coulomb blockade, cioè di una condizione in cui non c'è nessun passaggio di carica.

Nel primo capitolo, dopo aver enunciato le due leggi di Ohm ed illustrato i due effetti quantistici rilevanti nel fenomeno che spiegherò, calcolerò il valore della resistenza di giunzione dovuta ad una certa barriera di potenziale tra due elettrodi, dopodiché, nel secondo capitolo, analizzerò il caso della scatola di elettroni (caso a due elettrodi) e soprattutto il caso del transistor a singolo elettrone (caso a tre elettrodi). Nel terzo risolverò la master equation con la condizione di normalizzazione, ricaverò le correnti medie e graficherò il tutto. Ci saranno poi le considerazioni conclusive ed infine un'appendice dedicata al calcolo dei rates usati nella master equation.

Capitolo 1

1. Effetti quantistici: tunneling e quantizzazione di carica

In questo primo capitolo, e nei successivi, dimostrerò come si determini una chiara deviazione dalle leggi di Ohm in caso di effetti rilevanti di singolo elettrone in presenza di una barriera di potenziale, cioè in presenza di tunneling di singoli elettroni.
Le leggi di Ohm sono

V= $I \cdot R$, Prima legge di Ohm

R= $\frac{L}{\sigma \cdot A}$, Seconda legge di Ohm

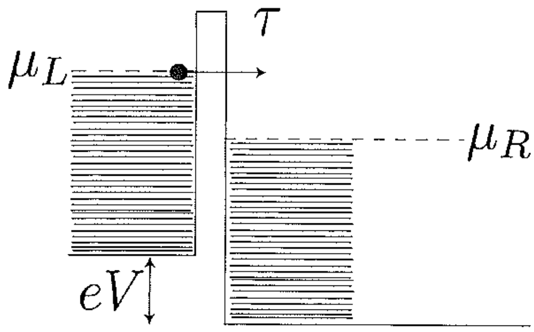
dove V è la tensione ai capi di un conduttore, I la corrente che scorre sempre nel conduttore per effetto della citata tensione, R la sua resistenza, L la sua lunghezza, A la sua sezione e σ la sua conduttività. Un'espressione della conduttività può essere data da un modello dovuto a Drude, in cui il moto medio di un elettrone in un conduttore, che consiste di una quantità innumerevole di urti, può essere considerato come uniforme [“Solid State Physics”, N.W. Ashcroft – N.D. Mermin].
Nei fenomeni di trasporto mesoscopici le deviazioni dalle leggi di Ohm sono dovute alla quantizzazione di carica, al tunneling ed a effetti di interferenza. Nel nostro caso sono rilevanti le prime due manifestazioni. In fisica classica una particella passa per una certa barriera di potenziale soltanto se ha un'energia superiore ad essa. Inoltre la carica può assumere ogni valore reale. In meccanica quantistica invece la carica elettrica è quantizzata, quindi non possono avvenire trasferimenti di carica inferiori a $1{,}6 \cdot 10^{-19}$ C, ed inoltre una certa particella-onda può scavare con una certa probabilità un tunnel in una certa gibbosità di potenziale.
Per studiare ogni nanostruttura si costruisce un circuito in cui essa è inserita tra due elettrodi che fanno anche da sorgenti “source” e da raccoglitori “drain” di elettroni. Il complesso elettrodi-nanostruttura viene tenuto a basse temperature e vengono adottati anche specifici accorgimenti per ridurre al minimo il rumore dovuto all'agitazione termica degli elettroni provenienti dall'ambiente esterno. Essi entrano negli elettrodi e si portano all'equilibrio in modo che la loro energia soddisfi la funzione di distribuzione di Fermi-Dirac

$$f^0(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{K \cdot T}} + 1} \quad ,$$

dove E è l'energia occupata da un certo fermione, μ è il potenziale chimico, K è la costante di Boltzmann, e T è la temperatura assoluta. Il potenziale chimico è il lavoro fatto per aggiungere o togliere una particella ad un certo sistema termodinamico. Chiamerò la nanostruttura nel fenomeno da me analizzato isola. Quando c'è tunneling, a causa della presenza del campo generato dagli elettrodi, si ha un trasporto di carica da un lead all'isola o al contrario determinando una variazione dello stato di carica di quest'ultima. L'isola, essendo un conduttore, vedrà disporsi tutte le cariche sulla sua superficie, in questo modo si formeranno capacità. Se ogni condensatore ha dimensione macroscopica sufficientemente piccola è possibile trascurare il contributo dovuto all'agitazione termica nella charging energy ed allo stesso tempo avere la stessa comparabile con tensioni usualmente realizzabili sperimentalmente, in modo che queste ultime siano in grado di far transire un elettrone alla volta. Se l'isola è sufficientemente grande invece allora è possibile trascurare la discretizzazione dei livelli e considerarla come un oggetto classico; così saranno applicabili ad essa determinate considerazioni energetiche le quali saranno sufficienti a spiegare sotto che condizioni di tensione è possibile avere o no il Coulomb blockade, ossia la totale assenza di corrente elettrica. Per conoscere poi l'entità della corrente media, quando non c'è Coulomb blockade, bisognerà considerare l'effetto di tunneling quantistico a cui l'elettrone necessariamente è soggetto quando deve passare da un lead all'isola, o dall'isola a un lead. La teoria che discuterò è stata presentata da Averin e Likharev nel 1986 ["The Physics of Nanoeletronics", T. Heikkila]. Questa teoria permetterà di calcolare la corrente media, che è la grandezza ad essere effettivamente comparata con le osservazioni. Messa quindi una certa nanostruttura (nel nostro caso un filo metallico) all'interno del circuito viene misurata la corrente da un amperometro per vari valori di tensione. Naturalmente dato il basso valore della corrente circolante in questo caso, si adotteranno opportuni sistemi di amplificazione per sapere il numero di elettroni passati in un certo arco di tempo.

2. Calcolo della resistenza di giunzione

Considero il caso di due elettrodi metallici senza isola. Supponiamo che l'apparato sia allo zero assoluto e che quindi tutti gli elettrodi occupino tutti i livelli energetici dallo zero all'energia di Fermi. L'applicazione della tensione shifterà i livelli degli elettroni di un certo $e \cdot V$ (visibile nella figura), e nelle distribuzioni di Fermi-Dirac dovremo considerare certi potenziali chimici al posto dell'energia di Fermi, perché ora agisce una certa tensione sull'insieme degli elettroni. Voglio calcolare la resistenza di giunzione e per farlo calcolerò la corrente dovuta ad una certa differenza di potenziale. Il coefficiente di trasmissione di un elettrone attraverso la barriera sarà



Modello schematico di una giunzione tunnel

$$\tau \sim e^{\frac{-2d\cdot\sqrt{2mV}}{\hbar}} ,$$

["The Physics of Nanoeletronics", T. Heikkila], in cui d è la larghezza della barriera, V la sua altezza ed m la massa elettronica. Qui mi metto nella condizione di piccola barriera e grande τ in modo da poterla considerare una perturbazione rispetto al moto libero (quest'ultimo avviene solo nel lead, non nell'isola). In tal modo potrò scrivere la corrente allo zero assoluto, da sinistra a destra, dovuta ad una certa energia E come

$$N_L(E-\mu_L) N_R(E-\mu_R) e\cdot A\cdot c\cdot\tau ,$$

dove A è l'area della giunzione, gli $N(E)$ sono la densità degli stati nel lato destro e sinistro della giunzione, e è la carica dell'elettrone e c è una costante dimensionale che fissa la dimensione dell'espressione a corrente/energia. A temperatura non nulla devo includere i numeri di occupazione ed integrare

$$I = e\cdot A\cdot c\cdot\tau\cdot\int_{-\infty}^{+\infty} dE\cdot N_L(E-\mu_L)\cdot N_R(E-\mu_R)\{f_L(E)\cdot[1-f_R(E)]-f_R(E)\cdot[1-f_L(E)]\}$$

$$= \quad e\cdot c\cdot A\cdot\tau\cdot\int_{-\infty}^{+\infty} dE\cdot N_L(E-\mu_L)\cdot N_R(E-\mu_R)\{f_L(E)-f_R(E)\} \quad ,$$

dove $\mu_R=\mu_L-eV$.

Ho considerato sia la corrente da destra verso sinistra che quella da sinistra verso destra. Nel caso di quest'ultima, per esempio, dovrò considerare la probabilità di occupazione dell'energia di sinistra moltiplicato la probabilità di non trovarlo a quella energia a destra. Viceversa nell'altro caso. Quando siamo all'equilibrio i numeri di occupazione saranno le distribuzioni di Fermi-Dirac. Quindi

$$f_{L/R}(E)=f^0(E;\mu_{L/R},T) \quad .$$

Se le sorgenti hanno un voltaggio molto più piccolo di E_F/e allora la densità degli stati ad energia E è circa uguale alla densità degli stati all'energia di Fermi. Chiamo le densità degli stati all'energia di Fermi N_{RF} e N_{LF} . Quindi l'integrale diventa

$$I=e\cdot c\cdot A\cdot\tau\cdot N_{LF}\cdot N_{RF}\cdot\int_{-\infty}^{+\infty} dE\cdot[f^0(E;\mu_L,T_L)-f^0(E;\mu_R,T_R)]$$

$$= \quad e\cdot c\cdot A\cdot\tau\cdot N_{LF}\cdot N_{RF}\cdot(\mu_L-\mu_R) \quad = \quad e^2\cdot c\cdot A\cdot\tau\cdot N_{LF}\cdot N_{RF}\cdot V \quad = \quad \frac{V}{R_T} \quad ,$$

perché la differenza tra i potenziali chimici è $e\cdot V$, come visibile dalla figura sopra. Nell'integrare ho tenuto conto del fatto che

$$\int_{-\infty}^{+\infty}(f^0(E;\mu_1,T_1)-f^0(E;\mu_2,T_2))dE \quad = \quad \mu_1-\mu_2 \quad .$$

Comunque dal calcolo risulta

$$R_T=(e^2\cdot c\cdot A\cdot\tau\cdot N_{LF}\cdot N_{RF})^{-1} \quad .$$

Siccome il coefficiente di trasmissione ha una dipendenza esponenziale dalla lunghezza del conduttore allora non è soddisfatta la seconda legge di Ohm.

Capitolo 2 – Considerazioni energetiche sul transistor a singolo elettrone

In questo capitolo spiegherò sotto che condizioni è possibile osservare gli effetti di singolo elettrone. Spiegherò il fondamentale concetto di charging energy e farò vedere che il fenomeno del Coulomb blockade può essere spiegato da semplici considerazioni classiche su di essa. Nel capitolo precedente ho calcolato la resistenza di un sistema di due elettrodi separati dal vuoto. Ora considererò un'isola tra gli elettrodi. Prima analizzerò il caso di isola tra due elettrodi (scatola di singolo elettrone) e poi il caso a tre elettrodi (transistor a singolo elettrone). In ogni caso supporrò di produrre delle condizioni sperimentali tali da far essere adeguata una descrizione classica della nanostruttura, in cui cioè saranno trascurabili gli effetti dovuti alla quantizzazione dell'energia. Entrambi i suddetti sistemi inoltre saranno considerati a temperature bassissime, ed enuncerò le condizioni affinché gli effetti dell'agitazione termica siano trascurabili.

1. Charging energy e condizioni di tunneling

Nel capitolo precedente ho calcolato la resistenza di giunzione tra due elettrodi che esercitavano una certa tensione. Ora considero un'isola tra questi due elettrodi. Se inizialmente l'isola è neutra e accendo il circuito, un certo numero di cariche si sposterà dagli elettrodi all'isola, caricandola. Essendo l'isola un conduttore vedrà disporsi tutte le cariche eccedenti (o in difetto) sulla sua superficie dando origine ad una certa capacità. La dimensione del sistema è cruciale. Si può vedere che

$$C \sim \varepsilon \cdot R \quad ,$$

cioè la capacità del condensatore è in relazione con la sua dimensione. Affinché si verifichino effetti di singolo elettrone è necessario avvicinare molto l'elettrodo all'isola. Se la dimensione della capacità è abbastanza piccola è possibile trascurare i contributi dovuti all'agitazione termica, ma non deve essere troppo piccola, cioè, deve essere abbastanza grande da poter trattare l'isola come un oggetto classico, trascurando la discretizzazione dei livelli energetici. Un'isola ha dimensioni tipiche attorno ai 100 nm. Le capacità usate sono di circa 0,5 fF, così che la charging energy sia abbastanza grande comparata con gli usuali voltaggi in modo che essi producano il moto di un elettrone alla volta. Negli altri sistemi, come nelle nanostrutture di semiconduttori, la spaziatura tra i livelli è più ampia e quindi le isole corrispondenti non possono essere considerate oggetti classici. Comunque è possibile nel nostro caso spiegare il fenomeno del Coulomb blockade mediante considerazioni sull'energia classica, nelle condizioni spiegate poc'anzi.

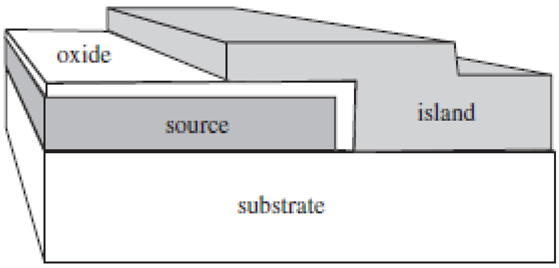


Illustrazione 1: Schema di fabbricazione di una giunzione

Per verificarsi gli effetti della quantizzazione di carica si devono isolare opportunamente il lead e l'isola. In pratica si usa un film di un ossido (come in figura). Nel caso dell'alluminio il film è sottile circa 1,5 nm. Un isolamento buono, cioè ottenuto con una pellicola troppo spessa distrugge l'effetto che noi vogliamo ottenere.

Se considero un condensatore inizialmente scarico, se sposto una certa carica dQ dovrò compiere il lavoro

$$dE=dQ\cdot V=\frac{Q\cdot dQ}{C} \quad .$$

Se integro tra 0 e q trovo il lavoro fatto per spostare una carica q , cioè l'energia acquisita dal condensatore per effetto dello spostamento di carica da un'armatura all'altra

$$E=\frac{q^2}{2\cdot C} \quad .$$

Se la carica q è proprio quella dell'elettrone, cioè sarà l'energia necessaria per spostare un elettrone, verrà detta charging energy. Tra le due energie ci sarà una certa relazione

$$E=\frac{q^2}{2\cdot C} \quad = \quad \frac{e^2}{2\cdot C}\cdot N^2 \quad = \quad E_{ch}\cdot N^2 \quad ,$$

con E_{ch} charging energy. Finora io ho supposto di partire da un condensatore scarico, ma la charging energy dipenderà da quanto sarà carica l'isola. Infatti

$$E_{ch}\cdot N^2 \quad - \quad E_{ch}\cdot(N-1)^2 \quad = \quad E_{ch}\cdot(2\cdot N-1) \quad ,$$

cioè l'energia che dovrò fornire all'elettrone n-esimo sarà diversa da quella necessaria per spostare il primo elettrone. La charging energy dipende dalla carica accumulata sull'isola, ciò rende ragione del fatto che in questo caso si ha un tipico effetto di correlazione tra cariche. Inoltre

$$\frac{E_{ch}}{KT}\gg 0 \quad ,$$

per T dell'ordine dei mK. Allo zero assoluto naturalmente il problema non si pone, ma lo zero assoluto non è raggiungibile sperimentalmente. Ancora, come anticipato, possiamo trascurare la discretizzazione dei livelli. Infatti supponiamo un'isola cubica di lato L e con a distanza interatomica. Allora il numero di atomi sarà circa

$$N_{at}\simeq\left(\frac{L}{a}\right)^3 \quad .$$

Considerando che la distanza media tra i livelli sarà circa uguale al rapporto tra l'energia di Fermi ed il numero di atomi e considerando che la charging energy, essendo un'energia potenziale soddisfa la legge di Coulomb, avrò

$$\frac{\delta_S}{E_{ch}} \simeq \frac{E_F \cdot L}{e^2 \cdot N_{at}} = \frac{E_F \cdot a \cdot L}{e^2 \cdot a \cdot N_{at}} \simeq \frac{1}{N^{\frac{2}{3}}} \quad ,$$

dove ho fatto uso del fatto che $\frac{e^2}{a} \simeq E_F$. Da qui si nota che se l’isola è abbastanza grande, cioè ha molti atomi, allora si può dire che l’elettrone è come se vedesse una banda continua quando arriva sull’isola. Quindi basta la charging energy per far eseguire una transizione ad un elettrone.
Quando è possibile che avvenga tunneling? Se una certa carica e supera la barriera generata dal campo elettrico allora

$$E_f = \frac{(q-e)^2}{2 \cdot C} = \frac{q^2}{2 \cdot C} + \frac{e^2}{2 \cdot C} + \frac{e \cdot q}{C} = E_i + E_{ch} - e \cdot V \quad ,$$

dove E_i è l’energia elettrostatica del condensatore prima del trasporto di carica ed E_f quella dopo. Siccome

$$E_f - E_i < 0 \quad ,$$

allora segue che

$$e \cdot V > E_{ch} \quad ,$$

che è la condizione affinché possa avvenire il tunneling. Le fluttuazioni quantistiche possono permettere il tunneling anche a bassi voltaggi. Una stima di questo effetto è fornita dal principio di indeterminazione tempo-energia. Inoltre possiamo ricavare una condizione di Coulomb blockade, cioè possiamo vedere che per certi valori dell’energia, data una certa resistenza di giunzione, non è possibile il passaggio di corrente. Il principio di indeterminazione tempo-energia è

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad ,$$

dove Δt è il tempo minimo necessario per effettuare una misura di energia con precisione ΔE . Se regoliamo la giunzione in modo tale che

$$E_{ch} \cdot \tau \lesssim \frac{\hbar}{2} \quad ,$$

allora non può esserci Coulomb blockade: alcune energie supereranno il valore della charging energy e ciò permetterà il tunneling. Chi è τ ? Siccome la particella passa in un condensatore una buona stima del tempo necessario affinché lo stesso dopo l’entrata della carica vada di nuovo all’equilibrio è data dalla costante di tempo. Abbiamo un circuito RC del tipo in

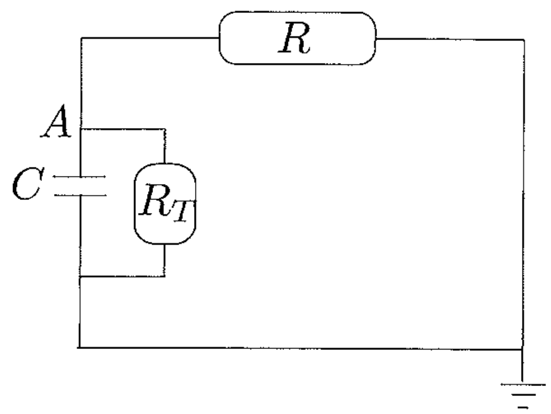


Illustrazione 2: Giunzione con capacità in un ambiente con resistenza R figura, con R_T resistenza di giunzione ed R resistenza dell'ambiente. Esplicitando la prima legge di Ohm possiamo pervenire alla seguente equazione differenziale

$$\frac{dq}{dt} = -\frac{q}{R_P \cdot C} \quad ,$$

con R_P parallelo tra le resistenze rappresentate poco sopra. La soluzione è

$$q(t) = q_0 \cdot \mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}} \quad \text{, con} \quad \tau = R_P \cdot C \quad .$$

Avendo stimato τ posso riconsiderare il principio di indeterminazione

$$E_C \cdot \tau = \frac{e^2 \cdot R_P \cdot C}{2 \cdot C} = \frac{e^2 \cdot R_P}{2} > \frac{\hbar}{2} \Rightarrow R_p > R_q \quad \text{, con} \quad R_q = \frac{\hbar}{e^2} \quad .$$

Si può esprimere la condizione anche in termini delle inverse, cioè le conduttanze. Se la resistenza è fatta in modo tale da superare un certo quanto di resistenza allora può avvenire il fenomeno del Coulomb blockade. Il quanto di resistenza ha un valore di 4108 Ω.

2. Ulteriori considerazioni sulla scatola di singolo elettrone

Considero ora una scatola di singolo elettrone schematizzata dal disegno. Se la tensione di gate è zero allora non ci saranno cariche in eccesso o in difetto sull'isola. Se accendo invece la tensione di gate caricherò l'isola e determinerò un certo accumulo di carica. Voglio determinare la charging energy del sistema in funzione dello stato di carica. Conosco due relazioni

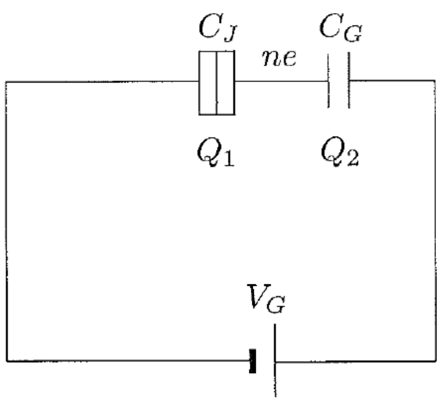


Illustrazione 3: Scatola di singolo elettrone

$$Q_1 + Q_2 = -ne \quad \text{e} \quad V_G = \frac{Q_1}{C_j} - \frac{Q_2}{C_G} \quad .$$

Elimino le cariche scrivendole in funzione dei potenziali

$$Q_1 = C_j \cdot U \quad \text{e} \quad Q_2 = -C_G \cdot (V_G - U) \quad .$$

U, che è la tensione sulla prima giunzione non la conosco, ma la posso determinare facilmente. Infatti

$$Q_1+Q_2=C_j\cdot U-C_G\cdot(V_G-U)=-n\cdot e\Rightarrow U\cdot(C_j+C_G)=C_G\cdot V_G-n\cdot e \quad ,$$

da cui

$$U=\frac{-n\cdot e+C_G\cdot V_G}{C_J+C_G} \quad .$$

Definisco due grandezze: $C=C_J+C_G$ e $Q_G=C_G\cdot V_G$. La seconda è chiamata carica di gate. La charging energy sarà la somma delle energie elettrostatiche dei due condensatori più il lavoro di estrazione delle cariche dell'isola da parte del gate.

$$E_{ch}(n,Q_G)=\frac{Q_1^2}{2C_J}+\frac{Q_2^2}{2C_G}+V_G\cdot Q_2=\frac{C_j\cdot U^2}{2}+\frac{C_G\cdot U^2}{2}+\frac{C_G\cdot V_G}{2}-C_G\cdot V_G\cdot U-C_G\cdot V_G^2+C_G\cdot V_G\cdot U \quad ,$$

da cui si ricava

$$\frac{(n\cdot e-Q_G)^2}{2\cdot C}-\frac{1}{2}\cdot Q_G\cdot V_G \quad .$$

Dal grafico si notano dei punti di degenerazione. Essi sono in corrispondenza di

$$\frac{Q_G}{e}=n+\frac{1}{2} \quad .$$

Variando la tensione di gate possiamo ottenere transizioni senza introdurre alcuna tensione di bias.

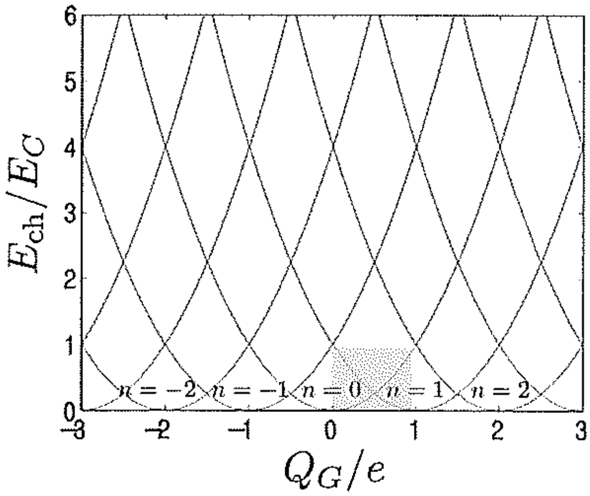


Illustrazione 4: Andamento della charging energy per diversi stati di carica positivi in una scatola di singolo elettrone

3. Transistor a singolo elettrone

L'isola può essere usata anche come transistor. In tal caso si applicheranno la tensione di bias (sul source e sul drain) ed una tensione di gate. L'intensità di corrente sarà controllata dalla tensione di bias e lo stato di carica dell'isola dalla tensione di gate, come in tutti i transistor. Questo è un transistor ad effetto di campo, perché in esso circola un solo tipo di corrente. Si può analogamente calcolare la charging energy e viene

$$E_{ch}(n, Q_G) = \frac{(n \cdot e - Q_G)^2}{2 \cdot C} \quad ,$$

dove ora però $C = C_L + C_R + C_G$ e $Q_G = C_G \cdot V_G + C_L \cdot V_L + C_R \cdot V_R$.

I bilanci delle varie transizioni sono

$$\Delta E_{FL} = E_{ch}(n+1, Q_G) - E_{ch}(n, Q_G) - e \cdot V_L \quad ,$$
$$\Delta E_{TL} = E_{ch}(n-1, Q_G) - E_{ch}(n, Q_G) + e \cdot V_L \quad ,$$
$$\Delta E_{FR} = E_{ch}(n+1, Q_G) - E_{ch}(n, Q_G) - e \cdot V_R \quad ,$$
$$\Delta E_{TR} = E_{ch}(n-1, Q_G) - E_{ch}(n, Q_G) + e \cdot V_R \quad .$$

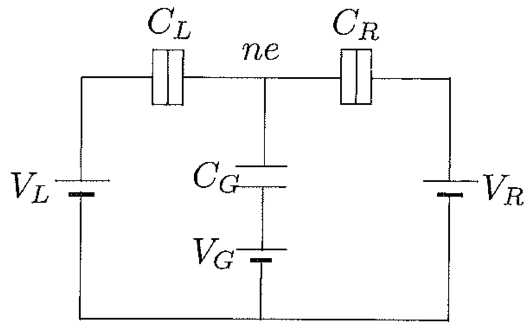


Illustrazione 5: Transistor a singolo elettrone

Il pedice FL per esempio indica "da sinistra", mentre TL "a sinistra", e lo stesso per la destra. Nel primo caso la transizione porta l'isola da uno stato di carica N ad uno N+1 con del lavoro di estrazione negativo. Nel secondo caso invece lo stato di carica finale è quello ad N-1 elettroni, con lavoro di estrazione positivo. Secondo la convenzione sul lavoro, è positivo il lavoro che un sistema termodinamico fa sull'ambiente. In questo caso il sistema a cui ci riferiamo è l'isola. Se tutte le equazioni poco sopra sono tutte maggiori di zero allora si ha Coulomb blockade. Altrimenti ci sono vari casi. I più interessanti sono quelli in cui c'è un passaggio di corrente, o verso destra o verso sinistra. Se assumiamo che a sinistra venga applicata una tensione superiore che a destra, allora per poterci essere passaggio di corrente devono verificarsi contemporaneamente le due condizioni

$$\delta E_{ch} < e V_L \quad \text{e} \quad \delta E_{ch} > e V_R \quad ,$$

con $\delta E_{ch} \equiv E_{ch}(n+1, Q_G) - E_{ch}(n, Q_G) = \dfrac{[(n+1) \cdot e - Q_G]^2}{2 \cdot C} - \dfrac{(n \cdot e - Q_G)^2}{2 \cdot C}$.

Sviluppando i quadrati ottengo

$$\delta E_{ch} = \frac{n^2 \cdot e^2 + 2 \cdot n \cdot e^2 + e^2 + Q_G^2 - 2 \cdot Q_G \cdot n \cdot e - 2 \cdot Q_G \cdot e - n \cdot e^2 - Q_G^2 + 2 \cdot n \cdot e \cdot Q_G}{2 \cdot C} \quad ,$$

ed il risultato finale è

$$\delta E_{ch}=\left(n+\frac{1}{2}-\frac{Q_G}{e}\right)\cdot\frac{e^2}{C} \quad .$$

In questo caso fluirà una certa corrente da sinistra verso destra. È da notare che le equazioni di bilancio sono identiche nel caso della scatola di singolo elettrone a patto di mettere le charging energy opportune. Se la soppressione avviene su una sola giunzione si parla di Coulomb blockade dinamico. Se $V_R \neq V_L$ il sistema non può essere in equilibrio. Ci saranno determinate oscillazioni da uno stato ad un altro che ci aspettiamo dipendere dalla tensione di gate oltre che da quella di bias. Nel terzo capitolo farò vedere che ciò si riflette nelle probabilità di trovare l'isola in un certo stato di carica.

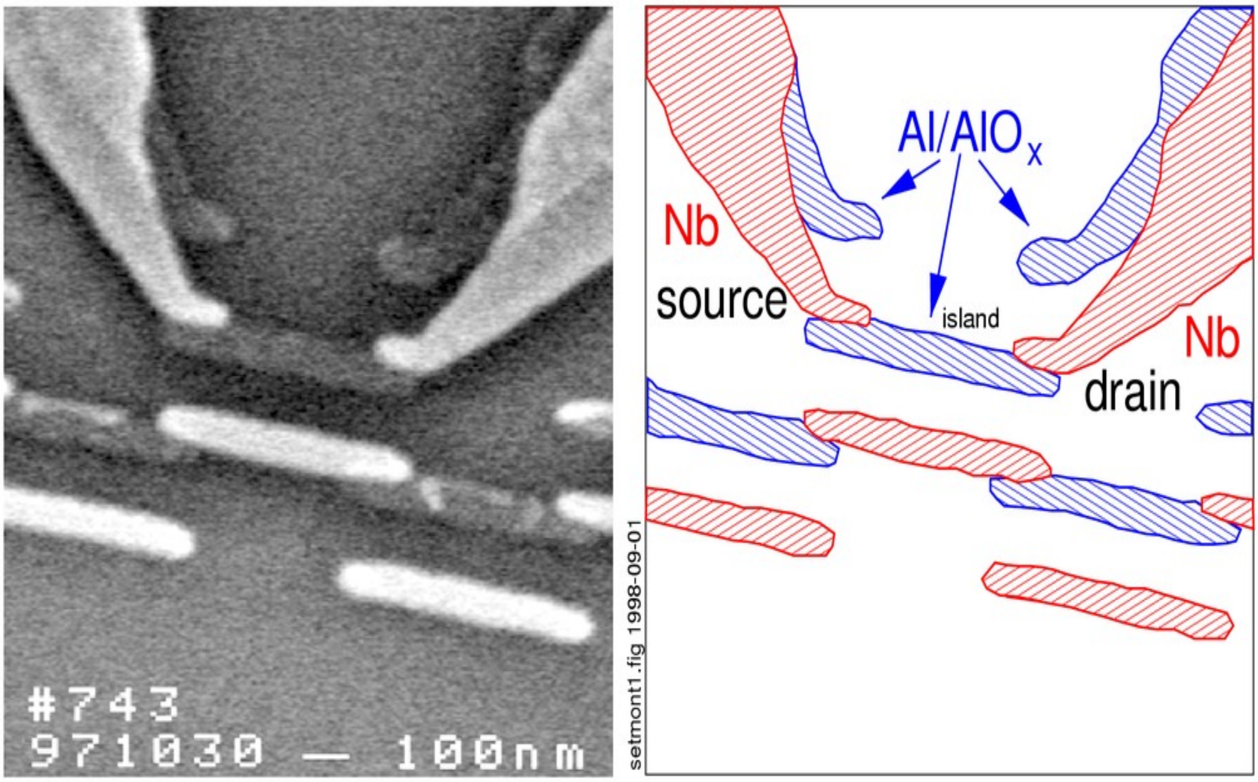


Illustrazione 6: Sinistra - Fotografia di un SET ottenuta con l'ausilio di un microscopio. Destra - Schema del SET – La fotografia è stata scattata da Torsten Henning a Goteborg nel 999 e pubblicata nella tesi di dottorato "Charging effects in niobium nanostructures".

Nella fotografia si può notare la dimensione dell'isola che è di circa 400 nm. In questo caso il source ed il drain sono in niobium ed il dispositivo viene fatto funzionare in regime superconduttivo. Il dispositivo che descrivo nella mia tesi non lo analizzo nelle condizioni in cui funziona in regime superconduttivo.

4. Diamanti di Coulomb

Si possono rappresentare le condizioni di bilancio in un diagramma e vedere che allo zero assoluto, in quel diagramma, la zona dei parametri in cui c'è Coulomb blockade ha una precisa connotazione geometrica. Considero le condizioni di bilancio per n=0. Supponiamo capacità simmetriche e voltaggi di bias antisimmetrici.

$$\delta E_{FL}=2\cdot E_{ch}\cdot\left(\frac{1}{2}+\frac{Q_G}{e}\right)-\frac{e\cdot V}{2}>0$$

$$\delta E_{TL}=2\cdot E_{ch}\cdot\left(-\frac{1}{2}+\frac{Q_G}{e}\right)+\frac{e\cdot V}{2}>0$$

$$\delta E_{FR}=2\cdot E_{ch}\cdot\left(\frac{1}{2}+\frac{Q_G}{e}\right)+\frac{e\cdot V}{2}>0$$

$$\delta E_{TR}=2\cdot E_{ch}\cdot\left(-\frac{1}{2}+\frac{Q_G}{e}\right)-\frac{e\cdot V}{2}>0$$

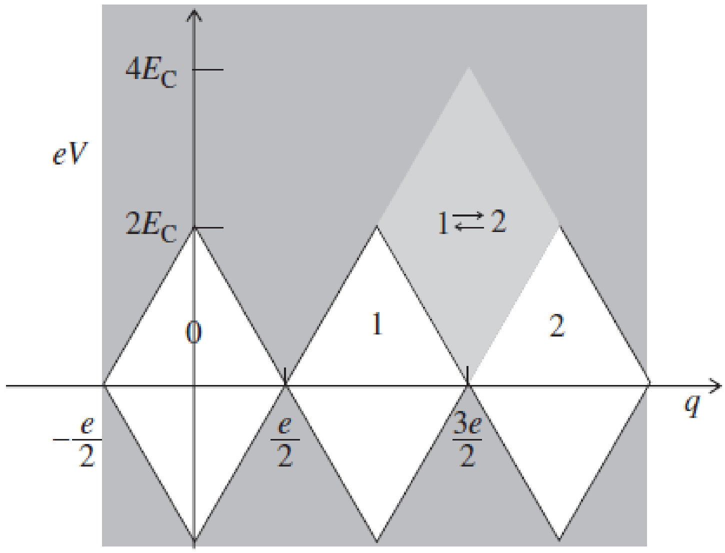


Illustrazione 7: Diamanti di Coulomb in un SET

Se le espressioni sono considerate come equazioni tutte e quattro danno un rombo detto diamante. Se consideriamo le condizioni di Coulomb blockade per tutti gli n otteniamo dei rombi tutti traslati di una carica di gate, quindi perfettamente periodici. In questo caso siamo allo zero assoluto e si suppone che all'interno dei diamanti non ci siano correnti. In realtà, negli esperimenti, si riscontra sempre una certa corrente. Bisogna inoltre notare che esistono dei punti di degenerazione. Sono i punti in cui la tensione di gate è tale da non far vedere all'elettrone la barriera di potenziale. Quindi esso passa, ma senza fare tunneling.

Capitolo 3 – Master equation e sistema a due stati di carica

In questo capitolo ricaverò l'espressione della corrente in funzione della tensione di bias ed in funzione della tensione di gate. Assumerò calcolati i rates così da poter scrivere la master equation e risolverla in condizioni stazionarie accoppiandola con la condizione di normalizzazione. Le soluzioni della master equation unite alle espressioni dei rates serviranno a calcolare la corrente media. Il calcolo dei rates sarà poi fatto in appendice.

1. Master equation

Ogni teoria della fisica contiene determinate equazioni le quali sotto certe condizioni daranno risultati con un certo significato fisico. In meccanica classica dato un certo sistema con certe masse, sottoposto ad un certo campo di forze, vogliamo conoscere posizione e velocità a tutti gli istanti [C. Mencuccini - V. Silvestrini, "Fisica generale 1"]. In elettromagnetismo data una certa distribuzione di carica vogliamo conoscere il valore del campo elettromagnetico in ogni punto dello spazio-tempo [C. Mencuccini - V. Silvestrini, "Fisica generale 2"] [R. Resnick, "Introduction to special relativity"]. In meccanica quantistica classica ciò che invece caratterizza il sistema è un certo stato, il cui modulo quadro dà una densità di probabilità in rapporto a possibili misure di posizione [C. Cohen Tannoudji – B. Diu – F. Laloe, "Quantum Mechanics"]. Nella teoria di Averin e Likharev dati certi rates vogliamo calcolare la probabilità di certi stati di carica [T. Heikkila, "The physics of nanoelettronics"] [Y. V. Nazarov - Y. M. Blanter, "Quantum transport"]. Gli stati di carica sono stati quantistici? Ciò che caratterizza il sistema sotto esame, cioè l'isola fatta di filo metallico è il suo stato di carica. Nonostante che il processo, in cui entra in gioco il tunneling, sia un processo casuale, lo stato di carica non è uno stato quantistico; perché non è conforme al principio di sovrapposizione della meccanica quantistica. Ho anticipato che dovrò risolvere la master equation, che è un'equazione di bilancio tra variazioni di probabilità rispetto al tempo. Perché non fare il bilancio rispetto alle probabilità? Perché in questo caso abbiamo a disposizione la regola aurea di Fermi. Io considero il più basso ordine perturbativo, e quindi in un singolo processo potrà avvenire la transizione di un solo elettrone.
L'equazione fondamentale per determinare la probabilità dello stato di carica è

$$\frac{dP(n,t)}{dt} = -[\Gamma_{LI}(n)+\Gamma_{IL}(n)+\Gamma_{RI}(n)+\Gamma_{IR}(n)]\cdot P(n,t)+[\Gamma_{LI}(n-1)+\Gamma_{RI}(n-1)]\cdot P(n-1,t)+\text{¿}$$
$$+[\Gamma_{IL}(n+1)+\Gamma_{IR}(n+1)]\cdot P(n+1,t) \quad ,$$

dove la funzione $P(n,t)$ è la probabilità di trovare l'isola nell'n-esimo stato di carica ed è classica. Per quanto riguarda i rates mi basta scriverne l'espressione di uno solo per conoscere anche gli altri, perché basterà cambiare la tensione a seconda che coinvolga il lead destro o sinistro nelle varie transizioni e poi basta considerare la charging energy opportuna sempre a seconda della transizione. Considero il rate relativo alla transizione lead sinistro-isola:

$$\Gamma_{LI}(n) = \frac{1}{e^2\cdot R_T}\cdot|\delta E_{ch}(n)-e\cdot V_L|\cdot\theta(e\cdot V_L-\delta E_{ch}(n)) \quad ,$$

dove $\delta E_{ch}(n)$ è la charging energy relativa alla transizione dallo stato n allo stato n+1, V_L è la tensione sul lead sinistro, e è la carica dell'elettrone ed R_T è la resistenza di giunzione. La funzione θ assume valore uno per argomenti positivi e zero per argomenti negativi o nulli.

Questa espressione, valida allo zero assoluto, sarà comunque calcolata esplicitamente in appendice. Voglio risolvere la master equation nel caso di due stati di carica in condizioni stazionarie. Cioè nelle seguenti condizioni

$$\frac{dP(n,t)}{dt}=0 \quad \text{e} \quad I_L=-I_R \quad .$$

Il sistema lavora tra gli stati 0 e 1 a bassissime temperature e solo per bassi valori della tensione di gate e della tensione di bias. Scrivendo l'equazione delle correnti utilizzando le loro definizioni ottengo

$$e\cdot\sum_n [\Gamma_{LI}(n)-\Gamma_{IL}(n)]\cdot P(n)=-e\cdot\sum_n [\Gamma_{RI}(n)-\Gamma_{IR}(n)]\cdot P(n) \quad .$$

L'equazione deve valere per ogni n, con n variabile intera. Quindi vale anche la relazione

$$\sum_n [\Gamma_{LI}(n)+\Gamma_{RI}(n)]\cdot P(n)=\sum_{n+1} [\Gamma_{IL}(n+1)+\Gamma_{IR}(n+1)]P(n+1) \quad ,$$

da cui ancora

$$[\Gamma_{LI}(n)+\Gamma_{RI}(n)]\cdot P(n)=[\Gamma_{IL}(n+1)+\Gamma_{IR}(n+1)]\cdot P(n+1) \quad .$$

Così la master equation in condizioni stazionarie è

$$-[\Gamma_{IL}(n)+\Gamma_{IR}(n)]\cdot P(n)+[\Gamma_{LI}(n-1)+\Gamma_{RI}(n-1)]\cdot P(n-1)=0 \quad .$$

La master equation contiene delle probabilità, pertanto dovrà valere anche una condizione di normalizzazione. Devo risolvere il seguente sistema nel caso particolare di n=0 ed n=1, allora

$$\begin{cases} [\Gamma_{IL}(1)+\Gamma_{IR}(1)]\cdot P(1)=[\Gamma_{LI}(0)+\Gamma_{RI}(0)]\cdot P(0) \quad , \\ P(0)+P(1)=1 \quad . \end{cases}$$

Applicando il metodo di sostituzione pervengo al risultato

$$
\begin{cases}
[\Gamma_{IL}(1)+\Gamma_{IR}(1)]-[\Gamma_{IL}(1)+\Gamma_{IR}(1)]\cdot P(0)=[\Gamma_{LI}(0)+\Gamma_{RI}(0)]\cdot P(0) \quad , \\
P(1)=1-P(0) \quad .
\end{cases}
$$

$$
\begin{cases}
P(0)=\dfrac{\Gamma_{IL}(1)+\Gamma_{IR}(1)}{\Gamma} \quad , \\
P(1)=\dfrac{\Gamma_{LI}(0)+\Gamma_{RI}(0)}{\Gamma} \quad ,
\end{cases}
$$

con $\quad \Gamma=\Gamma_{IL}(1)+\Gamma_{LI}(0)+\Gamma_{IR}(1)+\Gamma_{RI}(0) \quad .$

Riporto in questo caso specifico le espressioni di tutti i rates. Come visibile nell'illustrazione 8 queste sono le uniche possibili nel caso in esame

$$
\begin{aligned}
\Gamma_{LI}(0)&=\frac{1}{e^2\cdot R_T}\cdot|\delta E_{ch}-e\cdot V_L|\cdot\theta(e\cdot V_L-\delta E_{ch}) \quad , \\
\Gamma_{RI}(0)&=\frac{1}{e^2\cdot R_T}\cdot|\delta E_{ch}-e\cdot V_R|\cdot\theta(e\cdot V_R-\delta E_{ch}) \quad , \\
\Gamma_{IR}(1)&=\frac{1}{e^2\cdot R_T}\cdot|-\delta E_{ch}+e\cdot V_R|\cdot\theta(-e\cdot V_R+\delta E_{ch}) \quad , \\
\Gamma_{IL}(1)&=\frac{1}{e^2\cdot R_T}\cdot|-\delta E_{ch}+e\cdot V_L|\cdot\theta(-e\cdot V_L+\delta E_{ch}) \quad .
\end{aligned}
$$

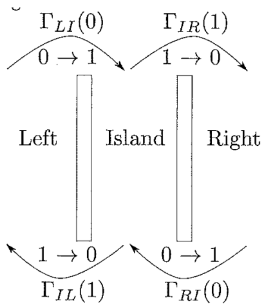


Illustrazione 8: Possibili transizioni in un sistema a due stati di carica

Ometto lo stato di partenza della transizione nella charging energy perché qui sono possibili solo due transizioni (vedi illustrazione 8) e ci sono transizioni relative alla sinistra ed alla destra. Per capire come ho scritto i rates considero la seguente variazione di energia relativa alle transizioni che coinvolgono il lead sinistro

$$
\delta E_{ch}^{L}=\pm[(\frac{1}{2}-\frac{Q_G}{e})\cdot\frac{e^2}{C}-\frac{e\cdot V}{2}] \quad ,
$$

assumendo che $\quad e\cdot V_L=-e\cdot V_R=\dfrac{e\cdot V}{2} \quad .$

Nella transizione dall'elettrodo all'isola la variazione di energia ha segno positivo, mentre il segno è negativo per la transizione inversa. Quando si considerano le transizioni a destra basterà cambiare segno a V . Come già anticipato, il calcolo dei rates e delle probabilità serve alla determinazione della corrente. Considero solo l'espressione per quella sinistra, per la destra si scrive analogamente

$$I_L = e \cdot \sum_n [\Gamma_{LI}(n) - \Gamma_{IL}(n)] \cdot P(n) \quad .$$

Calcolo la corrente nel caso in esame omettendo il pedice

$$I = e \cdot [\Gamma_{LI}(0) \cdot P(0) - \Gamma_{IL}(1) \cdot P(1)] = e \cdot \frac{\Gamma_{LI}(0) \cdot \Gamma_{IR}(1) - \Gamma_{RI}(0) \cdot \Gamma_{IL}(1)}{\Gamma} = e \cdot \frac{\Gamma_{LI}(0) \cdot \Gamma_{IR}(1)}{\Gamma} \quad .$$

Se V>0 e siamo allo zero assoluto allora non c'è corrente verso sinistra (vedere illustrazione 8). Vediamo le condizioni per il non annullamento delle θ

$$\begin{cases} e \cdot V_L - \delta E_{ch} \geq 0 \quad , \\ \delta E_{ch} - e \cdot V_R \geq 0 \quad , \end{cases} \qquad \begin{cases} (\frac{1}{2} - \frac{Q_G}{e}) \cdot \frac{e^2}{C} - \frac{e \cdot V}{2} \leq 0 \quad , \\ (\frac{1}{2} - \frac{Q_G}{e}) \cdot \frac{e^2}{C} + \frac{e \cdot V}{2} \geq 0 \quad , \end{cases} \qquad \begin{cases} \frac{e^2}{2 \cdot C} - \frac{Q_G \cdot e}{C} - \frac{e \cdot V}{2} \leq 0 \quad , \\ \frac{e^2}{2 \cdot C} - \frac{Q_G \cdot e}{C} + \frac{e \cdot V}{2} \geq 0 \quad , \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{e}{2} - Q_G - \frac{C \cdot V}{2} \leq 0 \quad , \\ \frac{e}{2} - Q_G + \frac{C \cdot V}{2} \geq 0 \quad , \end{cases} \qquad \begin{cases} Q_G - \frac{e}{2} \geq -\frac{C \cdot V}{2} \quad , \\ Q_G - \frac{e}{2} \leq \frac{C \cdot V}{2} \quad , \end{cases}$$

$$\left| Q_G - \frac{e}{2} \right| \leq \frac{C \cdot |V|}{2} \quad .$$

Ora procedo al calcolo del denominatore

$$\Gamma = \Gamma_{LI}(0) + \Gamma_{IR}(1) = \frac{1}{e^2 \cdot R_T} \cdot (|\delta E_{ch} - e \cdot V_L| + |-\delta E_{ch} + e \cdot V_R|) = \frac{1}{e^2 \cdot R_T} \cdot (-\delta E_{ch} + e \cdot V_L + \delta E_{ch} - e \cdot V_R) \quad ,$$

$$\Gamma = \frac{V}{e \cdot R_T} \quad .$$

Ora passo al numeratore

$$\Gamma_{LI}(0)\cdot\Gamma_{IR}(1)=\left(\frac{1}{e^2\cdot R_T}\left|\delta E_{ch}-e\cdot V_L\right|\right)\left(\frac{1}{e^2\cdot R_T}\left|-\delta E_{ch}+e\cdot V_R\right|\right)=\frac{1}{e^4\cdot R_T^{\;2}}\left(\frac{e^2\cdot V^2}{4}-\delta E_{ch}^{\;2}\right) \quad ,$$

cioè

$$\frac{V}{4\cdot e^2\cdot R_T^{\;2}}\cdot\left[V-\frac{4\cdot e^2}{C^2\cdot V}\cdot\left(\frac{1}{2}-\frac{Q_G}{e}\right)^2\right] \quad ,$$

quindi l'espressione finale è

$$I=\frac{1}{4\cdot R_T}\cdot\left[V-\frac{4\cdot e^2}{C^2\cdot V}\cdot\left(\frac{1}{2}-\frac{Q_G}{e}\right)^2\right]\cdot\theta\left(\left|Q_G-\frac{e}{2}\right|-\frac{C\cdot|V|}{2}\right) \quad ,$$

dove ho considerato $R_L=R_R=R_T$.

Chiaramente la corrente circolante nel lead non è conforme alla prima legge di Ohm. Si può generalizzare il calcolo considerando sistemi a tre stati, a quattro e così via, ma la complessità dello stesso cresce rapidamente.

Di seguito riporto i grafici dei rates, delle probabilità e della corrente. Tutte le funzioni sono espresse in funzione della tensione di bias e della tensione di gate. Allo zero assoluto e per tensioni di bias positive gli unici rates non nulli sono quelli che producono una corrente da sinistra verso destra. Grafico tutto in unità adimensionali. Noto infatti che dalle tre grandezze, il cui valore è sperimentale

$$R_T=340\,K\Omega \quad , \quad C=1.3\,fF \quad , \quad C_G=0.3\,fF \quad ,$$

è possibile ricavare dimensionalmente tutte le grandezze di interesse

$$\tau=R_T\cdot C=4.42\cdot10^{-10}\,s \quad ,$$

$$V=\frac{e}{C}=1.24\cdot10^{-4}\,V \quad ,$$

$$E=\frac{e^2}{C}=1.96\cdot10^{-23}\,J \quad ,$$

$$I=\frac{e}{\tau}=3.62\cdot10^{-10}\,A \quad .$$

Scrivo uno dei rates in unità adimensionali moltiplicando e dividendo l’energia per $\frac{e^2}{C}$.

$$\Gamma_{LI}(0)=\frac{1}{e^2\cdot R_T}\cdot\left|\delta E_{ch}-\frac{e\cdot V}{2}\right|\cdot\theta\left(\frac{e\cdot V}{2}-\delta E_{ch}\right)=\frac{1}{\tau}\cdot\left|\delta \bar{E}_{ch}-\frac{e\cdot\bar{V}}{2}\right|\cdot\theta\left(\frac{e\cdot\bar{V}}{2}-\delta \bar{E}_{ch}\right) \quad .$$

Moltiplico ambo i membri per τ ed ottengono

$$\Gamma_{LI}(0)\cdot\tau=\left|\delta \bar{E}_{ch}-\frac{e\cdot\bar{V}}{2}\right|\cdot\theta\left(\frac{e\cdot\bar{V}}{2}-\delta \bar{E}_{ch}\right) \quad .$$

Per la corrente uso l’espressione

$$I=e\cdot\frac{\Gamma_{LI}(0)\cdot\Gamma_{IR}(1)}{\Gamma} \quad .$$

Se divido ambo i membri per $\frac{e}{\tau}$ ottengo l’espressione adimensionale

$$\frac{I\cdot\tau}{e}=\frac{\Gamma_{LI}(0)\cdot\Gamma_{IR}(1)}{\Gamma} \quad .$$

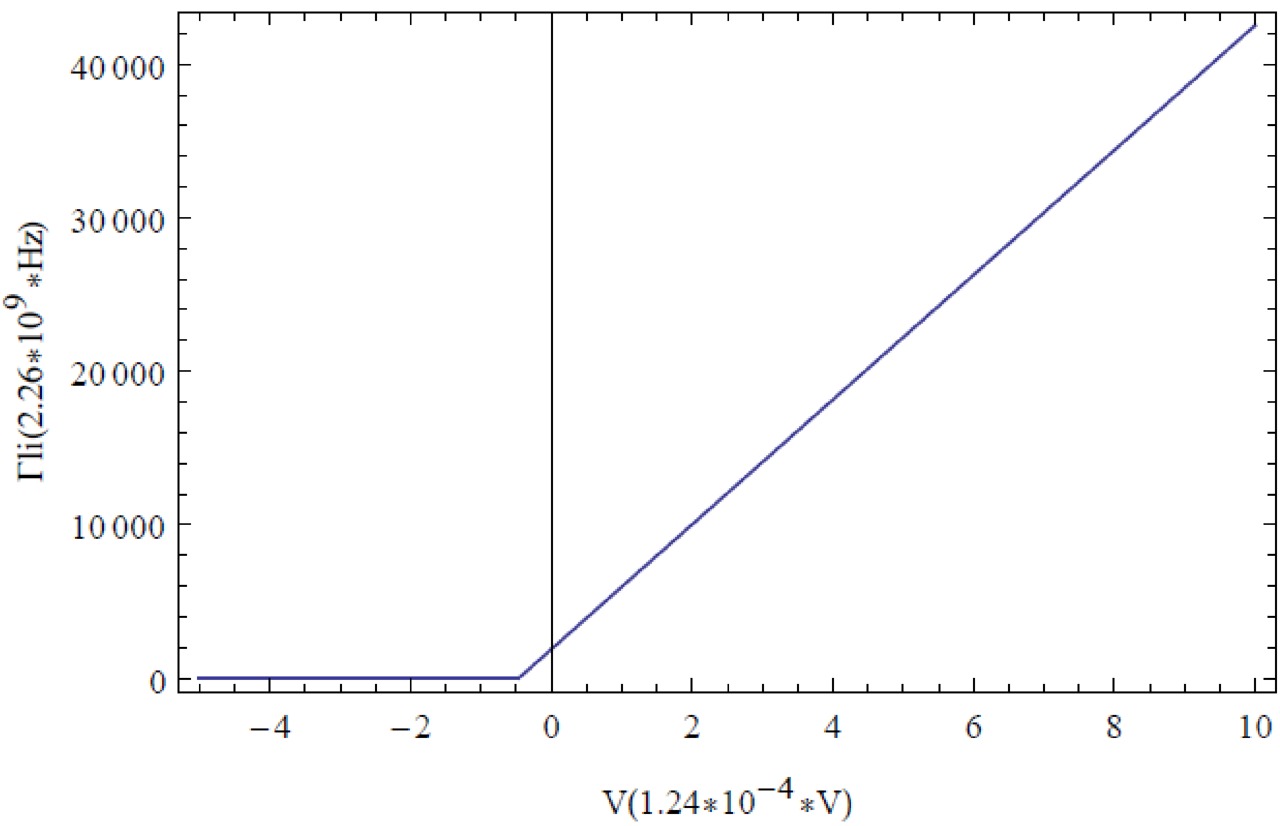


Illustrazione 8: Rate relativo alla transizione di un elettrone dal lead sinistro all'isola in funzione della tensione di bias

Questo è l'andamento del rate relativo alla transizione lead sinistro-isola per una tensione di gate di un volt. La tensione di gate anche nei grafici seguenti sarà sempre fissata ad un volt. Si nota bene la regione del Coulomb blockade e poi una crescita lineare. La regione di Coulomb Blockade è caratterizzata dal fatto che non sono possibili transizioni, infatti il rate è nullo. Ciò che annulla il rate è proprio la condizione, espressa nel secondo capitolo, secondo cui la tensione di bias non è superiore alla charging energy. Questa condizione è quella che annulla la teta di Heaviside nell'espressione del rate. Nella regione in cui non è soddisfatta la condizione di Coulomb blockade invece c'è un aumento lineare del rate. Siccome è in relazione con la corrente, si ritrova un risultato già noto, e cioè che aumentando la tensione di bias determino un aumento dell'intensità di corrente, perché anche l'altro rate ha un andamento lineare all'aumentare della tensione di bias.

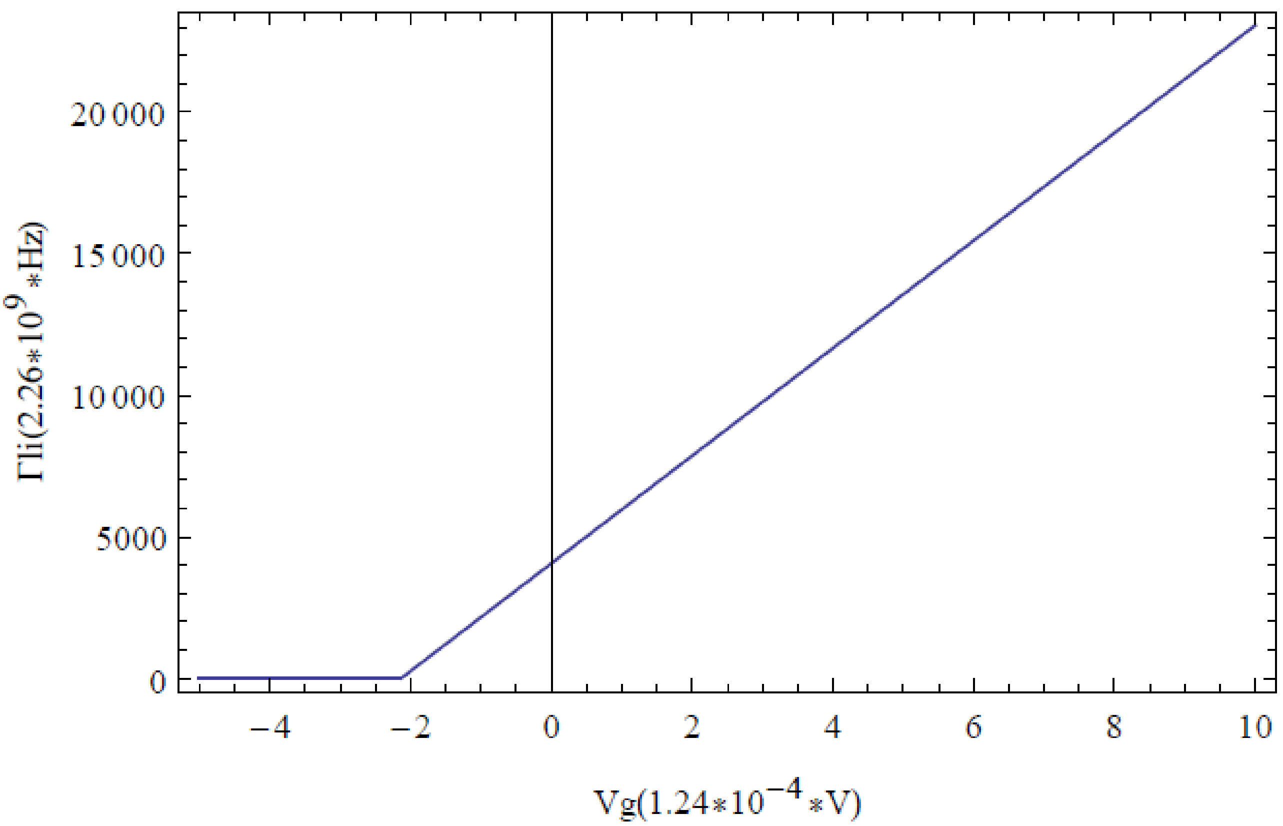


Illustrazione 9: Rate relativo alla transizione di un elettrone dal lead sinistro all'isola in funzione della tensione di gate

Questo invece è l’andamento dello stesso rate in funzione della tensione di gate. La tensione di bias è stata fissata ad un volt. Anche nei grafici seguenti la tensione di bias sarà fissata ad un volt. Anche in questo caso si ha un andamento lineare al di fuori della regione di Coulomb blockade per cui valgono considerazioni analoghe a quelle fatte per il precedente grafico. La regione di Coulomb blockade è anche qui determinata dalla condizione di Coulomb blockade. Il fenomeno ha una dipendenza anche dalla tensione di gate, come ho fatto vedere nel secondo capitolo, in quanto la charging energy dipende anche dalla tensione di gate. Ricordo che sto considerando il caso a due stati, e che la tensione di gate, come in tutti i transistor, modula la carica dell’isola. Se dunque aumentiamo la tensione di gate dobbiamo ottenere un aumento dello stato di carica, che però nel nostro caso può essere al massimo uno. Quindi l’andamento dell’altro rate deve essere in modo tale che la corrente si annulli quando si esce al di fuori del regime a due stati, e questo lo si può vedere nell’altro grafico del rate in funzione della tensione di gate poco sotto. La corrente rispetto alla tensione di bias può aumentare in quanto ciò non determina un’uscita dal regime a due stati, mentre ciò non può accadere nel caso di variazione della tensione di gate.

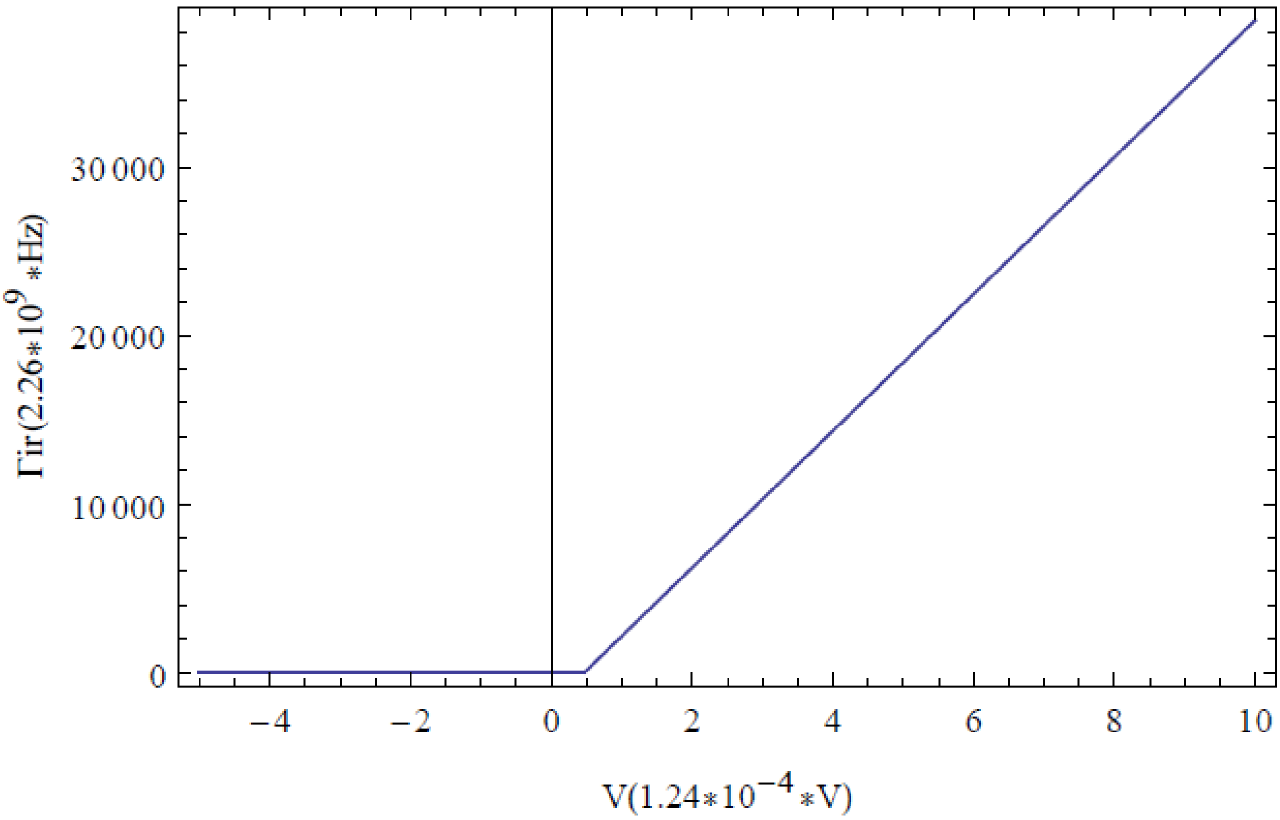


Illustrazione 10: Rate relativo alla transizione di un elettrone dall'isola al lead destro in funzione della tensione di bias

L’andamento del rate per transizioni dall’isola al lead destro in funzione della tensione di bias segue un andamento simile a quello dell’altro rate, qui però “il ginocchio” della curva sconfina nella parte positiva delle tensioni di bias. Il ginocchio è spostato a causa della differente charging energy la quale fa sentire il suo effetto sulla condizione di Coulomb blockade. Come già detto la corrente aumenterà con l’aumentare della tensione di bias. C’è da tenere presente comunque che i nostri risultati sono relativi ad un regime approssimato. In realtà i rates non potranno determinare mai, nella realtà, un aumento indefinito della corrente, ma ci si aspetta di arrivare ad un punto di massimo della corrente, fissata naturalmente la tensione di gate. Il modello che sto considerando è buono per basse temperature e basse tensioni. Chiaramente se si aumenta troppo la tensione di bias si finirà per non avere più risultati consistenti. Nella realtà ci sono dei limiti a cui il dispositivo è soggetto. Un aumento della tensione di bias, con relativo aumento anche della temperatura, determinerà prima il passaggio a stati di carica superiori e, se eccessiva, la rottura del dispositivo.

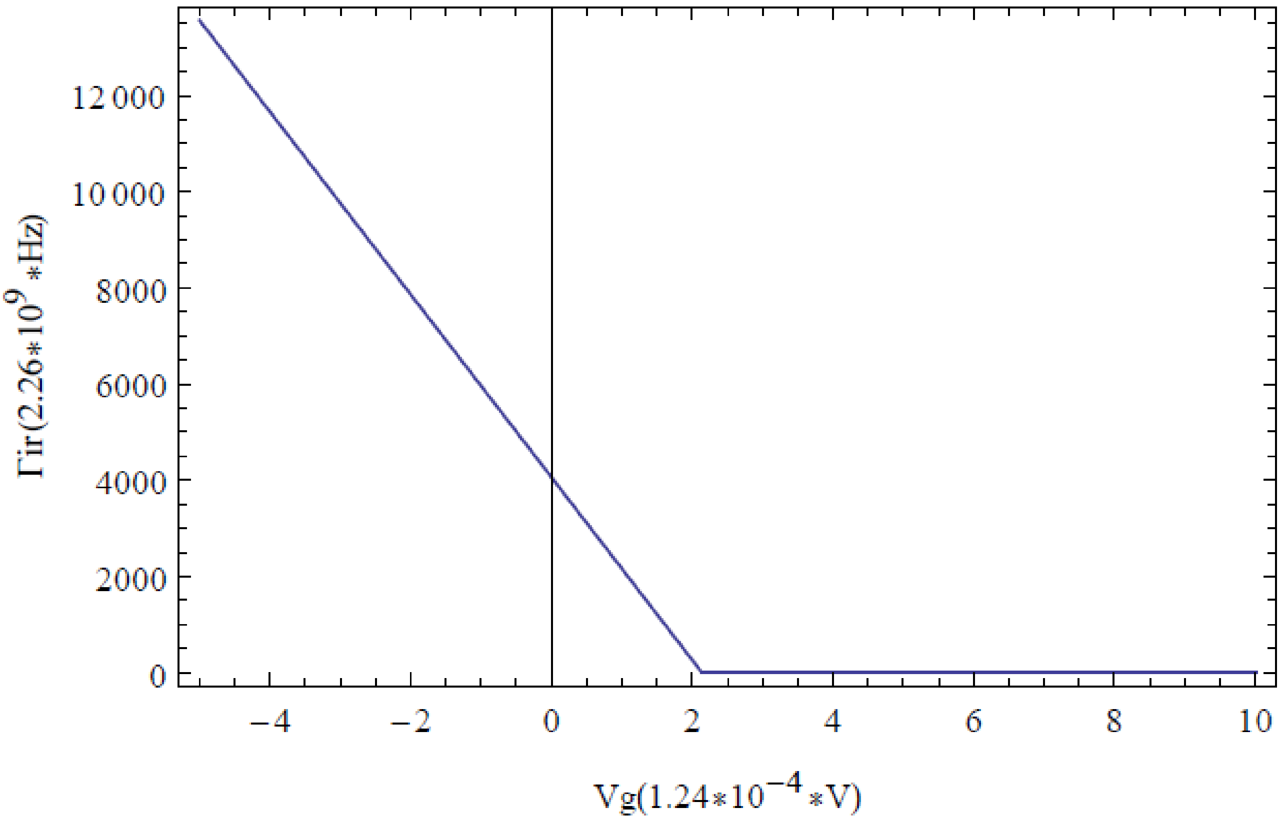


Illustrazione 11: Rate relativo alla transizione di un elettrone dall'isola al lead destro in funzione della tensione di gate

In questo caso la regione del Coulomb blockade è nella regione delle tensioni positive. Una piccola porzione di tale regione però ha comunque un rate non nullo. Se si confronta questo rate con l’altro, in funzione della tensione di gate, ci si rende conto che questo andamento permette una corrente non nulla solo all’interno di un certo intervallo di tale tensione. In questo caso la soglia del Coulomb blockade è più alta, e l’aumento del rate si ha abbassando la tensione di gate.

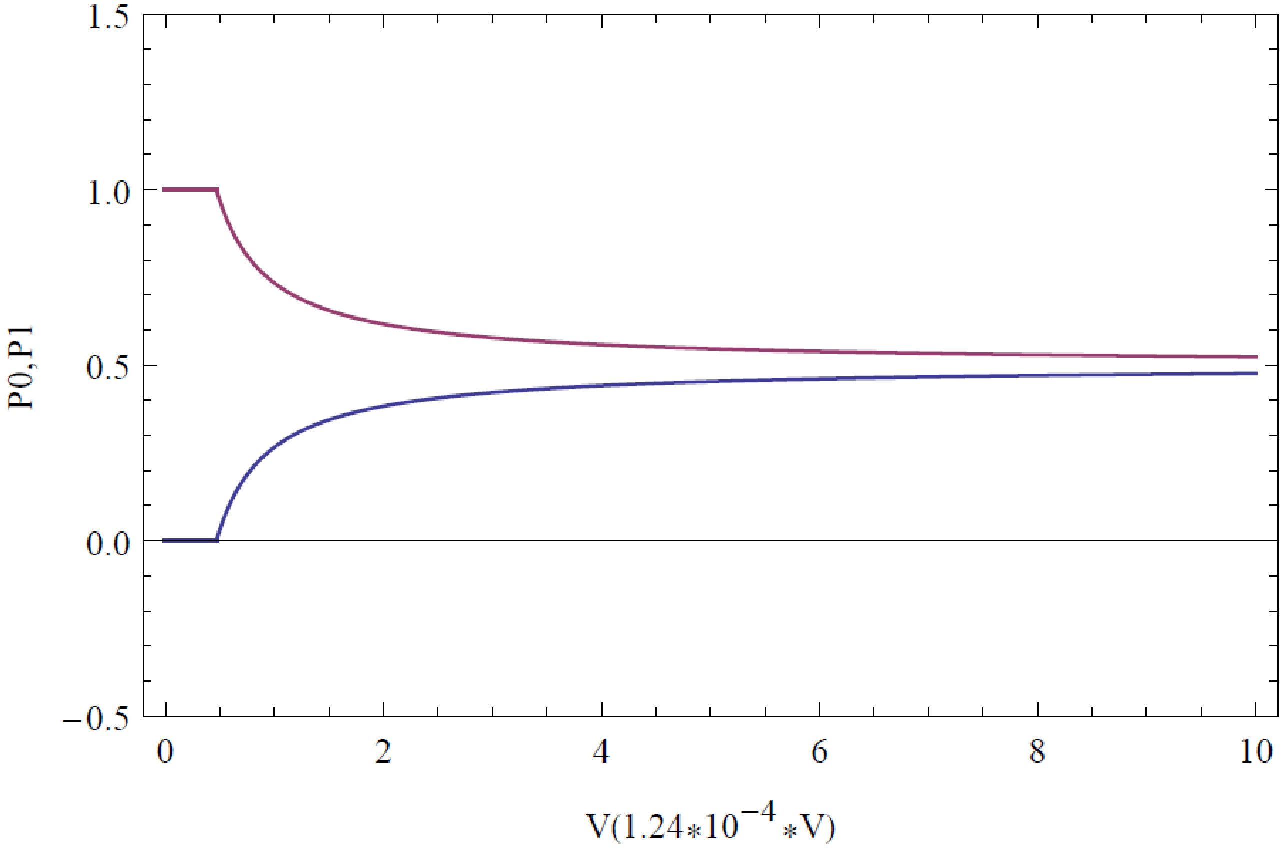


Illustrazione 12: Probabilità di trovare l'isola negli stati di carica 0 e 1 in funzione della tensione di bias

Queste sono le probabilità in funzione della tensione di bias. Le ho graficate insieme per far notare come sia soddisfatta la condizione di normalizzazione. Faccio notare come i grafici siano ad un fissato valore della tensione di gate, cioè un volt. Al di sotto di una certa tensione di bias la probabilità relativa allo stato zero è zero mentre quella relativa allo stato uno è uno. Questo riflette le differenti estensioni delle regioni di Coulomb blockade visibili dai grafici dei rates in funzione della tensione di bias. Superato il valore di soglia per entrambi i rates si determineranno delle oscillazioni dello stato di carica deducibili proprio dall'analisi del grafico.

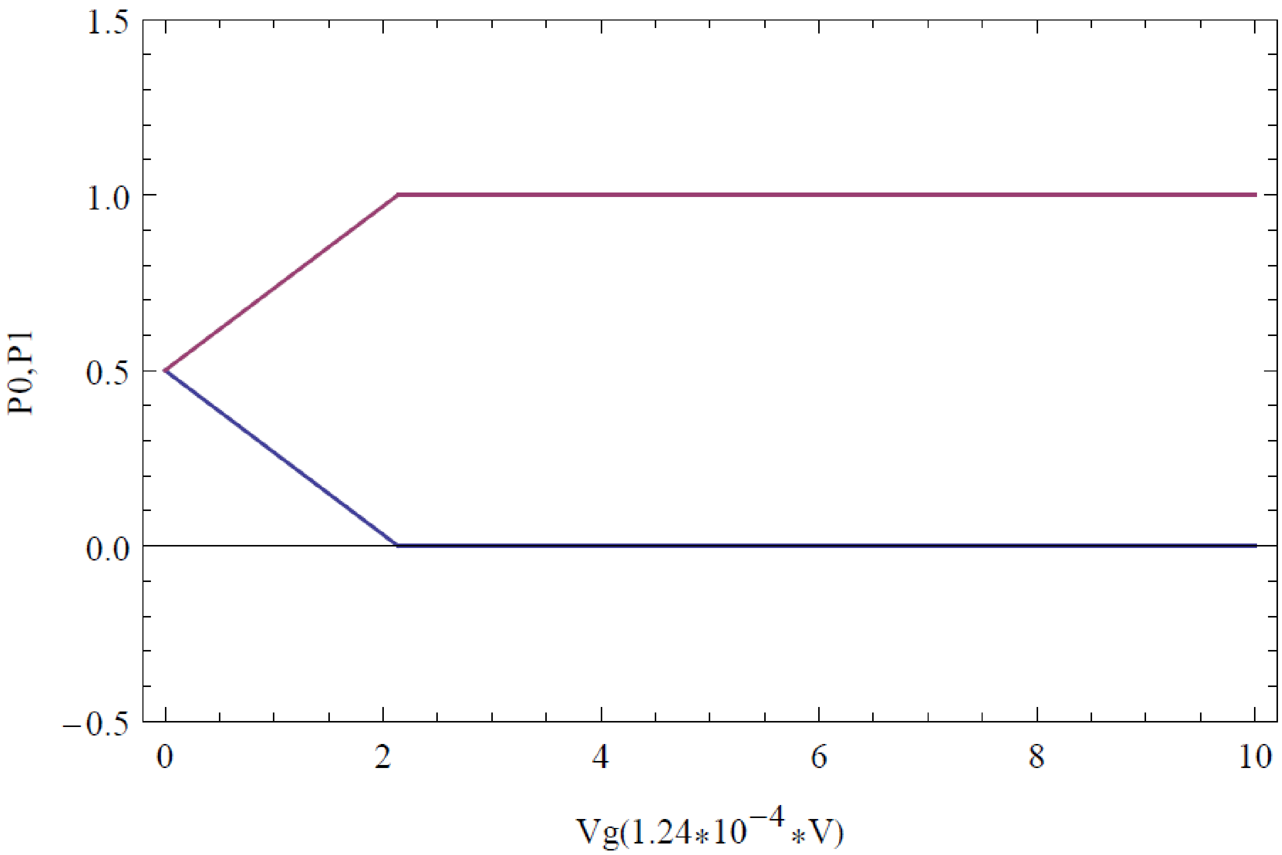


Illustrazione 13: Probabilità di trovare l'isola negli stati di carica 0 e 1 in funzione della tensione di gate

Qui l'andamento iniziale è lineare, poi oltre una certa tensione di gate il sistema si fisserà sul primo stato carico. Questo lo si può capire anche guardando l'illustrazione 4 del capitolo 2. In ogni caso ciò è comprensibile. Io sto analizzando il funzionamento al più basso ordine perturbativo, cioè il caso di transizione di singolo elettrone che esegue un tunneling di una sola barriera alla volta. Se si aumenta molto la tensione di bias non sarà più possibile un'isola neutra. Faccio anche notare, che in realtà un aumento sensibile della tensione di gate determinerà per l'isola stati di carica superiori a quello di un solo elettrone in eccesso.

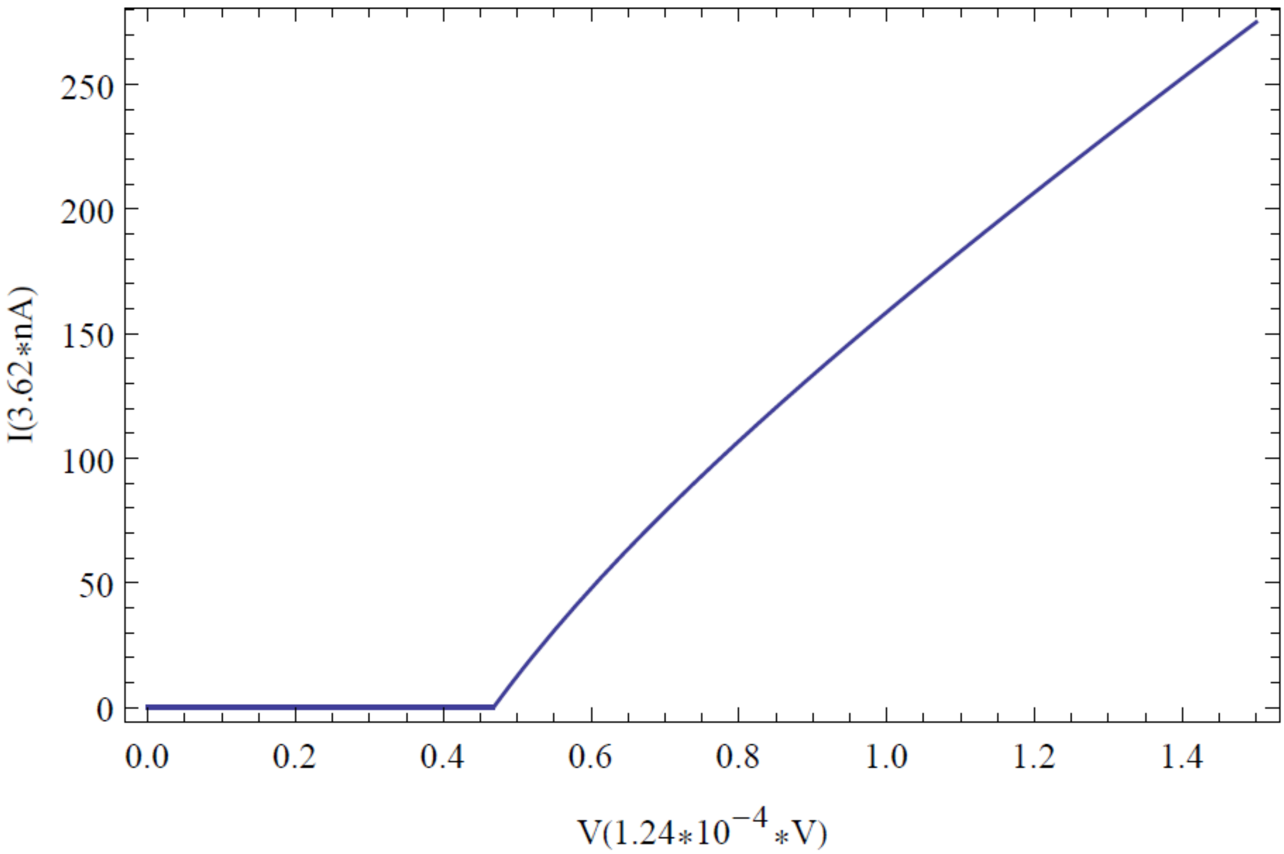


Illustrazione 14: Corrente che attraversa il dispositivo in funzione della tensione di bias

L’andamento della corrente in funzione della tensione di bias non è chiaramente di tipo Ohm. Anche al di fuori della regione di Coulomb blockade l’andamento non è lineare. Si può dire che è quasi lineare. Ciò che determina l’uscita dal regime lineare sono la quantizzazione della carica ed il tunneling. Ho ipotizzato entrambi i fenomeni per calcolare la corrente. I rates, come si vedrà in appendice, vengono calcolati utilizzando la regola aurea di Fermi. Nella regola aurea verrà considerato sia il contributo della barriera che il tipo di transizione, che riguarda un elettrone alla volta. Quindi ritrovo chiaramente la deviazione dalla prima legge di Ohm proprio per i due effetti menzionati nel primo capitolo: quantizzazione di carica e tunneling.

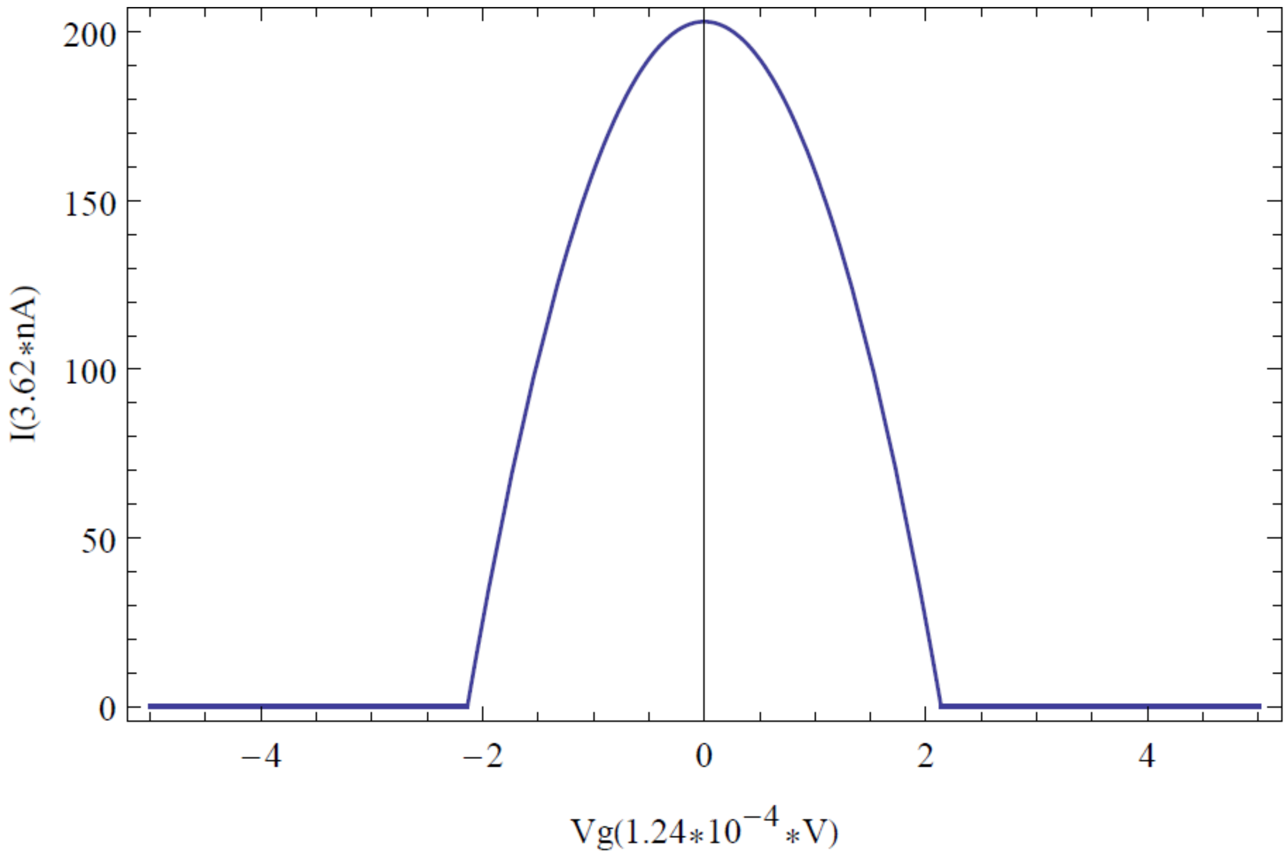
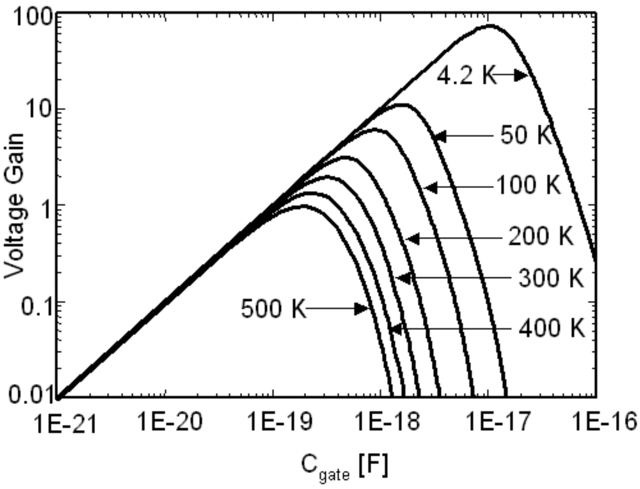


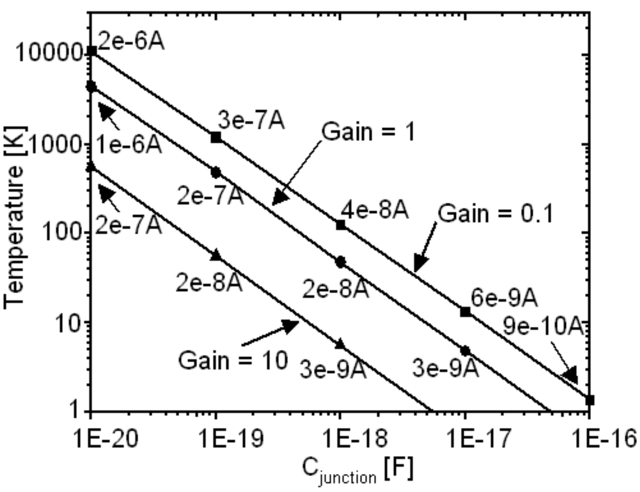
Illustrazione 15: Corrente che attraversa il dispositivo in funzione della tensione di gate

In quest'ultimo grafico si nota una zona limitata della tensione di gate, come ho anticipato, in cui non c'è Coulomb blockade. Noi stiamo considerando un sistema che funziona solo tra lo stato a carica zero e lo stato a carica uno. Naturalmente variando la tensione di gate entreremo in altri regimi ed il sistema inizierà a funzionare in altri stati (vedere illustrazione 4 del capitolo 2).

Conclusioni

Finora ho trattato il SET da un punto di vista puramente teorico. Ho dimostrato che la resistenza di giunzione non è di tipo ohmico e non è di tipo ohmico neppure il conduttore che costituisce l'isola. In particolare ho analizzato il fenomeno del Coulomb blockade facendo vedere che la sua esistenza può essere desunta da considerazioni esclusivamente classiche. Ho esposto la teoria di Averin e Likharev supponendo nota l'espressione dei rates, ed ho risolto la master equation nel caso a due stati. Ho analizzato l'andamento in funzione delle tensioni di tutte le grandezze di interesse nella teoria: i rates, le probabilità e la corrente. Nei commenti ho messo in luce anche i limiti dell'approccio a due stati. Aumentando le tensioni e la temperatura il sistema funzionerà tra un numero alto di stati di carica ma calcolare tutti i dettagli in condizioni meno estreme non è affatto semplice dal punto di vista matematico. Ora volgerò la mia attenzione alle possibili applicazioni del SET. Ho notato già che esiste un regime di totale assenza di corrente. È possibile considerare il regime di Coulomb blockade come uno zero? Per la realizzazione delle porte logiche è importante riuscire a costruire circuiti a transistor che riescano a funzionare tra soli due stati. Oppure, sono possibili invece applicazioni nel campo dell'elettronica analogica? I transistor bipolari e quelli ad effetto di campo sono utilizzabili sia come amplificatori che come elementi in circuiti digitali [J. Millman, "Circuiti e sistemi microelettronici"]. Il transistor a singolo elettrone (SET) purtroppo non può essere piegato a questi utilizzi. Esso presenta dei vantaggi che gli permettono di essere un utile strumento in alcune misurazioni fisiche, ma presenta anche degli svantaggi che gli impediscono di essere usati come i BJT ed i FET.
I SET possono essere fatti anche in semiconduttori, nanotubi in carbonio e singole molecole, ma in tali casi la teoria da me espressa non vale. Il SET in alluminio è il più usato nelle applicazioni. I transistor al silicio sono i più piccoli SET incorporati in circuiti che coinvolgono più di un transistor. Hanno capacità di circa 1 aF e charging energy corrispondenti di circa 20 meV. Usando alcune tecniche si è riusciti a diminuire la capacità ed aumentare la charging energy. Per esempio è stato fatto un set con isola in alluminio con capacità di 0,7 aF e charging energy di 115 meV e può operare agevolmente a temperatura ambiente. Con le molecole di C_{60} si è riusciti ad arrivare a 0,3 aF, corrispondenti a diametri di circa 1,4 nm. Finora la capacità più bassa che si è riuscita ad ottenere è 0,1 aF. Rimpicciolendo il transistor si ottengono effetti desiderabili come l'aumento della temperatura e della frequenza a cui si può operare però, crescono grandezze come il campo elettrico, il voltaggio a cui operare e la potenza dissipata per unita di area; mentre diminuisce il guadagno in tensione. I seguenti grafici mostrano effetti significativi.





Nella prima figura si nota che diminuendo la capacità di gate, fissata una certa temperatura, c'è una crescita del guadagno in tensione fino ad una certa capacità, al di sotto della quale c'è una rapida decrescita indipendentemente dalla temperatura. Nella seconda figura si vede come al diminuire della capacità di giunzione ci sia un aumento esponenziale della temperatura, questo perché viene dissipata molta potenza. Questo fenomeno non ne rende possibile l'utilizzo in circuiti integrati come quelli utilizzati per i computer. Gli inconvenienti del SET sono tre: basso guadagno in tensione, alta impedenza di uscita ed alta sensibilità al rumore. Per capacità di gate di alcuni zeptofarad (uno zeptofarad corrisponde a 10^{-21} farad) si ha un'attenuazione in tensione di circa 1000, cioè se in ingresso applichiamo decine di volts in uscita avremo decine di millivolts. Il basso guadagno di tensione non li rende adatti come amplificatori. L'alta impedenza di uscita fa sì che non possano essere utilizzati come elementi in circuiti digitali perché avrebbero elevati tempi di commutazione. Inoltre il SET, e questo è il suo terzo inconveniente, è molto sensibile al rumore. Anche fenomeni estremamente piccoli possono determinare delle commutazioni nella conduzione o meno del transistor. I tre problemi possono essere risolti accoppiando un SET ad un FET e cioè utilizzando dei circuiti ibridi. Ciò che invece è rilevante nei SET è il guadagno di carica. Il guadagno di carica è la modulazione della carica che passa attraverso il SET diviso il cambio di carica sul gate e può essere facilmente maggiore di uno anche a temperatura ambiente. I SET sono i migliori misuratori di carica e di corrente esistenti. Riguardo alle basse temperature infine, in cui questi strumenti devono operare, esse non rappresentano un problema per le misure fisiche in cui i suddetti strumenti vengono utilizzati, perché le basse temperature sono desiderabili proprio per la riduzione dei rumori dovuti all'agitazione termica.

Appendice

L'equazione del moto è quella di Schrodinger ed io voglio risolverla per via perturbativa. Le transizioni che da essa sono generate, come ho detto poc'anzi, sono tra uno stato legato ed uno a spettro continuo. Lo stato legato è quello dell'isola e l'altro quello del lead. L'hamiltoniana totale è

$$H=H_L+H_R+H_I+H_{ch}+H_t \quad .$$

I primi quattro termini sono scritti supponendo infinita la barriera, cioè nel caso che le tre parti siano disaccoppiate. L'accoppiamento è introdotto dal termine perturbativo. Le hamiltoniane potranno essere scritte nel formalismo della seconda quantizzazione

$$H_L=\sum_{k,\sigma}\varepsilon_k\cdot c^{\dagger}_{k,\sigma}\cdot c_{k,\sigma} \quad .$$

La notazione indica che un elettrone con numeri quantici k e numero di spin σ è distrutto e ricreato sul lead sinistro. Stessa cosa vale per il destro. I contributi sull'isola sono due

$$H_I=\sum_{q,\sigma}\varepsilon_q\cdot b^{\dagger}_{q,\sigma}\cdot b_{q,\sigma} \quad \text{e} \quad H_{ch}=\frac{(\hat{n}\cdot e-Q_G)^2}{2\cdot C} \quad ,$$

dove $\hat{n}$ è da intendersi come operatore numero. Se suppongo di saper risolvere l'equazione di Schrodinger perfettamente per l'hamiltoniana somma dei primi tre termini, il contributo dell'energia di charging sarà diagonale ed avrà l'unica funzione di shiftare in alto i livelli energetici dell'isola ad ogni nuova acquisizione di carica, oppure, shiftare in basso ad ogni ammanco di carica.
L'hamiltoniana di tunneling ha un contributo a sinistra ed uno a destra. Mi indica che l'effetto della barriera finita è di permettere transizioni dallo stato con set di numeri quantici k ad uno con set di numeri quantici q , conservando lo spin.

$$H_{t,L}=\sum_{k,q,\sigma}T_{k,q}\cdot b^{\dagger}_{q,\sigma}\cdot c_{k,\sigma}+h.c. \quad .$$

I due elementi tengono conto del fatto che la transizione può avvenire dal lead all'isola oppure viceversa. Anche qui devo considerare il caso del lead destro per considerare l'intera hamiltoniana di tunneling. Considerando l'effetto della barriera piccolo, si procederà con la regola aurea di Fermi per il calcolo dei rates, perché gli elettroni vengono considerati liberi nei lead e legati nell'isola. Si può usare la regola di Fermi per calcolare le transizioni dovute all'hamiltoniana di tunneling tra due stati relativi all'hamiltoniana imperturbata. La regola aurea di Fermi è data da

$$\Gamma_{i\to f}=\frac{2\cdot\pi}{\hbar}\cdot\langle f|H^{'}|i\rangle\cdot\delta(E_i-E_f) \quad .$$

Nella δ ci sono le energie iniziali e finali delle particelle che eseguono la transizione. Esse possono essere facilmente calcolate

$$E_i=\frac{3}{5}\cdot N_I\cdot\varepsilon_F+n\cdot\varepsilon_q \quad ,$$

$$E_f=\frac{3}{5}\cdot N_I\cdot\varepsilon_F-\varepsilon_k+n\cdot\varepsilon_q+\varepsilon_q+\delta E_{ch}(n) \quad ,$$

dove N_I è il numero medio di elettroni nell'isola. L'energia iniziale è la somma dell'energia media più l'energia degli elettroni che hanno caricato l'isola, mentre nell'energia finale è aggiunta l'energia dell'elettrone che esegue la transizione più la charging energy che esso induce. Facendo la differenza, e tenendo conto che sono possibili tutte le transizioni da uno stato con numero k ad uno con numero q purché le particelle siano su una superficie di Fermi

$$\Gamma_{LI}(n)=\frac{2\cdot\pi}{\hbar}\sum_{k,q,\sigma,i_n}\left|\langle i_n|c^\dagger_{k,\sigma}\cdot b_{q,\sigma}\cdot H_{TL}|i_n\rangle\right|^2 W_{i_n}\delta(\delta E_{ch}+\varepsilon_q-\varepsilon_k) \quad ,$$

questo perché le transizioni da k a q sono eventi incompatibili e quindi le probabilità corrispondenti si sommano. Lo stato iniziale può essere preso come prodotto tensore, così posso fattorizzare opportunamente applicando gli operatori di creazione e distruzione agli stati corrispondenti

$$\Gamma_{LI}(n)=\frac{2\cdot\pi}{\hbar}\sum_{k,q,\sigma,i_L,i_{I_n}}|T_{k,q}|^2\cdot\left|\langle i_L|c^\dagger_{k,\sigma}\cdot c_{k,\sigma}|i_L\rangle\cdot\langle i_{I_n}|b_{q,\sigma}\cdot b^\dagger_{q,\sigma}|i_{I_n}\rangle\right|^2\cdot W_{i_L}\cdot W_{I_n}\delta(\delta E_{ch}+\varepsilon_q-\varepsilon_k) \quad .$$

Siccome

$$\sum_{i_L}W_{i_L}\cdot\langle i_L|c^\dagger_{k,\sigma}\cdot c_{k,\sigma}|i_L\rangle=f_L(\varepsilon_k) \quad ,$$

$$\sum_{i_{I_n}}W_{i_{I_n}}\cdot\langle i_{I_n}|b_{q,\sigma}\cdot b^\dagger_{q,\sigma}|i_{I_n}\rangle=1-f_I(\varepsilon_q) \quad ,$$

cioè danno rispettivamente la probabilità di essere in uno qualunque degli stati con energia ε_k e la probabilità di non essere in uno qualunque degli stati ε_q . Ci siamo messi in condizioni in cui la probabilità di trasmissione non dipende da k e q . Se avessi un transistor più piccolo dovrei per forza considerare le caratteristiche microscopiche del lead, invece in questo caso T dipende solo dalla barriera. Se non c'è dipendenza da k e q posso passare al continuo senza colpo ferire perché il numero degli stati è indifferente. σ contribuisce per un fattore 2 che inglobo negli altri fattori.

$$\sum_{k,q,\sigma} |T_{k,q}|^2 \rightarrow \Omega_L \cdot \Omega_I \int d\varepsilon_k \cdot d\varepsilon_q \cdot |T|^2 \cdot N_L \cdot N_I \quad .$$

Raccolgo le costanti

$$\frac{1}{e^2 \cdot R_L} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon_L \cdot d\varepsilon_I \cdot f(\varepsilon_L) \cdot (1 - f(\varepsilon_I)) \cdot \delta(\delta E_{ch} + \varepsilon_I - \varepsilon_L) \quad ,$$

con $\quad R_L = \dfrac{\hbar}{4 \cdot \pi \cdot e^2 \cdot N_I(0) \cdot N_L(0) \cdot \Omega_I \cdot \Omega_L \cdot |T|^2} \quad .$

Affinché il rate non sia nullo devo applicare una tensione di bias pari alla charging energy in modo che la delta non si annulli sempre. Infatti le transizioni avvengono all’energia di Fermi. La tensione viene data al lead.

$$\varepsilon_L = \varepsilon_F + eV_L \quad \text{quindi} \quad \varepsilon_I = \varepsilon_F + eV_L - \delta E_{ch} \quad .$$

Così posso risolvere uno degli integrali ed ottenere

$$\frac{1}{e^2 \cdot R_L} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon_L \cdot f(\varepsilon_L) \cdot [1 - f^0(\varepsilon_L - \delta E_{ch})] \quad .$$

La variazione dell’energia di charging è un’energia di equilibrio termodinamico, e sull’isola si è già all’equilibrio, invece sul lead no, devo mettere una certa energia di bias per ottenere l’equilibrio.

$$\frac{1}{e^2 \cdot R_L} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon_L \cdot f^0(\varepsilon_L - eV_L) \cdot [1 - f^0(\varepsilon_L - \delta E_{ch})] \quad .$$

Con il seguente cambio di variabile $\varepsilon_L - eV_L = \mu_L$, e moltiplicando e dividendo il risultato dell’integrale per la costante di Planck viene

$$\Gamma_{LI}(n) = \frac{R_K}{h R_L} \cdot \frac{\delta E_{ch} - eV_L}{e^{\frac{\delta E_{ch} - eV_L}{KT}} - 1} \quad ,$$

con $\quad R_k = \dfrac{h}{e^2} \quad ,$

dove abbiamo sfruttato il seguente risultato

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE \cdot f^0(E;\mu,T)\cdot(1-f^0(E-x;\mu,T))=n^0(x,t)\cdot\int_{-\infty}^{+\infty} dE\cdot[f^0(E-x;\mu,T)-f^0(E,\mu,T)]=x\cdot n^0(x,T)$$

dove $f^0(E;\mu,T)$ sono le distribuzioni di Fermi-Dirac mentre le $n^0(x,T)$ sono le distribuzioni di Bose-Einstein.

Allo zero assoluto in particolare il rate è

$$\Gamma_{LI}(n)=\frac{1}{e^2\cdot R_L}\cdot|\delta E_{ch}(n)-eV_L|\cdot\theta(eV_L-\delta E_{ch}) \quad ,$$

questo perché nel limite di temperatura nulla la funzione di Bose-Einstein è una teta di Heaviside, ed a causa della presenza del -1 al denominatore bisogna considerare in modulo il numeratore. Questo è il rates per una transizione da n ad n+1 per effetto di un elettrone proveniente dal lead sinistro. Si può eseguire un calcolo analogo per gli altri, tuttavia basta fare le osservazioni che ho fatto nel capitolo 3 per ottenerli tutti.

Bibliografia

T. Heikkila, “The Physics of Nanoelettronics”, Oxford University Press, 2013.

Y. V. Nazarov - Y. M. Blanter, “Quantum transport”, Cambridge University Press, 2009.

C. Mencuccini - V. Silvestrini , “Fisica generale 1”, Liguori Editore, 1996

C. Mencuccini - V. Silvestrini, “Fisica generale 2”, Liguori Editore, 1995.

R. Resnick, “Introduction to special relativity”, John Wiley & Sons, Inc., 1968.

C. Cohen-Tannoudji – B. Diu – F. Laloe, “Quantum Mechanics”, Herman e John Wiley & Sons, Inc., 1977.

N.W. Ashcroft – N.D. Mermin, “Solid State Physics”, Dorothy Garbose Crane, 1976.

J. Millman, “Circuiti e sistemi microelettronici”, Bollati Boringhieri, 1987.