Theoretische Untersuchungen zur Genauigkeit von Einzel–Elektronen–Bauelementen

Dissertation der Fakultät für Physik der Ludwig–Maximilians–Universität München

> vorgelegt von Christoph Weiß aus Singen

München, den 21. Dezember 2000

Tag der mündlichen Prüfung: 30. März 2001 Erstgutachter: Professor Dr. Wilhelm Zwerger Zweitgutachter: Professor Dr. Khaled Karrai

Zusammenfassung

Die Anwendung von Einzel–Elektronen–Bauelementen war lange Zeit dadurch beschränkt, dass ihre Genauigkeit unter der kommerziell erhältlicher Bauelemente lag. In Experimenten wurden in den letzten Jahren gewaltige Fortschritte erzielt; besonders Gleichstrom–Stromquellen, die mit Einzel–Elektronen–Effekten arbeiten, erreichen schon Genauigkeiten, wie sie für einen Stromstandard nötig sind.

Ziel dieser Arbeit ist es, die Genauigkeit von Einzel-Elektronen-Bauelementen genauer zu untersuchen. Im Mittelpunkt steht dabei einerseits die Entwicklung der Theorie eines nanomechanischen Einzel-Elektronen-Pendels, das als Stromstandard dienen könnte, und andererseits der Einfluss von Umgebungsladungsfluktuationen und Quantenfluktuationen auf Einzel-Elektronen-Bauelemente.

Der Hauptteil der Doktorarbeit gliedert sich in drei Teile. Im ersten Teil steht der Einfluss der Bewegung des nanomechanischen Pendels auf die Genauigkeit im Vordergrund; ferner werden erste in München erzielte experimentelle Ergebnisse auf diesem Gebiet erfolgreich erklärt. Der zweite Teil untersucht, in wie weit Quantenfluktuationen die Genauigkeit von Einzel-Elektronen-Bauelementen beeinflussen. Dazu wird die Einzel-Elektronen-Box auf ein effektives XY-Modell abgebildet und mit Hilfe eines Pfadintegralformalismuses für große Tunnelwiderstände störungstheoretisch untersucht. Insbesondere wird auch die Frage behandelt, was der physikalische Ursprung der Quantenfluktuationen ist. Der dritte Teil untersucht Umgebungsladungsfluktuationen. Dabei zeigt sich, dass experimentelle Kurven zumindest qualitativ erklärt werden können. Ein Nachteil vieler Coulomb-Blockade-Experimente sind die tiefen Temperaturen bei denen die Experimente durchgeführt werden. Zur Beantwortung der Frage, ob Einzel-Elektronen-Bauelemente auch bei Raumtemperatur verlässlich arbeiten können (insbesondere auch in integrierten Schaltungen), sind weitere Experimente nötig.

Die meisten Rechnungen können (oft nach nur kleinen Näherungen) analytisch durchgeführt werden; Computersimulationen werden in erster Linie zur Überprüfung der analytischen Ergebnisse durchgeführt bzw. werden für Parameterbereiche verwendet, die analytisch nicht mehr zugänglich sind. Meinen Eltern

"Was nun jene Zeichenschrift betrifft, über die er sich gar niemals beruhigen konnte, so fand sie sich auf der Schale einer Neu– Kaledonischen Muschel von mäßiger Größe und war auf weißlichem Grunde in leicht rötlich-brauner Farbe ausgeführt. Die Charaktere, wie mit einem Pinsel gezogen, gingen gegen den Rand hin in eine reine Strich-Ornamentik über, hatten aber auf dem größeren Teil der gewölbten Fläche in ihrer sorgfältigen Kompliziertheit das entschiedenste Ansehen von Verständigungsmalen. Meiner Erinnerung nach zeigten sie starke Ähnlichkeit mit früh-orientalischen Schriftarten, etwa dem alt-aramäischen Duktus, und tatsächlich mußte mein Vater seinem Freunde aus der gar nicht übel versehenen Stadtblibliothek von Kaisersaschern archäologische Bücher mitbringen, die die Möglichkeit der Nachforschung, des Vergleichens boten. Selbstverständlich führten diese Studien zu keinem Ergebnis oder doch nur zu so wirren und widersinnigen, daß sie auf nichts hinausliefen. [...]

Bedachte er, daß, wenn es sich wirklich hier um eine Geheimschrift hätte handeln sollen, die Natur über eine eigene, aus ihr selbst geborene, organisierte Sprache verfügen müßte? Denn welche vom Menschen erfundene sollte sie wählen, um sich auszudrücken? "

Thomas Mann, Doktor Faustus

Inhaltsverzeichnis

Einleitung 7								
1	Grundlagen							
	1.1	Bauele	emente	11				
		1.1.1	Einzel–Elektronen–Box	11				
		1.1.2	Einzel–Elektronen–Transistor	13				
	1.2	Anwer	ndungen	16				
		1.2.1	Coulomb–Blockade bei Raumtemperatur	16				
		1.2.2	Stromstandard mit Coulomb–Blockade?	16				
	1.3	Nanon	nechanik	17				
2	Nar	Vanomechanisches Pendel 1						
	2.1	Der ur	sprüngliche Vorschlag	19				
	2.2	Das M	lünchner Pendel	21				
	2.3	Genau	ligkeit	22				
		2.3.1	Lösung der Mastergleichung	23				
		2.3.2	Grenzfall tiefer Temperaturen	25				
		2.3.3	Endliche Temperaturen	27				
		2.3.4	Optimaler Betrieb	28				
	2.4	Erklär	ung der experimentellen Ergebnisse	29				
		2.4.1	Treiberspannung	29				
		2.4.2	Wie groß sind die Kapazitäten?	33				
		2.4.3	Peakform	34				
		2.4.4	Bewegungsgleichung	35				
3	Qua	uantenfluktuationen 39						
	3.1	Quantenmechanische Einzel–Elektronen–Box						
		3.1.1	Effektives Modell	41				
		3.1.2	Störungstheorie für kleines g	42				
		3.1.3	Temperaturabhängigkeit	47				
	3.2	Fluktu	ationen	49				
		3.2.1	Abschätzung für die Fluktuationen	50				
		3.2.2	Cutoff im Frequenzspektrum	51				

INHALTSVERZEICHNIS

		3.2.3	Quantenfluktuationen beim Nanopendel $\ \ . \ . \ . \ .$	52				
4	Umgebungsladungsfluktuationen							
	4.1	Das M	odell	55				
		4.1.1	Einfluss der Größe der Insel	57				
		4.1.2	Frequenzabhängigkeit	58				
	4.2	Erweit	erung des Modells	60				
		4.2.1	Einfluss einzelner Dipole	60				
		4.2.2	Gaußische Fluktuationen	61				
	4.3	Kennli	nien von Einzel–Elektronen–Bauelementen	63				
		4.3.1	Einzel–Elektronen–Transistor	64				
		4.3.2	Einzel–Elektronen–Box	71				
		4.3.3	Einzel–Elektronen–Pendel	74				
Re	Resümee							
\mathbf{A}	Symbole und Abkürzungen							
в	Numerische Verfahren							
	B.1	Monte	carlo Algorithmus	83				
	B.2	Rausch	nen	85				
\mathbf{C}	Ergänzungen zu Kapitel 2							
D) Zweite Ordnung Störungstheorie							
\mathbf{E}	E Summe von N Zufallsereignissen							
$\mathbf{L}\mathbf{i}$	Literatur							

Einleitung

In den letzten Jahren ist die Speicherkapazität von Computern exponentiell gewachsen; gleichzeitig wurden die Bauelemente immer kleiner. Dieser Prozess wird irgendwann an natürliche Grenzen stoßen – abgesehen davon, dass auch die Investitionskosten für einzelne Fabriken exponentiell steigen – da bei immer kleiner werdenden Speichern Effekte einzelner Elektronenladungen eine Rolle spielen werden. Deshalb ist der Gedanke naheliegend, Bauelemente zu verwenden, deren Funktionsweise auf Einzel-Elektronen-Effekten beruht. Diese Arbeit beschäftigt sich damit, wie verlässlich derartige Einzel-Elektronen-Bauelemente – eventuell auch bei Raumtemperatur – arbeiten könnten.

Coulomb–Blockade

Die Ladung auf einem Kondensator ist bekanntlich gegeben durch das Produkt von Kapazität und angelegter Spannung:

$$Q = CV$$
.

Diese Ladung kann jeden beliebigen Wert annehmen – insbesondere muss sie kein ganzzahliges Vielfaches der Elementarladung e sein. Ganz anders ist die Situation hingegen bei einer kleinen Insel, die durch schwache Tunnelkontakte mit Elektroden verbunden ist (Abbildung 1). Solange die thermischen Fluktuationen klein gegen die Energie sind, die zum Entfernen oder Hinzufügen eines Elektrons nötig wäre, d.h. solange

$$k_{\rm B}T \ll \frac{e^2}{2C} \equiv E_{\rm C}$$

gilt, ist die Zahl der Elektronen auf der Insel festgelegt; die sogenannte *Coulomb–Blockade* tritt ein.

Dieses Kriterium wird durch Quantenfluktuationen dadurch etwas aufgeweicht, dass die Wellenfunktion der Inselelektronen auch jenseits der Tunnelbarriere nicht verschwindet. Die typische Zeitskala für die Quantenfluktuationen ist die RC-Zeit τ . Die durch die Unschärferelation $\Delta E \tau \approx h$ definierte Energieunschärfe sollte sehr viel kleiner sein als die Coulomb-Energie $E_{\rm C}$, d.h. es muss

$$R_{\rm T} \gg R_{\rm K} = \frac{h}{e^2}$$



Abbildung 1: Einfache Anordnung bestehend aus einer Insel und zwei Zuleitungen, von denen Elektronen auf die Insel tunneln können.

gelten, wobei $R_{\rm K} \simeq 25.81 \text{ k}\Omega$ die von Klitzing-Konstante ist. Ein Schwerpunkt dieser Arbeit beschäftigt sich mit Systemen im sogenannten schwachen Tunnelbereich, bei denen diese Bedingung erfüllt ist.

Der Aufbau dieser Arbeit

Kapitel 1 führt zunächst in die Grundlagen der Arbeit ein. Dazu werden insbesondere die Einzel-Elektronen-Box und der Einzel-Elektronen-Transistor vorgestellt. Auf die bisherigen Messungen von Coulomb-Blockade bei Raumtemperatur wird ebenso eingegangen wie auf die Versuche, mit Einzel-Elektronen-Bauelementen einen Stromstandard zu bauen, was insbesondere deshalb interessant wäre, weil damit das anachronistische Urkilogramm endlich überflüssig würde: Die Größe 1 Ampère ist über die Kraft zwischen zwei stromdurchflossenen Leitern definiert, die Kraft wird in kg m s⁻² gemessen, wobei Sekunde (s) und indirekt auch Meter (m)¹ über extrem genaue Atomuhren definiert sind, während das Kilogramm (kg) immer noch über das Urkilogramm in Paris festgelegt wird. Das Kapitel endet mit einem Überblick über das relativ neue Forschungsgebiet der Nanomechanik.

In Kapitel 2 wird ein nanomechanisches Einzel-Elektronen-Pendel vorgestellt, wie es am *Center for NanoScience* an der Universität München von Artur Erbe in der Gruppe von Robert Blick am Lehrstuhl Kotthaus entwickelt und im Rahmen dieser Arbeit auch theoretisch begleitet wurde. Insbesondere ist dabei interessant, inwieweit sich ein derartiges Pendel als Stromstandard eignen könnte. Diese Frage wird im Rahmen einer "klassischen" Mastergleichung behandelt (falls man quantenmechanisches Tunneln und Effekte einzelner Elektronen überhaupt als "klassisch" bezeichnen will, weshalb der Name "orthodoxe" Theorie vielleicht besser ist).

¹Ein Meter ist definiert als die Strecke, die Licht im Vakuum in 1/299792485 s zurücklegt.

EINLEITUNG

Da die Kennlinie eines Einzel-Elektronen-Pendels für nicht zu schnelle Oszillationen die Überlagerung der Kennlinien zweier Einzel-Elektronen-Boxen ist, ist es naheliegend die Quantenfluktuationen anhand der Einzel-Elektronen-Box genauer zu untersuchen (Kapitel 3).

Kapitel 4 ist den Umgebungsladungsfluktuationen gewidmet. Dabei wird hergeleitet, dass die Fluktuationen gaußisch sind – unabhängig von dem genauen Modell für die fluktuierenden Dipole. Um die Frage beantworten zu können, ob Einzel-Elektronen-Bauelemente auch bei Raumtemperatur etwa in Computern eingesetzt werden können, sind weitere Experimente nötig. Auf jeden Fall wird der Bau eines Stromstandards mit Hilfe eines Einzel-Elektronen-Pendels nicht an Umgebungsladungsfluktuationen scheitern.

Die Arbeit schließt mit dem Resümee auf Seite 79; die verwendeten numerischen Verfahren werden im Anhang B vorgestellt.

Insbesondere dort, wo es darum ging, konkrete Zahlenwerte – etwa für Kapazitäten – auszurechnen, um die Ergebnisse der Rechnungen mit experimentellen Daten vergleichen zu können, wurden SI–Einheiten verwendet.

EINLEITUNG

Kapitel 1

Grundlagen

1.1 Bauelemente

1.1.1 Einzel-Elektronen-Box

Das einfachste Einzel-Elektronen-Bauelement ist die Einzel-Elektronen-Box, bei der ein Tunnelkontakt, eine Insel und ein Kondensator mit einer Spannungsquelle in Reihe geschaltet werden (Abbildung 1.1).



Abbildung 1.1: Schaltkreis der Einzel–Elektronen–Box; einer (metallischen) Insel mit einem Tunnelkontakt.

Die Ladungen Q und Q_g können durch Veränderung von V_g kontinuierlich verändert werden; die Differenz der beiden Ladungen – die Inselladung – hingegen



Abbildung 1.2: Linkes Bild: Ladungsenergie einer Einzel-Elektronen-Box als Funkton der externen Ladung n_x . Rechtes Bild: Die Zahl der Elektronen auf der Insel wird bei T = 0 dadurch bestimmt, dass die Ladungsenergie minimal ist; es entsteht eine sogenannte *Coulomb-Treppe*.

ist gegeben durch $Q - Q_g = n(-e)$. Für die klassische elektrostatische Energie inklusive der von der Spannungsquelle verrichteten Arbeit gilt:

$$E_n = \frac{Q^2}{2C} + \frac{Q_g^2}{2C_g} - Q_g V_g$$

wobei der Spannungsabfall $V_{\rm g}$ gegeben ist durch $V_{\rm g} = Q_{\rm g}/C_{\rm g} + Q/C$, d.h. es gilt:

$$E_n = \frac{U}{2} \left(n - n_x \right)^2 - \frac{n_x^2 e^2}{2C_g} \,. \tag{1.1}$$

,

Dabei ist $U = \frac{e^2}{C+C_g}$ die Ladungsenergie und $n_x = C_g V_g / e$ die externe Ladung; der letzte Term ist von n unabhängig und kann folglich vernachlässigt werden. Die so entstehende Parabelschar ist in Abbildung 1.2 gezeigt. Die Coulomb-Treppe entsteht dadurch, dass die Zahl der Elektronen für festes n_x durch die Parabel mit dem kleinsten Wert E_n gegeben ist.

Das im Experiment bestimmte zeitliche Mittel der Zahl der Überschusselektronen auf der Insel ist gegeben durch das thermodynamische Mittel

$$\langle n \rangle = \frac{\sum_{n} n \, e^{-\frac{E_n}{k_{\rm B}T}}}{\sum_{n} e^{-\frac{E_n}{k_{\rm B}T}}}, \qquad (1.2)$$

was dazu führt, dass die Stufen der Coulomb–Treppe bei hohen Temperaturen abgerundet werden. Gemessen wird nicht die Zahl der Elektronen auf der Insel sondern die Ladung Q auf dem Tunnelkontakt, die gegeben ist durch

$$\frac{\langle Q \rangle}{e} = \frac{C}{C + C_{\rm g}} \left(n_x - \langle n \rangle \right) \,. \tag{1.3}$$



Abbildung 1.3: Ladung auf dem Tunnelkontakt bei verschiedenen Temperaturen. Gepunktete Linien: berechnet mit Gleichung (1.2), durchgezogene Linien: Experiment. Aus Lafarge et al. (1991).

Abbildung 1.3 zeigt das Ergebnis einer Messung für verschiedene Temperaturen, bei der sich für tiefe Temperaturen Abweichungen von dem ergeben, was in Gleichung (1.2) vorhergesagt wird. Eine mögliche Erklärung ist, dass dies durch Quantenfluktuationen passiert (siehe z.B. D. Esteve auf S. 121 in Grabert und Devoret (1992); auf Seite 73 wird jedoch gezeigt, dass dieser Effekt mindestens genausogut durch Umgebungsladungsfluktuationen erklärt werden könnte – insbesondere da die Steigung in der Mitte der Stufe immer noch den idealen Wert annimmt. Die Abweichung vom klassischen Verhalten zeigt sich im quantenmechanischen Fall u.a. dadurch, dass die Steigung im Stufenmittelpunkt vom klassischen Wert abweicht (Kapitel 3).

1.1.2 Einzel–Elektronen–Transistor

Der Einzel-Elektronen-Transistor (Abbildung 1.4) ist nicht viel komplizierter als die Einzel-Elektronen-Box (er hat einen Tunnelwiderstand mehr).



Abbildung 1.4: Schaltkreis des Einzel-Elektronen-Transistors. Die erste experimentelle Realisierung gelang Fulton und Dolan (1987).

Orthodoxe Theorie der Coulomb-Blockade

Bei einer angelegten Source–Drain–Spannung kann Stromtransport nur dann beobachtet werden, falls der Strom nicht Coulomb–Blockade unterdrückt wird. Die elektrostatische Energie ist wieder gegeben durch

$$E_n = \frac{\left[n(-e) - Q_{\rm g}\right]^2}{2C} \, .$$

mit $Q_{\rm g} = C_{\rm L}V_{\rm L} + C_{\rm R}V_{\rm R} + C_{\rm g}V_{\rm g}$ und $C = C_{\rm L} + C_{\rm R} + C_{\rm g}$. Im Folgenden sei ein symmetrischer Einzel-Elektronen-Transistor betrachtet mit $C_{\rm R} = C_{\rm L}$ und den angelegten Spannungen $V_{\rm R} = V/2$ und $V_{\rm L} = -V/2$. Wenn ein Elektron von der rechten Elektrode auf die Insel tunnelt, liegt die Energie nach dem Tunneln um

$$\Delta E = E_n - E_{n+1} - (-e)\frac{V}{2}$$

unter der Energie vor dem Tunneln.

Die Ubergangsrate für ein Tunnelereignis, bei dem sich die elektrostatische Energie um ΔE ändert, ist im Rahmen der Näherung der goldenen Regel gegeben durch (Grabert und Devoret (1992)):

$$\Gamma = \frac{1}{e^2 R} \int dE \int dE' f(E) \left[1 - f(E')\right] \delta(E + \Delta E - E'), \qquad (1.4)$$

wobei die Fermifunktion f(E) die besetzten Zustände vor dem Tunneln beschreibt und 1 - f(E') die freien Zustände auf der anderen Seite der Tunnelbarriere. Es

1.1. BAUELEMENTE

muss also das Integral

$$\Gamma = \frac{1}{e^2 R} \int dE f(E) \left[1 - f(E + \Delta E)\right]$$

berechnet werden. Dies geschieht am einfachsten dadurch (Ingold und Nazarov in Grabert und Devoret (1992)), dass man zunächst die Beziehung

$$f(E)\left[1 - f(E + \Delta E)\right] = \frac{f(E) - f(E + \Delta E)}{1 - e^{-\beta \Delta E}}$$

verwendet $(\beta \equiv \frac{1}{k_{\rm B}T})$ und bei der Berechnung von

$$h(\Delta E) = \int_{-\infty}^{\infty} dE \left[f(E) - f(E + \Delta E) \right]$$

ausnutzt, dass $h'(\Delta E) = f(-\infty) - f(\infty) = 1$ und ferner h(0) = 0 gilt (woraus bereits $h(\Delta E) = \Delta E$ folgt):

$$\Gamma = \frac{1}{e^2 R} \frac{\Delta E}{1 - e^{-\beta \Delta E}} \,. \tag{1.5}$$

Für $T \to 0$ vereinfacht sich das zu

$$\Gamma = \begin{cases} \frac{\Delta E}{e^2 R} & : \Delta E > 0\\ 0 & : \Delta E < 0 \end{cases}$$

Damit erhält man eine Master-Gleichung für die Wahrscheinlichkeit p(m, t), m Überschusselektronen zur Zeit t auf der Insel zu finden.

$$\frac{d}{dt}p(m,t) = - \left[\Gamma_{\rm L}^{(+)}(m) + \Gamma_{\rm R}^{(+)}(m) + \Gamma_{\rm L}^{(-)}(m) + \Gamma_{\rm R}^{(-)}(m)\right]p(m,t)
+ \left[\Gamma_{\rm L}^{(+)}(m-1) + \Gamma_{\rm R}^{(+)}(m-1)\right]p(m-1,t)
+ \left[\Gamma_{\rm L}^{(-)}(m+1) + \Gamma_{\rm R}^{(-)}(m+1)\right]p(m+1,t).$$
(1.6)

Dabei beziehen sich die Indizes R und L auf die rechte bzw. linke Elektrode während + und - bedeutet, dass sich die Zahl der Elektronen auf der Insel um eins erhöht bzw. erniedrigt.

Der Strom durch die linke Elektrode, der als Funktion von Q_g die Periode e hat, ist gegeben durch:

$$I_{\mathrm{L}}(t) = -e \sum_{n} \left[\Gamma_{\mathrm{L}}^{(+)}(m) - \Gamma_{\mathrm{L}}^{(-)}(m) \right] p(n,t)$$

Für den Fall, dass nur zwei Ladungszustände eine Rolle spielen (d.h. V klein genug ist) gilt:

$$I_{\rm sd} = \frac{1}{4R} \left[V - \frac{4e^2}{C^2 V} \left(\frac{Q_{\rm g}}{-e} - n - \frac{1}{2} \right)^2 \right] \quad \text{für} \quad -\frac{VC}{2e} \le \frac{Q_{\rm g}}{-e} - n - \frac{1}{2} \le \frac{VC}{2e} \,,$$

während der Strom außerhalb dieses Intervalls verschwindet (Dittrich et al. (1998)). Die Kennlinien eines Einzel-Elektronen-Transistors werden auf Seite 67 gezeigt.

1.2 Anwendungen

Typische Inselgrößen bei Halbleiter–Nanostrukturen sind 100 nm, was zu Kapazitäten der Ordnung 500 aF (1 aF = 10^{-18} F) führt. Die Coulomb–Energie entspricht einer Temperatur von 4 K ($e^2/C \simeq k_B T$); die Temperatur, ab der Coulomb–Blockade gemessen werden kann liegt in etwa einen Faktor 10 darunter ($\simeq 0.4$ K). Zur Beobachtung der Coulomb–Blockade sind folglich oft Sub–Kelvin– Temperaturen nötig. Mit Molekülen können Inselgrößen von ca. 1 nm und Kapazitäten von unter einem aF erreicht werden. Dies führt dazu, dass auch bei Raumtemperatur Coulomb–Blockade gemessen werden kann (Abschnitt 1.2.1). Abschnitt 1.2.2 beschreibt den bisherigen Weg zu einem Stromstandard mit Einzel–Elektronen–Effekten.

Eine andere Anwendungsmöglichkeit, auf die hier nicht weiter eingegangen wird, besteht darin Quantencomputer mit Coulomb–Blockade–Quantenbits zu bauen (Loss und DiVincenzo (1998) und Makhlin et al. (1999)). Der von Loss und DiVincenzo vorgeschlagene Doppelquantendot in einer Aharanov–Bohm Geometrie wurde von Holleitner et al. (2000) experimentell realisiert.

1.2.1 Coulomb–Blockade bei Raumtemperatur

Raumtemperaturmessungen von Coulomb–Blockade sind bereits mehreren Gruppen gelungen. Schon 1991 wurden Coulomb–Oszillationen in $\frac{dI}{dV}(V)$ –Kurven bei 300 K gemessen (Nejoh (1991)); neuere Messungen zeigen auch überzeugende Daten zur Coulomb–Blockade bei geringen Spannungen in I(V)–Kurven (Andres et al. (1996)) und zu Coulomb–Oszillationen in I(V)–Kurven (Soldatov et al. (1996)). Bei den neueren Experimenten wurden Goldcluster bzw. organo– metallische Moleküle verwendet; der Strom wird durch eine Tunnelspitze gemessen, was sicher für eine Anwendung in Computerchips ein ziemlicher Nachteil ist. Bei Raumtemperaturmessungen führt die thermische Verbreiterung der Energieniveaus dazu, dass sich Cluster für nicht zu große Ströme wie metallische Inseln verhalten (Soldatov et al. (1996)) und die Daten auch gut mit der orthodoxen Theorie der Coulomb–Blockade verglichen werden können.

Auch in Halbleiter–Nanostrukturen wurden bereits Coulomb–Blockade bei Raumtemperatur gemessen (Zhuang et al. (1998) und Ishikuro et al. (1996)), allerdings handelt es sich hier mehr um Messungen, die zeigen, dass so etwas prinzipiell möglich ist, während die Daten nur bis zur Siedetemperatur von flüssigem Stickstoff überzeugend sind (Ishikuro et al. (1996)).

1.2.2 Stromstandard mit Coulomb–Blockade?

Eine der spannendsten Anwendungen der Coulomb–Blockade wäre die Verwirklichung eines Stromstandards, der darauf beruht, Elektronen in diskreten Einheiten periodisch durch ein Bauelement zu treiben (Geerligs et al. (1990) und Pothier et al. (1992)). Zu den Faktoren, die die Genauigkeit beschränken, gehören neben Quantenfluktuationen (Kapitel 3) und Umgebungsladungsfluktuationen (Kapitel 4) auch Tunnelprozesse höherer Ordnung. Während klassisch ein Elektron nur dann durch eine Insel fließen kann, wenn der Zustand auf der Insel energetisch günstiger ist als der Anfangszustand und zusätzlich noch der Endzustand energetisch günstiger ist als der Zustand auf der Insel, ist das bei Tunnelprozessen höherer Ordnung nicht mehr der Fall. Quantenmechanisch sind nämlich auch Prozesse erlaubt, bei denen die Energie des Zustands auf der Insel um ΔE über der Energie des Anfangszustands liegt – allerdings nur, solange das Elektron nicht länger als die durch die Energie-Zeitunschärfe gegebene Zeitdauer Δt mit $\Delta t \Delta E \approx h$ auf der Insel ist. Um den Einfluss von Tunnelprozessen höherer Ordnung zu minimieren, wurde eine Kette von 7 Tunnelkontakten verwendet (Keller et al. (1996)). Mit einer Folge von Spannungspulsen wird erreicht, dass pro Periode genau ein Elektron durch die Kette fließt; die Genauigkeit betrug in etwa $1.5:10^8$, was in etwa die Genauigkeit ist, mit der das Kilogramm definiert ist.

Eine neue Möglichkeit, einen Stromstandard zu bauen, wird in Kapitel 2 vorgestellt: Beim nanomechanischen Einzel–Elektronen–Pendel werden Tunnelprozesse höherer Ordnung exponentiell unterdrückt.

Eine andere Möglichkeit, Elektronen periodisch zu transferieren, ist der von Zhou et al. (1999) vorgeschlagene und von Switkes et al. (1999) experimentell verwirklichte adiabatische Transport. Da hier zufällige Ladungseinheiten transportiert werden, ist dieses Vorgehen nicht für einen Stromstandard geeignet. Der Stand der Forschung im Bereich des zeitabhängigen Transports in mesoskopischen Strukturen wurde von Büttiker (2000) zusammengefasst.

1.3 Nanomechanik

Der Schwerpunkt der Forschung auf der Nanometerskala lag bisher bei der Erforschung elektronischer Systeme. Die Nanomechanik ist hier – ganz im Gegensatz etwa zur Mikromechanik – ein neues Gebiet. Ein guter Überblick über den Stand der Forschung "auf dem Weg zur *Quanten–Mechanik*" ist in den Physikalischen Blättern Anfang 2000 erschienen (Blick et al. (2000)).

Die meisten Arbeiten beschäftigten sich bisher mit der Erzeugung freitragender Halbleiterstrukturen (Cleland und Roukes (1996), Carr et al. (1998) sowie Pescini et al. (1999)). Dabei wurden z.B. freitragende Drähte aus Silizium hergestellt, die eine Breite von 20 nm und eine Dicke von 80 nm haben, d.h. fast schon in Größenordnungen einzelner Makromoleküle vordringen (Blick et al. (2000)). Wenn derartige Nanodrähte an der Oberfläche noch metallisiert werden, können sie durch Wechselströme bei gleichzeitigem Anlegen eines Magnetfeldes durch die Lorentz-Kraft zum Schwingen angeregt werden (siehe z.B. Krömmer et al. (2000)). Derartige Nanostrukturen können z.B. zur Ladungsdetektion verwendet werden (Cleland und Roukes (1998)).

Am Center for NanoScience in München werden elektromechanische Systeme gebaut und auch theoretisch untersucht – wie etwa das nanomechanische Einzel– Elektronen–Pendel (Erbe, Weiss, Zwerger und Blick (2000)), mit dem erstmals Transport durch eine kleine metallische Insel, die zwischen zwei Elektroden hin und herpendelt (Gorelik et al. (1998)), gemessen wurde und auf dessen experimentelle Vorarbeiten (Erbe et al. (1998)) und theoretische Grundlagen (Weiss und Zwerger (1999)) im nächsten Kapitel noch genauer eingegangen werden wird.

Kapitel 2

Nanomechanisches Einzel–Elektronen–Pendel

Ein Einzel–Elektronen–Pendel ist ein Einzel–Elektronen–Transistor mit zeitlich variablen Tunnelkontakten. Im Gegensatz zum ursprünglichen Vorschlag – einer durch organische Molekülen zwischen zwei Elektroden aufgehängten Insel, besteht das "Münchner" Pendel aus einer Halbleiternanostruktur. Eine metallisierte Insel schwingt zwischen den beiden Elektroden hin und her. An der einen Elektrode wird die Insel positiv aufgeladen, an der anderen negativ; im zeitlichen Mittel fließt ein Gleichstrom. Im Mittelpunkt dieses Kapitels steht – insbesondere im Hinblick auf einen Stromstandard – die Frage, wie genau ein solches Pendel sein kann. Dazu werden hier insbesondere der Einfluss der Verweildauer und der Temperatur auf den gemessenen Strom sowohl analytisch als auch numerisch untersucht. Die beiden Tunnelkontakte sind nie gleichzeitig offen, weshalb Kotunneleffekte ausgeschlossen werden können.

2.1 Der ursprüngliche Vorschlag

Die ursprüngliche Idee für ein Einzel-Elektronen-Pendel stammt von Gorelik, Isacsson, Voinova, Ksemo, Shekhter und Jonson (Gorelik et al. (1998); siehe auch Isacsson et al. (1998)). Dabei ist eine kleine metallische Insel elastisch mit zwei Elektroden verbunden (Abbildung 2.1). Eine der Elektroden liegt auf einer positiven Spannung, die andere auf einer negativen; für mechanisch weiche Federn aus organischen Molekülen sagen Isacsson et al. (1998) Selbstoszillationen vorher (Abbildung 2.2), die zu einem Ladungstransfer mit der Frequenz f führen werden. Coulomb-Blockade sorgt dafür, dass nur eine ganze Zahl von Elektronen auf die Insel nahe dem Umkehrpunkt geladen wird; dieselbe Anzahl von Elektronen verlässt dann bei der anderen Elektrode die Insel wieder. Die Zahl der pro Periode



Abbildung 2.1: Eine kleine metallische Insel ist durch organische Moleküle als Federn mit den Elektroden verbunden (oben). Im unteren Bild wird gezeigt, wie sich die Insel an der linken Elektrode positiv auflädt, an der linken negativ. Es fließt ein Strom von 2Nef. Aus Isacsson et al. (1998).

transferierten Elektronen ist folglich:

$$\langle N \rangle = 2n_{\max}, \qquad n_{\max} = \left[\frac{CV}{e} + \frac{1}{2}\right], \qquad (2.1)$$

wobei V die angelegte Spannung und C die Kapazität der Insel relativ zu einer der Elektroden ist. Der mittlere Strom ist durch $\langle I \rangle = ef \langle N \rangle$ gegeben. Zwischen den Elektroden sollten sich entweder n_{\max} oder $-n_{\max}$ Elektronen auf der Insel befinden, je nachdem von welcher Elektrode sie gerade kommt.



Abbildung 2.2: Strom–Spannungs–Kennlinie der Selbstoszillationen. Aus Isacsson et al. (1998).

Die Bewegungsgleichung, die gelöst wurde, um die in Abbildung 2.2 gezeigten

Selbstoszillationen zu berechnen, lautet:

$$M\ddot{x} + \gamma\dot{x} + kx = \mathcal{E}Q(t)\,,$$

wobei gleichzeitig mit der Bewegungsgleichung auch die Ladung Q durch eine Mastergleichung (Gleichung (1.6)) bestimmt werden muss.

2.2 Das Münchner Pendel

Am Center for NanoScience an der Universität München wird eine etwas abgewandelte Idee experimentell umgesetzt (Erbe (2000), Erbe, Weiss, Zwerger und Blick (2000)). Es wird nicht mit einer winzig (einige nm) kleinen Insel, die durch Moleküle mit den Elektroden verbunden ist, sondern mit einem nanomechanischen Pendel (Inselgröße $100*400 \text{ nm}^2$)) gearbeitet (Abbildung 2.3). Ein erster



Abbildung 2.3: Schematische Darstellung eines nanomechanischen Einzel-Elektronen-Pendels. Da sich die Insel mit der Resonanzfrequenz f_r zwischen den Elektroden hin und her bewegt, könnte das Pendel als Stromstandard dienen. Metallische Teile sind hier wieder grau eingezeichnet.

Schritt bestand darin, ein Pendel ähnlich dem hier gezeigten zu bauen, bei dem nicht nur die Insel, sondern das gesamte Pendel metallisiert war (Erbe et al. (1998)). Zwischen Pendel und einer der Elektroden wurde dann eine Spannung angelegt und der Strom gemessen. Bei angelegter Wechselspannung wurde die Amplitude so weit reduziert, dass ein Strom von 5 ± 2 Elektronen gemessen wurde (Abbildung 2.4).

Allerdings spielt Coulomb–Blockade in diesem Experiment keine Rolle, da das gesamte Pendel metallisiert ist. Um einen Stromstandard bauen zu können, muss das Design so geändert werden, dass die Anzahl der Elektronen auf der Insel aufgrund der Coulomb–Abstoßung keine beliebigen Werte annehmen kann. Dazu wurde bei dem Pendel, wie in Abbildung 2.3 gezeigt, nur die Insel metallisiert, durch die dann einzelne Elektronen transportiert werden können.



Abbildung 2.4: Zahl der Elektronen, die pro Periode transferiert werden, wenn an ein vollständig metallisiertes Pendel eine Wechselspannung angelegt wird. Die Kurve hat in etwa Lorentz–Form. Aus Erbe (2000).

Da der Tunnelwiderstand R exponentiell mit dem Abstand Δx zwischen Insel und den Elektroden zunimmt ($R = \exp(\Delta x/\lambda)$), wird Tunneln exponentiell unterdrückt, wenn sich die Insel zwischen den beiden Elektroden befindet (sowohl die Amplitude der Oszillationen als auch der Abstand zwischen den beiden Elektroden ist dabei sehr viel größer als λ). Aus demselben Grund kann Cotunneln – was sonst ja die Genauigkeit von Einzel-Elektronen-Stromquellen limitiert – vernachlässigt werden.

Damit die Elektronen tunneln können, muss die Amplitude der Oszillationen groß im Vergleich zu der typischen Tunnellänge λ sein. In den Experimenten von Erbe et al. ist die Amplitude von der Ordnung 50 nm (Im Vergleich zu einigen Nanometern wie Gorelik et al. vorgeschlagen haben), weshalb sich dieses Design für einen Stromstandard eignen könnte.

2.3 Genauigkeit des Pendels

Die wichtigsten Ergebnisse zur Genauigkeit eines mechanischen Einzel-Elektronen-Pendels (Weiss und Zwerger (1999)) bilden einen wesentlichen Teil der vorliegenden Arbeit; zusätzlich wird im Folgenden noch der Einfluss der Treiberspannung (Abschnitt 2.4) untersucht. Die Genauigkeit aufgrund von Quantenfluktuationen und Umgebungsladungsfluktuationen wird in Abschnitt 3.2 bzw. 4.3.3 behandelt. Um zunächst einmal das "klassische" Einzel-Elektronen-Pendel zu verstehen, wird eine Master-Gleichung (Grabert und Devoret (1992)) verwendet, die dann mit einem einfachen Montecarlo-Algorithmus numerisch (Anhang B.1) als auch in leicht vereinfachter Form analytisch (Abschnitt 2.3.1) gelöst wird. Dabei wird sowohl die mittlere Zahl der pro Periode transferierten Elektronen – die sich von dem einfachen Ergebnis (2.1) in der Regel unterscheidet – als auch die Standardabweichung $\Delta N \equiv \sqrt{\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2}$ berechnet. Eines der wichtigsten Ergebnisse ist dabei, dass das Pendel mit $\Delta N \ll 1$ optimal arbeitet, wenn es sich nicht zu schnell bewegt (wobei 10⁷ Hz immer noch langsam ist auf einer Zeitskala von $RC \approx 10^{-10}$ s) und die Temperaturen tief genug sind ($k_{\rm B}T \ll \frac{e^2}{C}$). Für die Rechnungen wird in diesem Kapitel angenommen, dass der Elektronentransfer immer im Tunnelbereich exponentiell kleiner Transmission stattfindet.

2.3.1 Lösung der Mastergleichung

Um die Wahrscheinlichkeit p(m, t) zu berechnen, zur Zeit t genau m Überschusselektronen auf der Insel zu finden, wird eine Mastergleichung verwendet. Ein derartiges Vorgehen wurde erfolgreich zur Beschreibung sowohl von Quanten-Dots als auch von metallischen Inseln mit Coulomb-Blockade verwendet (Grabert et al. (1991), Beenakker (1991), Averin et al. (1991) sowie Bruder und Schoeller (1994)). Die Tatsache, dass die Insel oszilliert, führt zu zeitabhängigen Übergangsraten $\Gamma(m, t)$ in der Mastergleichung (1.6):

$$\frac{d}{dt}p(m,t) = - \left[\Gamma_{\rm L}^{(+)}(m,t) + \Gamma_{\rm R}^{(+)}(m,t) + \Gamma_{\rm L}^{(-)}(m,t) + \Gamma_{\rm R}^{(-)}(m,t)\right]p(m,t)
+ \left[\Gamma_{\rm L}^{(+)}(m-1,t) + \Gamma_{\rm R}^{(+)}(m-1,t)\right]p(m-1,t)
+ \left[\Gamma_{\rm L}^{(-)}(m+1,t) + \Gamma_{\rm R}^{(-)}(m+1,t)\right]p(m+1,t).$$
(2.2)

Die Übergangsraten werden wieder im Rahmen der Näherung der goldenen Regel verwendet (siehe z.B. Grabert und Devoret (1992))

$$\Gamma = \frac{1}{e^2 R} \frac{\Delta E}{1 - \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_{\rm B}T}\right)}.$$
(2.3)

Da sowohl der Widerstand R als auch die Kapazität C im Ausdruck $\Delta E \propto \frac{e^2}{C}$ jetzt zeitabhängig sind – wobei die exponentielle Zeitabhängigkeit in R(t) dominiert – faktorisieren die Übergangsraten zu:

$$\Gamma_{\rm R}^{(\mp)}(m,t) = g_{\rm R}(t)\,\Gamma_{{\rm R},m}^{(\mp)}(t)\,. \tag{2.4}$$

Die Funktion

$$g_{\rm R}(t) \equiv \frac{R_{\rm R}(t_{\rm max})C_{\rm R}(t_{\rm max})}{R_{\rm R}(t)C_{\rm R}(t)}$$
(2.5)

ist dabei stark zeitabhängig. Sie wird dominiert dadurch, dass die Tunnelwahrscheinlichkeit mit steigendem Abstand exponentiell sinkt, wenn sich die Insel von der Elektrode wegbewegt (t_{max} ist die Zeit an der das Elektron am nächsten an



Abbildung 2.5: Die Tunnelraten sind nur in einem kleinen Bereich um die maximale Auslenkung von 0 verschieden. Das Tunneln an der rechten und der linken Seite können getrennt behandelt werden; Kotunneln spielt folglich keine Rolle. Für x_{max} wurden 50 nm, für $\lambda = 0.1$ nm und für $x_0 = 1$ nm gewählt, die Bewegung des Pendels ist eine harmonische Schwingung $x(t) = x_{\text{max}} \sin(2\pi f t)$.

der rechten Elektrode ist). Es wird hier angenommen, dass die Bewegung des Pendels durch eine harmonische Schwingung beschrieben wird $(x(t) = x_{\max} \sin(\omega t))$. Für die Tunnelraten $\Gamma_{\mathrm{R},m}^{(\mp)}(t)$, deren Zeitabhängigkeit ausschließlich durch die zeitabhängigen Kapazitäten bestimmt wird, wird hier das Standardergebnis für Tunnelraten bei einer Spannung von -V/2 an der linken Elektrode und V/2 an der rechten Elektrode verwendet:

$$\Gamma_{\rm R,m}^{(\mp)}(t) = \frac{1}{\tau} \frac{\pm \left(m + \frac{C_{\rm L}(t)V}{e}\right) - \frac{1}{2}}{1 - \exp\left[-\left(\pm \left(m + \frac{C_{\rm L}(t)V}{e}\right) - \frac{1}{2}\right)\frac{e^2}{C_{\Sigma}(t)k_{\rm B}T}\right]}$$
(2.6)

mit $\tau = R_{\rm R}(t_{\rm max})C_{\rm R}(t_{\rm max})$ und $C_{\Sigma}(t) = C_{\rm R}(t) + C_{\rm L}(t)$. Für die linke Elektrode müssen die Indizes R und L vertauscht werden; V muss durch -V und x(t) durch -x(t) ersetzt werden.

Für die numerischen Rechnungen (Anhang B.1) wurde die komplette Mastergleichung verwendet, wobei der Einfachheit halber angenommen wurde, dass die Kapazität wie in einem Plattenkondensator vom Abstand abhängt: $C_{\rm L}(t) \propto \frac{1}{x_0+x_{\rm max}+x(t)}$; die genaue Form spielt jedoch wegen des dominierenden Einflusses von R(t) für nicht zu große V keine Rolle. Die Funktion g(t) hat die Form

$$g_{\rm R}(t) = \frac{x_0 + x_{\rm max} - x(t)}{x_0} \exp\left[-\frac{x_{\rm max} - x(t)}{\lambda}\right]$$
 (2.7)

und hat folglich ein stark ausgeprägtes Maximum bei t_{max} (Abbildung 2.3.1). Da die Elektronen nicht gleichzeitig auf der rechten und der linken Seite tunneln können ($x_{\text{max}} \gg \lambda$), kann das Tunneln an der rechten und der linken Seite getrennt behandelt werden. Für die analytische Lösung reicht es daher, zuerst nur eine Elektrode zu betrachten: $\Gamma_{\text{L}}^{(\pm)}(m,t) = 0$, wobei sich der rechten Elektrode eine Insel mit n Elektronen nähert, d.h. es geht darum, die bedingte Wahrscheinlichkeit p(m|n,t) zu berechnen, m Elektronen auf der Insel zu finden, wenn dort ursprünglich n Elektronen waren.

Wenn sich die Insel nahe der rechten Elektrode befindet, ändert sich $C_{\rm L}(t)$ übrigens sehr viel langsamer als $C_{\rm R}(t)$ – unabhängig vom genauen Modell für die Kapazität. Solange die angelegte Spannung V nicht zu groß ist (d.h. solange $VC_{\rm L}(t_{\rm max})$ von der Ordnung $e, 2e, \ldots$ ist), kann $C_{\rm L}(t)$ durch $C_{\rm L}(t_{\rm max})$ ersetzt werden. Um die Mastergleichung analytisch zu lösen, wird die Funktion $g_{\rm R}(t)$ durch eine Stufenfunktion $\tilde{g}_{\rm R}(t)$ mit derselben Höhe und Fläche ersetzt:

$$\tilde{g}_{\rm R}(t) \equiv \begin{cases} 0 & : t \le t_{\rm max} - t_0 \\ 1 & : t_{\rm max} - t_0 < t < t_{\rm max} + t_0 \\ 0 & : t \ge t_0 + t_{\rm max} \end{cases}, \qquad t_0 \equiv \sqrt{\frac{\pi\lambda}{2x_{\rm max}}} \frac{1}{\omega} \left(1 + \frac{\lambda}{2x_0} \right).$$
(2.8)

Die Breite $2t_0$ entspricht einer effektiven Verweildauer (der Faktor 2 könnte natürlich noch in die Definition von t_0 hineingezogen werden, allerdings sind so die später auszurechnenden Formeln etwas einfacher). Wie nicht anders zu erwarten, nimmt die Kontaktzeit mit steigender Oszillationsfrequenz ab $(x_{\text{max}} \gg \lambda, t_{\text{max}} \gg t_0)$.

Die Lösung p(m|n,t) der Mastergleichung kann dafür verwendet werden, die Wahrscheinlichkeit $p_{\Delta}(m)$ auszurechnen, dass m Elektronen transferiert werden:

$$p_{\Delta}(n) \equiv \sum_{k} p_{i}(k)p(k-n|k, t_{0}+t_{\max}),$$
 (2.9)

wobei $p_i(k)$ die Wahrscheinlichkeit ist, am Anfang k Überschusselektronen auf der Insel zu finden ($\sum_k p_i(k) = 1$). Um diese Wahrscheinlichkeit zu berechnen, sei hier die symmetrische Situation betrachtet, bei der die Wahrscheinlichkeit, dass sich die Insel der rechten Elekrode mit n Elektronen nähert, dieselbe ist, wie die Wahrscheinlichkeit, dass sich die Insel der linken Elektrode mit -n Elektronen nähert:

$$p_{\rm i}(n) = p_{\rm f}(-n),$$
 (2.10)

 mit

$$p_{\rm f}(m) = \sum_{n} p_{\rm i}(n) p(m|n, t_0 + t_{\rm max}).$$
 (2.11)

Dies führt zu seinem System linearer Gleichungen für $p_i(n)$, welches prinzipiell für beliebige Werte von n_{\max} und t_0 gelöst werden kann. Da die Formeln schnell sehr unanschaulich werden (siehe Anhang C), sollten kleine Werte von n_{\max} verwendet werden. Mithilfe von $p_{\Delta}(n)$ werden dann sowohl $\langle N \rangle$ als auch $\Delta N \ (\Delta N^2 \equiv \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2; \ \langle N^k \rangle \equiv \sum_N N^k p_{\Delta}(N))$ berechnet.

2.3.2 Grenzfall tiefer Temperaturen

Für sehr tiefe Temperaturen $k_{\rm B}T \ll \frac{e^2}{C}$ legt die Coulomb–Blockade die Zahl der Überschusselektronen auf der Insel zwischen $-n_{\rm max}$ und $n_{\rm max}$ fest. Es soll



Abbildung 2.6: Die mittlere Zahl von Elektronen, die pro Periode transportiert wird (links) und deren Standardabweichung (rechts) für T = 0. Coulomb–Blockade ist deutlich zu erkennen: unterhalb der kritischen Spannung $\frac{VC_{\rm L}(t_{\rm max})}{e} = \frac{1}{2}$ werden keine Elektronen transportiert. Für große Verweildauern $t_0 \gg \tau$ wird die Coulomb–Treppe symmetrisch. Die Übereinstimmung zwischen analytischen Ergebnissen (Linien) und Computersimulationen (Symbole) ist ausgezeichnet.

hier in erster Linie das Verhalten eines Einzel–Elektronen–Pendels bei kleinen ganzzahligen Werten von $n_{\max} \left(\frac{C_{\rm L}(t_{\max})V}{e} = n_{\max} + \delta; -\frac{1}{2} \le \delta < \frac{1}{2}\right)$ untersucht werden.

Mit der in Gleichung (2.8) beschriebenen Näherung vereinfacht sich die Mastergleichung bei T = 0 zu:

$$\frac{d}{dt}p(n-k|n,t) = -\frac{1}{\tau_{n-k}}p(n-k|n,t) + \frac{1}{\tau_{n-k+1}}p(n-k+1|n,t)$$
(2.12)

mit

$$\frac{1}{\tau_{-n_{\max}+\nu}} = \begin{cases} \frac{1}{\tau} \left(\nu - \frac{1}{2} + \delta\right) & : \quad \nu > 0\\ 0 & : \quad \nu \le 0 \end{cases}$$
(2.13)

Die Lösung der Gleichung (2.12) für $t_{\text{max}} - t_0 < t < t_{\text{max}} + t_0$ lautet:

$$p(n-k|n,t) = \frac{1}{k!} \left(\prod_{i=n-k+1}^{n} \frac{\tau}{\tau_i} \right) \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau_{n-k}}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau}\right) \right]^k$$
(2.14)

wo $\Delta t \equiv t_{\max} - t_0 + t \ (n, n - k > -n_{\max})$. Gleichung (2.14) kann leicht durch vollständige Induktion bewiesen werden, da $\frac{1}{\tau_m} + \frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{m+1}}$ gilt. Für $n = n_{\max}$, führt die Zusatzbedingung, dass die Summe der Wahrscheinlichkeiten eins sein muss zu $p(-n_{\max}|n,t) = 1 - \sum_{m=-n_{\max}+1}^{n} p(m|n,t)$. Zusammen mit den Gleichungen (2.9) und (2.11) kann dies dazu verwendet werden, den Strom und die Fluktuationen des Stroms für T = 0 analytisch zu berechnen.

In Abbildung 2.6 werden diese analytische Ergebnisse mit numerischen Ergebnissen der vollständigen Master–Gleichung verglichen. Die Coulomb–Blockade ist deutlich zu sehen: Für niedrige Spannungen werden keine Elektronen transferiert; oberhalb einer kritischen Spannung von $V = \frac{e^2}{2C_{\rm L}(t_{\rm max})}$ fließt Strom. Im



Abbildung 2.7: Die mittlere Zahl der Elektronen, die pro Periode transportiert werden, (durchgezogene Linie) und die Standardabweichung (gestrichelte Linie) für T = 0und $\frac{VC_{\rm L}(t_{\rm max})}{e} = 1$. Für $t_0 \ll t_{\rm max}$ fließt kein Strom; der optimale Parameterbereich ist für $t_0 \gg t_{\rm max}$ gegeben, da dort die mittlere Zahl der pro Periode transferierten Elektronen dem ganzzahligen Wert $\langle N \rangle = 2$ zustrebt und die Fluktuationen verschwinden.

Limes langer Verweildauern $(t_0 \gg \tau)$ ergibt sich eine Coulomb-Treppe, während das Einzel-Elektronen-Pendel bei kurze Verweildauern $(t_0 \leq \tau)$ immer noch ein Transistor-artiges Verhalten zeigt.

Für $n_{\text{max}} = 1$ und $\delta = 0$ sind die analytischen Gleichungen für die mittlere Anzahl der transportierten Elektronen ($\langle N \rangle$) und deren Standardabweichung ($(\Delta N)^2$) vergleichsweise einfach:

$$\langle N \rangle = 2 \frac{1 - a^3}{[1 + a] \left[1 + \frac{1}{2}a + a^2 \right]}$$
 (2.15)

$$(\Delta N)^2 = 2a(1-a)\frac{6+9a+22a^2+13a^3+10a^4}{\left[2a^2+a+2\right]^2\left[a+1\right]^2}$$
(2.16)

mit $a \equiv \exp\left(-\frac{t_0}{\tau}\right)$. Wie erwartet werden im Limes sehr kurzer Verweildauern $t_0 \ll \tau \ (a \to 1)$ keine Elektronen transportiert, während im Limes langer Verweildauern $t_0 \gg \tau \ (a \to 0)$ das einfache Ergebnis (2.1) reproduziert wird. Die Fluktuationen verschwinden sowohl im Limes langer als auch kurzer Verweildauern. Ihr Maximum ($\Delta N \approx 0.686$) wird für $t_0 \approx 0.92\tau$ erreicht (Abbildung 2.7).

2.3.3 Endliche Temperaturen

Für endliche Temperaturen ist die Zahl der Elektronen auf der Insel nicht mehr so eingeschränkt wie bei T = 0. Die Mastergleichung hat hier die etwas kompli-

ziertere Form:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p(-n_{\max}+k|n,t) = \frac{g(t)(k-\frac{1}{2}+\delta)}{\tau\left(1-\varepsilon^{2k-1}\xi\right)} \left[\varepsilon^{2k-1}\xi p(-n_{\max}+k-1|n,t) - p\left(-n_{\max}+k|n,t\right)\right] \\
+ \frac{g(t)}{\tau}\frac{k+\frac{1}{2}+\delta}{\left(1-\varepsilon^{2k+1}\xi\right)} \left[p(-n_{\max}+k+1|n,t) - \varepsilon^{2k+1}\xi p(-n_{\max}+k|n,t)\right], \quad (2.17)$$

mit $\varepsilon \equiv \exp\left(-\frac{e^2}{2C_{\Sigma}(t)k_{\rm B}T}\right)$ und $\xi = \varepsilon^{2\delta}$. Für $t_0 \gg \tau$ und konstantes C_{Σ} (d.h. konstantes ε und ξ) ist die stationäre Lösung $\left(\frac{d}{dt}p(m|n,t)=0\right)$, die von n unabhängig ist, gegeben durch $(p_{\rm f}(m)=p(m|n,t_{\rm max}+t_0))$:

$$p_{\rm f}(-n_{\rm max}+k) = \eta^{-1} \varepsilon^{k^2} \xi^k ,$$
 (2.18)

mit der Normierungskonstante $\eta \equiv \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \varepsilon^{\nu^2} \xi^{\nu}$. Zusammen mit Gleichung (2.9) führt dies zu:

$$p_{\Delta}(2n_{\max}+k) = \frac{\xi^{-k}}{\eta^2} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \varepsilon^{\nu^2} \varepsilon^{(\nu+k)^2}.$$
 (2.19)

Bei einem Einzel-Elektronen-Pendel ist $C_{\Sigma}(t)$ allerdings zeitabhängig, weshalb die Ergebnisse (2.18) und (2.19) nicht exakt sind. Es zeigt sich jedoch, dass es genügt $C_{\Sigma}(t)$ durch ein effektives $C_{\Sigma}(t^*)$, wobei t^* durch

$$\int_{t^*}^{\pi/\omega} g(t) \mathrm{d}t = \tau \tag{2.20}$$

definiert ist, zu ersetzen, um eine gute Übereinstimmung zwischen der numerischen Lösung des zeitabhängigen Problems und der analytischen Lösung (2.18) zu erhalten. (Veränderungen, die auf einer Zeitskala passieren, die viel kleiner ist als $\frac{\pi}{\omega} - t^*$, d.h. effektiven Zeitskalen die viel kleiner sind als τ , sind zu schnell als dass das System ihnen folgen könnte, siehe auch Abbildung 2.7.)

Abbildung 2.8 zeigt zwei Stufen der Coulomb-Treppe für verschiedene Temperaturen. In der Mitte der Stufen ($\delta = 0$) stimmt die mittlere Zahl der Elektronen, die pro Periode transferiert werden, mit dem einfachen Ergebnis $\langle N \rangle = 2n_{\text{max}}$ sogar für $k_{\text{B}}T > \frac{e^2}{2C_{\Sigma}}$ überein. Die Standardabweichung ist gegeben durch:

$$\Delta N \simeq \begin{cases} 2\sqrt{\frac{\varepsilon}{2\varepsilon+1}} & : \quad k_{\rm B}T \ll \frac{e^2}{2C_{\Sigma}} \\ \sqrt{k_{\rm B}T/\frac{e^2}{2C_{\Sigma}}} & : \quad k_{\rm B}T \gg \frac{e^2}{2C_{\Sigma}} \end{cases} , \quad \varepsilon = \exp\left(-\frac{e^2}{2C_{\Sigma}(t^*)k_{\rm B}T}\right) . \quad (2.21)$$

Wie nicht anders zu erwarten verschwinden die Fluktuationen exponentiell für Temperaturen, die deutlich kleiner sind als $E_{\rm C}$.

2.3.4 Optimaler Betrieb

Der relative Fehler des Stroms verschwindet exponentiell mit sinkender Temperatur und steigender Verweildauer; ab $t_0 \approx 20\tau$ sollte in der Mitte der ersten



Abbildung 2.8: Für $t_0 \gg \tau$ und T = 0 (durchgezogene Linie) ist die Coulomb-Treppe perfekt. Für steigende Temperaturen ist die Coulomb-Treppe zwar noch symmetrisch, allerdings werden die Kanten abgerundet, was für hohe Temperaturen zu einem ohmschen Verhalten führt (Die Energieskala ist gegeben durch $E_c = \frac{e^2}{2C_{\Sigma}}$)

Stufe die für einen Stromstandard sicherlich ausreichende Genauigkeit (bei einer Mittelung über 10^8 Schwingungen, siehe auch Anhang E) von

$$\frac{\Delta I}{I} \simeq \frac{\sqrt{3} \exp(-20/2)}{2\sqrt{10^8}} \approx 10^{-9}$$

erreicht werden, die allerdings aufgrund von Quantenfluktuationen (Kapitel 3) und Umgebungsladungsfluktuationen (Kapitel 4) noch etwas reduziert werden könnte (Abschnitt 4.3.3).

2.4 Erklärung der experimentellen Ergebnisse

Die ersten experimentellen Ergebnisse des nanomechanischen Einzel-Elektronen-Pendel (Erbe, Weiss, Zwerger und Blick (2000)) sehen etwas anders aus, als man es nach den bisherigen Überlegungen annehmen konnte. Um die Daten zu verstehen, müssen hier insbesondere zwei Dinge erklärt werden: die gemessene Peakform bei tiefen Temperaturen sowie die doch ziemlich große Zahl von Elektronen, die bei Raumtemperatur pro Periode transferiert werden (Abbildung 2.9). Eine Kurzform dieses Abschnitts wurde bereits in (Erbe et al. (2000)) veröffentlicht.

2.4.1 Treiberspannung

Leider bewegt sich das Pendel nicht von selbst – für die von Gorelik et al. (1998) vorhergesagten Selbstoszillationen ist das nanomechanische Pendel nicht weich genug. In Anbetracht der Tatsache, dass das Pendel aus Stabilitätsgründen auch nicht beliebig weich gemacht werden kann, musste die Oszillation hier getrieben werden. Dazu wurde unterhalb der Insel am Pendel ein weiteres Stück metallisiert und geerdet. Es wurden ferner zwei Treiberelektroden unterhalb der Source–Drain



Abbildung 2.9: Zahl der Elektronen, die im Experiment pro Periode bei Raumtemperatur (links) bzw. Heliumtemperatur (4.2 K, rechts) transferiert wird. Durchgezogene Linien sind der Fit mit Gleichung (2.24). Im Raumtemperaturbild wird als Inset ferner gezeigt, dass die gemessene Peakhöhe praktisch nicht von der Source–Drain Spannung abhängt. Im Tieftemperaturbild ist als Inset noch die mittels einer finite Elementerechnung bestimmte Feldverteilung zwischen Insel und Treiberelektrode gezeigt. Aus Erbe et al. (2000).

Elektroden angebracht, an die dann eine Wechselspannung angelegt wurde (Abbildung 2.10). Leider erfüllte sich die Hoffnung nicht, dass diese Spannung keinen Einfluss auf den zu messenden Strom haben würde.

In diesem Abschnitt werden nun zwei Fälle von kapazitativem Ubersprechen unterschieden: Zunächst das naheliegende auf die Source–Drain Elektroden, und dann das Übersprechen direkt auf die Insel. Letzteres erklärt die experimentellen Ergebnisse sehr gut.

2.4.1.1 Kapazitatives Übersprechen auf die Elektroden

Ein Ubersprechen auf die Source–Drain Elektroden würde dazu führen, dass die Wechselspannung $\hat{V}\sin(\omega t + \phi)$ die an das Pendel angelegte Source–Drain–Spannung ändern würde:

$$V \to V + c_{12} \frac{e}{C_{\rm L}(t_{\rm max})} \sin(\omega t + \phi),$$
 (2.22)

wobei ϕ die Phasenbeziehung zwischen der Treiberspannung und der Bewegung $(x(t) = \sin(\omega t))$ ist; c_{12} ist ein Maß dafür, wie stark das Übersprechen ist. Die Auswirkungen eines solchen Übersprechens sind in Abbildung 2.11 gezeigt. Auch für sehr große Werte von c_{12} (rechtes Bild) ergibt sich – im Widerspruch zum Experiment – ein ohmsches Verhalten.



Abbildung 2.10: Schematische Zeichnung des Messaufbaus. Das Pendel wird in Bewegung gesetzt, indem an die Treiberelektroden G_1 und G_2 eine Wechselspannung angelegt wird (Erbe (2000)). Die Insel pendelt zwischen Source (S) und Drain (D) hin und her. Metallisierte Teile werden wieder dunkelgrau dargestellt. Der untere Teil des Pendels, der von der Insel elektrisch isoliert ist, wurde in den Experimenten geerdet.

Für kleine Werte von c_{12} wurde ein semianalytisches Verfahren zur Lösung der Mastergleichung verwendet, bei dem die Mastergleichung zunächst für beide Seiten und verschiedene Anfangswerte der Zahl der Elektronen auf der Insel nwie in Abschnitt 2.3.1 beschrieben vereinfacht und dann mit Hilfe von *Maple* analytisch gelöst wurde.

Ausgehend von einer beliebigen (aber auf eins normierten und nichtnegativen) Anfangserteilung für $p_i(n)$ wurde dann numerisch die Verteilung $p_f(n)$ gemäß

$$p_{\rm f}(m) = \sum_{n} p_{\rm i}(n) p_{\rm R}(m|n, t_0 + t_{\rm max})$$

berechnet. Damit wurde

$$p_{\rm i}(m) = \sum_n p_{\rm f}(n) p_{\rm L}(m|n, t_0 + t_{\rm max})$$

bestimmt und daraus dann wieder $p_{\rm f}(m)$ und so weiter – es zeigt sich, dass dieses Verfahren sehr schnell konvergiert (nach 10 Schwingungen ändert sich für $t_0 = 10\tau$ nicht mehr viel an den so erhaltenen Zahlenwerten). Nachdem das Verfahren konvergiert war, konnte mit Gleichung (2.9) die Wahrscheinlichkeit berechnet werden, dass *n* Elektronen pro Periode transferiert werden, woraus wiederum die Messgrößen *N* und ΔN bestimmt wurden.

Dieses Verfahren eignet sich auch ausgezeichnet dazu festzustellen, wie lang es dauert, bis die Zahl der Elektronen auf der Insel nicht mehr davon abhängt,



Abbildung 2.11: Die Zerstörung der Coulomb–Treppe durch kapazitatives Übersprechen auf die Source–Drain–Elektroden. Für kleine Werte von c_{12} (linkes Bild, siehe auch Gleichung (2.22)) und $\phi = 0$ wurde zusätzlich zur Montecarlo–Simulation noch ein semianalytisches Verfahren verwendet. Auch für sehr große Werte von $c_{12} = 1000$ (rechtes Bild) ergibt sich ein ohmsches Verhalten.

wieviel Elektronen dort am Anfang waren. Dies ist insbesondere für die Computersimulation wichtig, da hier aus Zeitgründen ja nicht wie im Experiment immer über 10^8 Schwingungen gemittelt werden kann; es wurde folglich ein Vorlauf von 10 Schwingungen gewählt, bevor die berechneten Zahlen zur Berechnung des Ergebnisses verwendet wurden.

2.4.1.2 Kapazitatives Übersprechen auf die Insel

Eine andere Möglichkeit des kapazitativen Übersprechens, die vielleicht vor allem deshalb nicht naheliegend erschien, weil der untere Teil des Pendels ja geerdet ist, ist im Sinne einer Gatespannung:

$$Q_{\rm g} = c_{12}e\sin(\omega t + \phi). \qquad (2.23)$$

Um diese zu berücksichtigen, muss in der Mastergleichung (2.2) n durch $n + \frac{Q_g}{e}$ ersetzt werden. Numerisch lässt sich dies auch für große Werte von c_{12} leicht durchführen (Abbildung 2.12). Sowohl die Tatsache, dass im Experiment bis zu 1000 Elektronen pro Periode gemessen wurden, als auch die Tatsache, dass der gemessene Strom nur sehr sehr langsam von der Source–Drain–Spannung abhängt werden erklärt, ebenso das Auftreten von Strompeaks mit "falschem" Vorzeichen.

Bemerkenswert ist auch die Tatsache, dass der relative Fehler $\frac{\Delta N}{N}$ von der Ordnung 10^{-3} ist, was einem relativen Fehler im Strom (gemittelt über 10^8 Perioden) von 10^{-7} entspricht. Die numerischen Rechnungen wurden bei T = 0durchgeführt, aber auch bei Raumtemperatur ($k_{\rm B}T \simeq 300 \frac{e^2}{C_{\Sigma}}$) beträgt der relative Fehler der Stromquelle immer noch 10^{-6} . Dass diese Genauigkeit im Experiment dann doch nicht erreicht wird, kann dadurch erklärt werden, dass die Bewegung komplexer als hier angenommen ist; außerdem erhöht die Zeitabhängigkeit von C_g die Fluktuationen noch etwas.



Abbildung 2.12: Das Ergebnis einer Montecarlo–Simulation von kapazitativem Ubersprechen auf die Insel (Gleichung (2.23)) für $c_{12} = 1000$. Die Phasenverschiebung ϕ betrug in der linken Abbildung von oben nach unten 0, 0.22π , 0.5π , 1.5π , 1.22π , und π . Links ist die mittlere Zahl der pro Periode transferierten Elektronen, rechts deren Standardabweichung aufgetragen.

2.4.2 Wie groß sind die Kapazitäten?

Diese Erklärung macht natürlich nur dann Sinn, wenn die Kapazitäten zwischen Treiberelektroden und Insel die richtige Größenordnung haben. Bei maximaler Auslenkung des Pendels hat die nähere der beiden Treiberelektroden von der Insel aus betrachtet einen Radius von etwa 215 nm. Da der Abstand zwischen Elektrode und Insel gerade 300 nm beträgt, führt das zu einer Kapazität von

$$C \simeq 4\pi\varepsilon_0 \left(\frac{1}{215\,\mathrm{nm}} - \frac{1}{300\,\mathrm{nm}}\right)^{-1} \approx 84\,\mathrm{aF}\,.$$

mit $1 \text{ aF} = 10^{-18} \text{ F}$. Dies entspricht Gateladungen von bis zu $\pm 527 e$ wenn Spannungen von bis zu $\pm 1V$ an die Treiberelektrode angelegt werden.

Dabei wurde hier angenommen, dass das elektrische Feld der Elektrode nicht zu sehr durch andere metallische Teile verändert wird. In Anbetracht der im Vergleich zu anderen relevanten Spannungen doch recht großen Elektrodenspannung erscheint diese Annahme hier gerechtfertigt. Die Kapazität kann folglich genauso wie bei der Lehrbuchberechnung der Kapazität des Kugelkondensators geschehen (siehe z.B. Gerthsen et al. (1989)): Das Potential einer mit der Ladung Q geladenen Kugel ist im Abstand r gegeben durch $V(r) = \frac{Q}{4\pi\varepsilon_0 r}$; die Kapazität ist $C = Q/\Delta V$.

Da ja ein Teil des Raumes noch mit Dielektrikum gefüllt ist ($\varepsilon_r \simeq 10$, weshalb die so abgeschätzte Kapazität noch etwas zu klein ist), kann ein realistischer Wert für den Elektrodenradius auch noch etwas kleiner sein; die zweite Treiberelektrode sollte auch noch einen Einfluss haben – wenn beide Kapazitäten gleich groß wären und an die eine Elektrode eine Sinus– und an die andere eine Cosinus–Spannung angelegt wird, ergäbe dies noch einmal einen Faktor 1.41, da im Maximum der addierten Spannungen gerade $\sqrt{2}$ V anliegen. Torsionsmoden könnten auch zu einer Erhöhung der Kapazität führen, falls zumindest ein Teil der Raums zwischen Elektrode und Insel noch mit Dielektrikum gefüllt sind.

Für die Frage, ab welcher Temperatur Coulomb-Blockade gemessen werden kann, ist die Summe der hier abgeschätzten Kapazität und der Kapazitäten zwischen Insel und Source- bzw. Drain-Elektrode relevant. Um eine Größenordnung angeben zu können, sei hier angenommen, dass alle drei Kapazitäten in etwa gleich groß sind. Eine Kapazität von 3*80 aF entspricht einer Temperatur von $T \simeq 7 \text{ K} \left(\frac{e^2}{C} = k_{\text{B}}T\right)$; die Temperatur, ab der die Coulomb-Treppe gut sichtbar wäre, wenn sie nicht durch die Treiberspannung zerstört werden würde, liegt wieder einen Faktor 10 unter dieser Temperatur:

$$T \approx 700 \,\mathrm{mK}$$

2.4.3 Peakform

Da sich an die Peaks keine Gaußglocke anfitten lässt, ist das einfachst mögliche Modell bei tiefen Temperaturen (wo nur noch 0.1 Elektronen pro Periode transferiert werden) gegeben durch eine Entwicklung der Gleichung (2.15) im Limes kurzer Verweildauern $t_0 \ll \tau$

$$\langle N
angle \propto {t_0 \over au}$$
 ,

wobei die Bewegung des Pendels die Form

$$x(t) = x_{\max}(f)\,\sin(2\pi ft)$$

hat und der Widerstand exponentiell von $x_{\max}(f)$ abhängt und t_0 im wesentlichen durch

$$t_0 \propto \frac{1}{f\sqrt{x_{\max}}}$$

gegeben ist (Gleichung (2.8)). Für $x_{\max}(f)$ kann die Formel einer gedämpften harmonischen Schwingung

$$\ddot{x}(t) + 2\pi k \dot{x}(t) + 4\pi^2 f_0^2 x(t) = F \sin(2\pi f(t+t^*))$$

verwendet werden (siehe z.B. Gerthsen et al. (1989)):

$$x_{\max}(f) \propto \frac{1}{\sqrt{(f^2 - f_0^2)^2 + k^2 f^2}};$$

für die Resonanzfrequenz gilt:

$$f_{\rm r} = \frac{f_0}{2}\sqrt{4-2k}\,.$$

Die Peakform wird folglich durch die Gleichung

$$N = \frac{A}{f} \sqrt{\frac{x_{\max}(f_{\rm r})}{x_{\max}(f)}} \exp\left[-B\left\{1 - x_{\max}(f)/x_{\max}(f_{\rm r})\right\}\right]$$
(2.24)

beschrieben, die sich gut an die experimentellen Daten fitten lässt (Abbildung 2.9). Der Gütefaktor

$$Q = \frac{f_0}{k}$$

ist bei Heliumtemperaturen dabei von der Ordnung 10 (Erbe et al. (2000)). Dies liegt um zwei Größenordnungen unter dem Wert, der üblicherweise für Drähte gemessen wird, die an zwei Seiten aufgehängt sind (siehe z.B. Krömmer et al. (2000)).

2.4.4 Bewegungsgleichung

Das Pendel bewegt sich, weil an den Treiberelektroden eine Wechselspannung angelegt wird. Wie genau verhält sich dann die Kraft? Der Einfachheit halber sei hier wieder angenommen, dass die Kapazität zwischen Treiberelektrode und unterem metallisierten Teil des Pendels umgekehrt proportional zum Abstand dist. Zwei entgegengesetzt geladene Kondensatorplatten ziehen sich an, die Energie beträgt

$$E = \frac{1}{2}CV^2;$$

die Kraft, mit der sie sich anziehen $(F = -\frac{\partial}{\partial d}E)$ ist gegeben durch

$$F = \frac{C}{d}V^2$$

Das Pendel wird zu beiden Elektroden hingezogen; wenn eine Kraft nach rechts hier als positiv definiert wird, gilt:

$$F_{\rm ges} = \frac{C_{\rm R}}{d_{\rm R}} V_{\rm R}^2 - \frac{C_{\rm L}}{d_{\rm L}} V_{\rm L}^2 \,.$$

Da insbesondere in der Ruhelage $\left(\frac{C_{\rm R}}{d_{\rm R}} = \frac{C_{\rm L}}{d_{\rm L}}\right)$ eine Kraft auf die Insel ausgeübt werden soll (damit die Oszillationen überhaupt beginnen, außerdem ist die Oszillation ja noch gedämpft), dürfen die angelegten Spannungen von Betrag her nicht gleich sein. Es bietet sich insbesondere an

$$V_{\rm R} = \hat{V}_{\rm R} \cos(2\pi f t)$$

und

$$V_{\rm L} = \hat{V}_{\rm L} \sin(2\pi f t)$$



Abbildung 2.13: Der zeitliche Verlauf der Schwingung (durchgezogene Linie) bei angelegten Spannungen von $V_R = \hat{V} \cos(2\pi ft)$ und $V_L = -\hat{V} \sin(2\pi ft)$ für den Fall, dass die Kraft auf den unteren Teil des Pendels dominiert (links), bzw. dass die Kraft auf die Inselladung dominiert (rechts). Die Frequenz der angelegten Spannung wurde so gewählt, dass sich das System jeweils in Resonanz befand – d.h. $f = \frac{1}{2}f_r$ (links) und $f = f_r$ (rechts). Das rechte Bild darf allerdings nicht mit den Selbstoszillationen verwechselt werden, da die angelegte Wechselspannung erst dafür verantwortlich ist, dass sich so viele Elektronen auf der Insel befinden.

(oder umgekehrt) zu wählen. Die resultierende Kraft hängt also sowohl vom Abstand als auch von der Zeit ab $(C = \frac{\varepsilon_0 A}{d})$:

$$x''(t) + 2\pi k x'(t) + 4\pi^2 f_0^2 x(t) = \frac{\varepsilon_0 A}{(d_0 - x(t))^2} V_{\rm R}(t)^2 - \frac{\varepsilon_0 A}{(d_0 + x(t))^2} V_{\rm L}(t)^2 . \quad (2.25)$$

Diese Differentialgleichung muß nun leider nicht im Limes $d_0 \gg |x(t)|$ gelöst werden (wo der Nenner entwickelt werden könnte), weshalb Versuche hier analytisch weiterzurechnen nicht besonders Erfolg versprechend sind; sie wurde folglich mit einem vierstufigen Runge-Kutta Verfahren (Press et al. (1992)) numerisch gelöst (Abbildung 2.13), wobei für k der Wert $\frac{f_0}{10}$ gewählt wurde (siehe Abschnitt 2.4.3).

Dabei sollte es eigentlich nicht überraschen, dass sich das Pendel mit der doppelten Frequenz der angelegten Spannung bewegt, da die Zeitabhängigkeit der Kraft im Wesentlichen durch $\cos(\omega t)^2 - \sin(\omega t)^2 = \cos(2\omega t)$ gegeben ist, d.h. die Kraft doppelt so schnell wie die Spannung oszilliert. Leider sind das nicht die Lösungen, mit denen in Abschnitt 2.4.1.2 der recht große Strom bei Raumtemperatur erklärt wurde, denn dazu sollte die Gatespannung immer positiv sein wenn sich das Pendel an der rechten Elektrode befindet und immmer negativ wenn es an der linken Elektrode ist¹. Um dies zu erreichen muss noch die Kraft berücksichtigt werden, die das elektrostatische Feld auf die doch recht große Inselladung

¹Allerdings könnten die hier gefundenen Lösungen, die ein Signal zu Rauschverhältnis von ca. $\frac{1}{1000}$ haben, zum Untergrund beitragen, was damit im Einklang steht, dass dieser sich relativ leicht mit der Source–Drain–Spannung zu 0 verschieben lässt
ausübt (Abbildung 2.13). Dies geschah wie in Abschnitt 2.1 mit einer Kraft $\mathcal{E}Q$ in einem einfachen Modell dadurch, dass die Ladung Q auf der Insel für große positive Auslenkungen (x > 0.8) als $Q = CV_{\rm R}$ und für große negative Auslenkungen (x < -0.8) als $Q = CV_{\rm L}$ gewählt wurde, was in etwa der Lösung der zeitabhängigen Mastergleichung bei gleichzeitiger Lösung der Bewegungsgleichung im Limes großer Verweildauern entspricht.

Kapitel 3

Quantenfluktuationen

Bei einer Einzel-Elektronen-Box ist die Steigung χ der Coulombtreppe in der Stufenmitte ($n_x = 0$, Abschnitt 3.1, siehe auch Abschnitt 1.1.1) zwar ein gutes Maß für Quantenfluktuationen, sie beantwortet aber insbesondere nicht die Frage, wie eine endliche Leitfähigkeit $g \equiv \frac{R_{\rm K}}{4R_{\rm T}}$ die Genauigkeit des Einzel-Elektronen-Pendels beeinflusst. Dazu ist es nötig $\langle n^2 \rangle$ zu berechnen (Abschnitt 3.2).

Zunächst wird die Einzel-Elektronen-Box auf ein effektives Modell – eine langreichweitig gekoppelte XY-Kette – abgebildet. Die Steigung χ der Einzel-Elektronen-Box entspricht jetzt dem Helizitätsmodul der eindimensionalen Kette; die Berechnung des Pfadintegrals erfolgt störungstheoretisch. Bei den in Abschnitt (3.1) vorgestellten Resultaten handelt es sich in erster Linie um Ergebnisse von Hofstetter und Zwerger (1997) (siehe auch Zwerger und Scharpf (1991), Zwerger (1994), Hofstetter (1997) sowie Hofstetter und Zwerger (1998)), die noch durch Rechnungen für endliche Temperaturen ergänzt werden (Abschnitt 3.1.3), bei denen sich zeigt, dass die Korrekturen für kleine endliche Temperaturen keineswegs – wie in der orthodoxen Theorie der Coulomb-Blockade erwartet – exponentiell verschwinden.

3.1 Quantenmechanische Einzel–Elektronen– Box

Der Hamiltonoperator der quantenmechanischen Einzel-Elektronen-Box (Zwerger (1994)) ist gegeben durch:

$$\hat{H} = \frac{U}{2}(\hat{n} - n_x)^2 + \sum_a \varepsilon_a c_a^{\dagger} c_a + \sum_b \varepsilon_b c_b^{\dagger} c_b + \sum_{a,b} t_{ab} c_a^{\dagger} c_b + h.c.; \qquad (3.1)$$

er ist die Summe aus elektrostatischer Energie $(U = \frac{e^2}{C})$, Fermiverteilungen in Zuleitungen (Index a) und Insel (Index b) sowie dem Tunnelanteil. Die Operatoren c und c^{\dagger} sind Erzeugungs– bzw. Vernichtungsoperatoren für Quasiteilchen,

deren Energieniveaus durch a bzw. b indiziert werden. Die Zahl der Uberschusselektronen in der Box wird durch den Operator

$$\hat{n} = \left. \sum_{a} c_{a}^{\dagger} c_{a} - \left\langle c_{a}^{\dagger} c_{a} \right\rangle \right|_{n_{x}=0}$$

bestimmt. Ein Parameter, der den Unterschied zwischen der orthodoxen Theorie mit rein elektrostatischer Energie und der quantenmechanischen Einzel-Elektronen-Box sehr gut beschreibt ist der dimensionslose Leitwert

$$g \equiv \frac{R_{\rm K}}{4R_{\rm T}}$$

der mit Hilfe von Fermis goldener Regel wie folgt durch Parameter des mikroskopischen Modells ausgedrückt werden kann:

$$g = \pi^2 \left| t \right|_{\varepsilon_{\mathrm{F}}}^2 \rho_a \rho_b \,,$$

wobei die ρ 's die Zustandsdichten an der Fermienergie $\varepsilon_{\rm F}$ sind und die t_{ab} bei $\varepsilon_{\rm F}$ im Hamiltonoperator (3.1) im Mittel als konstant genähert wurden. Dabei wurde verwendet, dass die Eigenzustände der Box ein kontinuierliches Spektrum besitzen, was nur für metallische Systeme der Fall ist.

Um quantenmechanische Korrekturen auszurechen, soll nun aus der Zustandssumme

$$\mathcal{Z} = \operatorname{Spur} \exp\left(-\beta \hat{H}\right)$$

zunächst die mittlere Zahl der Überschusselektronen auf der Insel berechnet werden. Dazu wird die Beziehung

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial n_x} = (n_x - \hat{n}) U$$

sowie die Operatoridentität

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \exp(\hat{H}(\alpha)) = \int_0^1 d\lambda \, \exp[(1-\lambda)\hat{H}(\alpha)] \frac{\partial \hat{H}(\alpha)}{\partial \alpha} \exp[\lambda \hat{H}(\alpha)] \tag{3.2}$$

verwendet. Da die Spur invariant bezüglich zyklischen Vertauschens ist, gilt:

$$\frac{\partial \ln(Z)}{\partial n_x} = \left(\langle n \rangle - n_x \right) \beta U \,. \tag{3.3}$$

Um die mittlere Zahl der Überschusselektronen auszurechen, kann z.B. diagrammatische Störungstheorie (Grabert (1994)) verwendet werden; hier wird ein effektives Modell für die Berechnung der Zustandssumme verwendet. Für die numerische Berechnung eignet sich neben Quanten-Montecarlo-Simulationen (siehe z.B. Scalia et al. (1991), Falci et al. (1995), Hofstetter und Zwerger (1998) und Göppert et al. (1998)) auch die Cluster-Transfer-Matrix-Methode von Chung (1999).

3.1.1 Effektives Modell

Die Zustandssumme des nulldimensionalen quantenmechanischen Systems kann in diejenige eines klassischen Systems in d = 1 mit der dimensionslosen Systemlänge

$$L = \beta U$$

umgeschrieben werden. Dazu werden zunächst die fermionischen Freiheitsgrade ausintegriert, ferner wird mit einer Hubbard–Stratonovich–Transformation eine Phasenvariable θ eingeführt, die zur Elektronenzahl n konjugiert ist (Eckern et al. (1984)). Der Tunnelanteil des Hamiltonoperators wird durch Kumulantenentwicklung bis zur zweiten Ordnung in t genähert, wobei diese Näherung im Limes eines Tunnelkontaktes mit sehr vielen Kanälen exakt wird (Schoeller (1996)).

Die Zustandssumme hat jetzt die Form eines Pfadintegrals

$$\mathcal{Z}(n_x) = \int \mathcal{D}_c \theta \exp\left[-S[\theta] + in_x \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}x}\right], \qquad (3.4)$$

wobei

$$S[\theta] = \frac{1}{2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}x}\right)^2 + \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x' \alpha(x - x') [1 - \cos(\theta(x) - \theta(x'))] \quad (3.5)$$

die Wirkung ist. Bei der Pfad
integration über die kompakte Variable θ werden periodische Randbe
dingungen gefordert

$$\theta(L/2) = \theta(-L/2) \pmod{2\pi}$$
.

Der langreichweitige Wechselwirkungskern α ist gegeben durch¹

$$\alpha(x) = -\frac{1}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{g}{\pi} |\omega_n| e^{-i\omega_n x} = g \frac{1}{L^2 \sin(\pi x/L)^2}$$
(3.6)

mit den Matsubarafrequenzen $\omega_n = \frac{2\pi n}{L}$. Im Grenzfall tiefer Temperaturen $(L \to \infty)$ vereinfacht sich die Wirkung (3.5) zu

$$S[\theta] = \frac{1}{2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}x}\right)^2 + \frac{g}{\pi^2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x' \frac{1 - \cos(\theta(x) - \theta(x'))}{(x - x')^2}$$
(3.7)

was mit einem zweikomponentigen klassischen Einheitsspin

$$\vec{S} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) \\ \sin(\theta) \end{pmatrix}$$

¹Eine genauere Betrachtung dieser Summe folgt auf Seite 51

nichts anderes ist als die Energie eines klassischen XY–Modells in einer Dimension mit einer langreichweitigen Wechselwirkung $\propto \frac{1}{r^2}$.

Die kurzreichweitige Wechselwirkung $\propto \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}x}\right)^2$ entsteht aus der Coulomb-Energie; die angelegte Spannung wirkt wie ein imaginäres Drehmoment in_x , welches an die Torsion

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \, \frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}x} = 2\pi m$$

der Kette koppelt. Da m wegen der periodischen Randbedingungen für θ nur ganzzahlige Werte annimmt, kann es als Windungszahl interpretiert werden.

3.1.2 Störungstheorie für kleines g

Da eine vollständige analytische Auswertung des Pfadintegrals (3.4) leider nicht möglich ist, wird im Folgenden die Zustandssumme für kleine g störungstheoretisch berechnet. Dazu wird zunächst die Wirkung (3.5) inklusive des Oberflächenterms aus Gleichung (3.4) in einen kurzreichweitigen und einen langreichweitigen Anteil zerlegt

$$S[\theta] - in_x \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \, \frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}x} = S_0[\theta] + gS_1[\theta] \tag{3.8}$$

mit

$$S_0[\theta] = \frac{1}{2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \, \left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}x}\right)^2 - in_x \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \, \frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}x}$$

und

$$S_1[\theta] = \frac{1}{\pi^2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x' \frac{1 - \cos(\theta(x) - \theta(x'))}{(x - x')^2}$$

Es sei \mathcal{Z}_0 die freien Zustandssumme, bei der nur S_0 berücksichtigt wird. Diese Zustandssumme stimmt mit der klassischen Zustandssumme überein (Hofstetter (1997)). Für ein beliebiges Funktional $A[\theta]$ sei nun der freie Erwartungswert definiert als

$$\langle A \rangle_0 \equiv \frac{1}{\mathcal{Z}_0} \int \mathcal{D}_c \theta \, A[\theta] e^{-S_0[\theta]};$$
(3.9)

für die vollständige Zustandssumme gilt folglich:

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_0 \left\langle e^{-gS_1} \right\rangle_0 \,. \tag{3.10}$$

Zur Berechnung der Zustandssumme wird nun die Kumulantenentwicklung (Le Bellac (1991)) verwendet:

$$\ln(\mathcal{Z}) = \ln(\mathcal{Z}_0) - g \left\langle S_1 \right\rangle_0 + \frac{g^2}{2} \left(\left\langle S_1^2 \right\rangle_0 - \left\langle S_1 \right\rangle_0^2 \right) + \dots$$
(3.11)

Beim Pfadintegral (3.9) kann der Integrationsbereich in einzelne Sektoren mit fester Windungszahl zerlegt werden:

$$\langle A \rangle_0 = 2\pi \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i m n_x} \frac{1}{\mathcal{Z}_0} \int_0^{2\pi m} \mathcal{D}\theta \, A[\theta] \exp\left[-\frac{1}{2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \, \left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}x}\right)^2\right] \,.$$

Dabei bedeutet $\int_0^{2\pi m} \mathcal{D}\theta$, dass hier nur noch über Konfigurationen $\theta(x)$ integriert wird, die den Randbedingungen

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & : x = -L/2 \\ 2\pi m & : x = L/2 \end{cases}$$

genügen. Durch die Randbedingungen wird eine Gerade $\theta_m \equiv \omega_m \cdot \left(x + \frac{L}{2}\right)$ definiert, mit deren Hilfe der Pfad $\theta(x)$ geschrieben werden kann als:

$$\theta(x) = \theta_m + \phi(x) \,.$$

Das Pfadintegral (3.9) kann folglich (unter Verwendung der Tatsache, dass $\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx \frac{d\phi}{dx} = 0$ gilt) auch als

$$\left\langle A\right\rangle_{0} = 2\pi \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i m n_{x} - \frac{(2\pi m)^{2}}{2L}} \frac{1}{\mathcal{Z}_{0}} \int_{0}^{0} \mathcal{D}\phi A[\theta] \exp\left[-\frac{1}{2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \left(\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x}\right)^{2}\right] \quad (3.12)$$

geschrieben werden.

3.1.2.1 Erste Ordnung

Zunächst muss hier der Erwartungswert

$$\left\langle S_1 \right\rangle_0 = \frac{1}{\pi^2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x' \frac{1 - \left\langle \cos(\theta(x) - \theta(x')) \right\rangle_0}{(x - x')^2} \tag{3.13}$$

und insbesondere

$$\langle \cos(\theta(x) - \theta(x')) \rangle_{0} =$$

$$\frac{2\pi}{\mathcal{Z}_{0}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i m n_{x} - \frac{(2\pi m)^{2}}{2L}} \int_{0}^{0} \mathcal{D}\phi \, e^{-\frac{1}{2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \, \dot{\phi}^{2}} \, \cos\left(\frac{2\pi m}{L} (x - x') + \phi(x) - \phi(x')\right)$$

$$(3.14)$$

berechnet werden. Dabei kann für den Cosinus ein Additionstheorem verwendet werden; ferner bleibt das Integrationsmaß unter der Spiegelung $\phi \to -\phi$ invariant, weshalb für das folgende Pfadintegral, bei dem ja sowohl über den Weg $\phi(x)$ als auch über dem Weg $-\phi(x)$ integriert wird, verschwindet:

$$\int_0^0 \mathcal{D}\phi \, e^{-\frac{1}{2}\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \, \dot{\phi}^2} \, \sin\left(\phi(x) - \phi(x')\right) = 0 \,,$$

so dass

$$\langle \cos(\theta(x) - \theta(x')) \rangle_0 =$$

$$\frac{2\pi}{\mathcal{Z}_0} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i m n_x - \frac{(2\pi m)^2}{2L}} \cos\left(\frac{2\pi m}{L}(x - x')\right) \int_0^0 \mathcal{D}\phi \, e^{-\frac{1}{2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \, \dot{\phi}^2} \, \cos\left(\phi(x) - \phi(x')\right)$$

$$(3.15)$$

gilt. Hier sollte der Erwartungswert $\langle \cos{(\phi(x)-\phi(x'))}\rangle_\phi$ mit

$$\langle f[\phi] \rangle_{\phi} \equiv \frac{\int_{0}^{0} \mathcal{D}\phi \, e^{-\frac{1}{2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \, \dot{\phi}^{2}} f[\phi]}{\int_{0}^{0} \mathcal{D}\phi \, e^{-\frac{1}{2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \, \dot{\phi}^{2}}} \tag{3.16}$$

berechnet werden. Dabei ist das Pfadintegral im Normierungsfaktor $(\int_0^0 \mathcal{D}\phi \exp\left[-\frac{1}{2}\int dx \dot{\phi}^2\right])$ identisch mit dem euklidischen quantenmechanischen Propagator am Ursprung $K(0\tau|0)$ eines freien Teilchens mit Masse M = 1 in der imaginären Zeit $\tau = L$ ($\hbar = 1$), also gleich $\frac{1}{\sqrt{2\pi L}}$ (siehe z.B. Schulman (1981)), weshalb aus Gleichung (3.15) nun wird:

$$\langle \cos(\theta(x) - \theta(x')) \rangle_0 =$$

$$\frac{\sqrt{2\pi}}{\mathcal{Z}_0 \sqrt{L}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i m n_x - \frac{(2\pi m)^2}{2L}} \cos\left(\frac{2\pi m}{L}(x - x')\right) \langle \cos\left(\phi(x) - \phi(x')\right) \rangle_{\phi} .$$

$$(3.17)$$

Aufgrund der Randbedingungen kann für die reelle Variable $\phi(x)$ die Fourierdarstellung

$$\phi(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \phi_k \sin\left(\frac{\pi k}{L}(x+L/2)\right)$$
(3.18)

gewählt werden, mit der die Gewichtsfunktion in Gleichung (3.16) die folgende Form hat

$$\frac{1}{2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \, \dot{\phi}^2 = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\pi^2 k^2}{4L} \phi_k^2;$$

d.h. sie ist quadratisch im Feld ϕ . Hier besagt das sogenannte Wick–Theorem (Le Bellac (1991)), dass

$$\left\langle \prod_{k=1}^{2n} \phi(x_k) \right\rangle_{\phi} = \sum_{\text{alle Paare } (k_i, k'_i)} \prod_{i=1}^{n} \left\langle \phi(x_{k_i}) \phi(x_{k'_i}) \right\rangle$$

gilt. Da diese Beziehung auch für Linearkombinationen $\phi(x) - \phi(x')$ erfüllt ist, gilt mit $\cos(y) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!}$

$$\langle \cos(\phi(x) - \phi(x')) \rangle_{\phi} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{(2n)!} \left\langle (\phi(x) - \phi(x'))^2 \right\rangle_{\phi}^n$$

(siehe auch Anmerkung auf Seite 63), und folglich wegen $\frac{(2n-1)!!}{(2n)!} = \frac{1}{2^n n!}$ auch

$$\left\langle \cos\left(\phi(x) - \phi(x')\right) \right\rangle_{\phi} = \exp\left(-\frac{1}{2}\left\langle \left(\phi(x) - \phi(x')\right)^2 \right\rangle_{\phi}\right). \tag{3.19}$$

Die Berechnung von $\langle (\phi(x) - \phi(x'))^2 \rangle_{\phi}$ erfolgt nun unter Verwendung der Fourierdarstellung (3.18):

$$\left\langle \left(\phi(x) - \phi(x')\right)^2 \right\rangle_{\phi} = \sum_{k,n=1}^{\infty} \left\langle \phi_k \phi_n \right\rangle_{\phi} \left\{ \sin\left[\pi k \left(\frac{x}{L} + \frac{1}{2}\right)\right] - \sin\left[\pi k \left(\frac{x'}{L} + \frac{1}{2}\right)\right] \right\} \\ \cdot \left\{ \sin\left[\pi n \left(\frac{x}{L} + \frac{1}{2}\right)\right] - \sin\left[\pi n \left(\frac{x'}{L} + \frac{1}{2}\right)\right] \right\}.$$

Wegen $\langle \phi_k \phi_n \rangle_{\phi} = \delta_{k,n} \frac{2L}{\pi^2 n^2}$ und der Identität

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \sin(nx) \sin(ny) = \frac{(\pi - y)x}{2}, \qquad (0 < x < y < \pi)$$

die aus $\sin(x)\sin(y) = \frac{1}{2}(\cos(x-y) - \cos(x+y))$ sowie Abschnitt 27.9.6 in (Abramowitz und Stegun (1984)) folgt, gilt

$$\left\langle \left(\phi(x) - \phi(x')\right)^2 \right\rangle_{\phi} = -\frac{1}{L}(x - x')^2 + |x - x'|$$
 (3.20)

Unter Verwendung von (3.17) gilt:

$$\langle \cos\left(\theta(x) - \theta(x')\right) \rangle_{0} =$$

$$\frac{\sqrt{2\pi}}{\mathcal{Z}_{0}\sqrt{L}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i m n_{x} - \frac{(2\pi m)^{2}}{2L}} \cos\left(\frac{2\pi m}{L}(x - x')\right) e^{\frac{(x - x')^{2}}{2L} - \frac{|x - x'|}{2}} .$$

$$(3.21)$$

Mit Hilfe der Poisson–Summenformel

1

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} f(m) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, e^{2\pi i k x} f(x)$$

wird die Windungszahl m jetzt durch ihre duale Variable n ersetzt, die der Zahl der Überschusselektronen in der Box entspricht. Es gilt

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i m \left(n_x \pm \frac{x-x'}{L}\right) - \frac{(2\pi m)^2}{2L}} = \sqrt{\frac{L}{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{L}{2} \left(n_x \pm \frac{x-x'}{L} - n\right)^2}.$$
 (3.22)

Hier soll der Grenzwert tiefer Temperaturen $(L \to \infty)$ betrachtet werden, außerdem ist die Steigung der Stufe an der Stufenmitte besonders interessant, d.h. es sei im Folgenden $|n_x| \ll \frac{1}{2}$. In diesem Fall trägt in (3.22) nur der Term mit n = 0 bei, da alle anderen exponentiell unterdrückt werden. Die freie Zustandssumme wird hier zu

$$\mathcal{Z}_0 \simeq \exp\left[-\frac{L}{2}n_x^2\right]$$

Aus (3.21) folgt somit

$$\left\langle \cos\left(\theta(x) - \theta(x')\right) \right\rangle_{0} = \frac{e^{\frac{(x-x')^{2}}{2L} - \frac{|x-x'|}{2}}}{2\mathcal{Z}_{0}} \left(e^{-\frac{L}{2} \left(n_{x} + \frac{x-x'}{L} - n\right)^{2}} + e^{-\frac{L}{2} \left(n_{x} - \frac{x-x'}{L} - n\right)^{2}} \right),$$

was nichts anderes ist als

$$\left\langle \cos\left(\theta(x) - \theta(x')\right) \right\rangle_{0} = \frac{1}{2} e^{-\frac{|x-x'|}{2}} \left(e^{-n_{x}|x-x'|} + e^{+n_{x}|x-x'|} \right) \,. \tag{3.23}$$

Der Mittelwert des langreichweitigen Wechselwirkungsterms (3.13) ist folglich gegeben durch

$$\left\langle S_1 \right\rangle_0 = \frac{1}{2\pi^2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x' \frac{2 - e^{-\left(\frac{1}{2} + n_x\right)|x - x'|} - e^{-\left(\frac{1}{2} - n_x\right)|x - x'|}}{(x - x')^2} \,.$$

was für große L zu

$$\langle S_1 \rangle_0 = \frac{L}{2\pi^2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \mathrm{d}x \, \frac{2 - e^{-\left(\frac{1}{2} + n_x\right)|x|} - e^{-\left(\frac{1}{2} - n_x\right)|x|}}{x^2} \tag{3.24}$$

wird. Wie man sich leicht überzeugen kann, divergiert dieses Integral für kleine *x* logarithmisch, weshalb Hofstetter (1997) dieses Resultat nun dazu verwendet, das endliche Integral $\frac{\partial}{\partial n_x} \langle S_1 \rangle_0$ zu berechnen. Hier sei – vor allem als Vorbereitung der Berechnung der Standardabweichung – ein etwas anderer Weg gewählt, indem direkt ein Cutoff bei kurzen Zeiten eingeführt wird:

$$\langle S_1 \rangle_0 = \frac{L}{\pi^2} \int_0^\infty \mathrm{d}x \, \frac{2 - e^{-\left(\frac{1}{2} + n_x\right)x} - e^{-\left(\frac{1}{2} - n_x\right)x}}{x^2 + \varepsilon^2} \,,$$

wobei die obere Integrationsgrenze im Grenzfall großer L noch ∞ gesetzt werden kann. Unter Verwendung von 3.345 in (Gradstein und Ryshik (1981)) folgt daraus:

$$\langle S_1 \rangle_0 = \frac{L}{\pi^2 \varepsilon} \left\{ \pi$$

$$-\operatorname{ci} \left[\varepsilon \left(\frac{1}{2} + n_x \right) \right] \sin \left[\varepsilon \left(\frac{1}{2} + n_x \right) \right] + \operatorname{si} \left[\varepsilon \left(\frac{1}{2} + n_x \right) \right] \cos \left[\varepsilon \left(\frac{1}{2} + n_x \right) \right]$$

$$- \operatorname{ci} \left[\varepsilon \left(\frac{1}{2} - n_x \right) \right] \sin \left[\varepsilon \left(\frac{1}{2} - n_x \right) \right] + \operatorname{si} \left[\varepsilon \left(\frac{1}{2} - n_x \right) \right] \cos \left[\varepsilon \left(\frac{1}{2} - n_x \right) \right] \right\} ,$$

$$(3.25)$$

wobei $\operatorname{ci}(x) \equiv -\int_x^\infty \frac{\cos(t)}{t} dt$ der Integralcosinus und $\operatorname{si}(x) \equiv -\int_x^\infty \frac{\sin(t)}{t} dt$ der Integralsinus ist.

3.1. QUANTENMECHANISCHE EINZEL-ELEKTRONEN-BOX

Für kleine ε gilt $\operatorname{ci}(\varepsilon) \simeq \gamma + \ln(\varepsilon)$ und $\operatorname{si}(\varepsilon) \simeq -\frac{\pi}{2} + \varepsilon$ und folglich

$$\langle S_1 \rangle_0 = \frac{L}{\pi^2} \left\{ - \left[\gamma + \ln\left(\varepsilon \left(\frac{1}{2} + n_x\right) \right) \right] \left(\frac{1}{2} + n_x\right) + \left(\frac{1}{2} + n_x\right) - \left[\gamma + \ln\left(\varepsilon \left(\frac{1}{2} - n_x\right) \right) \right] \left(\frac{1}{2} - n_x\right) + \left(\frac{1}{2} - n_x\right) + \mathcal{O}(\varepsilon) \right\}$$
(3.26)

Aus (3.3) und (3.11) folgt

$$\langle \hat{n} \rangle = n_x + \frac{1}{L} \frac{\partial}{\partial n_x} \left\{ \ln(\mathcal{Z}_0) - g \left\langle S_1 \right\rangle_0 \right\} + \mathcal{O}(g^2),$$

was im Limes $\varepsilon \to 0$ nichts anderes ist als

$$\langle \hat{n} \rangle = \frac{g}{\pi^2} \ln \left(\frac{\frac{1}{2} + n_x}{\frac{1}{2} - n_x} \right) + \mathcal{O}(g^2) \tag{3.27}$$

Die Steigung in der Stufenmitte

$$\chi \equiv \left. \frac{\partial}{\partial n_x} \left\langle \hat{n} \right\rangle \right|_{n_x = 0}$$

ist folglich gegeben durch

$$\chi = \frac{4g}{\pi^2} + \mathcal{O}(g^2) \,. \tag{3.28}$$

3.1.3 Temperaturabhängigkeit

Wenn nun versucht werden soll, die Temperaturabhängigkeit der Steigung zu bestimmen, so werden sicher beim Lösen der Integrale Korrekturen der Ordnung $\mathcal{O}(\exp(-L/2))$ auftreten. Abgesehen davon, dass ein Fehler dieser Größenordnung bereits beim Wechsel der Integrationsvariablen in Gleichung (3.24) auftritt (die neuen Integrationsgrenzen gelten streng genommen nur im Limes $L \to \infty$), wird eine derartige Temperaturabhängigkeit bereits von der 0-ten Ordnung in gerzeugt.

Allerdings gibt es auch eine weitere Ursache für die Temperaturabhängigkeit: der langreichweitige Wechselwirkungskern (3.6)

$$\alpha(x) = \frac{g}{L^2 \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)^2},$$

bzw. als Taylorreihe

$$\alpha(x) = g \left[\frac{1}{\pi^2 x^2} + \frac{1}{3} \frac{1}{L^2} + \frac{1}{15} \frac{\pi^2}{L^4} x^2 + \frac{2}{189} \frac{\pi^4}{L^6} x^4 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L^8}\right) \right].$$

Aus Gleichung (3.24) folgt für die *L*-Abhängigkeit von $\langle S_1 \rangle_0$:

$$\langle S_1 \rangle_0 (L) = \langle S_1 \rangle_0 (L = \infty)$$

$$+ L \int_0^{\frac{L}{2}} dx \, 2 \left[\frac{1}{3} \frac{1}{L^2} + \frac{1}{15} \frac{\pi^2}{L^4} x^2 + \frac{2}{189} \frac{\pi^4}{L^6} x^4 + \dots \right]$$

$$- L \int_0^{\infty} dx \left[e^{-(\frac{1}{2} + n_x)x} + e^{-(\frac{1}{2} - n_x)x} \right] \cdot \left[\frac{1}{3} \frac{1}{L^2} + \frac{1}{15} \frac{\pi^2}{L^4} x^2 + \frac{2}{189} \frac{\pi^4}{L^6} x^4 \right]$$

$$+ \mathcal{O} \left(\frac{1}{L^7}, \exp\left(-\frac{L}{2}\right) \right).$$

$$(3.29)$$

Da das erste Integral (inklusive Vorfaktor) einen endlichen Term liefert, der weder von n_x noch von L abhängt, kann dieser vernachlässigt werden (nur die partiellen Ableitungen nach diesen Größen sind von physikalischem Interesse). Ausrechnen der elementaren Integrale liefert:

$$\langle S_1 \rangle_0 (L) = \langle S_1 \rangle_0 (L = \infty)$$

$$- \left[\frac{4}{3} \frac{1}{L(1 - 4n_x^2)} + \frac{32}{15} \frac{\pi^2 (1 + 12n_x^2)}{L^3 (1 - 4n_x^2)^3} + \frac{1024}{63} \frac{\pi^4 (1 + 40n_x^2 + 80n_x^4)}{L^5 (1 - 4n_x^2)^5} \right]$$

$$+ \mathcal{O}\left(\frac{1}{L^7}, \exp\left(-\frac{L}{2}\right) \right).$$

$$(3.30)$$

Für die Steigung in der Stufenmitte ergibt sich folglich:

$$\chi(L) = \left(\frac{4}{\pi^2} + \frac{32}{3}\frac{1}{L^2} + \frac{512}{5}\frac{\pi^2}{L^4} + \frac{40960}{21}\frac{\pi^4}{L^6}\right)g + \mathcal{O}\left(g^2, \frac{g}{L^8}, \exp\left(-\frac{L}{2}\right)\right).$$
(3.31)

Den führende Korrekturterm $\propto g \left(\frac{k_{\rm B}T}{U}\right)^2$ bekommt man wegen der ohmschen Dissipation durch die Fermireservoire, wenn man über die orthodoxe Theorie hinausgeht (siehe z.B. Zwerger und Scharpf (1991)). Der Vorfaktor stimmt mit dem Ergebnis von Grabert (1994) überein. Der Vollständigkeit halber sei hier noch erwähnt, dass es möglich ist, jede beliebige Ordnung in $\frac{1}{L}$ zu berechnen, da

$$\frac{1}{\sin(x)^2} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\cot(x)$$

gilt und sich der $\cot(x)$ wie folgt darstellen lässt:

$$\cot(x) = \frac{1}{x} - \left[\frac{x}{3} + \frac{x^3}{45} + \frac{2^{2n}}{(2n)!}B_n x^{2n-1} + \dots\right]$$

wobei die Bernoulli'schen Zahlen B_n definiert sind durch (Bronstein und Semendjajew (1989))

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{2k}} = \frac{\pi^{2k} 2^{2k-1}}{(2k)!} B_k \,. \tag{3.32}$$

Der Beitrag zur Plateausteigung der Ordnung $\mathcal{O}\left(\frac{1}{L^{2n}}\right)$ lautet

$$\chi^{(n)} = g \frac{\pi^{2n-2}}{L^{2n}} 2(2n-1) \frac{2^{2n}}{(2n)!} B_n \int_0^\infty \mathrm{d}x \, x^{2n} e^{-\frac{1}{2}x} \,,$$

so dass

$$\chi^{(n)} = g \frac{\pi^{2n-2}}{L^{2n}} (2n-1)2^{4n+2} B_n$$

Dies wiederum bedeutet wegen des asymptotischen Verhaltens von $B_k \sim \frac{(2k)!}{\pi^{2k}2^{2k-1}}$ (siehe Gleichung (3.32)), dass die Reihe $\sum_n \chi^{(n)}$ divergiert, was wohl wie bei dem berühmten Beispiel

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x \, \exp\left(-\lambda x^4 - x^2\right) = \sum_{n=0}^\infty \int_0^\infty \mathrm{d}x \, \frac{\lambda^n (-1)^n}{n!} x^{4n} e^{-x^2} = \sum_{n=0}^\infty \frac{(4n-1)!! \, (-1)^n}{2^{2n+1} n!} \lambda^n \,,$$

bei dem aus einem für $\lambda \geq 0$ konvergenten Integral eine für $\lambda > 0$ divergente Summe wird, darauf zurückzuführen ist, dass Summation und Integration eben nicht immer vertauscht werden dürfen. Da dies hier mit der Unterscheidung zwischen punktweiser und gleichmäßiger Konvergenz zu tun hat, ist es nicht weiter verwunderlich, dass es von der Größe von L abhängen wird, wie viele Terme in der Summe mitgenommen werden dürfen, um das Ergebnis noch zu verbessern. An dieser Stelle sei auf die Fachliteratur verwiesen (siehe z.B. Arfken (1985) und dort zitierte Literatur).

3.2 Fluktuationen

Bei der Berechnung von $\langle n \rangle$ wurde verwendet, dass aus der Tatsache, dass

$$\frac{\partial}{\partial n_x} H = \beta U(n_x - n) \tag{3.33}$$

gilt, bereits

$$\langle n \rangle = n_x + \frac{1}{\beta U} \frac{\partial}{\partial n_x} \ln(Z)$$
 (3.34)

folgt. Es wäre nun verlockend, die Gleichung

$$\frac{\partial^2}{\partial n_x^2} \exp(-\beta H) = (\beta U(n_x - n))^2 \exp(-\beta H) - \beta U$$
(3.35)

zu verwenden, um $\langle n^2 \rangle$ auszurechnen. Dies wäre jedoch falsch, da *n* und *H* nicht kommutieren und folglich die Operatorgleichung (3.2) verwendet werden muss. Der Versuch, statt dessen auf die Beziehung

$$\frac{\partial}{\partial U}H = \beta \frac{1}{2}(n_x - n)^2 \,,$$

d.h.

$$\left\langle \frac{1}{2}(n-n_x)^2 \right\rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial U} \ln(Z)$$
 (3.36)

auszuweichen, erscheint zunächst auch nicht besonders vielversprechend: leider divergiert dieser Ausdruck sowohl in der in Abschnitt 3.1.2 vorgestellten Störungstheorie, als auch etwa im Rahmen der diagrammatischen Störungstheorie, wie sie in Arbeiten der Freiburger Gruppe von Grabert (z.B. Göppert et al. (1998)) verwendet wird. Da diese Divergenz offensichtlich unphysikalisch ist, soll hier zunächst überlegt werden, welches Ergebnis physikalisch sinnvoll erwartet wird.

3.2.1 Abschätzung für die Fluktuationen

Dazu wird hier zunächst in der Nähe von $n_x = 0$ der (endliche) Ausdruck

$$\frac{\partial}{\partial n_x} \left\langle \frac{1}{2} (n - n_x)^2 \right\rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial U} \frac{\partial}{\partial n_x} \ln(Z)$$
(3.37)

berechnet, was dasselbe ist wie

$$\frac{\partial}{\partial n_x} \left\langle \frac{1}{2} (n - n_x)^2 \right\rangle = n_x - \langle n \rangle ,$$

so dass

$$\frac{\partial}{\partial n_x} \left\langle n^2 \right\rangle = 2n_x \frac{\partial}{\partial n_x} \left\langle n \right\rangle \,.$$

Für T = 0 gilt somit:

$$\left\langle n^2 \right\rangle = 2C - \frac{g}{\pi^2} \ln\left(1 - 4n_x^2\right) + \mathcal{O}(g^2),$$
(3.38)

wobei die Integrationskonstante 2*C* natürlich nicht von n_x , dafür aber von g abhängen kann. Da $\langle n \rangle^2$ von der Ordnung $\mathcal{O}(g^2)$ ist, ist die Varianz von n ebenfalls durch Gleichung (3.38) gegeben. Offensichtlich muss C > 0 und $C \to 0$ für $g \to 0$ gelten.

Im Rahmen der diagrammatischen Störungstheorie (Göppert et al. (1998)) wird deutlich, dass zur Berechnung der ersten Ordnung in g nur die Ladungszustände -1, 0, 1 verwendet werden. Aus den Gleichungen $\sum_{n=-1}^{1} p_n n = \langle n \rangle$ und $\sum_{n=-1}^{1} p_n n^2 = \langle n^2 \rangle$ folgt

$$p_{-1}(n_x) = C - \frac{g}{\pi^2} \ln(1 + 2n_x) + O(g^2)$$
(3.39)

und $p_1(n_x) = p_{-1}(-n_x)$. Diese Gleichungen gelten solange $\left|\frac{g}{\pi^2}\ln(1\pm 2n_x)\right| \ll 1$ erfüllt ist². Da Wahrscheinlichkeiten nicht negativ sind, folgt aus $p_{-1}(n_x = 1/2) \geq 1$

50

²Der am schnellsten divergierende Term der Ordnung g^k hat nach (Göppert et al. (1998)) die Form $-\frac{1}{2} \left[g \frac{1}{\pi^2} \ln \left(\frac{1}{2} - n_x \right) \right]^k$. Man beachte, dass sich die Definition von g bei Göppert et al. (1998) um einen Faktor $\frac{1}{\pi^2}$ von dem hier gewählten unterschiedet.

0 bereits:

$$\left\langle n^2 \right\rangle \ge \frac{2g}{\pi^2} \ln(2) - \frac{g}{\pi^2} \ln(1 - 4n_x^2) + \mathcal{O}(g^2),$$
 (3.40)

wobei es bei dieser Abschätzung natürlich nicht darauf ankommt, ob $C = \frac{g}{\pi^2} \ln(2)$ oder $C = \frac{g}{\pi^2} \ln\left(\frac{3}{2}\right)$ gilt.

3.2.2 Cutoff im Frequenzspektrum

An dieser Stelle sei – wie bereits angekündigt – der langreichweitige Wechselwirkungskern noch einmal genauer betrachtet – diesmal mit einem Cutoff im Frequenzspektrum.

$$\alpha(x) = -\frac{1}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{g}{\pi} |\omega_n| e^{-i\omega_n x} e^{-\varepsilon |\omega_n|}$$
(3.41)

mit $\varepsilon = \frac{U}{E_{\rm cutoff}}$ und den Matsubara–Frequenzen $\omega_n = \frac{2\pi n}{L}$. Diese Summe kann zwar exakt gelöst werden (der Limes $\varepsilon \to 0$ liefert dann das Ergebnis (3.6)), da hier aber der Grenzfall sehr tiefer Temperaturen interessiert, kann auch gleich die Euler–Maclaurin'sche Summenformel (3.6.28 in Abramowitz und Stegun (1984)) verwendet werden:

$$\sum_{k=1}^{n-1} f_k = \int_0^n f(k) \, \mathrm{d}k - \frac{1}{2} \left[f(0) + f(n) \right] + \frac{1}{12} \left[f'(0) + f'(n) \right] - \frac{1}{720} \left[f''(0) + f''(n) \right] + \dots$$

Die Lösung des Integrals ergibt:

$$\alpha(x) = \frac{-\varepsilon^2 + x^2}{(\varepsilon^2 + x^2)^2 \pi^2},$$
(3.42)

bzw.

$$\alpha(x) = \frac{1}{(\varepsilon^2 + x^2)\pi^2} - \frac{2\varepsilon^2}{(\varepsilon^2 + x^2)^2\pi^2}.$$
 (3.43)

Dabei können Integrale, bei denen der zweite Term auftritt, gemäß

$$\int \mathrm{d}x \, \frac{-2\varepsilon^2}{\left(\varepsilon^2 + x^2\right)^2 \pi^2} \dots = \varepsilon \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \int \mathrm{d}x \, \frac{1}{\left(\varepsilon^2 + x^2\right) \pi^2} \dots$$

berechnet werden.

Damit lautet Gleichung (3.26) wie folgt:

$$\langle S_1 \rangle_0 = \frac{L}{\pi^2} \left\{ - \left[1 + \gamma + \ln\left(\varepsilon \left(\frac{1}{2} + n_x\right)\right) \right] \left(\frac{1}{2} + n_x\right) + 1 - \left[1 + \gamma + \ln\left(\varepsilon \left(\frac{1}{2} - n_x\right)\right) \right] \left(\frac{1}{2} - n_x\right) + \mathcal{O}(\varepsilon) \right\} .$$

$$(3.44)$$

Für die Fluktuationen

$$\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 = -2 \frac{\partial}{\partial L} \ln(Z) - n_x^2 + 2n_x \langle n \rangle - \langle n \rangle^2$$

ergibt sich folglich

$$\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 = \frac{2g}{\pi^2} \left[-\gamma - \ln(\varepsilon) - \frac{1}{2} \ln\left(\frac{1}{4} - n_x^2\right) \right] + \mathcal{O}\left(g\varepsilon, g^2\right)$$
(3.45)

Hier sollte nun auf den physikalischen Ursprung des Cutoffs eingegangen werden. An vergleichbarer Stelle wurden Energien wie etwa die Fermienergie oder die Bandbreite eingesetzt; bei Größen wie $\langle n \rangle$ die (fast) nicht vom Cutoff abhängen bietet sich der Grenzfall unendlicher Bandbreiten an (Grabert (1994)). Neben der über die Energie-Zeit-Unschärfe mit der Fermienergie verbundenen Zeitskala, gibt es aufgrund der Tatsache, dass das Tunneln nicht instantan stattfindet, noch eine zweite Zeitskala (siehe z.B. Persson und Baratoff (1988)). Die damit verbundene Kreisfrequenz ω_0 lässt sich leicht dadurch abschätzen, dass man das Tunnelpotential als umgekehrten Oszillator mit

$$V_0 = \frac{m}{2}\,\omega_0^2 x^2$$

nähert. Dabei ist $V_0 > \varepsilon_{\rm F}$ die Höhe der Tunnelbariere, m die (freie) Elektronenmasse und x der Tunnelabstand. Für $V_0 \approx 2\varepsilon_{\rm F} \simeq 11 \,{\rm eV}$ (für Gold) und $x \simeq 2 \,{\rm nm}$ ergibt sich mit

$$\omega_0 pprox 10^{15} \, \mathrm{Hz}$$

ein Cutoff im Frequenzbereich unterhalb der Fermikante; es ist physikalisch nicht sinnvoll Frequenzen zu berücksichtigen, die größer als diese Frequenz sind. Da der Cutoff logarithmisch in die Gleichung für die Fluktuationen eingeht, kommt es bei der Abschätzung des Wertes für ω_0 nicht auf Faktoren der Ordnung 10 an.

Die Varianz für die (stationäre) Einzel-Elektronen-Box beträgt folglich

$$\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 \simeq \frac{2g}{\pi^2} \left[-\gamma - \ln\left(\frac{U}{\hbar\omega_0}\right) - \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1}{4} - n_x^2\right) \right] + \mathcal{O}\left(g\frac{U}{\hbar\omega_0}, g^2\right).$$
 (3.46)

Diese Formel unterscheidet sich grundlegend von dem Ergebnis von Göppert und Grabert (2000), die versuchen die auch ihnen bekannte Cutoff–Abhängigkeit dadurch zu umgehen, dass sie die Größe $\langle \delta n(t) \delta n(0) \rangle$ berechnen. Da aber wie oben gezeigt der Cutoff durchaus eine äußerst physikalische Ursache hat, spricht die Tatsache, dass $\lim_{t\to 0} \langle \delta n(t) \delta n(0) \rangle$ weitgehend Cutoff unabhängig ist, dafür, dass die dort berechnete Formel nur für Zeiten $t \gg 1/\omega_0$ gilt.

3.2.3 Quantenfluktuationen beim nanomechanischen Einzel-Elektronen-Pendel

Die Quantenfluktuationen hängen von g ab – aber welchen Wert für g muss man im Fall des Einzel-Elektronen-Pendels verwenden, wenn der Widerstand R(t) mit $g_0 = \frac{R_{\rm K}}{4R(0)}$ und

zeitabhängig ist, da sich das Pendel mit der Kreisfrequenz ω bewegt? Auf dem Weg von der einen Elektrode weg ergibt sich:

$$g(t) = g_0 \exp\left[-\left(\frac{t}{t'_0}\right)^2\right]$$
$$t'_0 = \sqrt{\frac{2\lambda}{x_{max}}} \frac{1}{\omega}, \qquad (3.47)$$

was bis auf einen Faktor von $\frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{\lambda}{2x_0}\right)$ gerade die Kontaktzeit ist (siehe Abschnitt 2.3.1). Es handelt sich also im Gegensatz zur Einzel-Elektronen-Box um ein zeitabhängiges quantenmechanisches Problem. Im Kapitel 2 wurde gezeigt, dass die Fluktuationen beim Einzel-Elektronen-Pendel im Limes großer Kontaktzeiten $t_0 \gg R(0)C$ im Rahmen der orthodoxen Theorie der Coulomb-Blockade exponentiell klein werden; im Folgenden wird der Grenzfall langer Kontaktzeiten quantenmechanisch betrachtet.

Da sich das System im Limes großer Kontaktzeiten in der Nähe der maximalen Auslenkung im Gleichgewicht befindet, wäre bei einem plötzlichen Übergang der Leitfähigkeit vom Maximalwert nach 0 klar, dass $g = g_0$ in die Formeln einzusetzen wäre; bei einem adiabatisch langsamen Übergang würde g = 0 gelten. Hier ist aber weder der eine noch der andere Grenzfall erreicht: zunächst ist der Übergang adiabatisch und später fast instantan.

Falls der Übergang gleichförmig – etwa in der Form $s = (t - t_0) / \Delta t$ – zwischen den Zeitpunkten t_0 und $t_1 = t_0 + \Delta t$ stattfinden sollte, unterscheidet die Größe von Δt , um was für einen Übergang es sich hier handelt (Messiah (1990)). Übertragen auf das Einzel-Elektronen-Pendel entspricht Δt in etwa der Zeit, in der g(t) um einen Faktor $\exp(-1)$ abnimmt:

$$g(t + \Delta t) = \exp(-1)g(t) \tag{3.48}$$

so dass

$$\Delta t^2 + 2t\Delta t - t_0^2 = 0$$

bzw.

$$\Delta t = -t + \sqrt{t^2 + t_0^{\prime 2}}$$

gilt, d.h. die Zeit, in der die Leitfähigkeit um einen Faktor $\exp(-1)$ abnimmt, wird immer kürzer je weiter sich das Pendel von der maximalen Auslenkung entfernt. Das System befindet sich im Gleichgewicht solange $\Delta t \gg R(t)C$ gilt; für $t \to \infty$ ist $g(t^*)$ der gesuchte Wert, wobei t^* durch

$$\Delta t = RC$$

oder

$$-t^* + \sqrt{t^{*2} + t_0^{\prime 2}} = \frac{1}{4g_0} R_{\rm K} C \exp(t^{*2}/t_0^{\prime 2})$$
(3.49)



Abbildung 3.1: Numerisch aus Gleichung (3.49) bestimmte Werte für $g^* \equiv g(t^*)$. Realistische Zahlenwerte sind $x_{\text{max}} = 50$ nm, und $\lambda = 0.1$ nm. Für die oberen drei Kurven wurde f = 100 MHz und verschiedene Werte für die Kapazität verwendet; für die untere Kurve f = 50 MHz und C = 25 aF.

definiert ist. Diese Gleichung kann numerisch z.B. durch Intervallschachtelung gelöst werden; das Ergebnis für $g^* \equiv g(t^*)$ als Funktion von g_0 ist in Abbildung 3.1 gezeigt.

Damit ergibt sich für die Varianz der Zahl der Elektronen auf der Insel

$$\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 \simeq \frac{2g^*}{\pi^2} \left[-\gamma - \ln\left(\frac{U}{\hbar\omega_0}\right) - \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1}{4} - n_x^2\right) \right] + \mathcal{O}\left(g^*\frac{U}{\hbar\omega_0}, g^{*2}\right) . \quad (3.50)$$

Bei einer Mittelung über 10^8 Schwingungen bedeutet das für die relative Genauigkeit der Stromquelle im Limes großer Verweildauern bei T = 0 in der Mitte einer Stufe der Höhe Mef:

$$\frac{\Delta I}{I} \simeq \frac{1}{10^4 M} \sqrt{\frac{4g^*}{\pi^2} \ln\left(\frac{C\hbar\omega_0}{e^2}\right)},$$

was für $C \simeq 50 \,\mathrm{aF}$ und $g^* \approx 0.01$ (siehe Abbildung 3.1) in etwa $1.5 \cdot 10^{-5}/M$ ist. Je nachdem wie genau die Kapazität vom Abstand abhängt kann eine Stufenhöhe von bis zu $M \simeq 100$ gewählt werden, was zusammen mit einer experimentell realistischen Integration über 10^{10} Schwingungen eine Genauigkeit von 10^{-8} ergibt.

Kapitel 4

Umgebungsladungsfluktuationen

Bei einer Betrachtung der Genauigkeit von Einzel–Elektronen–Bauelementen darf sicher ein Faktor nicht vernachlässigt werden: die Umgebungsladungsfluktuationen, die sich nicht nur in vereinzelten Sprüngen¹ in Messkurven zeigen. Nach dem hier verwendeten Modell skalieren die Fluktuationen mit der Kapazität der Insel, d.h. in etwa mit ihrem Radius. Bevor die Auswirkungen der Umgebungsladungsfluktuationen auf Einzel–Elektronen–Bauelemente genauer untersucht werden können, wird zunächst bewiesen, dass die Fluktuationen für nicht zu kleine Inseln gaußisch sind.

4.1 Das Modell

Hintergrundladungsfluktuationen werden durch gefangene Ladungen verursacht, die sich im Dielektrikum unterhalb der Insel befinden. Experimentell wurde gezeigt, dass es wahrscheinlicher ist, dass dies ein Volumeneffekt ist und nicht nur aus der unmittelbaren Umgebung der Insel kommt (Zorin et al. (1996)). Im Unterschied zum Schrotrauschen sind die Hintergrundladungsfluktuationen frequenzabhängig (1/f-Rauschen, Abschnitt 4.1.2). Messungen von hochfrequentem Rauschen (Fujisawa und Hirayama (2000)) erfordern dabei andere Anforderungen an das Experiment als Messungen von Rauschen bei niedrigen Frequenzen (Glattli et al. (1997)).

Zunächst soll hier gezeigt werden, was für Ladungsfluktuationen auf der Insel durch eine homogene Dipoldichte induziert werden. Die Argumentation zur Berechnung von $\langle \delta q(t) \delta q(0) \rangle$ folgt Bouchiat (1997), wobei die Zwischenschritte etwas ausführlicher gemacht werden, was dann später die Verallgemeinerung auf die Berechnung höherer Momente δq^n vereinfacht.

Zunächst sei hier berechnet, welche Polarisationsladung δq eine Ladung q

¹Die Zeitskala, auf der die zufälligen Sprünge stattfinden, reicht dabei von Sekunden bis zu Stunden (Manninen und Pekola (1996)).

am Ort \vec{r} auf der Insel induziert. Als Ausgangspunkt dienen zwei verschiedene Ladungs und Spannungskonfigurationen $(q_i \text{ und } V_i)$ bzw. $(q'_i \text{ und } V'_i)$ zwischen denen die folgende Beziehung gilt:

$$\sum_{i} q'_{i} V_{i} = \sum_{i} \sum_{j} C_{ij} V'_{j} V_{i} = \sum_{j} \sum_{i} C_{ji} V_{i} V'_{j} = \sum_{j} q_{j} V'_{j}.$$
(4.1)

Als die eine Konfiguration wird nun der Fall gewählt, dass alle Elektroden auf Spannung $V_i = 0$ liegen und eine Ladung q am Ort \vec{r} eine Ladung δq auf der Insel induziert, während die zweite Konfiguration gerade darin besteht, dass die Insel auf dem Potential V_0 liegt und am Ort \vec{r} keine Ladung vorhanden ist.

Dies führt zu $qV(\vec{r})+\delta qV_0=0$. Für die Polarisationsladung auf der Insel gilt folglich:

$$\delta q = -q \frac{V(\vec{r})}{V_0}, \qquad (4.2)$$

wobei $V(\vec{r})$ das Potential am Punkt \vec{r} für den Fall ist, dass sich keine Ladung an diesem Punkt befindet und die Insel auf Potential V_0 liegt. Das Verhältnis $\frac{V(\vec{r})}{V_0}$ ist daher nur von der Geometrie abhängig.

Dieses Ergebnis kann leicht auf einen Dipol $\delta \vec{P}$ verallgemeinert werden:

$$\delta q = -\frac{\delta \vec{P} \cdot \vec{\mathcal{E}}(\vec{r})}{V_0}, \qquad (4.3)$$

wobei $\mathcal{E}(\vec{r})$ das elektrische Feld am Ort \vec{r} ist, wenn der Dipol entfernt wurde und die Insel auf Potential V_0 liegt. Wie Gleichung (4.3) deutlich zeigt, hängt der Einfluss eines Dipols sehr davon ab, an welcher Stelle er liegt. Insbesondere haben Dipole in der Nähe der Insel einen größeren Einfluss als solche, die weiter entfernt sind.

Die gesamte Polarisationsladung aufgrund einer Dipoldichte $\delta \vec{p}(\vec{r})$ ist gegeben durch:

$$\delta q(t) = -\int \mathrm{d}^3 r \frac{\delta \vec{p}(\vec{r}, t) \cdot \vec{\mathcal{E}}(\vec{r})}{V_0} \,. \tag{4.4}$$

Die Autokorrelationsfunktion der induzierten Ladung ergibt sich als:

$$\delta q(t) \delta q(0) = \int \mathrm{d}^3 r' \int \mathrm{d}^3 r \frac{\left(\delta \vec{p}(\vec{r},t) \cdot \vec{\mathcal{E}}(\vec{r})\right) \left(\delta \vec{p}(\vec{r'},0) \cdot \vec{\mathcal{E}}(\vec{r'})\right)}{V_0^2} \,, \qquad (4.5)$$

bzw. zeitlich gemittelt:

$$\langle \delta q(t) \delta q(0) \rangle = \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} \int \mathrm{d}^{3} r' \int \mathrm{d}^{3} r \frac{\langle \delta p_{i}(\vec{r},t) \delta p_{j}(\vec{r}',0) \rangle \mathcal{E}_{i}(\vec{r}) \mathcal{E}_{j}(\vec{r}')}{V_{0}^{2}} \,. \tag{4.6}$$

Unter der Annahme, dass die Dipolfluktuationen wie folgt delta-korreliert sind:

$$\langle \delta p_i(\vec{r},t)\delta p_j(\vec{r}',0)\rangle = \delta_{ij}\delta(\vec{r}-\vec{r}')n_{\rm P}\frac{P(t)}{3},\qquad(4.7)$$

wobei $n_{\rm P}$ die Dipoldichte und P(t) die Dipol-Autokorrelationsfunktion ist, ergibt sich:

$$\langle \delta q(t) \delta q(0) \rangle = n_{\rm P} \frac{P(t)}{3} \int' \mathrm{d}^3 r \frac{\left|\vec{\mathcal{E}}(\vec{r})\right|^2}{V_0^2} \,.$$
 (4.8)

Mit $\int' d^3r$ ist hier gemeint, dass über den Bereich integriert wird, in dem Dipole vorhanden sind, d.h. insbesondere nicht über das Vakuum oberhalb des Bauelements. Da die Energiedichte des elektrischen Feldes gegeben ist durch $w_{\rm el} = \frac{1}{2} \varepsilon_0 \varepsilon_{\rm r} \left| \vec{\mathcal{E}} \right|^2$, ist dies wegen $W'_{\rm el} = \frac{1}{2} C'_{\rm I} V_0^2$ nichts anderes als:

$$\langle \delta q(t) \delta q(0) \rangle = n_{\rm P} \frac{P(t)}{3} \left(\frac{C_{\rm I}'}{\varepsilon_0 \varepsilon_{\rm r}} \right) , \qquad (4.9)$$

wobei $C'_{\rm I}$ die Kapazität der Insel ist.

4.1.1 Einfluss der Größe der Insel

In der Arbeit von Bouchiat (1997) wurde ausgehend von Gleichung (4.9) untersucht, ob die Stärke der Fluktuationen ($\langle \delta q^2 \rangle \propto C_1$) mit der Größe der Insel skaliert. Es zeigt sich, dass die Fluktuationen zwar mit der Größe der Insel wachsen, allerdings nicht mit der Fläche sondern etwas langsamer. Mit der Fläche der Insel würde die Kapazität skalieren, wenn es sich hier um einen Plattenkondensator mit kleinem Plattenabstand handeln würde. Eine bessere Näherung für die Insel, die gut analytisch berechnet werden kann, ist hier das abgeplattete Rotationsellipsoid (mir Halbachsen *a*, *b* und *c* wobei a = b > c gilt) (siehe z.B. Landau und Lifschitz (1974)):

$$C_{\rm I}' = \frac{1}{2} 4\pi \varepsilon_0 \varepsilon_{\rm r} \frac{\sqrt{a^2 - c^2}}{\arccos\left(\frac{c}{a}\right)} \tag{4.10}$$

wobei sich der Faktor $\frac{1}{2}$ dadurch erklärt, dass die Integration in (4.8) natürlich nur über den Bereich geht, in dem auch Dipole vorhanden sind. Dies sollte auch dazu führen, dass der Einfluss von Umgebungsladungsfluktuationen in freitragenden Coulomb-Blockade Strukturen, wie sie etwa von Tilke (2000) realisiert wurden, um einiges kleiner ist als bei massiven Halbleiterstrukturen.

Es sei hier noch bemerkt, dass sich die Kapazität der beiden Grenzfälle (Kugel und Kreisfläche) von Gleichung (4.10) um weniger als einen Faktor 2 unterscheiden:

$$C'_{\rm I} = 2\pi\varepsilon_0\varepsilon_{\rm r} * \begin{cases} a : c = a \\ \frac{2}{\pi}a : c = 0 \end{cases},$$
(4.11)

weshalb im Folgenden mit der Formel

$$C_{\rm I}' \propto r_{\rm I}$$
 (4.12)

gearbeitet wird, wobe
i $r_{\rm I}$ der Radius (bzw. die charakteristische Länge) der Insel
 ist.

Bei den im Experiment von Bouchiat (1997) verwendeten Inseln handelt es sich um Inseln, bei denen eine Seite um einen Faktor 10 bis 100 größer ist, als die andere, weshalb ein langgestrecktes Rotationsellipsoid mit

$$C_{\rm I}' = \frac{1}{2} 4\pi \varepsilon_0 \varepsilon_{\rm r} \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{\cosh^{-1}\left(\frac{a}{b}\right)} \tag{4.13}$$

die Kapazität in diesem Fall vielleicht besser beschreibt. Für das Verhältnis der beiden Kapazitäten ergibt sich bei den Inselgrößen $(0.1*1 \ \mu m^2)$ bzw. $(0.1*10 \ \mu m^2)$ in etwa 5.7, was dem gemessenen Verhältnis der Stärke der Fluktuationen von in etwa 4 schon näher kommt als das von Bouchiat (1997) vermutete Verhältnis der Flächen von 10.

Hier könnte jetzt noch der berechtigte Einwand angebracht werden, dass es sich bei den Inseln ja nicht um Rotationsellipsoide handelt sondern dass wir vielleicht eher in dem Limes $a > b \gg c$ sind. Hier gilt (Landau und Lifschitz (1974))

$$\frac{1}{C_{\rm I}} \propto \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}\xi}{\sqrt{(\xi + a^2)(\xi + b^2)\xi}}$$

Die Lösung dieses Integrals ergibt sich (z.B. durch Substitution $\xi = z^2$ unter Verwendung von a > b und Gleichung (3.152) in Gradstein und Ryshik (1981)):

$$\frac{1}{C_{\rm I}} \propto \frac{1}{a} F\left(\frac{\pi}{2}, \sqrt{1 - b^2/a^2}\right),$$
 (4.14)

wobei F das elliptische Integral ist. Auch diesmal ergibt sich für das Verhältnis der Kapazitäten der beiden Inseln in etwa 6 (6.17).

Im Einzelfall kann sicherlich die Kapazität noch durch eine Computersimulation genauer bestimmt werden, die auch die Elektroden berücksichtigt.

4.1.2 Frequenzabhängigkeit

Gemessen wird das Rauschspektrum $S_q(f)$, aus dem sich die zeitliche Korrelationsfunktion der Hintergrundladungsfluktuationen durch Fouriertransformation ergibt:

$$\langle \delta q(t) \delta q(0) \rangle = \int_0^\infty S_q(f) \cos(2\pi f t) \,\mathrm{d}f \,, \tag{4.15}$$

insbesondere gilt für die Varianz der Ladungsfluktuationen:

$$\left\langle \delta q^2 \right\rangle = \int_0^\infty S_{\mathbf{q}}(f) \,\mathrm{d}f \,.$$

$$\tag{4.16}$$

Experimente zeigen, dass für das Rauschen über einen großen Frequenzbereich

$$S_{\rm q}(f) \propto \frac{1}{f}$$

4.1. DAS MODELL

gilt, wobei es von diesem Verhalten auch deutliche Abweichungen geben kann (Bouchiat (1997)) - z.B. wenn ein einzelner Fluktuator dominiert.

Das 1/f-Verhalten kann als Uberlagerung einzelner Zwei-Niveau-Fluktuatoren erklärt werden. So leitet Bouchiat ausgehend von der Formel für das Rauschspektrum bei Telegraphenrauschen (Machlup (1954))

$$S_{\rm T}(f) \approx \frac{1}{\pi} \frac{\tau_{\rm eff}}{1 + (2\pi f \tau_{\rm eff})^2}$$

durch Mittelung über viele solcher Fluktuatoren für die fouriertransformierte $\tilde{P}(f)$ der Dipolautokorrelationsfunktion P(t):

$$\tilde{P}(f) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \rho\left(\tau_{\text{eff}}\right) \frac{\tau_{\text{eff}}}{1 + \left(2\pi f \tau_{\text{eff}}\right)^2} \,\mathrm{d}\tau_{\text{eff}}$$

mit einer Verteilungsfunktion $\rho(\tau_{\text{eff}}) \propto \frac{1}{\tau_{\text{eff}}} (\tau_{\min} \leq \tau_{\text{eff}} \leq \tau_{\max})$ den Ausdruck

$$\tilde{P}(f) = \frac{1}{2\pi^2 \ln\left(\frac{\tau_{\max}}{\tau_{\min}}\right)} \left[\arctan\left(2\pi f \tau_{\max}\right) - \arctan\left(2\pi f \tau_{\min}\right)\right] \frac{1}{f}$$
(4.17)

her. Für $\frac{1}{\tau_{\min}} \gg f \gg \frac{1}{\tau_{\max}}$ ergibt dieses Modell eine 1/f–Abhängigkeit des Rauschens.

Um aus (4.17) $\langle \delta q(t) \delta q(0) \rangle$ zu berechnen, benötigt man noch

$$\int_0^\infty \frac{1}{x} \arctan\left(\frac{x}{a}\right) \cos(xy) \, \mathrm{d}x = \frac{1}{2} \pi \mathrm{E}_1(ay) \,,$$

was entweder mit Gradstein und Ryshik (1981) und einigen Integrationstricks ausgerechnet oder in einem Buch wie Erdélyi et al. (1954) (Formel 1.8.3) nachgeschlagen werden kann. Dabei ist $E_1(z) = \int_z^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt$ das Exponentialintegral:

$$\langle \delta q(t) \delta q(0) \rangle \propto \frac{1}{4\pi \ln\left(\frac{\tau_{\max}}{\tau_{\min}}\right)} \left[\mathcal{E}_1\left(\frac{t}{2\pi\tau_{\max}}\right) - \mathcal{E}_1\left(\frac{t}{2\pi\tau_{\min}}\right) \right],$$
 (4.18)

was im Limes $t \to 0$ wegen $E_1(\varepsilon) \simeq -\gamma - \ln(\varepsilon)$ (für $\varepsilon \ll 1$) und $-\ln(t/\tau_{max}) + \ln(t/\tau_{min}) = \ln(\tau_{max}/\tau_{min})$ bedeutet, dass die Stärke der Fluktuationen nicht von τ_{min} und τ_{max} abhängt und insbesondere eine temperaturabhängige Wahl dieser beiden Zeiten nicht zu einer Temperaturabhängigkeit von $\langle \delta q^2 \rangle$ führt.

Realistische Zahlenwerte für die Rauschdaten aus Bouchiat (1997) scheinen $\tau_{\text{max}} = 10$ s (was evtl. durch die Integrationszeit am Verstärker bestimmt ist) und $\tau_{\text{min}} = 10^{-7}$ s zu sein (abgeschätzt dadurch, dass das 1/f-Rauschen im Schrotrauschen untergeht), wobei es hier auf Faktoren von 10 nicht ankommt. Die Zeitskala festzulegen, auf der die Funktion (4.18) gegen 0 geht, ist schon etwas schwieriger, insbesondere hängt sie von der genauen Wahl von τ_{\min} ab,

doch selbst bei $\tau_{\min} = 10^{-12}$ s ist 10^{-5} s eine sinnvolle Zeitskala t_{Flukt} , auf der die Korrelationen gegen 0 gehen. Auf jeden Fall gilt:

$$RC \ll t_{
m Flukt} pprox 10^{-5}~{
m s}$$
 .

Da für die Kapazität in diesem Experiment in etwa 1 fF groß war und für den Widerstand eines funktionierenden Einzel-Elektronen-Transistors $R = 10R_{\rm K}$ ein sinnvoller Wert ist (zumindest sollte er nicht viel kleiner sein), was

$$RC \approx 10^{-10} \text{ s}$$

bedeutet, wobei es bei den Zeitskalen wieder nicht auf Faktoren der Ordnung 10 ankommt. Um einen Zahlenwert für die Varianz der Fluktuationen abschätzen zu können, benötigt man zusätzlich zu der Information $S_q(f) \propto$ $[\arctan(2\pi f \tau_{\max}) - \arctan(2\pi f \tau_{\min})] \frac{1}{f}$ noch einen Wert für den Proportionalitätsfaktor. Bei den Experimenten von Bouchiat (1997) ist dieser Faktor in etwa $10^{-4} \dots 10^{-6}$, was zu

$$\sqrt{\langle \delta q^2 \rangle} \approx 0.005 \dots 0.05$$

führt.

4.2 Erweiterung des Modells

4.2.1 Einfluss einzelner Dipole

Während es relativ einfach ist, das durch viele Dipole verursachte Rauschen zu beschreiben (Abschnitt 4.2.2), ist das bei einem einzelnen Fluktuator schon etwas schwieriger. Da aber einzelne (zufällige!) Ereignisse, die zu Unstetigkeiten in den Messkurven führen, in Experimenten beobachtet wurden, sollte auf diesen Effekt hier noch eingegangen werden. Besonders groß ist der Einfluss eines Dipols mit

$$\langle \delta p_i(\vec{r},t)\delta p_j(\vec{r}',0)\rangle = \delta_{ij}\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\delta(\vec{r}'-\vec{r}_0)\frac{P_1(t)}{3}$$
(4.19)

in der Nähe der Insel. Die Dipolautokorrelationsfunktion $P_1(t)$ geht bei der Mittelung über viele Dipole in P(t) über. An einem Punkt $\vec{r_0}$ unmittelbar unterhalb der Insel ist das elektrische Feld für eine Kreisscheibe² proportional zur Oberflächenladungsdichte:

$$\left|\vec{\mathcal{E}}\left(\vec{r}_{0}\right)\right| = \frac{Q}{\pi r_{1}^{2} \varepsilon_{0} \varepsilon_{\mathrm{r}}},\qquad(4.20)$$

d.h. wegen $\vec{\mathcal{E}} \propto \vec{e}_z = \vec{e}_3$ gilt:

$$\left\langle \delta q(t) \delta q(0) \right\rangle = \int \mathrm{d}^3 r' \int \mathrm{d}^3 r \frac{\left\langle \delta p_3(\vec{r}, t) \delta p_3(\vec{r'}, 0) \right\rangle \mathcal{E}_3(\vec{r}) \mathcal{E}_3(\vec{r'})}{V_0^2} \,. \tag{4.21}$$

 $^{^2{\}rm F}$ ür eine kugelförmige Insel würden sich nur geringfügig andere Zahlenwerte ergeben.

4.2. ERWEITERUNG DES MODELLS

Unter Verwendung von Gleichung (4.19) und $Q = C_{I}V_{0}$ ergibt sich:

$$\langle \delta q(t) \delta q(0) \rangle = \frac{P_1(t)}{3} \left(\frac{C_{\rm I}}{\pi r_{\rm I}^2 \varepsilon_0 \varepsilon_{\rm r}} \right)^2 ,$$
 (4.22)

und mit Gleichung (4.11) folglich:

$$\langle \delta q(t) \delta q(0) \rangle = \frac{P_1(t)}{3} \left(\frac{4}{\pi^2}\right)^2 \frac{1}{r_1^2}.$$
 (4.23)

Der Vergleich mit Gleichung (4.8) zeigt einerseits, dass einzelne Dipole kaum eine Rolle spielen, solange $n_{\rm P}r_{\rm I}^3 \gg 1$ gilt, andererseits bedeutet diese Gleichung aber auch, dass es nicht unbedingt eine gute Idee ist, zu beliebig kleinen Inselgrößen zu gehen um den Einfluss von Umgebungsladungsfluktuationen möglichst klein zu halten. Denn selbst wenn die Kapazität schneller als mit dem Inselradius $r_{\rm I}$ skalieren sollte, so ist das Verhältnis $C_{\rm I}/r_{\rm I}^2$ in Gleichung (4.22) sicherlich keine Konstante und die Größe der Unstetigkeiten, die einzelne Ereignisse verursachen, wird mit sinkender Inselgröße zunehmen.

Um genauere quantitative Aussagen treffen zu können, sind hier weitere Experimente nötig, anhand derer dann auch versucht werden kann, detailliertere mikroskopische Modelle zu entwerfen, um insbesondere die Frage nach der optimalen Inselgröße beantworten zu können. Dabei muss auch der von Verbrugh et al. (1995) untersuchte Effekte der Selbsterwärmung kleiner Proben berücksichtigt werden.

4.2.2 Gaußische Fluktuationen

Das Ziel dieses Kapitels ist es, den Einfluss von Umgebungsladungsfluktuationen auf die Funktionsweise von Einzel-Elektronenbauelementen zu untersuchen. Dazu reicht es allerdings nicht, wie Bouchiat (1997) nur das erste Moment zu berechnen.

Was ergibt sich bei der Berechnung höherer Momente von δq , wenn als einzige Annahmen verwendet werden, dass die Dipolfluktuationen delta-korreliert sind und ferner die Fluktuationen nicht von einigen wenigen Dipolen verursacht werden? Während Beiträge der Form

$$\langle \delta p_i(\vec{r_1}, 0) \delta p_j(\vec{r_2}, 0) \delta p_k(\vec{r_3}, 0) \delta p_l(\vec{r_4}, 0) \rangle \propto \delta_{ij} \delta_{kl} \delta(\vec{r_1} - \vec{r_2}) \delta(\vec{r_3} - \vec{r_4}) n_{\rm P}^2 P(0)^2 \quad (4.24)$$

leicht zu berechnen sind (vergleiche Abschnitt 4.1), da die zu berechnenden Integrale faktorisieren:

$$\left\langle \delta q^4 \right\rangle_1 \propto n_{\rm P}^2 r_{\rm I}^2 P(0)^2 \,, \tag{4.25}$$

ist dies bei Termen der Form

$$\langle \delta p_i(\vec{r}_1) \delta p_j(\vec{r}_2) \delta p_k(\vec{r}_3) \delta p_l(\vec{r}_4) \rangle \propto \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) \delta(\vec{r}_3 - \vec{r}_4) n_{\rm P} P(0)^2 \quad (4.26)$$

schon etwas schwieriger.³ Allerdings lässt sich das zu berechnende Integral nach oben abschätzen durch

$$\int d^3 r \left(\frac{\left|\vec{\mathcal{E}}\right|}{V_0}\right)^n \propto r_{\rm I}^{3-n} \,. \tag{4.27}$$

Für den Kugelkondensator kann dies leicht durch explizites Nachrechnen überprüft werden. Etwas schwieriger wird es schon im Fall einer Inselform, die der in Experimenten verwendeten entspricht. Dass das Integral (4.27) für n = 2 konvergiert ist schon aus physikalischen Gründen klar (siehe Gleichung (4.8)), folglich konvergiert das Integral auch für n > 2. Das Ergebnis $\propto r_{\rm I}^{3-n}$ folgt schon aus Dimensionsgründen. (Selbst für einen Plattenkondensator mit Plattenabstand dund Fläche A, der ja zwei charakteristische Längen hat, gilt die nachfolgende Argumentation nach wie vor. Hier lautet das Ergebnis von (4.27) $\propto A/d^{n-1}$; an Stellen, an denen im Folgenden argumentiert wird, dass $n_{\rm P}r_{\rm I}^3 \gg 1$ gilt, steht dann der analoge Ausdruck: $n_{\rm P}Ad \gg 1$).

Aus (4.26) und (4.27) folgt:

$$\left\langle \delta q^4 \right\rangle_2 \propto \frac{n_{\rm P}}{r_{\rm I}} P(0)^2 \,, \tag{4.28}$$

was im Limes einer großen Anzahl von Dipolen $(n_{\rm P}r_{\rm I}^3\gg1)$ gegen $\langle\delta q^4\rangle_1$ (Gleichung (4.25)) vernachlässigt werden kann.

Analog dazu ergibt sich für $\langle \delta q^3 \rangle$ mit

$$\langle \delta p_i(\vec{r}_1) \delta p_j(\vec{r}_2) \delta p_k(\vec{r}_3) \rangle \propto \delta_{ij} \delta_{jk} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) n_{\rm P} P(0)^{3/2}$$
(4.29)

der folgende Ausdruck

$$\left\langle \delta q^3 \right\rangle \propto n_{\rm P} P(0)^{3/2} \,, \tag{4.30}$$

der wegen

$$1 > \frac{\sqrt{\langle \delta q^2 \rangle}}{e} > \frac{\langle \delta q^2 \rangle^{3/2}}{e^3} = \frac{\sqrt{n_{\rm P} r_{\rm I}^3} n_{\rm P} P(0)^{3/2}}{e^3} \gg \frac{\langle \delta q^3 \rangle}{e^3} \tag{4.31}$$

ebenso wie höhere ungerade Potenzen nicht berücksichtigt werden muss (der Fall $\sqrt{\langle \delta q^2 \rangle}/e > 1$ bedeutet sowieso völlige Zerstörung der Coulomb–Blockade (siehe Abschnitt 4.3.1), evtl. könnte hier auch noch argumentiert werden, dass wegen $\langle \delta \vec{P} \rangle = \vec{0}$ für physikalisch sinnvolle Annahmen für $\delta \vec{P}(t)$ auch $\left| \langle \delta \vec{P}^3 \rangle \right| \ll P(0)^{3/2}$ gilt).

Für höhere gerade Potenzen von δq ergibt somit nur der Term:

$$\langle \delta p_{i_1}(\vec{r_1}) \delta p_{i_2}(\vec{r_2}) \dots \delta p_{i_{2k}}(\vec{r_{2k}}) \rangle =$$

$$(2k-1)!! \delta_{i_1 i_2} \delta_{i_3 i_4} \dots \delta_{i_{2k-1} i_{2k}} \delta(\vec{r_1} - \vec{r_2}) \dots \delta(\vec{r_{2k-1}} - \vec{r_{2k}}) \left(\frac{n_{\rm P} P(0)}{3}\right)^k \quad (4.32)$$

³Hier ging noch die sicherlich vernünftige Annahme ein, dass $\langle \delta \vec{P}^4 \rangle$ von derselben Größenordnung ist wie $\langle \delta \vec{P}^2 \rangle^2$

einen relevanten Beitrag, wobei $(2k-1)!! \equiv \prod_{i=1}^{k} (2i-1)$ für n = 2k gerade die Zahl der Möglichkeiten ist, aus n Zahlen jeweils k Paare zu bilden,⁴ d.h. es gilt

$$\langle \delta q^n \rangle = \begin{cases} (n-1)!! \left\langle \delta q^2 \right\rangle^{n/2} : n \text{ gerade} \\ 0 : n \text{ ungerade} \end{cases},$$
(4.33)

was wegen

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, x^{2k} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right] = (2k-1)!! \, \sigma^{2k}$$

bedeutet, dass die Fluktuationen gaußisch sind. Dies ist im Einklang mit dem zentralen Grenzwertsatz (siehe z.B. Mathews und Walker (1970)), der besagt, dass die Summe unendlich vieler unkorrelierter Zufallszahlen immer gaußisch ist. Für den hier interessanten Parameterbereich (insbesondere $\sqrt{\langle \delta q^2 \rangle} \leq 0.1$) reichen in etwa 1000 Dipole in einem Volumen von der Größe r_1^3 aus, um in guter Näherung gaußisches Rauschen zu erzeugen. Bei einer homogenen Dipolverteilung tragen für eine kugelförmige Insel mit Radius $r_{\rm I}$ Dipole im Abstand bis zu $2r_{\rm I}$ vom Kugelmittelpunkt genauso viel zu den Umgebungsladungsfluktuationen bei, wie die Dipole im Rest des Volumens. Deshalb ist die Gesamtzahl der Dipole, die nötig sind um gaußisches Rauschen zu erzeugen, von derselben Größenordnung – unabhängig von der genauen Inselform.

In Anhang B.2 wird gezeigt, wie gaußisches Rauschen mit einem 1/f Spektrum numerisch berechnet werden kann. Dieses Vorgehen unterscheidet sich grundlegend von der numerischen Rechnung von Johansson und Haviland (2000), die zur Untersuchung einer eindimensionalen Kette von Tunnelkontakten die Umgebungsladungsfluktuationen durch Zufallszahlen im Bereich von -Ae bis Aemit der Amplitude A ($0 \le A \le \frac{1}{2}$) darstellen. Dieser Ansatz, der auch von Yamanaka et al. (2000) verwendet wird, soll die Periodizität der Kennlinien widerspiegeln. Es erscheint hier sehr viel sinnvoller, wie im Abschnitt 4.3.1 gezeigt, die Periodizität der Kennlinien direkt durch Fourier-Reihen zu berücksichtigen und keine gleichverteilten sondern gaußische Zufallszahlen zu verwenden.

4.3 Umgebungsladungsfluktuationen & Kennlinien von Einzel–Elektronen–Bauelementen

Aufgrund der Tatsache, dass die Umgebungsladungsfluktuationen für große Inseln gaußisch sind, ist es relativ einfach, ihren Einfluss auf die Kennlinien von

⁴Der Induktionsanfang ist trivial. Zum Schritt von $k \to k + 1$ muss man sich nur fragen, wieviele Möglichkeiten es gibt, eine beliebig herausgegriffene Zahl mit anderen zu paaren – genau 2k + 1. Multipliziert mit (2k - 1)!! ergibt das gerade die Zahl der insgesamt möglichen Paare.

Einzel-Elektronen-Bauelementen zu untersuchen. Der Vergleich mit experimentellen Daten zeigt, dass die Annahme, dass es sich um große Inseln handelt, zutrifft.



4.3.1 Einzel-Elektronen-Transistor

Abbildung 4.1: Der Strom eines Einzel-Elektronen-Transistors "gemessen" als Funktion von V_G (in Schritten von $\frac{2}{1000} \frac{e}{C}$) bei sehr kurzen Messdauern (von links oben nach rechts unten: RC, 10RC, 100RC, 10000RC). Während das Ergebnis bei Messzeiten von der Ordnung RC ziemlich zufällig ist, ist bei einer Integrationszeit von 10000RC der Einfluss des Schrotrauschens kaum noch zu sehen. Der "Messprozess" wurde simuliert, indem die Mastergleichung (1.6) mit dem in Anhang B.1 beschriebenen Montecarlo-Algorithmus gelöst wurde.

Bei fester Source–Drain–Spannung $V_{\rm sd}$ ist die Kennlinie eines Einzel– Elektronen–Transistors eine periodische Funktion in der Gateladung $Q_{\rm g} = C_{\rm G}V_{\rm G}$ mit der Periode e, d.h. es gilt:

$$I_{\rm sd} = \sum_{n=0}^{\infty} \left[a_n \cos\left(2\pi n Q_{\rm g}/e\right) + b_n \sin\left(2\pi n Q_{\rm g}/e\right) \right] \,. \tag{4.34}$$

Eine Lösung von Gleichung (1.1.2), für die die Koeffizienten leicht analytisch ausgerechnet werden können, ist wegen (Abramowitz und Stegun (1984) 27.8.6)

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos(2\pi nx)}{\pi^2 n^2} = \frac{1}{6} - x + x^2, \quad 0 \le x \le 1$$

für $V_{\rm sd}C = e$ gegeben durch

$$a_n = \frac{e}{RC} * \begin{cases} \frac{1}{6} & : n = 0\\ -\frac{1}{\pi^2 n^2} & : n \ge 1 \end{cases} \quad \text{und} \quad b_n = 0.$$
 (4.35)

Da die Zeitskala der Umgebungsladungsfluktuationen um Größenordnungen über der RC-Zeit liegt, kann der Einfluss von Umgebungsladungsfluktuationen durch die Ersetzung: $Q_{\rm g} \rightarrow Q_{\rm g} + \delta Q(t)$ berücksichtigt werden (siehe auch Abbildung 4.1), wobei im folgenden zur besseren Lesbarkeit der Formeln mit dimensionslosen Größen $q_{\rm g} \equiv Q_{\rm g}/e$ und $\delta q(t) \equiv \delta Q(t)/e$ gearbeitet wird:

$$I_{\rm sd}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \left[\cos \left(2\pi n q_{\rm g} \right) \cos \left(2\pi n \delta q(t) \right) - \sin \left(2\pi n q_{\rm g} \right) \sin \left(2\pi n \delta q(t) \right) \right] + \sum_{n=0}^{\infty} b_n \left[\sin \left(2\pi n q_{\rm g} \right) \cos \left(2\pi n \delta q(t) \right) + \cos \left(2\pi n q_{\rm g} \right) \sin \left(2\pi n \delta q(t) \right) \right] .$$
(4.36)

Gaußische Fluktuationen führen wegen

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \cos(2\pi nx) \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right] = \exp\left(-2\pi^2 n^2 \sigma^2\right)$$

zu:

$$\langle I_{\rm sd} \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \left[a_n \cos\left(2\pi n q_{\rm g}\right) + b_n \sin\left(2\pi n q_{\rm g}\right) \right] \exp\left(-2\pi^2 n^2 \left\langle \delta q^2 \right\rangle \right) \,. \tag{4.37}$$

In Abbildung 4.2 ist der Einfluss der Umgebungsladungen auf die Kennlinie eines Einzel-Elektronen-Transistors für verschiedene Stärken von $\langle \delta q^2 \rangle$ gezeigt. Dass die Gleichung (4.37) auch Messergebnisse zumindest qualitativ gut beschreibt, zeigt Abbildung 4.3; die Annahme, dass die Fluktuationen gaußisch sind, steht auf jeden Fall nicht im Widerspruch zu experimentellen Ergebnissen. Da in Experimenten manchmal aber doch einzelne Fluktuatoren dominieren, sollte der Effekt eines einzelnen fluktuierenden Dipols ebenfalls untersucht werden:

$$\langle I_{\rm sd} \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} I_n(q_G) * \begin{cases} \cos\left(2\pi n\Delta q\right) & : \delta q(t) = \Delta q \operatorname{sign}(\sin(\omega t)) \\ J_0\left(2^{3/2}\pi n\Delta q\right) & : \delta q(t) = \sqrt{2}\Delta q \sin(\omega t) \end{cases}$$
(4.38)

mit $I_n(q_G) = a_n \cos(2\pi n q_g) + b_n \sin(2\pi n q_g)$ und $\Delta q \equiv \sqrt{\langle \delta q^2 \rangle}$ bewirken würde $(J_0(z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos(z \sin \theta) d\theta$ ist die Besselfunktion erster Art und 0-ter Ordnung). Bei einem einzelnen Dipol ist spätestens, wenn für n=1 die erste Nullstelle erreicht wird (d.h. für $\Delta q = 0.25$ bzw für $\Delta q = \frac{2.4048...}{2^{3/2}\pi} \approx 0.271$), klar, dass das Messergebnis nicht mehr viel mit dem zu tun hat, was ohne Umgebungsladungsfluktuationen gemessen werden sollte (derartige Fluktuationen können genauso plötzlich, wie sie angefangen haben, auch wieder aufhören). In Abbildung 4.4 wird deutlich, dass ein einzelner Dipol die Kennlinie eines Einzelelektronentransistors



Abbildung 4.2: Der Strom eines Einzel-Elektronen-Transistors als Funktion von V_G nach Gleichung (4.37) für gaußisches Rauschen bei verschiedene Stärken von Δq (0.0, 0.1, 0.2 und 0.3). Die numerischen Daten wurden wie in Abbildung 4.1 beschrieben gewonnen (es wurde hier noch über verschiedene Sätze von Zufallszahlen gemittelt); zusätzlich wurde in die Computersimulation noch gaußisches 1/f-Rauschen (Anhang B.2) eingeführt.

doch deutlich anders beeinflussen würde, als das bei den gaußischen Umgebungsladungsfluktuationen in Abbildung 4.3 der Fall war.

Im Folgenden sei der Fall betrachtet, dass die Insel nicht zu klein ist, d.h. dass die Fluktuationen gaußisch sind. Für große Δq gilt hier:

$$\langle I_{\rm sd} \rangle \simeq I_0 + [a_1 \cos \left(2\pi q_{\rm g}\right) + b_1 \sin \left(2\pi q_{\rm g}\right)] \exp \left(-2\pi^2 \left\langle \delta q^2 \right\rangle\right) \,.$$

Es scheint also, als ob es nur eine Frage der Messgenauigkeit wäre ob man für $\sqrt{\langle \delta q^2 \rangle} < 1$ die Coulomb–Oszillationen noch messen kann. Es sollte aber zunächst überlegt werden, für welchen Fall die Formel (4.37) auch das Messergebnis beschreibt: genau dann, wenn die Messdauer t_{Mess} sehr viel größer ist als die Zeitskala t_{Flukt} , auf der die Fluktuationen korreliert sind. Wenn es in der Grundlagenforschung darum geht, Coulomb–Oszillationen überhaupt zu messen, ist dies sicherlich realisiert.

Ganz anders ist die Situation bei der Anwendung eines Einzel-Elektronen-Transistors etwa als Computerbauelement. Hier könnte es konkret darum gehen, zwei Stromzustände I_0 , I_1 (Maximum und Minimum der Coulomb-Oszillationen), die die Zustände 0 und 1 repräsentieren, durch eine sehr kurze Messung auf einer Zeitskala



Abbildung 4.3: Vergleich Theorie (links, Gleichung (4.37)) und Experiment (rechts, Bouchiat (1997)) für verschiedene Werte von $V_{\rm sd}$. Die experimentellen Kurven sind in Schritten von $25 \,\mu V$ aufgenommen, die theoretischen in Schritten von 0.2e/C von -1.2 bis 1.2. Für die gaußischen Umgebungsladungsfluktuationen $\sqrt{\langle \delta q^2 \rangle} = 0.1$ gewählt wurde. Dabei wurde bei der Rechnung noch berücksichtigt, dass im Experiment die eine Elektrode auf dem Potential V und die andere auf 0 liegt, was dazu führt, dass die Peaks benachbarter Kurven leicht verschoben sind (um 0.05e). Die Kapazität betrug im Experiment 0.6 fF; wenn man für den Widerstand noch den sicherlich realistischen Wert von 100 $R_{\rm K}$ annimmt (was $\frac{e}{\tau} \simeq 620 \,\mathrm{pF}$ bedeutet), stimmt auch die Größe des Stroms von Rechnung und Experiment überein.



Abbildung 4.4: Die Wirkung eines einzelnen Dipols mit $\delta q(t) = \sqrt{2}\Delta q \sin(\omega t)$ (links) bzw. $\delta q(t) = \Delta q \operatorname{sign}(\sin(\omega t))$ (rechts) auf die Kennlinie eines Einzel-Elektronen-Transistors. Dabei entspricht das rechte Bild dem einen Fluktuator, der mit gleichen Zeitkonstanten zwischen zwei Zuständen hin und her springt. Dabei treten die erwähnten Unstetigkeiten natürlich nur auf, wenn man nicht wie hier über mehrere Schwingungen mittelt. Die Parameter wurden so gewählt wie bei den gaußischen Fluktuationen in Abbildung 4.3.

(mit $t_{\text{Mess}} \approx 10^{-8} \dots 10^{-9}$ s aber immer noch $t_{\text{Mess}} \gg RC$,⁵ vergleiche Abbildung 4.1), zu unterscheiden, wobei bei einer Messung einige t_{Flukt} später selbstverständlich derselbe Wert ausgelesen werden soll. Der Wert einer einzelnen Messung wird folglich um den Mittelwert streuen:

$$I_n = I_n \pm \Delta I_n \,.$$

Die beiden Zustände können noch gut unterschieden werden, wenn

$$I_1 - I_0 \gg \Delta I_0 + \Delta I_1$$

gilt, wobei die Bedingung \gg je nach gewünschter Genauigkeit schon bei einigen ΔI erfüllt ist. Falls etwa eine Fehlertoleranz von 1 : 10⁹ akzeptabel ist (bei 10⁹ maligem auslesen des Speichers würde einmal ein falscher Wert geliefert) lautet die Bedingung an die maximal möglichen Fluktuationen:

$$I_1 - I_0 = 6 \left(\Delta I_0 + \Delta I_1 \right) \,, \tag{4.39}$$

da die Fluktuationen gaußisch sind und $\int_6^\infty \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-x^2/2) dx \simeq 10^{-9}$ gilt. Wenn ein Messwert oberhalb von $I_1 - 6\Delta I_1 = I_0 + 6\Delta I_0$ liegt, soll er als "1" interpretiert werden, unterhalb als "0".

Um ein Gefühl dafür zu bekommen, wie stark die Fluktuationen dafür höchstens sein dürfen, sei hier kurz auf ein einfaches Modell für eine solche Einzel-Elektronen-Transistor-Kennlinie eingegangen:

$$I_{\rm sd} = \hat{I}\cos(2\pi q_{\rm g})$$

Die Mittelung über Umgebungsladungsfluktuationen führt hier zu:

$$\langle I_{\rm sd} \rangle = \hat{I} \cos(2\pi q_{\rm g}) \exp\left(-2\pi^2 \left\langle \delta q^2 \right\rangle\right) \,.$$

Wegen $\cos(x)^2 = \frac{1}{2}(1 + \cos(2x))$ gilt auch

$$\left\langle I_{\rm sd}^2 \right\rangle = \hat{I}^2 \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos(4\pi q_{\rm g}) \exp\left(-8\pi^2 \left\langle \delta q^2 \right\rangle \right) \right] \,.$$

und folglich

$$\Delta I_0 = \Delta I_1 = \hat{I} \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \exp\left(-8\pi^2 \left\langle\delta q^2\right\rangle\right) - \exp\left(-4\pi^2 \left\langle\delta q^2\right\rangle\right)}$$

 $^{^5}$ Da es nicht besonders aussichtsreich wäre, Computer zu verkaufen, die auf Heliumtemperatur abgekühlt werden müssen, wohingegen alles ab Stickstofftemperatur bereits kommerziell interessant sein könnte, darf hier im Gegensatz zu den Tieftemperatur
experimenten von Seite 60 von $RC \approx 10^{-13}$ s ausgegangen werden.



Abbildung 4.5: Das Maximum und das Minimum der Strom-Spannungskennlinie samt Standardabweichung als Funktion der Stärke der Umgebungsladungsfluktuationen. Ab $\Delta q \approx 0.2$ wird es ziemlich schwierig, die beiden durch eine kurze Messung noch zu unterscheiden.

Die Bedingung (4.39) ist mit $I_1 - I_0 = 2\hat{I} \exp\left(-2\pi^2 \langle \delta q^2 \rangle\right)$ erfüllt für

$$\sqrt{\langle \delta q^2 \rangle} \simeq 0.0772 \,, \tag{4.40}$$

was zumindest für Kurzzeitspeicher eine realistische Größenordnung ist. Dass es auf längeren Zeitskalen noch zu Drifts kommen kann (Zorin et al. (1996)) spricht ebenso wie die Tatsache, dass $\sqrt{\langle \delta q^2 \rangle}$ von der Speicherdauer t_{Speich} abhängen könnte⁶

$$\left\langle \delta q^2 \right\rangle \propto \int_{1/t_{\text{Speich}}}^{\dots} \mathrm{d}f \frac{1}{f} \,,$$
 (4.41)

eher gegen die Verwendung von Einzel–Elektronen–Transistoren als Langzeitspeicher.

Doch nun wieder zum Einfluss der Umgebungsladungsfluktuationen auf realistische Kennlinien (4.34). Von Interesse ist hier außer den Fluktuationen sicherlich auch die Strom-Strom-Korrelationsfunktion $\langle I(t)I(0)\rangle$, wegen (4.36) muss hierzu insbesondere

$$\left\langle \cos\left(nx(t)\right)\cos\left(mx(0)\right)\right\rangle = \frac{1}{2}\left\langle \cos\left[nx(t) + mx(0)\right] + \cos\left[nx(t) - mx(0)\right]\right\rangle$$

und

$$\langle \sin\left(nx(t)\right) \sin\left(mx(0)\right) \rangle = \frac{1}{2} \left\langle \cos\left[nx(t) - mx(0)\right] - \cos\left[nx(t) + mx(0)\right] \right\rangle$$

 $^{^{6}\}mathrm{Als}$ obere Grenze des Integrals (4.41) verwenden Verbrugh et al. (1995) hier1/(RC). Vergleiche auch Abschnitt 4.1.2.

berechnet werden $(x(t) \equiv 2\pi \delta q(t))$. Analog zu Gleichung (4.33) gilt auch:

$$\left\langle (n\delta q(t) \pm m\delta q(0))^k \right\rangle = \begin{cases} (k-1)!! \left\langle (n\delta q(t) \pm m\delta q(0))^2 \right\rangle^{k/2} & :k \text{ gerade} \\ 0 & :k \text{ ungerade} \end{cases}$$
(4.42)
und wegen $\left\langle (n\delta q(t) \pm m\delta q(0))^2 \right\rangle = (n^2 + m^2) \left\langle \delta q^2 \right\rangle \pm 2nm \left\langle \delta q(t) \delta q(0) \right\rangle$ gilt:
 $\left\langle I(t)I(0) \right\rangle = \sum_{n,m} a_n a_m \cos \left(2\pi nq_g\right) \cos \left(2\pi mq_g\right) e^{-2\pi^2 (n^2 + m^2)} \left\langle \delta q^2 \right\rangle \cosh \left(4\pi^2 nm \left\langle \delta q(t) \delta q(0) \right\rangle \right)$
 $+ \sum_{n,m} a_n a_m \sin \left(2\pi nq_g\right) \sin \left(2\pi mq_g\right) e^{-2\pi^2 (n^2 + m^2)} \left\langle \delta q^2 \right\rangle \sinh \left(4\pi^2 nm \left\langle \delta q(t) \delta q(0) \right\rangle \right)$
 $+ 2 \sum_{n,m} a_n b_m \sin \left(2\pi nq_g\right) \cos \left(2\pi mq_g\right) e^{-2\pi^2 (n^2 + m^2)} \left\langle \delta q^2 \right\rangle e^{-4\pi^2 nm \left\langle \delta q(t) \delta q(0) \right\rangle }$
 $+ \sum_{n,m} b_n b_m \sin \left(2\pi nq_g\right) \sin \left(2\pi mq_g\right) e^{-2\pi^2 (n^2 + m^2)} \left\langle \delta q^2 \right\rangle \cosh \left(4\pi^2 nm \left\langle \delta q(t) \delta q(0) \right\rangle \right)$
 $+ \sum_{n,m} b_n b_m \cos \left(2\pi nq_g\right) \cos \left(2\pi mq_g\right) e^{-2\pi^2 (n^2 + m^2)} \left\langle \delta q^2 \right\rangle \sinh \left(4\pi^2 nm \left\langle \delta q(t) \delta q(0) \right\rangle \right)$
 $+ \sum_{n,m} b_n b_m \cos \left(2\pi nq_g\right) \cos \left(2\pi mq_g\right) e^{-2\pi^2 (n^2 + m^2)} \left\langle \delta q^2 \right\rangle \sinh \left(4\pi^2 nm \left\langle \delta q(t) \delta q(0) \right\rangle \right)$, (4.43)

wobei bei der Berechnung des gemischten Terms noch verwendet wurde, dass $\cosh(x) - \sinh(x) = \exp(-x)$ gilt. Gleichung (4.43) liefert wegen $\lim_{t\to\infty} \langle \delta q(t) \delta q(0) \rangle = 0$ wie zu erwarten das asymptotische Verhalten:

$$\lim_{t \to \infty} \langle I(t)I(0) \rangle = \langle I_{\rm sd} \rangle^2$$

Die Gleichung (4.43) ermöglicht es auch, zu untersuchen, wie groß die Umgebungsladungsfluktuationen bei einem realistischen Modell sein dürfen, damit es noch als Computerspeicher verwendet werden kann. Für $VC_{\rm L}/e = \frac{1}{4}$ ist die Bedingung (4.39) erfüllt bei

$$\sqrt{\langle \delta q^2 \rangle} \simeq 0.0766$$

was fast genau mit der einfachen Abschätzung (4.40) übereinstimmt. Zusätzlich zu den Umgebungsladungsfluktuationen, deren Einfluss auch durch geeignete Schaltkreise noch verringern kann (Yamanaka et al. (2000)), sollte noch kurz auf folgende Fehlerquellen eingegangen werden:

• Schrotrauschen: Aufgrund der Tatsache, dass der Strom durch stochastische Tunnelereignisse entsteht, ergeben sich Stromfluktuationen. Im Vergleich zu rein Poisson'schem Rauschen kann die Korrelation zwischen einzelnen Tunnelereignissen bei den zwei Tunnelkontankten des Einzel-Elektronen-Transistors um einen Faktor 2 unterdrückt werden (Birk et al. (1995)). Numerische Integration der Mastergleichung (1.6) zeigt, dass Schrotrauschen bei einer Integrationszeit von $10^4 \tau$ keinen Einfluss auf die Unterscheidbarkeit der Messwerte "0" und "1" hat (vergleiche Abbildung 4.1).

- Kotunneln: Tunnelprozesse höherer Ordnung sind bei vielen Versuchen, einen Stromstandard zu bauen, extrem störend (Seite 17). Hier bewirken sie in erster Linie, dass ein messbarer Strom in einem Bereich fließt, in dem der Strom wegen Coulomb-Blockade eigentlich unterdrückt sein sollte; dies beeinträchtigt die Unterscheidbarkeit der Messwerte "0" und "1" kaum.
- **Thermische Fluktuationen**: Wenn die Source–Drain–Spannung (V_{sd}) verschwindet, geht der Einzel-Elektronen-Transistor in eine Einzel-Elektronen-Box über. Die Fluktuationen der Zahl der Elektronen auf der Insel ist für hohe Temperaturen im Rahmen der orthodoxen Theorie gegeben durch $\Delta n \propto C k_{\rm B} T/e^2$ (siehe z.B. erster Teil von Gleichung (2.21)), was zu einem Fehler im Strom von

$$\Delta I \approx \frac{e}{\tau} \sqrt{\frac{Ck_{\rm B}T}{e^2}}$$

führt, der durch die Integrationszeit $(t_{int} > \tau)$ noch um einen Faktor $\sqrt{\frac{\tau}{t_{int}}}$ kleiner wird. Da dieser Fehler kleiner als $\sim \frac{1}{10} (I_{\text{max}} - I_{\text{min}})$ sein sollte, muss die Temperatur klein genug gewählt werden. Da dann die Fluktuationen aber sowieso wieder exponentiell verschwinden (zweiter Teil von (2.21)), sollten thermische Fluktuationen die Genauigkeit zumindest so lange nicht beeinflussen, als die Betriebstemperatur des Computers niedrig genug gehalten wird.

• Quantenfluktuationen: Auch hier kann für $V_{\rm sd} = 0$ das Ergebnis der Einzel-Elektronen-Box verwendet werden (Kapitel 3):

$$\frac{\Delta I}{I} \propto \sqrt{g \, \frac{\tau}{t_{\rm int}}}$$

was für Integrationszeiten von $t_{\rm int} \simeq 10^4 \tau$ die Genauigkeit des Einzel-Elektronen–Transistors nicht wesentlich beeinflusst.

Als Fazit lässt sich sagen, dass sich Einzel-Elektronen-Transistoren zumindest zum Einsatz als verlässliche Kurzzeitspeicher in Computern eignen. Durch Verlängerung der Integrationszeit würde sich zwar die Genauigkeit noch erhöhen, andererseits leidet dann die Anwendbarkeit wieder, da das Auslesen des Speichers natürlich nicht allzu lange dauern darf.

4.3.2Einzel-Elektronen-Box

,

Auch die Coulomb-Treppe kann man als Fourierreihe darstellen. Im klassischen Fall (lim $q \rightarrow 0$) ergibt sich wegen (Abramowitz und Stegun (1984) 27.8.6)

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin\left(2\pi k \left(x + \frac{1}{2}\right)\right)}{\pi k} = -\frac{1}{2}x, \quad -\frac{1}{2} \le x \le \frac{1}{2}$$

、、



Abbildung 4.6: Die Stufen einer klassischen Einzel-Elektronen-Box dargestellt als Fouriereihe (4.45) für $\Delta q = 0$ (links) bzw. $\Delta q = 0.1$ und 0.4 (rechts). Während die Coulomb-Treppe für q = 0.1 noch sehr gut sichtbar ist und die Stufen noch sehr flach sind, zerstören um einen Faktor 4 höhere Umgebungsladungsfluktuationen die Coulombtreppe vollständig.

für die Zahl der Elektronen auf der Insel bei T = 0:

$$n = n_{\rm x} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\pi k} \sin(2\pi k \, n_{\rm x}) \,. \tag{4.44}$$

Mittelung über gaußische Umgebungsladungsfluktuationen $(n_x \rightarrow n_x + \delta q(t))$ ergibt:

$$\langle n \rangle = n_{\rm x} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\pi k} \sin(2\pi k \, n_{\rm x}) \exp\left(-2\pi^2 k^2 \left\langle \delta q^2 \right\rangle\right) \,, \tag{4.45}$$

wobei die Exponentialfunktion einerseits dafür sorgt, dass die Reihe schneller konvergiert und andererseits die Unstetigkeit und damit das als Gibbs'sches Phänomen bekannte Überschießen der Fourierreihe an der Unstetigkeit beseitigt wird (was auch im Limes unendlich vieler Summanden erhalten bleibt, siehe z.B. Mathews und Walker (1970), Abbildung 4.6). Dieses mathematische Artefakt beruht darauf, dass die Fourierreihe nicht punktweise sondern bezüglich einer Integralnorm gegen die ursprüngliche Stufenfunktion konvergiert. Die Tatsache, dass die Unstetigkeit durch Umgebungsladungsfluktuationen verschwindet, ist auch ein Indiz dafür, dass die Frage ob die Steigung der Stufe auch bei endlichem g noch unendlich ist, etwas akademisch ist. Für $\langle \delta q^2 \rangle > 0$ gilt bei $n_{\rm x} = \frac{1}{2}$:

$$\left(\frac{\partial}{\partial n_{\rm x}}\left\langle n\right\rangle\right)\left(n_{\rm x}=\frac{1}{2}\right)=1+2\sum_{k=1}^{\infty}\exp\left(-2\pi^2k^2\left\langle\delta q^2\right\rangle\right)\,,$$

so dass

$$\frac{\partial}{\partial n_{\mathbf{x}}}\left\langle n\right\rangle <\infty$$

für noch so kleine nicht verschwindende Umgebungsladungsfluktuationen gilt.
4.3. KENNLINIEN VON EINZEL–ELEKTRONEN–BAUELEMENTEN 73

Abbildung 4.7 zeigt die Ladung auf dem Tunnelkontakt

$$\frac{\langle Q \rangle}{e} = \frac{C}{C + C_g} \left(n_x - \langle n \rangle \right)$$

bei verschiedenen Temperaturen. Die experimentellen Daten von Lafarge et al. (1991) weichen, wie schon in Abschnitt 1.1.1 erwähnt, von den klassisch erwarteten Kurven ab, was leicht erklärt werden kann, wenn man noch Umgebungsladungsfluktuationen der Stärke $\Delta q = 0.05 \ e$ annimmt.



Abbildung 4.7: Experimentelle Daten der Ladung auf dem Tunnelkontakt (Lafarge et al. (1991)) (links) im Vergleich mit aufgrund von Umgebungsladungsfluktuationen verschmierten Kurven (rechts). Die gepunkteten Linien wurden mit Gleichung (1.2) berechnet; für die Stärke der Umgebungsladungsfluktuationen wurde $\Delta q = 0.05$ gewählt. Die Kapazitäten haben die Werte C = 0.6 fF und $C_g = 85$ aF. Die Stärke der Umgebungsladungsfluktuationen werden, da in Experimenten beobachtet wird, dass die Fluktuationen bei tiefen Temperaturen sättigen (bei Song et al. (1995) waren sie für Temperaturen unterhalb von 300 mK konstant).

Bei der Berechnung der Autokorrelationsfunktion treten im Vergleich zu Gleichung (4.43) neben $\langle (n_x + \delta q(t)) (n_x + \delta q(0)) \rangle$ noch Terme der Form

$$\left\langle \delta q(t) \sin\left(2\pi k \delta q(0)\right) \right\rangle = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{2\pi\varepsilon} \left\langle \sin\left(2\pi\varepsilon \delta q(t)\right) \sin\left(2\pi k \delta q(0)\right) \right\rangle$$

auf, die wegen $\lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{\varepsilon} \sinh (\varepsilon \langle \delta q(t) \delta q(0) \rangle) = \langle \delta q(t) \delta q(0) \rangle$ ebenfalls linear in $\langle \delta q(t) \delta q(0) \rangle$ sind. Für $n_x = 0$ bzw. $n_x = \frac{1}{2}$, d.h. auf der Mitte der Stufe bzw.

der Stufenkante ergibt sich:

$$\langle \delta n(t) \delta n(0) \rangle = \langle \delta q(t) \delta q(0) \rangle + 4 \sum_{k=1}^{\infty} \eta^k e^{-2\pi^2 k^2 \langle \delta q^2 \rangle} \langle \delta q(t) \delta q(0) \rangle$$

$$+ \sum_{k,m} \frac{\eta^{k+m}}{\pi^2 km} e^{-2\pi^2 (k^2 + m^2) \langle \delta q^2 \rangle} \sinh\left(4\pi^2 km \langle \delta q(t) \delta q(0) \rangle\right), \quad (4.46)$$

wobei η wie folgt definiert ist:

$$\eta = \begin{cases} -1 & : n_{\rm x} = 0\\ 1 & : n_{\rm x} = \frac{1}{2} \end{cases}$$

Gleichung (4.46) bedeutet keineswegs, dass in der Stufenmitte ($\eta = -1$) für kleine Fluktuationen eine lineare Beziehung zwischen $\langle \delta n(t) \delta n(0) \rangle$ und $\langle \delta q^2 \rangle$ besteht, da aus der Poisson–Summenformel

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left(-tn^2 + 2\pi inz\right) = \sqrt{\frac{\pi}{t}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\pi^2}{t}(n-z)^2\right)$$

folgt:

$$\sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k} e^{-2\pi^{2} k^{2} \left\langle \delta q^{2} \right\rangle} = \frac{1}{2} \left[\sqrt{\frac{\pi}{2\pi^{2} \left\langle \delta q^{2} \right\rangle}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\pi^{2}}{2\pi^{2} \left\langle \delta q^{2} \right\rangle} \left(n - \frac{1}{2}\right)^{2}} - 1 \right] \,,$$

d.h. der zweite Term in Gleichung (4.46) geht schneller als jede Potenz von $\langle \delta q^2 \rangle$ gegen $-2 \langle \delta q(t) \delta q(0) \rangle$, während der dritte Ausdruck wegen $\sinh(\varepsilon) \simeq \varepsilon$ für $\varepsilon \ll 1$ schneller als jede Potenz von $\langle \delta q^2 \rangle$ gegen $\langle \delta q(t) \delta q(0) \rangle$ geht. Für kleine Umgebungsladungsfluktuationen wird der Wert der Formel (4.46) folglich exponentiell klein.

4.3.3 Einzel-Elektronen-Pendel

Da die Kennlinie des Einzel-Elektronen-Pendels im Grenzfall langer Kontaktzeiten die Summe der $n(n_x)$ Kennlinien zweier Einzel-Elektronen-Boxen multipliziert mit ef ist, kann das Ergebnis aus Abschnitt (4.3.2) direkt dazu verwendet werden, den Einfluss von Umgebungsladungsfluktuationen auf ein Einzel-Elektronen-Pendel zu beschreiben. Hier soll auch die Gelegenheit genutzt werden, auf den Fall eines asymmetrischen Pendels einzugehen (d.h. $C_{\text{links}} \neq C_{\text{rechts}}$), wobei noch zwischen den Fällen unterschieden werden muss, dass das Verhältnis der beiden Kapazitäten rational bzw. irrational ist. Bei einem rationalen Verhältnis können zumindest manchmal Stufen der Höhe 2ef auftreten (dazu muss das Verhältnis der beiden Kapazitäten gerade $\frac{1+2m}{1+2n}$ mit natürlichen Zahlen n und mbetragen), während bei einem irrationalen Verhältnis immer nur Stufen der Höhe ef vorkommen. Durch Umgebungsladungsfluktuationen wird diese strenge Trennung allerdings wieder aufgehoben, da zwei nahe aneinanderliegende Stufen zu einer verschmiert werden. Für den Strom unter Einfluss der Umgebungsladungsfluktuationen gilt:

$$\langle I \rangle = \frac{e}{RC} \left[(1+c)n_{\rm x} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\pi k} \sin(2\pi k \, n_{\rm x}) \exp\left(-2\pi^2 k^2 \left\langle \delta q^2 \right\rangle\right) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\pi k} \sin(2\pi k \, cn_{\rm x}) \exp\left(-2\pi^2 k^2 \left\langle \delta q^2 \right\rangle\right) \right], \quad (4.47)$$

wobe
i $n_{\rm x} = C_{\rm rechts} V/e$ gilt und ferner c wie folgt definiert ist:

$$c = \frac{C_{\text{links}}}{C_{\text{rechts}}}.$$

In Abbildung 4.8 wird gezeigt, wie typische Messergebnisse für ein Einzel-Elektronen-Pendel im Limes langer Verweildauern und tiefer Temperaturen mit und ohne Umgebungsladungsfluktuationen aussehen könnten

Zum Schluss soll hier noch kurz auf den Einfluss der Umgebungsladungsfluktuationen auf die Genauigkeit des Einzel-Elektronen-Pendels eingegangen werden. Eine experimentell sicher realistische Abschätzung für die Stärke der Umgebungsladungsfluktuationen ist $\Delta q \equiv \sqrt{\langle \delta q^2 \rangle} \simeq 0.1$ (nach wie vor in Einheiten der Elementarladung). Bei einer derartigen Größenordnung der Fluktuationen dominiert hier bei weitem der Einfluss der beiden benachbarten Stufen. In der Stufenmitte gilt für die Fluktuationen $\langle \delta n^2 \rangle$ der Anzahl der Elektronen auf der Insel:

$$\left\langle \delta n^2 \right\rangle \simeq 2 \int_{\frac{1}{2}}^{\frac{3}{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta q} \exp\left(-\frac{x^2}{2\Delta q^2}\right) \mathrm{d}x \approx 1.5 \cdot 10^{-7} \,, \tag{4.48}$$

was bei einer Frequenz von 100 MHz und einer Integrationszeit von 1 s (d.h. $10^4 t_{\text{flukt}}$) führt dies zu einem Fehler im gemessenen Strom von (siehe Anhang E):

$$\frac{\Delta I}{I} \approx \sqrt{\frac{3 \cdot 10^{-7}}{10^4}} \approx 5 \cdot 10^{-6} \,,$$

während um einen Faktor 2 kleinere Fluktuationen Δq (siehe Abbildung 4.8) eine Genauigkeit von bereits

$$\frac{\Delta I}{I} \approx 3 \cdot 10^{-14}$$

ergeben würde, die für Präzisionsexperimente sicherlich ausreicht. Insbesondere darf hier nicht vergessen werden, dass aufgrund der Tatsache, dass es sich hier um eine freitragende Struktur handelt, die Umgebungsladungsfluktuationen etwas geringer ausfallen werden als bei massiven Halbleiterstrukturen (siehe S. 57).



Abbildung 4.8: Der Strom, der in einem Einzel–Elektronen–Pendel mit $C_{\text{links}} \neq C_{\text{rechts}}$ bei tiefen Temperaturen, langen Kontaktzeiten und kleinem g gemessen werden sollte, für ein Verhältnis der Kapazitäten von $c = \frac{1}{2}$, $c = \frac{1}{3}$ und $c = \frac{1}{\pi}$ (rechts). Die linken Bilder wurden ohne Umgebungsladungsfluktuationen berechnet, bei den rechten wurden gaußische Fluktuationen mit $\Delta q = 0.05$ verwendet.

Trotzdem wäre es sinnvoll, bei der Wahl des Materials für einen derartigen Stromstandard außer auf mechanische Eigenschaften insbesondere auch darauf zu achten, wie rauscharm die Probe ist. Es ist sicherlich auch naheliegend, sich für Präzisionsmessungen nicht gerade eine besonders schmale Stufe auszusuchen.

Etwas anders hingegen ist die Situation für den Fall, dass die Stufen nicht flach sind. Wenn die Steigung in der Mitte einer Stufe im Fall eines symmetrischen Pendels (c = 1) aufgrund von Quantenfluktuationen (Kapitel 3) gegeben ist durch $\frac{4}{\pi^2}g$, dann gilt:

$$\left< \delta n^2 \right> \simeq \left(\frac{4}{\pi^2} g \right)^2 \Delta q^2 \,.$$

Da die Quantenfluktuationen die Korrelation des Rauschens zerstören dürften, skalieren die relative Genauigkeit des Stroms wieder mit der Wurzel aus der Anzahl der Schwingungsperioden ($\sqrt{10^8} = 10^4$):

$$\frac{\Delta I}{I} = \frac{4\,\Delta q}{10^4 \pi^2} \,g\,,\tag{4.49}$$

so dass für $\Delta q \approx 0.1$

$$\frac{\Delta I}{I} \approx 4 \cdot 10^{-6} g_{\pm}$$

gilt, was erneut deutlich macht, wie wichtig es ist, in einem Bereich zu arbeiten, in dem $g \ll 1$ gilt.

Bei diesen Abschätzungen wurde davon ausgegangen, dass es sich um die erste Stufe mit einer Stufenhöhe von ef handelt; bei höheren Stufen (mef) erhöht sich sich die Genauigkeit noch um einen Faktor $\frac{1}{\sqrt{m}}$ – zumindest so lange die Verweildauer sehr groß ist.

Resümee

Zunächst wurde ein neues Einzel–Elektronen–Bauelement vorgestellt: das mechanische Einzel–Elektronen–Pendel. Im Rahmen einer einfachen Mastergleichung wurde sowohl analytisch als auch numerisch die Genauigkeit berechnet, mit der ein solches Pendel Strom transportieren kann. Dabei stellte sich heraus, dass sich das Pendel nicht zu schnell bewegen darf, um eine für einen Stromstandard nötige Genauigkeit zu erreichen. Die Strom–Spannungs–Kennlinie entspricht in diesem Grenzfall der Überlagerung der Kennlinien zweier Einzel–Elektronen–Boxen. Die ersten experimentellen Ergebnisse wurden dadurch erklärt, dass die Wechselspannung, die dafür sorgt, dass sich das Pendel bewegt, leider auch als Gate–Spannung auf die Insel wirkt. Bei diesem Teil der Arbeit, der in einem spannenden Wechselspiel zwischen Theorie und Experiment entstanden ist, handelte es sich um rein klassische Rechnungen im Rahmen der orthodoxen Theorie der Coulomb– Blockade, bei denen davon ausgegangen wird, dass sich auf einer metallischen Insel immer eine ganze Anzahl von Elektronen befindet.

Quantenmechanisch wird zwar auch immer eine ganze Anzahl gemessen, es besteht aber immer eine endliche Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich ein Insel-Elektron auf der Zuleitung befindet. Ein Maß dafür, wie weit das Verhalten vom klassischen Verhalten abweicht, ist der dimensionslose Leitwert $g = \frac{R_{\rm K}}{4R_{\rm T}}$. Die Quantenfluktuationen einer Einzel-Elektronen-Box wurden im Rahmen eines effektiven XY-Modells mit Hilfe eines Pfadintegralformalismus störungstheoretisch berechnet. Dazu wurde im Frequenzraum ein Cutoff eingeführt und insbesondere auch physikalisch begründet. Die Ergebnisse konnten auch auf das nanomechanische Einzel-Elektronen-Pendel übertragen werden.

Eine weitere Fehlerquelle auf dem Weg zum Einzel-Elektronen-Stromstandard sind Umgebungsladungsfluktuationen. Hier wurde aufbauend auf einfachen Modellen für den Ursprung dieser Fluktuationen in einer konkreten experimentellen Anordnung eines metallischen Einzel-Elektronen-Transistors (Bouchiat (1997)) eine Theorie zur Berechnung der Auswirkung der Umgebungsladungsfluktuationen auf die Kennlinien von Einzel-Elektronen-Bauelementen entwickelt. Dazu wurde zunächst gezeigt, dass die Fluktuationen für nicht zu kleine Inseln gaußisch sind. Mit realistischen Werten für die Stärke der Fluktuationen konnten die Messkurven grundlegender Experimente zur Coulomb-Blockade im Limes $g \ll 1$ zumindest qualitativ erklärt werden. Als Ergebnis stellte sich heraus, dass Quantenfluktuationen der begrenzende Faktor für die Genauigkeit von nanomechanischen Einzel–Elektronen–Pendeln sind; die derzeitigen Experimente sind leider noch nicht in einem Bereich, in dem Abweichungen vom klassisch erwarteten Verhalten gemessen werden können.

Ein Stromstandard ist aber bei weitem nicht die einzige Anwendungsmöglichkeit von Einzel-Elektronen-Bauelementen. Neben der Anwendung als sehr präzises Messinstrument (von der hier nur implizit beim Vergleich mit experimentellen Daten zur Einzel-Elektronen-Box Gebrauch gemacht wurde, die mit einem Einzel-Elektronen-Transistor gemessen worden sind), ist vor allem der Einsatz in der Informationsverarbeitung – etwa als Speicherelement eines Computers – interessant. Hier wurde untersucht, inwieweit Umgebungsladungsfluktuationen und Quantenfluktuationen bewirken können, dass Zahlen falsch aus einem als Speicher eingesetzten Einzel-Elektronen-Transistor ausgelesen werden. Als Fazit lässt sich sagen, dass der Einsatz als Computer-Speicherelement durch solche Fehlerquellen nicht beeinträchtigt werden wird. Die Fragen, ob Einzel-Elektronen-Transistoren in den dafür erforderlichen Stückzahlen reproduzierbar hergestellt werden können und ob dies tatsächlich mit Raumtemperatur-Coulomb-Blockade-Bauelementen gelingen wird, konnte im Rahmen dieser Arbeit nicht beantwortet werden; an dieser Stelle sind weitere Experimente nötig, die die Temperaturabhängigkeit der Stärke der Fluktuationen bestimmen. Außerdem müssen Einzel-Elektronen-Bauelementen erfolgreich in elektronische Schaltkreise integriert werden.

Damit schließt diese Arbeit in der begründeten Zuversicht, dass die Erklärungen der beobachteten Phänomene wesentlich mehr mit der Realität zu tun haben als bei der Muschel in Thomas Manns *Doktor Faustus*, die im Vorspann zitiert wurde (Mann (1947)). Dennoch trifft Diracs Feststellung 'We wanted the equations which would describe nature and the best we could hope for was usually approximate equations and we would have to reconcile ourselves to an absence of strict logic' (Dirac (1977)), die sich auf die Höhepunkte der Theoretischen Physik bezieht, sicher auch auf Arbeiten zu, die aktuelle experimentelle Ergebnisse auf dem Gebiet der Einzel-Elektronen-Bauelemente erklären.

Anhang A

Symbole und Abkürzungen

β	$\beta \equiv \frac{1}{k_{\rm B}T}$
C	Kapazität
$\delta q(t)$	Umgebungsladungsfluktuationen, $\langle \delta q(t) \rangle = 0$
Δq	Standardabweichung $\Delta q \equiv \sqrt{\langle \delta q^2 \rangle - \langle \delta q \rangle^2}$
e	Betrag der Elementarladung (Elektronenladung $= -e$)
$\varepsilon_{ m F}$	Fermienergie
f	Frequenz
g	$g \equiv \frac{R_{\rm K}}{4R_{\rm T}}$: dimensionsloser Leitwert
h	Planck'sche Konstante
γ	Euler'sche Konstante $\gamma \simeq 0.5772$
Γ	Übergangsrate
$I_{\rm sd}$	Source–Drain–Strom
$k_{\rm B}$	Boltzmann–Konstante
L	$L \equiv \beta U$
n_x	externe Ladung bei der Einzel–Elektronen–Box
$p_n(t)$	Wahrscheinlichkeit, dass n Elektronen zur Zeit t auf der Insel sind
Q_g	Gateladung
$R_{ m K}$	von Klitzing Konstante $R_{\rm K} = \frac{h}{e^2}$
R_{T}	Tunnelwiderstand
$t_{\rm max}$	Zeitpunkt, an dem Auslenkung des Pendels maximal ist.
Т	absolute Temperatur
U	Energieskala bei der Einzel–Elektronen–Box $(U = \frac{e^2}{C})$
V	Spannung
χ	Steigung der Coulomb–Treppe der Einzel–Elektronen–Box bei $n_{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{0}$
(2n-1)!!	Doppelfakultät; $(2n-1)!! \equiv \prod_{i=1}^{n} (2i-1)$

Anhang B

Numerische Verfahren

B.1 Montecarlo Algorithmus

Die Mastergleichung (1.6) auf Seite 15 beschreibt die Zahl der Elektronen auf einer metallischen Insel, die über zwei Tunnelkontakte R und L mit Elektroden verbunden ist. Mit einer Übergangsrate

$$\Gamma^{(+)} = \Gamma_{\rm R}^{(+)} + \Gamma_{\rm L}^{(+)}$$

erhöht sich die Zahl der Elektronen um eins, während sie sich mit der Übergangsrate

$$\Gamma^{(-)} = \Gamma_{\rm R}^{(-)} + \Gamma_{\rm L}^{(-)}$$

um eins erniedrigt. Dies kann durch einen einfachen Montecarlo–Algorithmus simuliert werden, der aus einer mehrfachen Hintereinanderausführung von folgenden drei Schritten besteht:

- 1. Generiere eine Zufallszahl mit $0 \le x \le 1$ (hierfür wurde *ran2* aus Press et al. (1992) verwendet).
- 2. Die Zahl der Elektronen auf der Insel zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ berechnet sich jetzt gemäß:

$$n(t + \Delta t) = \begin{cases} n(t) + 1 & : x > 1 - \Delta t \, \Gamma^{(+)} \\ n(t) & : 1 - \Delta t \, \Gamma^{(+)} \ge x \ge \Delta t \, \Gamma^{(-)} \\ n(t) - 1 & : \Delta t \, \Gamma^{(-)} > x \end{cases}$$
(B.1)

3. Gleichzeitig ändert sich die Zahl der Elektronen, die die Insel durch die rechte Elektrode verlassen haben, wie folgt:

$$N_{\rm R}(t + \Delta t) = \begin{cases} N_{\rm R}(t) - 1 & : x > 1 - \Delta t \, \Gamma_{\rm R}^{(+)} \\ N_{\rm R}(t) & : 1 - \Delta t \, \Gamma_{\rm R}^{(+)} \ge x \ge \Delta t \, \Gamma_{\rm R}^{(-)} \\ N_{\rm R}(t) + 1 & : \Delta t \, \Gamma_{\rm R}^{(-)} > x \end{cases}$$
(B.2)

Dabei muss Δt so klein gewählt werden, dass

$$1 - \Delta t \, \Gamma^{(+)} \gg \Delta t \, \Gamma^{(-)}$$

gilt. Andererseits sollte Δt auch nicht beliebig klein gewählt werden, da die Genauigkeit numerisch nicht beliebig groß ist und Simulationen sonst auch zu lange dauern würden. Während der Zeit $t_{\rm ges}$ fließt dabei der Strom

$$I = e \frac{N_{\rm R}}{t_{\rm ges}} \,.$$

Je nach Anwendung kann mit einem festen Δt (Einzel-Elektronen-Transistor) oder mit variablem Δt (Einzel-Elektronen-Pendel) gearbeitet werden.

Bei dem hier beschriebenen Algorithmus handelt es sich um ein Standardverfahren zum Lösen derartiger Master–Gleichungen, das schon von vielen Gruppen angewendet wurde (z.B. Mullen et al. (1988) und Wilkins et al. (1989)).

B.2 1/f Rauschen

Zur Berechnung des gaußischen 1/f-Rauschens wurde ein Algorithmus von Romero und Sancho (1999) für gaußische Zufallszahlen mit der zeitlichen Korrelation $\gamma(t)$ verwendet. Die so erzeugten Zufallszahlen sollen drei Zielen genügen:

- 1. Der Mittelwert muss verschwinden $\langle \eta(t) \rangle = 0$,
- 2. sie müssen gaußverteilt sein und
- 3. es muss $\langle \eta(t)\eta(t')\rangle = \gamma(|t-t'|)$ gelten.

Es sei hier vorausgesetzt, dass die Fouriertransformierte der Funktion $\gamma(t)$ existiert:

$$\gamma(\omega) = \int \mathrm{d}t \, e^{-i\omega t} \gamma(t)$$

Im Fourierraum muss die Korrelation

$$\langle \eta(\omega)\eta(\omega')\rangle = 2\pi\delta(\omega+\omega')\gamma(\omega)$$

erfüllt sein $(\eta(\omega))$ ist die Fouriertransformierte von $\eta(t)$). Als nächstes wird die Zeit diskretisiert. Sie wird in $N = 2^n$ Intervalle der Länge Δt unterteilt, wobei das Zeitintervall Δt kleiner als alle anderen charakteristischen Zeiten sein sollte.

Im diskreten Fourierraum lautet die Korrelation

$$\left\langle \eta(\omega_{\mu})\eta(\omega_{\mu'}')\right\rangle = N\Delta t \delta_{\mu+\mu',0}\gamma(\omega_{\mu})$$

Die $\eta(\omega_{\mu})$ können nun gemäß

$$\eta(\omega_{\mu}) = \begin{cases} \sqrt{N\Delta t}\gamma(\omega_{\mu}) & \alpha(\omega_{\mu}) & : \mu = 0\dots N - 1\\ \eta(\omega_{0}) & : \mu = N \end{cases}, \quad \omega_{\mu} = \frac{2\pi\mu}{N\Delta t}$$
(B.3)

berechnet werden, wobei die $\alpha(\omega_{\mu})$ (komplexe) gaußische Zufallszahlen mit Mittel 0 und der Korrelation

$$\langle \alpha_{\mu}\alpha_{\nu}\rangle = \delta_{\mu+\nu,0} \tag{B.4}$$

sind. Bei einem System der Größe N genügen die Fourierkomponenten einer reellen periodischen Folge der Bedingung:

$$\alpha_{\mu} = \alpha_{\mu+pN} \qquad \qquad \alpha_{\mu} = \alpha_{-\mu}^*;$$

wobei p eine natürliche Zahl ist. Da $\alpha_{\mu=0}$ reell ist und $\operatorname{Im} \alpha_{\mu>0} = -\operatorname{Im} \alpha_{\mu<0}$ gilt, können die komplexen Zufallszahlen (B.4) wie folgt konstruiert werden:

$$\alpha_{\mu} = a_{\mu} + ib_{\mu} \,, \qquad \qquad b_0 = 0 \,,$$

mit reellen gaußischen Zufallszahlen mit Mittel 0 und der Varianz

$$\left\langle a_{\mu}^{2} \right\rangle = \left\langle b_{\mu}^{2} \right\rangle = \frac{1}{2}, \quad \mu \neq 0, \qquad \left\langle a_{0}^{2} \right\rangle = 1.$$

Aus den Zufallszahlen $\gamma(\omega_{\mu})$ wurden die gesuchten Zufallszahlen $\gamma(t_i)$ mit Hilfe des *Fast Fourier Transform* Algorithmus *four1* aus Press et al. (1992) bestimmt; zur Erzeugung der unkorrelierten gaußischen Zufallszahlen war die Funktion *gasdev* aus Press et al. (1992) verwendet worden. Für $\gamma(\omega)$ wurde

$$\gamma(\omega) \propto \begin{cases} \frac{1}{\omega + \omega_0} & : \omega \le \omega_c \\ 0 & : \omega > \omega_c \end{cases}$$
(B.5)

gewählt; die Größe von N war durch den Arbeitsspeicher der Computer beschränkt, da alle Zufallszahlen auf einmal berechnet werden mussten $(N = 10^{24})$.

Um zu überprüfen, ob das so gewonnene Rauschen auch tatsächlich die gewünschten Eigenschaften hat, wurden die 3 Punkte am Anfang dieses Abschnitts getestet. Dabei stellte sich heraus, dass es insbesondere beim dritten Punkt

$$\gamma(t_i) = \frac{\sum_{j=0}^{N_{\max}} \eta(t_j + i\Delta t) \eta(t_j)}{N_{\max} + 1}$$
(B.6)

Probleme gab. Nachdem – anders als von Romero und Sancho (1999) empfohlen – für $N_{\text{max}} = N$ gewählt wurde (dabei musste wegen der Periodizität des Rauschens $i \ll N$ gelten) und ferner auf der linken Seite von Gleichung (B.5) ω durch $\omega/\sqrt{2}$ ersetzt wurde, ergab sich zumindest für kleine Zeiten das erwartete Verhalten der Korrelationsfunktion (Abbildung B.1). Die Probleme können zum Teil darauf zurückgeführt werden, dass bei der Ausführung der Summe in (B.6) implizit eine Fouriertransformation durchgeführt wird, was numerisch normalerweise unter allen Umständen verhindert werden sollte (Press et al. (1992)).



Abbildung B.1: Die gaußischen Zufallszahlen haben die gewünschte Korrelation.

Anhang C Ergänzungen zu Kapitel 2

An dieser Stelle sollten die in Kapitel 2 verwendeten analytischen Formeln im Limes T = 0 bei endlicher Verweildauer nicht fehlen. Dazu wurde zunächst Gleichung (2.11) mit *Maple* gelöst und daraus mit (2.9) der Mittelwert $\langle N \rangle$ sowie die Größe $\langle N^2 \rangle$ der transferierten Elektronen berechnet.

Solange nur 0, ± 1 Elektronen auf der Insel sein können, sind die Formeln noch nicht allzu kompliziert. Ausgehend von

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}p(1,t) &= -\frac{1}{\tau}\left(\frac{3}{2}+\delta\right)p(1,t) \\ \frac{d}{dt}p(0,t) &= -\frac{1}{\tau}\left(\frac{1}{2}+\delta\right)p(0,t) + \frac{1}{\tau}\left(\frac{3}{2}+\delta\right)p(1,t) \\ \frac{d}{dt}p(-1,t) &= \frac{1}{\tau}\left(\frac{1}{2}+\delta\right)p(0,t) \end{aligned}$$

mit $-\frac{1}{2} \le \delta \le \frac{1}{2}$ erhält man:

$$\langle N \rangle = 4 \frac{\left(1 - e^{-(1+2\,\delta)\frac{t_0}{\tau}}\right) \left(1 - e^{-(3+2\,\delta)\frac{t_0}{\tau}}\right)}{2 - 2\,e^{-4\frac{t_0}{\tau}(1+\delta)} + e^{-(1+2\,\delta)\frac{t_0}{\tau}} + 2\,e^{-(1+2\,\delta)\frac{t_0}{\tau}}\delta - 2\,e^{-(3+2\,\delta)\frac{t_0}{\tau}}\delta - e^{-(3+2\,\delta)\frac{t_0}{\tau}}}$$

(was für $\delta = 0$ in (2.15) übergeht) und

$$\left\langle N^2 \right\rangle = 2 \, \frac{\left(1 - e^{-(1+2\,\delta)\frac{t_0}{\tau}}\right) \left(2 \, e^{-(3+2\,\delta)\frac{t_0}{\tau}} \delta - 2 \, e^{-(1+2\,\delta)\frac{t_0}{\tau}} \delta - e^{-(3+2\,\delta)\frac{t_0}{\tau}} - 3 \, e^{-(1+2\,\delta)\frac{t_0}{\tau}} + 4\right)}{2 - 2 \, e^{-4} \frac{t_0}{\tau} (1+\delta) + e^{-(1+2\,\delta)\frac{t_0}{\tau}} + 2 \, e^{-(1+2\,\delta)\frac{t_0}{\tau}} \delta - 2 \, e^{-(3+2\,\delta)\frac{t_0}{\tau}} \delta - e^{-(3+2\,\delta)\frac{t_0}{\tau}} \delta - e^{-(3+2\,\delta)\frac{t_0}{\tau}} \delta - e^{-(3+2\,\delta)\frac{t_0}{\tau}} + 4\right)} \, .$$

Sobald 0, ± 1 und ± 2 Elektronen auf der Insel sein dürfen, werden die Formeln sehr schnell kompliziert:

$$\begin{split} \langle N \rangle = \\ &-8 \left\{ 42 \, e^{-a(7+2\,\delta)} \delta + 16 \, \delta^3 e^{-4\,a(4+\delta)} + 186 \, \delta \, e^{-3\,a(5+2\,\delta)} - 96 \, e^{-4\,a} + 51 \, e^{-a(7+2\,\delta)} + 8 \, \delta^3 e^{-a(19+6\,\delta)} \\ &-72 \, e^{-4\,a(\delta+2)} \delta^2 + 92 \, \delta \, e^{-4\,a(4+\delta)} - 186 \, \delta \, e^{-a(9+2\,\delta)} + 75 \, e^{-a(5+2\,\delta)} - 8 \, \delta^3 e^{-a(6\,\delta+13)} - 132 \, \delta^2 e^{-a(9+2\,\delta)} \\ &+144 \, \delta^2 e^{-2\,a(5+2\,\delta)} + 136 \, \delta \, e^{-2\,a(5+2\,\delta)} + 94 \, \delta \, e^{-a(11+2\,\delta)} - 144 \, \delta^2 e^{-2\,a(7+2\,\delta)} + 132 \, \delta^2 e^{-3\,a(5+2\,\delta)} \\ &+24 \, \delta^3 e^{-3\,a(5+2\,\delta)} - 24 \, \delta^3 e^{-a(9+2\,\delta)} + 32 \, \delta^3 e^{-2\,a(5+2\,\delta)} - 136 \, \delta \, e^{-2\,a(7+2\,\delta)} - 94 \, \delta \, e^{-a(6\,\delta+13)} \\ &-16 \, e^{-4\,a(\delta+2)} \delta^3 + 12 \, \delta^2 e^{-a(19+6\,\delta)} - 30 \, e^{-4\,a(\delta+2)} - 33 \, e^{-3\,a(5+2\,\delta)} - 92 \, e^{-4\,a(\delta+2)} \delta + 33 \, e^{-a(1+2\,\delta)} \\ &-33 \, e^{-a(6\,\delta+13)} - 12 \, e^{-2\,a(5+2\,\delta)} + 33 \, e^{-a(9+2\,\delta)} - 33 \, e^{-3\,a(5+2\,\delta)} + 30 \, e^{-4\,a(4+\delta)} + 12 \, e^{-2\,a(7+2\,\delta)} \\ &-24 \, \delta^3 e^{-a(17+6\,\delta)} - 51 \, e^{-a(17+6\,\delta)} + 84 \, e^{-a(7+2\,\delta)} \, \delta^2 + 60 \, \delta^2 e^{-a(11+2\,\delta)} + 72 \, \delta^2 e^{-4\,a(4+\delta)} \\ &-24 \, \delta^3 e^{-a(17+2\,\delta)} \delta^3 - 75 \, e^{-a(19+6\,\delta)} + 96 \, e^{-4\,a(5+2\,\delta)} - 84 \, \delta^2 e^{-a(17+6\,\delta)} - 12 \, e^{-a(5+2\,\delta)} \, \delta^2 \right\} / \\ &-8 \, e^{-a(5+2\,\delta)} \, \delta^3 + 24 \, e^{-a(7+2\,\delta)} \, \delta^3 - 75 \, e^{-a(19+6\,\delta)} + 96 \, e^{-a(5+2\,\delta)} \, \delta - 42 \, \delta \, e^{-a(17+6\,\delta)} - 12 \, e^{-a(5+2\,\delta)} \, \delta^2 \right\} / \\ &-8 \, \delta^3 e^{-a(11+2\,\delta)} - 60 \, \delta^2 e^{-a(6\,\delta+13)} + 50 \, e^{-a(5+2\,\delta)} \, \delta - 42 \, \delta \, e^{-a(17+6\,\delta)} - 12 \, e^{-a(5+2\,\delta)} \, \delta^2 \right\} / \\ &-360 \, e^{-a(7+2\,\delta)} \, \delta + 360 \, \delta \, e^{-3\,a(5+2\,\delta)} + 192 \, e^{-4\,a} + 108 \, e^{-a(7+2\,\delta)} \, + 32 \, \delta^3 e^{-a(19+6\,\delta)} \\ &+ 432 \, \delta^2 e^{-a(9+2\,\delta)} - 144 \, \delta^2 e^{-a(6\,\delta+13)} + 608 \, \delta^2 e^{-2\,a(5+2\,\delta)} + 144 \, \delta \, e^{-2\,a(7+2\,\delta)} + 144 \, \delta \, e^{-2\,a(7+2\,\delta)} + 144 \, \delta^2 e^{-a(10+2\,\delta)} + 168 \, \delta^3 e^{-3\,a(5+2\,\delta)} \\ &+ 608 \, e^{2\,e^{-2\,a(7+2\,\delta)}} + 164 \, \delta^4 e^{-2\,a(7+2\,\delta)} - 184 \, \delta \, e^{-a(6\,\delta+13)} - 96 \, e^{-4\,a(\delta+2)} \, \delta^3 - 360 \, \delta \, e^{-4\,a(\delta+2)} \, \delta^3 \\ &- 600 \, e^{-a(6\,\delta+13)} - 1$$

wobe
i $\frac{t_0}{\tau}$ hier mit aabgekürzt wurde.

$$\begin{split} \left< N^2 \right> = \\ & \left\{ -1152 \, e^{-4 \, a(5+2 \, \delta)} - 1088 \, \delta^3 e^{-a(6 \, \delta+11)} + 160 \, e^{-4 \, a(\delta+2)} \delta^5 - 1680 \, e^{-a(6 \, \delta+11)} - 4272 \, e^{-a(7+2 \, \delta)} \delta^5 + 176 \, \delta^3 e^{-4 \, a(4+\delta)} + 1536 \, \delta \, e^{-3 \, a(5+2 \, \delta)} - 3072 \, e^{-4 \, a} - 1575 \, e^{-2 \, a(3+2 \, \delta)} - 368 \, e^{-2 \, a(3+2 \, \delta)} \delta^4 + 1152 \, e^{-2 \, a(4 \, \delta+0)} + 792 \, e^{-a(7+2 \, \delta)} - 448 \, \delta^3 e^{-a(19+6 \, \delta)} + 6312 \, e^{-a \, a(9+2 \, \delta)} - 368 \, e^{-2 \, a(3+2 \, \delta)} \delta^3 + 1258 \, \delta \, e^{-4 \, a(4+0)} - 128 \, e^{-a(6 \, \delta+11)} \delta^4 + 320 \, \delta^5 e^{-4 \, a(3+\delta)} - 3792 \, \delta \, e^{-a(9+2 \, \delta)} - 1648 \, e^{-2 \, a(3+2 \, \delta)} \delta^3 + 4920 \, e^{-a(5+2 \, \delta)} + 3712 \, \delta^3 e^{-a(6 \, \delta+13)} + 512 \, e^{-a(6 \, \delta+13)} \delta^4 + 32 \, \delta^5 e^{-4 \, a(4+\delta)} - 128 \, \delta^4 \, e^{-a(19+6 \, \delta)} - 5648 \, \delta^2 e^{-4 \, a(3+\delta)} - 3952 \, \delta \, e^{-a(6 \, \delta+11)} - 2656 \, \delta^4 e^{-2 \, a(5+2 \, \delta)} - 1440 \, \delta^2 e^{-a(9+2 \, \delta)} + 8128 \, \delta^2 e^{-a(6 \, \delta+13)} + 976 \, \delta^2 e^{-2 \, a(5+2 \, \delta)} - 322 \, e^{-2 \, a(3+2 \, \delta)} \delta^5 - 11484 \, \delta \, e^{-4 \, a(3+\delta)} - 160 \, e^{-2 \, a(7+2 \, \delta)} \delta^5 - 3232 \, e^{-a(6 \, \delta+11)} \delta^2 + 3056 \, \delta \, e^{-a(11+2 \, \delta)} + 1080 \, \delta^2 e^{-2 \, a(7+2 \, \delta)} - 816 \, \delta^4 e^{-2 \, a(7+2 \, \delta)} \delta^5 - 122 \, \delta^4 \, e^{-a(17+6 \, \delta)} - 6528 \, \delta^2 e^{-3 \, a(5+2 \, \delta)} + 1350 \, \delta \, e^{-2 \, a(7+2 \, \delta)} + 5984 \, \delta \, e^{-a(6 \, \delta+13)} + 5168 \, e^{-4 \, a(\delta+2)} \delta^3 + 1584 \, e^{-4 \, a(\delta+2)} \, \delta^3 - 320 \, e^{-2 \, a(5+2 \, \delta)} + 1350 \, \delta \, e^{-2 \, a(7+2 \, \delta)} + 5984 \, \delta \, e^{-a(6 \, \delta+13)} + 5168 \, e^{-4 \, a(\delta+2)} \delta^3 + 1584 \, e^{-4 \, a(\delta+2)} \, \delta^3 - 320 \, e^{-2 \, a(5+2 \, \delta)} - 1482 \, e^{-4 \, a(\delta+2)} + 2848 \, \delta^3 e^{-4 \, a(3+\delta)} - 752 \, \delta^3 e^{-2 \, a(2+2 \, \delta)} + 1386 \, e^{-4 \, a(\delta+2)} \, \delta^{-3} - 230 \, e^{-2 \, a(5+2 \, \delta)} \, \delta^5 + 1224 \, e^{-a(17+2 \, \delta)} + 624 \, e^{-a(6 \, \delta+13)} + 5168 \, e^{-4 \, a(\delta+2)} \, \delta^3 + 192 \, e^{-a(7+2 \, \delta)} \, \delta^3 + 192 \, \delta^2 \, e^{-a(17+6 \, \delta$$

 $\begin{aligned} &-32\,\delta^{3}e^{-a(5+2\delta)} + 200\,e^{-4a(5+2)}\delta^{2} + 168\,\delta\,e^{-4a(4+\delta)} - 360\,\delta\,e^{-a(5+2\delta)} - 60\,e^{-a(5+2\delta)} \\ &+32\,\delta^{3}e^{-a(6\,\delta+13)} + 816\,\delta^{2}e^{-4\,a(3+\delta)} - 64\,\delta^{4}e^{-2\,a(5+2\,\delta)} - 432\,\delta^{2}e^{-a(9+2\,\delta)} + 144\,\delta^{2}e^{-a(6\,\delta+13)} \\ &-608\,\delta^{2}e^{-2\,a(5+2\,\delta)} - 144\,\delta\,e^{-4\,a(3+\delta)} - 96\,\delta\,e^{-2\,a(5+2\,\delta)} + 184\,\delta\,e^{-a(11+2\,\delta)} - 608\,\delta^{2}e^{-2\,a(7+2\,\delta)} \\ &-64\,\delta^{4}e^{-2\,a(7+2\,\delta)} - 432\,\delta^{2}e^{-3\,a(5+2\,\delta)} + 32\,\delta^{3}e^{-a(11+2\,\delta)} - 96\,\delta^{3}e^{-3\,a(5+2\,\delta)} - 96\,\delta^{3}e^{-a(9+2\,\delta)} \\ &-384\,\delta^{3}e^{-2\,a(5+2\,\delta)} - 96\,\delta\,e^{-2\,a(7+2\,\delta)} + 184\,\delta\,e^{-a(6\,\delta+13)} + 96\,e^{-4\,a(\delta+2)}\delta^{3} + 16\,e^{-4\,a(\delta+2)}\delta^{4} \\ &-144\,\delta^{2}e^{-a(19+6\,\delta)} + 45\,e^{-4\,a(\delta+2)} + 576\,\delta^{3}e^{-4\,a(3+\delta)} - 384\,\delta^{3}e^{-2\,a(7+2\,\delta)} + 168\,e^{-4\,a(\delta+2)}\delta^{4} \\ &+60\,e^{-a(11+2\,\delta)} + 60\,e^{-a(6\,\delta+13)} + 174\,e^{-4\,a(3+\delta)} + 60\,e^{-2\,a(5+2\,\delta)} + 108\,e^{-a(9+2\,\delta)}\delta^{2} \\ &+108\,e^{-3\,a(5+2\,\delta)} + 96\,\delta^{4}e^{-4\,a(3+\delta)} + 45\,e^{-4\,a(4+\delta)} + 60\,e^{-2\,a(7+2\,\delta)} - 144\,e^{-a(5+2\,\delta)}\delta^{2} \\ &+96\,\delta^{3}e^{-a(17+6\,\delta)} - 108\,e^{-a(17+6\,\delta)} + 432\,e^{-a(7+2\,\delta)}\delta^{2} + 144\,\delta^{2}e^{-a(11+2\,\delta)} + 200\,\delta^{2}e^{-4\,a(4+\delta)} \\ &-32\,e^{-a(5+2\,\delta)}\delta^{3} + 96\,e^{-a(7+2\,\delta)}\delta^{3} - 60\,e^{-a(19+6\,\delta)} - 192\,e^{-4\,a(5+2\,\delta)}\delta + 360\,\delta\,e^{-a(17+6\,\delta)} \\ &+432\,\delta^{2}e^{-a(17+6\,\delta)} - 184\,\delta\,e^{-a(19+6\,\delta)} - 184\,e^{-a(5+2\,\delta)}\delta + 360\,\delta\,e^{-a(17+6\,\delta)} \end{aligned}$

89

Anhang D

Zweite Ordnung Störungstheorie

Zur Berechnung der zweiten Ordnung in g muss zunächst das Integral

$$\left\langle S_{1}^{2} \right\rangle_{0} = \frac{1}{g^{2}} \int \mathrm{d}x_{1} \int \mathrm{d}x_{2} \int \mathrm{d}x_{3} \int \mathrm{d}x_{4} \,\alpha \left(x_{1} - x_{2}\right) \alpha \left(x_{3} - x_{4}\right)$$

$$\left\langle \left[1 - \cos\left(\theta_{1} - \theta_{2}\right)\right] \left[1 - \cos\left(\theta_{3} - \theta_{4}\right)\right] \right\rangle$$
(D.1)

mit $\theta_i \equiv \theta(x_i)$ gelöst werden; die Rechnungen bis zur Temperaturabhängigkeit folgen wieder Hofstetter (1997). Da Terme der Form $\langle \cos(\theta_1 - \theta_2) \rangle_0$ schon aus Kapitel 3 bekannt sind, muss noch der Ausdruck

$$\left\langle \cos\left(\theta_{1}-\theta_{2}\right)\cos\left(\theta_{3}-\theta_{4}\right)\right\rangle_{0} = \frac{1}{2}\left\langle \cos\left(\theta_{1}-\theta_{2}-\theta_{3}+\theta_{4}\right)+\cos\left(\theta_{1}-\theta_{2}+\theta_{3}-\theta_{4}\right)\right\rangle_{0}$$

berechnet werden. Analog zu Gleichung (3.17) gilt

$$\langle \cos \left(\theta_{1} - \theta_{2} - \theta_{3} + \theta_{4} \right) \rangle_{0} =$$

$$\frac{\sqrt{2\pi}}{\mathcal{Z}_{0}\sqrt{L}} \sum_{m} e^{2\pi i m n_{x} - \frac{(2\pi m)^{2}}{2L}} \cos \left(\frac{2\pi m}{L} (x_{1} - x_{2} - x_{3} + x_{4})\right) \left\langle \cos \left(\phi_{1} - \phi_{2} - \phi_{3} + \phi_{4}\right) \right\rangle_{\phi} .$$

$$(D.2)$$

Die ϕ -Mittelung wird wieder bezüglich der quadratischen Wirkung (3.16) durchgeführt. Nach dem Wick-Theorem gilt folglich

$$\langle \cos(\phi_1 - \phi_2 - \phi_3 + \phi_4) \rangle = \exp\left[-\frac{1}{2} \left\langle (\phi_1 - \phi_2 - \phi_3 + \phi_4)^2 \right\rangle_{\phi} \right].$$

Analog zu Kapitel 3 ergibt sich:

$$\left\langle \left(\phi_{1}-\phi_{2}-\phi_{3}+\phi_{4}\right)^{2}\right\rangle_{\phi} = (D.3)$$

$$\left(|x_{1}-x_{2}|+|x_{3}-x_{4}|+|x_{1}-x_{3}|+|x_{2}-x_{4}|-|x_{1}-x_{4}|-|x_{2}-x_{3}|\right)$$

$$-\frac{1}{L}\left(x_{1}-x_{2}-x_{3}+x_{4}\right)^{2}.$$

Für den windungszahlabhängigen Anteil von $({\rm D.2})$ wird zunächst wieder die Poisson–Summenformel verwendet

$$\frac{\sqrt{2\pi}}{\mathcal{Z}_0\sqrt{L}} \sum_m e^{2\pi i m n_x - \frac{(2\pi m)^2}{2L}} \cos\left(\frac{2\pi m}{L}(x_1 - x_2 - x_3 + x_4)\right) =$$

$$\frac{1}{2\mathcal{Z}_0} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[e^{-\frac{L}{2}\left(n_x - \frac{x_1 - x_2 - x_3 + x_4}{L} - n\right)^2} + e^{-\frac{L}{2}\left(n_x + \frac{x_1 - x_2 - x_3 + x_4}{L} - n\right)^2} \right].$$
(D.4)

Für große L werden wieder alle Terme mit $n \neq 0$ exponentiell unterdrückt. Es gilt:

$$\left\langle \cos\left(\theta_{1} - \theta_{2} - \theta_{3} + \theta_{4}\right) \right\rangle_{0} =$$

$$\frac{1}{2} \left(e^{n_{x}|x_{1} - x_{2} - x_{3} + x_{4}|} + e^{-n_{x}|x_{1} - x_{2} - x_{3} + x_{4}|} \right) e^{-\frac{(x_{1} - x_{2} - x_{3} + x_{4})}{2L}} e^{-\frac{1}{2} \left\langle (\phi_{1} - \phi_{2} - \phi_{3} + \phi_{4})^{2} \right\rangle_{\phi}}$$

$$(D.5)$$

bzw. mit Gleichung (D.3)

$$\langle \cos\left(\theta_1 - \theta_2 - \theta_3 + \theta_4\right) \rangle_0 =$$

$$\frac{1}{2} \left(e^{n_x |x_1 - x_2 - x_3 + x_4|} + e^{-n_x |x_1 - x_2 - x_3 + x_4|} \right) e^{-\frac{1}{2} (|x_1 - x_2| + |x_3 - x_4| + |x_1 - x_3| + |x_2 - x_4| - |x_1 - x_4| - |x_2 - x_3|)} .$$

Die Berechnung von $\langle \cos(\theta_1 - \theta_2 + \theta_3 - \theta_4) \rangle_0$ erfolgt analog. Zur Vereinfachung der Notation wird noch $x_i \to 2x_i$ skaliert. Damit wird (D.1) zu

$$\begin{split} \left\langle S_{1}^{2} \right\rangle_{0} &= \frac{1}{g^{2}} \int_{-L/4}^{L/4} \mathrm{d}x_{1} \int_{-L/4}^{L/4} \mathrm{d}x_{2} \int_{-L/4}^{L/4} \mathrm{d}x_{3} \int_{-L/4}^{L/4} \mathrm{d}x_{4} \,\alpha \left(x_{1} - x_{2}\right) \alpha \left(x_{3} - x_{4}\right) \\ &\times \left[1 - \frac{1}{2} \left(e^{-|x_{1} - x_{2}|(1 + 2n_{x})} + e^{-|x_{1} - x_{2}|(1 - 2n_{x})} \right) - \frac{1}{2} \left(e^{-|x_{3} - x_{4}|(1 + 2n_{x})} + e^{-|x_{3} - x_{4}|(1 - 2n_{x})} \right) \right. \\ &+ \frac{1}{4} e^{-|x_{1} - x_{2}| - |x_{3} - x_{4}| - |x_{1} - x_{3}| - |x_{2} - x_{4}| + |x_{1} - x_{4}| + |x_{2} - x_{3}|} \left(e^{-2n_{x}|x_{1} - x_{2} - x_{3} + x_{4}|} - e^{2n_{x}|x_{1} - x_{2} - x_{3} + x_{4}|} \right) \\ &+ \frac{1}{4} e^{-|x_{1} - x_{2}| - |x_{3} - x_{4}| - |x_{1} - x_{4}| - |x_{2} - x_{3}| + |x_{1} - x_{3}| + |x_{2} - x_{4}|} \left(e^{-2n_{x}|x_{1} - x_{2} - x_{4} + x_{3}|} - e^{2n_{x}|x_{1} - x_{2} - x_{4} + x_{3}|} \right) \right] \end{split}$$

An dieser Stelle bietet sich wieder die Einführung von Relativkoordinaten

$$x \equiv x_1 - x_2$$
, $y \equiv x_3 - x_4$, $z \equiv x_1 - x_3$

sowie einer Schwerpunktskoordinaten an. Die Jakobi–Determinante dieser Transformation ist eins; die Schwerpunktsintegration ergibt einen Faktor L/2.

$$\begin{split} \left\langle S_{1}^{2} \right\rangle_{0} &= \frac{L}{2g^{2}} \int_{-L/4}^{L/4} \mathrm{d}x \int_{-L/4}^{L/4} \mathrm{d}y \int_{-L/4}^{L/4} \mathrm{d}z \, \alpha(x) \alpha(y) \\ &\times \left[1 - \frac{1}{2} \left(e^{-|x|(1+2n_{x})} + e^{-|x|(1-2n_{x})} \right) - \frac{1}{2} \left(e^{-|y|(1+2n_{x})} + e^{-|y|(1-2n_{x})} \right) \right. \\ &\left. + \frac{1}{4} e^{-|x| - |y| - |z| - |-x + y + z| + |y + z| + |-x + z|} \left(e^{-2n_{x}|x - y|} - e^{2n_{x}|x - y|} \right) \right. \\ &\left. + \frac{1}{4} e^{-|x| - |y| - |y + z| - |-x + z| + |z| + |-x + y + z|} \left(e^{-2n_{x}|x + y|} - e^{2n_{x}|x + y|} \right) \right] \end{split}$$

Nach der Kumulantenentwicklung

$$\ln \mathcal{Z} = \ln \mathcal{Z}_0 - g \left\langle S_1 \right\rangle_0 + \frac{g^2}{2} \left(\left\langle S_1^2 \right\rangle_0 - \left\langle S_1 \right\rangle_0^2 \right)$$

muss von $\left< S_1^2 \right>_0$ noch der Term

$$\left\langle S_1^2 \right\rangle_0 = \frac{L^2}{4g^2} \int_{-L/4}^{L/4} \mathrm{d}x \int_{-L/4}^{L/4} \mathrm{d}y \,\alpha(x) \alpha(y) \left(1 - \frac{1}{2} \left(e^{-|x|(1+2n_x)} + e^{-|x|(1-2n_x)} \right) \right) \\ \times \left(1 - \frac{1}{2} \left(e^{-|y|(1+2n_x)} + e^{-|y|(1-2n_x)} \right) \right)$$

subtrahiert werden. Es gilt

$$\left\langle S_{1}^{2} \right\rangle_{0} - \left\langle S_{1} \right\rangle_{0}^{2} = \frac{L}{2} \int_{-L/4}^{L/4} \mathrm{d}y \int_{-L/4}^{L/4} \mathrm{d}z \int_{-L/4}^{L/4} \mathrm{d}x \frac{\alpha(x)\alpha(y)}{g^{2}}$$
(D.6)

$$\times \left[-\frac{1}{4} \left(e^{-|x|(1+2n_{x})} + e^{-|x|(1-2n_{x})} \right) \left(e^{-|y|(1+2n_{x})} + e^{-|y|(1-2n_{x})} \right) \right.$$
$$+ \frac{1}{4} e^{-|x| - |z| + |y+z| + |z-x| - |-x+z+y| - |y|} \left(e^{-|x-y|2n_{x}} + e^{|x-y|2n_{x}} \right) \\+ \frac{1}{4} e^{-|x| - |z| + |z-y| + |z-x| - |-x+z+y| - |y|} \left(e^{-|x+y|2n_{x}} + e^{|x+y|2n_{x}} \right) \right] .$$

Der Term der Plateausteigung in zweiter Ordnung in g

$$\chi^{(2)} = \left. \frac{g^2}{2L} \frac{\partial^2}{\partial n_x^2} \left(\left\langle S_1^2 \right\rangle_0 - \left\langle S_1 \right\rangle_0^2 \right) \right|_{n_x = 0}$$

lautet folglich für große L:

$$\chi^{(2)} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz \,\alpha(x)\alpha(y) \, e^{-|x|-|y|} \left[-2\left(x^2 + y^2\right) + (x - y)^2 e^{-|z|+|y+z|+|z-x|-|-x+z+y|} + (x + y)^2 e^{-|z|+|z-y|+|z-x|-|-x+z-y|} \right]$$
(D.7)

 mit

$$\alpha(x)\alpha(y) = g^2 \left[\frac{1}{\pi^4 x^2 y^2} + \frac{1}{3\pi^2 L^2} \left(\frac{1}{x^2} + \frac{1}{y^2} \right) + \frac{1}{9L^4} + \frac{1}{15L^4} \left(\frac{x^2}{y^2} + \frac{y^2}{x^2} \right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L^6} \right) \right]$$

Teilweise numerische Integration ergab für den L-unabhängigen Term (Hofstetter und Zwerger (1997)) in Übereinstimmung mit Grabert (1994):

$$\chi^{(2)}(L\!=\!\infty) = -0.05201077\,g^2$$

Die führenden Terme in L^{-1} konnten mit Mapleanalytisch berechnet werden. Dazu wurde das Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}z f(x, y, z)$$

zunächst in die Form

$$\int_0^\infty dx \int_0^\infty dy \int_0^\infty dz \ [f(x, y, z) + f(-x, y, z) + f(x, -y, z) + f(-x, -y, z) + f(x, -y, -z) + f(-x, -y, -z)] + f(x, -y, -z) + f(-x, -y, -z)]$$

gebracht. Außerdem wurde verwendet, dass der Integrand ohne den Term $\alpha(x)\alpha(y)$ symmetrisch bezüglich Vertauschungen von x und y ist. Bei den vier Teilintegralen

$$I_1 = \int_0^\infty dx \int_0^{x/2} dy \int_0^\infty dz \dots$$

$$I_2 = \int_0^\infty dx \int_{x/2}^x dy \int_0^\infty dz \dots$$

$$I_3 = \int_0^\infty dx \int_x^{2x} dy \int_0^\infty dz \dots$$

$$I_4 = \int_0^\infty dx \int_{2x}^\infty dy \int_0^\infty dz \dots$$

wurde die z-Integration wieder jeweils in vier Integrale aufgeteilt:

$$I_{1} = \int_{0}^{\infty} dx \int_{0}^{x/2} dy \left\{ \int_{0}^{y} + \int_{y}^{x-y} + \int_{x-y}^{x} + \int_{x}^{x+y} \right\} dz \dots$$

$$I_{2} = \int_{0}^{\infty} dx \int_{x/2}^{x} dy \left\{ \int_{0}^{x-y} + \int_{x-y}^{y} + \int_{y}^{x} + \int_{x}^{x+y} \right\} dz \dots$$

$$I_{3} = \int_{0}^{\infty} dx \int_{x}^{2x} dy \left\{ \int_{0}^{y-x} + \int_{y-x}^{x} + \int_{x}^{y} + \int_{y}^{x+y} \right\} dz \dots$$

$$I_{4} = \int_{0}^{\infty} dx \int_{2x}^{\infty} dy \left\{ \int_{0}^{x} + \int_{x}^{y-x} + \int_{y-x}^{y} + \int_{y}^{x+y} \right\} dz \dots$$

wobei die obere Integrationsgrenzex+yist, da der Integrand für $z\ge x+y$ verschwindet. Das Ergebnis in führenden Ordnungen in L^{-1} lautet

$$\chi^{(2)} = \chi^{(2)}(L = \infty) + \frac{16}{81} \frac{(160 \ln(2) - 33)}{\pi^2 L^2} g^2 + \left(\frac{88}{45} - \frac{176}{27\pi^2}\right) \frac{1}{L^3} g^2 + \mathcal{O}\left(\frac{g^2}{L^4}\right) ,$$

wobei bei der Berechnung des letzten Terms berücksichtigt werden musste, dass die *x*-Integration in Wirklichkeit nur bis L/4 geht. Auch hier zeigt sich wieder die typische Korrektur $\propto \left(\frac{k_{\rm B}T}{U}\right)$. Grabert (1994) gibt bei seinen Rechnungen in zweiter Ordnung in *g* keine analytischen Resultate für endliche Temperaturen an.

Anhang E

Wie skalieren die Fluktuationen bei einer Summe von N Ereignissen?

Bei $N \gg 1$ unkorrelierten $(\langle \delta x_i \delta x_j \rangle \propto \delta_{ij})$ Zufallszahlen x_i mit dem Mittelwert $\langle x \rangle$ und der Standardabweichung Δx ist die Antwort nicht besonders schwierig $(I_N \equiv \sum_{i=1}^N x_i)$: Wegen

$$\Delta I_N^2 \equiv \left\langle I_N^2 \right\rangle - \left\langle I_N \right\rangle^2$$

gilt

$$\Delta I_N^2 = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle x_i x_j \rangle - N^2 \langle x \rangle^2$$

und folglich

$$\Delta I_N^2 = \sum_{i=1}^N \left\langle x_i^2 \right\rangle + 2 \sum_{i < j} \left\langle x_i x_j \right\rangle - N^2 \left\langle x \right\rangle^2$$

so dass mit $\delta x_i \equiv x_i - \langle x \rangle$

$$\Delta I_N^2 = N \left\langle x^2 \right\rangle + 2 \sum_{i < j} \left\langle x \right\rangle^2 + 2 \sum_{i < j} \left\langle \delta x_i \delta x_j \right\rangle - N^2 \left\langle x \right\rangle^2 \tag{E.1}$$

gilt. Für unkorrelierte Zufallszahlen folgt daraus wegen $\sum_{i < j} = \sum_{j=1}^{N} (j-1)$ und

$$\sum_{j=1}^{N} (j-1) = \frac{1}{2}N(N-1)$$

die Gleichung

$$\Delta I_N^2 = N\left\langle x^2 \right\rangle + 2\frac{1}{2}N(N-1)\left\langle x \right\rangle^2 - N^2\left\langle x \right\rangle^2$$

was nichts anderes ist als

$$\Delta I_N^2 = N \left\langle x^2 \right\rangle - N \left\langle x \right\rangle^2 \,,$$

d.h. der relative Fehler von I_N skaliert wie

$$\frac{\Delta I_N}{I_N} = \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{\Delta x}{\langle x \rangle} \,. \tag{E.2}$$

Anders verhält es sich hingegen, wenn die Zufallszahlen korreliert sind (siehe Anhang B.2), d.h. wenn $\langle \delta x_{i+n} \delta x_i \rangle$ für kleine *n* in etwa Δx^2 ist und erst auf einer Skala M ($1 \ll M \ll N$) gegen 0 geht, da dann

$$\sum_{i=1}^{N} \left\langle \delta x_0 \delta x_i \right\rangle \simeq M \Delta x^2$$

gilt. Aus Gleichung (E.1) folgt in diesem Fall wegen $M \ll N$ für die Varianz:

$$\Delta I_N^2 \simeq N \left\langle x^2 \right\rangle - N \left\langle x \right\rangle^2 + 2NM\Delta x^2$$

was wegen $M \gg 1$ nichts anderes ist als

$$\Delta I_N^2 \simeq 2NM\Delta x^2 \,.$$

Für korrelierte Zufallszahlen skaliert der relative Fehler von ${\cal I}_N$ folglich wie

$$\frac{\Delta I_N}{I_N} \simeq \sqrt{\frac{2M}{N} \frac{\Delta x}{\langle x \rangle}} \,. \tag{E.3}$$

Literaturverzeichnis

- Abramowitz, M. und Stegun, I. A. (1984). *Pocketbook of Mathematical Functions*. Thun: Verlag Harri Deutsch.
- Andres, R. P., Bein, T., Dorogi, M., Feng, S., Henderson, J. I., Kubiak, C. P., Mahoney, W., Osifchin, R. G., und Reifenberger, R. (1996). Science, 272, 1323.
- Arfken, G. (1985). Mathematical Methods for Physicists. San Diego: Academic Press.
- Averin, D. V., Korotkov, A. N., und Likharev, K. K. (1991). *Phys. Rev. B*, 44, 6199.
- Beenakker, C. W. J. (1991). Phys. Rev. B, 44, 1646.
- Birk, H., de Jong, M. J. M., und Schönenberger, C. (1995). Phys. Rev. Lett., 75, 1610.
- Blick, R., Erbe, A., Tilke, A., und Wixforth, A. (2000). *Physikalische Blätter*, 56(1), 31.
- Bouchiat, V. (1997). Quantum fluctuations of the charge in single electron and single Cooper pair devices. Doktorarbeit: CEA-Saclay.
- Bronstein, I. N. und Semendjajew, K. A. (1989). *Taschenbuch der Mathematik*. Thun: Verlag Harri Deutsch.
- Bruder, C. und Schoeller, H. (1994). Phys. Rev. Lett., 72, 1076.
- Büttiker, M. (2000). J. Low Temp. Phys., 118, 519.
- Carr, D. W., Sekaric, L., und Craighead, H. G. (1998). J. Vac. Sci. Technol. B, 16, 3821.
- Chung, S. G. (1999). J. Phys. Soc. Japan, 68, 1778.
- Cleland, A. N. und Roukes, M. L. (1996). Appl. Phys. Lett., 69, 2653.
- Cleland, A. N. und Roukes, M. L. (1998). *Nature*, 392, 160.

- Dirac, P. A. M. (1977). History of Twentieth Century Physics. International School of Physics 'Enrico Fermi', Course 57, S. 112, New York: Academic Press.
- Dittrich, T., Hänggi, P., Ingold, G.-L., Kramer, B., Schön, G., und Zwerger, W. (1998). *Quantum Transport and Dissipation*. Weinheim: Wilech–VCH.
- Eckern, U., Schön, G., und Ambegaokar, V. (1984). Phys. Rev. B, 30, 6419.
- Erbe, A. (2000). *Nanomechanischer Elektronentransport*. Doktorarbeit: Universität München (unveröffentlicht).
- Erbe, A., Blick, R. H., Tilke, A., Kriele, A., und Kotthaus, J. P. (1998). Appl. Phys. Lett., 73, 3751.
- Erbe, A., Weiss, C., Zwerger, W., und Blick, R. H. (2000). A nanomechanical resonator shuttling single electrons at radio frequencies (cond-mat/0011429).
- Erdélyi, A., Magnus, W., Oberhettinger, F., und Tricomi, F. G. (1954). *Tables of Integral Transforms Volume I.* New York: McGraw-Hill.
- Falci, G., Schön, G., und Zimanyi, G. T. (1995). Phys. Rev. Lett., 74, 3257.
- Fujisawa, T. und Hirayama, Y. (2000). Appl. Phys. Lett., 77, 543.
- Fulton, T. A. und Dolan, G. J. (1987). Phys. Rev. Lett., 59, 109.
- Geerligs, L. J., Anderegg, V. F., Holweg, P. A. M., Mooij, J. E., Pothier, H., Esteve, D., Urbina, C., und Devoret, M. H. (1990). *Phys. Rev. Lett.*, 64, 2691.
- Gerthsen, C., Kneser, H. O., und Vogel, H. (1989). *Physik.* Berlin: Springer–Verlag.
- Glattli, D. C., Jacques, P., Kumar, A., Pari, P., und Saminadayar, L. (1997). J. Appl. Phys., 81, 7350.
- Göppert, G. und Grabert, H. (2000). Charge Fluctuations in the Single Electron Box (cond-mat/0009446).
- Göppert, G., Grabert, H., Prokof'ev, N. V., und Svistunov, B. V. (1998). Phys. Rev. Lett., 81, 2324.
- Gorelik, L. Y., Isacsson, A., Vonova, M. V., Kasemo, B., Shekter, R. I., und Jonson, M. (1998). Phys. Rev. Lett., 80, 4526.

Grabert, H. (1994). Phys. Rev. B, 50, 17364.

Grabert, H. und Devoret, M. H. (Eds.). (1992). Single Charge Tunneling. New York: Plenum.

- Grabert, H., Ingold, G.-L., Devoret, M. H., Esteve, D., Pothier, H., und Urbina, C. (1991). Z. Phys. B, 84, 143.
- Gradstein, I. S. und Ryshik, I. M. (1981). Summen-, Produkt- und Integraltafeln. Thun: Harri Deutsch.
- Hofstetter, W. (1997). *Statistische Mechanik der Einzel-Elektronen-Box*. Diplomarbeit: Universität München (unveröffentlicht).
- Hofstetter, W. und Zwerger, W. (1997). Phys. Rev. Lett., 78, 3737.
- Hofstetter, W. und Zwerger, W. (1998). Euro. Phys. J. B, 5, 751.
- Holleitner, A. W., Decher, C. R., Eberl, K., und Blick, R. H. (2000). Coherent coupling of two quantum dots embedded in an Aharonov-Bohm ring (condmat/0011044).
- Isacsson, A., Gorelik, L. Y., Voinova, M. V., Kasemo, B., Shekhter, R. I., und Jonson, M. (1998). *Physica-B.*, 255, 150.
- Ishikuro, H., Fujii, T., Saraya, T., Hashiguchi, G., Hiramoto, T., und Ikoma, T. (1996). Appl. Phys. Lett., 68, 3585.
- Johansson, J. und Haviland, D. B. (2000). Random background charges and Coulomb blockade in one-dimensional tunnel junction arrays (cond-mat/0006395).
- Keller, M. W., Martinis, J. M., Zimmerman, N. M., und Steinbach, A. H. (1996). Appl. Phys. Lett., 69, 1804.
- Krömmer, H., Erbe, A., Tilke, A., Manus, S., und Blick, R. H. (2000). Europhys. Lett., 50, 101.
- Lafarge, P., Pothier, H., Williams, E. R., Esteve, D., Urbina, C., und Devoret, M. H. (1991). Z. Phys. B, 85, 327.
- Landau, L. D. und Lifschitz, E. (1974). Lehrbuch der Theoretischen Physik VIII: Elektrodynamik der Kontinua. Berlin: Akademieverlag.
- Le Bellac, M. (1991). *Quantum and Statistical Field Theory*. Oxford: Clarendon Press.
- Loss, D. und DiVincenzo, E. V. (1998). Phys. Rev. A, 57, 120.
- Machlup, S. (1954). J. Appl. Phys., 25, 341.
- Makhlin, Y., Schön, G., und Shnirman, A. (1999). Nature, 398, 305.
- Mann, T. (1947). *Doktor Faustus*, (S. 24 f.) (1990 ed.). Frankfurt: Fischer Taschenbuch Verlag.

- Manninen, A. J. und Pekola, J. P. (1996). Czech. J. Phys., 46(suppl., pt. S4), 2294.
- Mathews, J. und Walker, R. L. (1970). Mathematical Methods of Physics. Redwood City: Addison–Wesley.
- Messiah, A. (1990). Quantenmechanik: Band 2. Berlin: Walter de Gruyter.
- Mullen, K., Ben-Jacob, E., Jaklevic, R. C., und Schuss, Z. (1988). *Phys. Rev. B*, 37, 98.
- Nejoh, H. (1991). Nature, 353, 640.
- Persson, B. N. J. und Baratoff, A. (1988). Phys. Rev. B, 38, 9616.
- Pescini, L., Tilke, A., Blick, R. H., Lorenz, H., Kotthaus, J. P., Eberhardt, W., und Kern, D. (1999). Nanotechnology, 10, 418.
- Pothier, H., Lafarge, P., Urbina, C., Esteve, D., und Devoret, M. H. (1992). Europhys. Lett., 17, 249.
- Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., und Flannery, B. P. (1992). Numerical Recipes in C. Cambridge: Cambridge University Press.
- Romero, A. H. und Sancho, J. M. (1999). J. Comp. Phys., 156, 1.
- Scalia, V., Falci, G., Fazio, R., und Giaquinta, G. (1991). Z. Phys, 85, 427.
- Schoeller, H. (1996). Habilitationsschrift: Universität Karsruhe (unveröffentlicht).
- Schulman, L. S. (1981). Techniques and Applications of Path Integration. New York: Wiley.
- Soldatov, E. S., Khanin, V. V., Trifonov, A. S., Presnov, D. E., Yakovenko, S. A., Khomutov, G. B., Gubin, C. P., und Kolseov, V. V. (1996). *JETP Lett*, 64, 556.
- Song, D., Amar, A., Lobb, C. J., und Wellstood, F. C. (1995). IEEE Trans. Appl. Subercond., 5, 3085.
- Switkes, M., Marcus, C. M., Campman, K., und Gossard, A. C. (1999). Science, 283, 1905.
- Tilke, A. (2000). Einzelelektronentransport in Silicon-on-Insulator-Nanostrukturen. Doktorarbeit: Universität München (unveröffentlicht).
- Verbrugh, S. M., Benhamadi, M. L., Visscher, E. H., und Mooij, J. E. (1995). J. Appl. Phys., 78, 2830.

- Weiss, C. und Zwerger, W. (1999). *Europhys. Lett.*, 47, 97.
- Weiss, C. und Zwerger, W. (2000). Influence of background charge fluctuations on single electron devices (in Vorbereitung).
- Wermke, M., Klosa, A., Kunkel-Razum, K., und Scholze-Stubenrecht, W. (Eds.). (2000). *Duden: Die deutsche Rechtschreibung*. Mannheim: Dudenverlag.
- Wilkins, R., Ben-Jacob, E., und Jaklevic, R. C. (1989). Phys. Rev. Lett., 63, 801.
- Yamanaka, T., Morie, T., Nagata, M., und Iwata, A. (2000). Nanotechnology, 11(3), 154.
- Zhou, F., Spivak, B., und Altshuler, B. (1999). Phys. Rev. Lett., 82, 608.
- Zhuang, L., Guo, L., und Chou, S. Y. (1998). Appl. Phys. Lett., 72, 1205.
- Zorin, A. B., Ahlers, F.-J., Niemeyer, J., Weimann, T., Wolf, H., Krupenin, V. A., und Lotkhov, S. V. (1996). Phys. Rev. B, 53, 13682.
- Zwerger, W. (1994). Z. Phys. B, 93, 333.
- Zwerger, W. und Scharpf, W. (1991). Z. Phys. B, 85, 421.

LITERATURVERZEICHNIS

Danksagung

Herrn Professor Dr. W. Zwerger gilt mein Dank für die interessante Aufgabenstellung, seine ständige Bereitschaft zu Hilfestellung und Diskussionen sowie für das in mich gesetzte Vertrauen.

Bei Herrn Professor Dr. H. Wagner und allen Lehrstuhlangehörigen bedanke ich mich für die schöne Zeit in der Theresienstraße. Besonders danke ich Nikhil Chandra für die Unterstützung nicht nur bei physikalischen Problemen. Ebenso danke ich Hans Aschauer, Claus Beisbart, Dr. Walter Hofstetter, Professor Dr. Martin Holthaus, Ullrich Martini, Florian Meier, Dr. Jens Schmalzing, Dr. Sigmund Stintzing, Florian Weig und Patrick Werner.

Herrn Professor Dr. J. P. Kotthaus und seinem Lehrstuhl danke ich für die Gastfreundschaft bei Seminaren und der Tagung in Mauterndorf. Ganz besonders danke ich Artur Erbe für die erfolgreiche und hochinteressante Zusammenarbeit zwischen Experiment und Theorie im wissenschaftlichem Neuland des nanomechanischen Einzel-Elektronen-Pendels – und für das, was ich durch ihn über Musik gelernt habe. Mein Dank gilt auch Dr. Robert H. Blick, Professor Dr. Khaled Karrai, Stephan Manus, Dr. Friedrich Simmel und Dr. Armin Tilke.

Bei Artur Erbe, Patrick Werner, Nikhil Chandra, Robert Blick und Hans Stießberger bedanke ich mich für die Durchsicht dieser Arbeit.

Mein herzlicher Dank gilt meinen Eltern und allen, die mich während der letzten drei Jahre auch außerhalb der Universität begleitet haben.

Last not least danke ich der DFG für die finanzielle Unterstützung dieser Arbeit im Rahmen des Sonderforschungsbereichs 348 Nanometer– Halbleiterbauelemente, sowie dem *Center for NanoScience* der Universität München für die ausgezeichnete interdisziplinäre Atmosphäre in München und auf den Tagungen in Venedig und Wildbad Kreuth.

Lebenslauf

3. Dezember 1971	Geburt in Singen am Hohentwiel
1978 - 1980	Grundschule Radolfzell–Markelfingen
1980 - 1985	Deutsche Evangelische Oberschule Kairo
1985 - 1991	Gymnasium Radolfzell
Juni 1991	Abitur
1991 - 1997	Physikstudium an der Universität Konstanz
1991 - 1997	Stipendiat der Studienstiftung des deutschen Volkes
1993 - 1994	Auslandsjahr an der University of Cambridge
Juni 1994	erfolgreiche Teilnahme an Physik–Abschlussklausuren
1996 - 1997	Diplomarbeit bei Herrn Professor Dr. M. Wilkens, Kon-
	stanz (inzwischen Potsdam), am Lehrstuhl Mlynek
	Thema: "Bosegase in verschiedenen Gesamtheiten"
November 1997	Diplom
November 1997 –	Wissenschaftlicher Angestellter an der
Januar 1998	Universität Potsdam
Februar 1998 –	Wissenschaftlicher Angestellter an der
März 2001	Ludwig–Maximilians–Universität München