

PACS numbers: 34.70.+e, 72.10.Bg, 82.20.Ej, 82.30.Fi, 82.39.Jn, 85.35.Gv, 85.65.+h

## Переходные токи включения и выключения в органических наноструктурах

Э. Г. Петров, В. О. Леонов

*Институт теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова НАН Украины,  
ул. Метрологическая, 14<sup>б</sup>,  
03680, ГСП, Киев, Украина*

Виявлен фізический механізм виникновения больших токов включения и выключения в устройствах типа «электрод–молекула–электрод», проявляющих свойства молекулярного диода. Показано, что указанные токи могут заметно превышать стационарный ток в устройстве, если только контакт молекулы с электродами является асимметричным и/или если в молекуле основную роль в электронной трансмиссии играют локализованные молекулярные орбитали.

Виявлено фізичний механізм виникнення великих струмів вмикання та вимикання в пристроях типу «електрода–молекула–електрода», що виявляють властивості молекулярної діоди. Показано, що зазначені струми можуть помітно перевищувати стаціонарний струм у пристрої, якщо лише контакт молекули з електродами є асиметричним та/або якщо в молекулі головну роль в електронній трансмісії мають локалізовані молекулярні орбіталі.

Physical mechanism of formation of high switch-on and switch-off currents is revealed in the ‘electrode–molecule–electrode’ devices, which exhibit the molecular diode properties. As shown, such currents can noticeably exceed a steady state current in the device, if only the contact of a molecule with the electrodes is asymmetric one and/or if the localized molecular orbitals play a dominant role in an electron transmission through the molecule.

**Ключевые слова:** туннелирование, электронные прыжки, молекулярный диод.

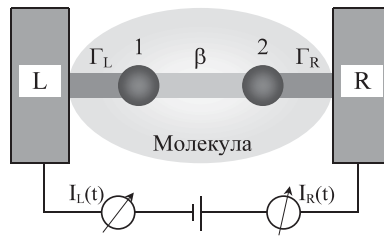
*(Получено 18 октября 2010 г.)*

## 1. ВВЕДЕНИЕ

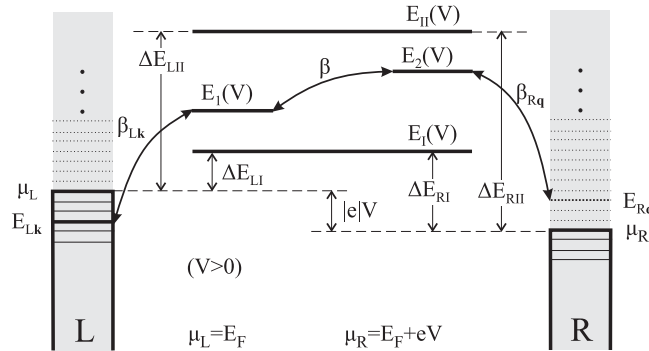
В начале 80-х годов прошлого столетия возникла идея использовать отдельные молекулы и молекулярные структуры в качестве базовых элементов электроники [1]. В последнее десятилетие выполнено большое число экспериментов по исследованию проводящих свойств молекул, вставленных между электродами. К настоящему времени экспериментально показано, что молекулы с асимметричной связью по отношению к электродам обладают диодными свойствами и обнаруживают отрицательное дифференциальное сопротивление [2–4]. Несмотря на заметный успех в понимании механизмов проводимости отдельных молекул, многие вопросы, связанные с выяснением условий, при которых отдельные молекулы и молекулярные проводящие элементы исполняют роль регулятора зарядового (электронного и дырочного) переноса между микроэлектродными структурами, остаются невыясненными. Это обусловлено тем, что основные экспериментальные и теоретические наработки касались изучения стационарных вольт-амперных характеристик систем типа «электрод  $L$ –молекула–электрод  $R$ » (LMR-система). Вместе с тем в реальных условиях функционирования молекул как базовых элементов электроники должны происходить переключения режимов трансмиссии электронов через молекулу, связанных с быстрым изменением разности электрических потенциалов  $V$ . Как следствие, в LMR-системе должны возникнуть переходные токи. Предварительные теоретические оценки, полученные в рамках простейшей модели электронной трансмиссии через изолированный уровень молекулы, показали [5, 6], что переходные токи могут на порядки величины превосходить стационарные токи в той же молекуле. В настоящей работе мы приводим результаты исследования переходных токов в LMR-системе, где молекула контактирует с электродами через активные терминальные группы.

## 2. МОДЕЛЬ И РЕЗУЛЬТАТЫ

На рисунке 1 представлена модель рассматриваемой LMR-системы, в которой связь терминальных групп 1 и 2 с левым и правым электродами характеризуется параметрами  $\Gamma_L$  и  $\Gamma_R$  уширения уровней энергии электрона  $E_1$  и  $E_2$  на группах 1 и 2, а сами группы связаны между собой взаимодействием  $\beta$ . В большинстве реальных систем выполняется условие  $D^2 = \Delta E^2 + 4\beta^2 \gg (\Gamma_L)^2 + (\Gamma_R)^2$ , где  $\Delta E = E_1 - E_2$ . Поэтому взаимодействие  $\beta$  приводит к формированию коллективизированных уровней энергии молекулы  $E_I = \frac{1}{2}(E_1 + E_2 - D)$  и  $E_{II} = \frac{1}{2}(E_1 + E_2 + D)$ . Трансмиссия электрона идёт с участием именно этих уровней. На рисунке 2 показана схема расположения уров-



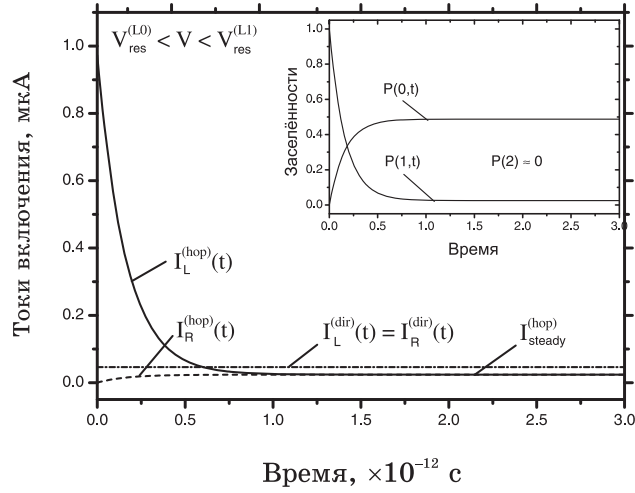
**Рис. 1.** Молекула контактирует с электродами через свои терминальные группы 1 и 2, связанные между собой взаимодействием  $\beta$ .



**Рис. 2.** Схема положения энергетических уровней заряженной молекулы относительно уровней Ферми электродов.

ней энергии электрона, когда электрон с энергией  $E_{Lk}$  на левом электроде попадает на уровни молекулы с энергиями  $E_I$  или  $E_{II}$ , а потом оказывается на правом электроде с энергией  $E_{Rq}$ . Эффективность трансмиссии электрона от одного электрода к другому определяется соответствующими трансмиссионными щелями  $\Delta E_{rj} = E_j - \mu_r$ , где  $r = L, R$  и  $j = I, II$ .

Химический потенциал  $r$ -го электрода  $\mu_r$  задаёт сдвиг уровня Ферми электрода. В соответствии с теорией трансмиссии электрона [5–7], зависящий от времени ток через  $r$ -й электрод  $I_r(t) = I_r^{(hop)}(t) + I_r^{(dir)}(t)$  состоит из прыжковой и прямой (туннельной) компонент. Обе компоненты тока включают перенос электрона вдоль  $\nu$ -го трансмиссионного канала, который связан с зарядовым состоянием молекулы. Когда энергетические щели  $\Delta E_{rj}$  положительны, трансмиссия электронов через молекулу носит нерезонансный характер, и потому прыжковый механизм переноса электрона обусловлен температурной активацией. Туннельная компонента тока при этом может даже превосходить прыжковую компоненту тока. Когда одна или более

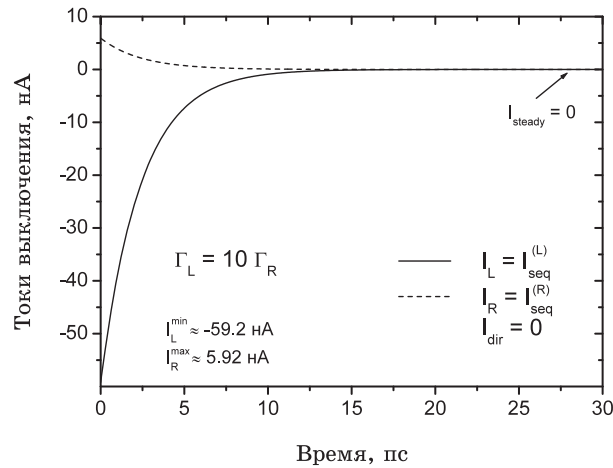


**Рис. 3.** Токи включения в молекулярном диоде при  $V = V_f > 0$ . Контактный ток  $I_L^{(hop)}(0)$  через левый электрод заметно превышает стационарный ток  $I_{steady}^{(hop)}$ .

энергетическая щель становится отрицательна, то один или более уровней молекулы (в нашем случае не более двух уровней) находятся ниже уровня Ферми левого (при  $V > 0$ ) или правого (при  $V < 0$ ) электродов.

Величина токов в LMR-системе заметно возрастает по сравнению с нерезонансным случаем, однако физика формирования токов включения и выключения остаётся той же самой. Так, при скачкообразном изменении разности потенциалов от  $V = 0$  до  $V = V_f > 0$  поток электронов, приходящих на молекулу от левого электрода, превышает поток электронов, приходящих от молекулы на правый электрод и, следовательно,  $I_L(t) \gg I_R(t)$ . Лишь на временах  $t \gg \tau_{tr}$ , где  $\tau_{tr}$  — характерное время установления тока, в LMR-системе установится стационарный ток  $I_{steady}$ , соответствующий разности потенциалов  $V_f$ . Теория показывает, что при быстром переключении  $V_i$  на  $V_f$  туннельная составляющая тока включения,  $I^{(dir)}(t) = I_L^{(dir)}(t) = I_R^{(dir)}(t)$ , связанная с прямой межэлектродной трансмиссией электронов, практически не отличается от её стационарного значения. Однако прыжковые компоненты тока,  $I_L^{(hop)}(t)$  и  $I_R^{(hop)}(t)$ , на временах  $t \ll \tau_{tr}$  заметно отличаются друг от друга.

При резонансном перескоке электронов от левого электрода на молекулу максимальные значения прыжковых компонент токов включения определяются выражениями  $I_L^{(hop)}(0) = 2\pi I_0 \Gamma_L$  и  $I_R^{(hop)}(0) = 2\pi I_0 \Gamma_R$ , тогда как их стационарные значения совпадают и равны  $I_{steady} = 2\pi I_0 \Gamma_L \Gamma_R / (2\Gamma_L + \Gamma_R)$ , где  $\Gamma_L$  и  $\Gamma_R$  есть параметры связи молекулы с левым и правым электродом соответственно. Отсюда



**Рис. 4.** Токи выключения в молекулярном диоде. Контактный ток  $I_I^{(hop)}(0)$  через левый электрод заметно превышает подобный ток  $I_R^{(hop)}(0)$  через правый электрод.

видно, что при  $\Gamma_L \gg \Gamma_R$  максимальный ток включения превышает стационарный ток через молекулу в  $2\Gamma_L/\Gamma_R$  раза, т.е. может быть сильнее на несколько порядков величины (на рис. 3 показан случай  $\Gamma_L/\Gamma_R = 10$ ). Отметим, что вследствие большого различия между трансмиссионными параметрами  $\Gamma_L$  и  $\Gamma_R$  туннельная компонента тока является несущественной в формировании токов включения. Эти токи целиком определяются зарядкой молекулы за счёт прыжкового механизма переноса электронов. В противоположность токам включения токи выключения формируются при нулевой разности потенциалов на электродах. Поэтому туннельная компонента тока включения отсутствует принципиально. Сами же токи выключения связаны с разрядкой молекулы, когда избыточный заряд на молекуле перескакивает на прилегающие электроды, причём, токи выключения имеют противоположные знаки. При этом ток стекания выше на тот электрод, который более тесно контактирует с молекулой (см. пример на рис. 4).

### 3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполненное исследование показало, что учёт поведения токов включения и выключения в молекулярных системах становится важным при конструировании устройств молекулярной электроники, где отдельные молекулы, молекулярные провода и молекулярные наноструктурные соединения различной архитектуры могут использоваться в качестве базовых элементов типа диодов, транзисторов, элементов памяти, усилителей, транзмиттеров и др.

**ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА**

1. A. Aviram and M. Ratner, *Chem. Phys. Lett.*, **29**: 277 (1974).
2. R. M. Metzger, *Acc. Chem. Res.*, **32**: 950 (1999).
3. J. Chen and M. A. Reed, *Chem. Phys.*, **281**: 127 (2002).
4. G. Cuniberti, G. F. Fagas, and K. Richter, *Introducing Molecular Electronics* (Heidelberg: Springer: 2007).
5. E. G. Petrov and M. V. Koval, *Phys. Letters A*, **372**: 5651 (2008).
6. E. G. Petrov, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **496**: 1 (2008).
7. Н. В. Коваль, Ю. А. Черний, Э. Г. Петров, *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнології*, **6**, вип. 3: 755 (2008).