

МРНТИ 47.09.48

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК НАНОКОММУТИРУЮЩЕГО УСТРОЙСТВА НА ОСНОВЕ «Au – C₁₄H₉ – Au»

Д.М. СЕРГЕЕВ^{1,*}[0000-0001-7426-3039], А.Г. ДУЙСЕНОВА¹[0000-0003-4868-1944],

Е.В. ПЕТРЕНКО²[0000-0003-0765-1845], А.Л. СОЛОВЬЁВ²[0000-0001-8858-1177],

Ж.М. ЕМБЕРГЕНОВ³[0000-0003-4991-1764]

¹Военный институт Сил воздушной обороны им.Т.Я. Бегельдинова,
г. Ақтобе, Казахстан

²Физико-технический институт низких температур им.Б.И. Веркина,
г. Харьков, Украина

³Назарбаев Интеллектуальная школа физико-математического направления,
г.Ақтобе, Казакстан

* e-mail: serdau@mail.ru

Аннотация: В работе были определены основные электрические характеристики (вольтамперная характеристика, дифференциальная проводимость и электронная плотность) наноконтакта «Au – C₁₄H₉ – Au» с применением модели Хюккеля и метода неравновесных гриновских функций. На основе анализа полученных результатов, было показано, что на базе молекулы Au – C₁₄H₉ – Au предоставляется возможность создания наноконмутирующего устройства, который функционировал безотказно под влиянием шумового сигнала. Амплитуда такого нанопереключателля составляет 1,03 нА, следовательно присутствие флуктуационного тока (шума) с амплитудой около 1 нА в электронной цепи оказывает непосредственное влияние на работу нанопереключателля. Выявлено, что особенности электрических характеристик рассматриваемых наноструктур позволяет исключить ошибочное срабатывания наноконмутирующего устройства путем подбора оптимального значения порогового тока ±145 нА, так как осцилляции тока в интервале напряжении -3÷-1.2 В пренебрегается. При таком подборе порогового тока ключ переходит в активный режим в интервале напряжении ~1.3÷1.8 В, вне этого интервала находится в режиме отсечки. Таким образом определены режимы работы наноконмутирующего устройства. Данные результаты принесут огромный вклад в создании новых перспективных конмутирующих устройств нанозлектроники.

Ключевые слова: наноконмутирующее устройство, вольтамперная характеристика, дифференциальная проводимость, электронная плотность.

Введение

В настоящее время разработка электронных приборов нанозлектроники тесна связана с достижениями в области физики низкоразмерных структур. Одним из перспективных элементов электронной техники по мнению авторов в работе [1] являются элементы, построенные на основе низкоразмерных структур, включающие в себя уникальные электрические и магнитные свойства.

Но для создания простых логических элементов цифровых систем на основе базовых наноразмерных структур, появляется необходимость в создании наноконмутирующих устройств для управления режимами переключения работы наносхем.

Следовательно, для того чтобы решить эту проблему, а также увеличить функциональные потребности нанoeлектроники, необходимо изучить наноструктуры с нестандартными электротранспортными характеристиками, которые могли бы выполнить функцию электронного ключа.

Появление на вольтамперной характеристике эффекта отрицательного дифференциального сопротивления является особенностью электрофизических свойств подобного наноконмутирующего устройства. Отрицательное дифференциальное сопротивление в электронном устройстве на основе 2'-amino-4-ethynylphenyl-4'-ethynylphenyl-5'-nitro-1-benzenethiol, содержащий окислительно-восстановительный центр нитроамина был рассмотрен в работах [2-3]. В будущем такие устройства могут служить в качестве эффективного электронного ключа.

Однако, необходимо учитывать, что амплитуда такого нанопереключатeля составляет 1,03 нА, следовательно присутствие флуктуационного тока (шума) с амплитудой около 1 нА в электронной цепи оказывает непосредственное влияние на работу нанопереключатeля. В таком случае вероятность случайного срабатывания электронного ключа под влиянием шумового тока возрастает, и ключ становится не пригодным для использования его в присутствии шума. Для работы такого ключа необходимо обеспечить помехозащищенную среду, а также подбирать для сборки цепи малошумящие электронные приборы для предотвращения случайного срабатывания переключателя.

Основная часть

В настоящее время представляет интерес молекула феналенил ($C_{14}H_9$), которая может существовать в трех различных формах: 1) катион с закрытой оболочкой; 2) радикал с открытой оболочкой; 3) анион с закрытой оболочкой. Стабильное состояние этой молекулы связано с использованием своей несвязывающейся молекулярной орбитали. Возможность генерирования радикала посредством внешнего переноса электронов или инъекции спина в пустой NVMO позволяет использовать молекулу феналенил для разработки элементов спиновой электроники [4].

Геометрия исследуемого наноконмутирующего устройства приведена на Рисунок 1. Исследуемая наносистема состоит из 338 атомов и имеет три области с общим размером $\sim 30.4 \text{ \AA}$: центральную, левую и правую области электродов. Центральная область включает активную часть нанопереключатeля в виде молекулы $C_{14}H_9$, где происходит рассеяние квазичастиц в области с размером $\sim 6.8 \text{ \AA} \times 7.25 \text{ \AA}$. Молекула $C_{14}H_9$ представляет собой

фрагмент графена, пассивизированный атомами водорода. Электроды получены путем расширения центральной области по оси C на $\sim 4.08 \text{ \AA}$. Расстояние между электродами составляет $\sim 21.78 \text{ \AA}$, где размещена центральная область наносистемы (212 атомов). Расстояние между электродом и молекулой $C_{14}H_9$ составляет $\sim 2.65 \text{ \AA}$.

Методы исследования

Компьютерное моделирование электрических характеристик рассматриваемой наноструктуры производилось в рамках модели Хюккеля, а также метода неравновесных гриновских функций (НРГФ). В программе Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab проводилось моделирование квантово-транспортных характеристик наноустройства [5]. ВАХ наноструктуры указывает фундаментальную связь электрического тока со спектром пропускания, и рассчитывается на основе известного уравнения Ландауэра [6,7]:

$$I(V_L, V_R, T_L, T_R) = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T(E) \left[\int \left(\frac{E - \mu_R}{k_B T_R} \right) - \int \left(\frac{E - \mu_L}{k_B T_L} \right) \right] dE \quad (1)$$

где e – заряд электрона, h – постоянная Планка, E – энергия, $T(E)$ – функция (спектр) пропускания, $f(E)$ – фермиевская функция распределения квазичастиц по энергиям, k_B – постоянная Больцмана, T_R, T_L – текущие температуры и μ_R, μ_L – электрохимические потенциалы правого и левого электрода.

Для описания межатомного взаимодействия и оптимизации наноструктуры использовались потенциалы ReaxFF_CHONS_2010 [8] и EAM_Au_Sheng_2011 [9], хорошо оптимизирующие углеродосодержащие и золотосодержащие наноструктуры, соответственно.

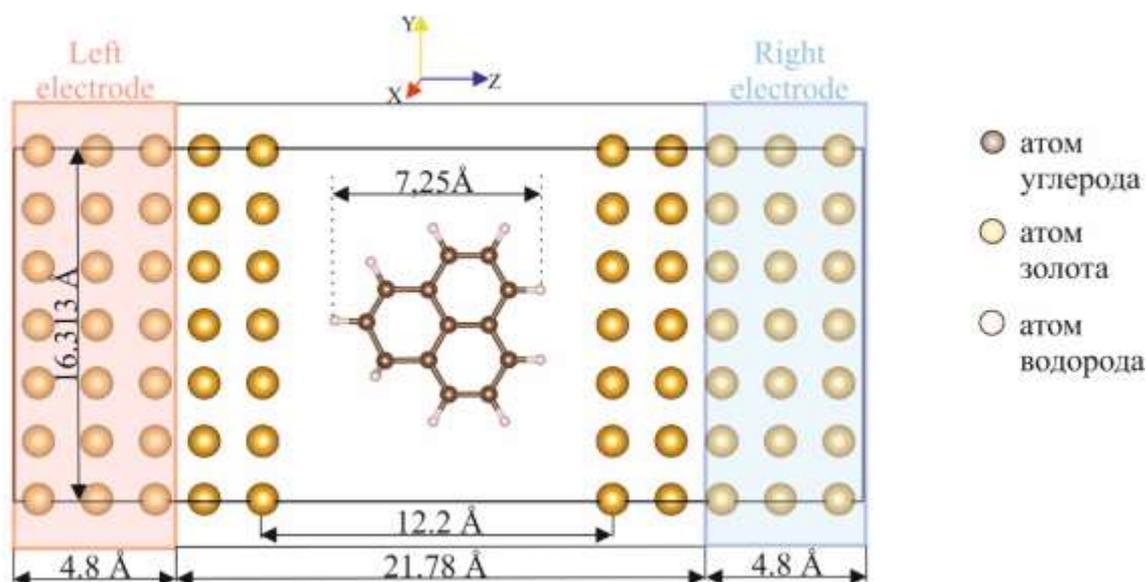


Рисунок 1 – Геометрия нанопереключателѐа на базе молекулы $Au - C_{14}H_9 - Au$: а) ZY-plane; б) ZX-plane.

Результаты исследования

В интервале напряжений $1.2 \div 1.52$ В наблюдается значительный рост тока до 350 нА. Рисунок 2. После чего происходит резкое убывание тока до ~ 37 нА, формируя область ОДС. Максимальное значение тока, протекающий сквозь наноструктуры, составляет 350 нА (при напряжении смещении 1,52 В). В интервале напряжении $-3 \div -1.2$ В наблюдается осцилляция тока с амплитудой 145 нА. При остальных значениях приложенного напряжения сквозь наноструктуры протекает малый ток $\sim -25 \div 70$ нА (на рисунке отмечено желтым прямоугольником). Особенности ВАХ проявляются и в дифференциальной проводимости наноустройства (Рисунок 3). Максимальное отклонение дифференциальной проводимости от нулевого значения в положительную сторону составляет 1.36 мкСм (при $V_{\text{bias}} = 1.32$ В), в отрицательную – -0.95 мкСм (при $V_{\text{bias}} = 1.72$ В). Они проявляются в интервале напряжении, где ВАХ имеет N-образную форму.

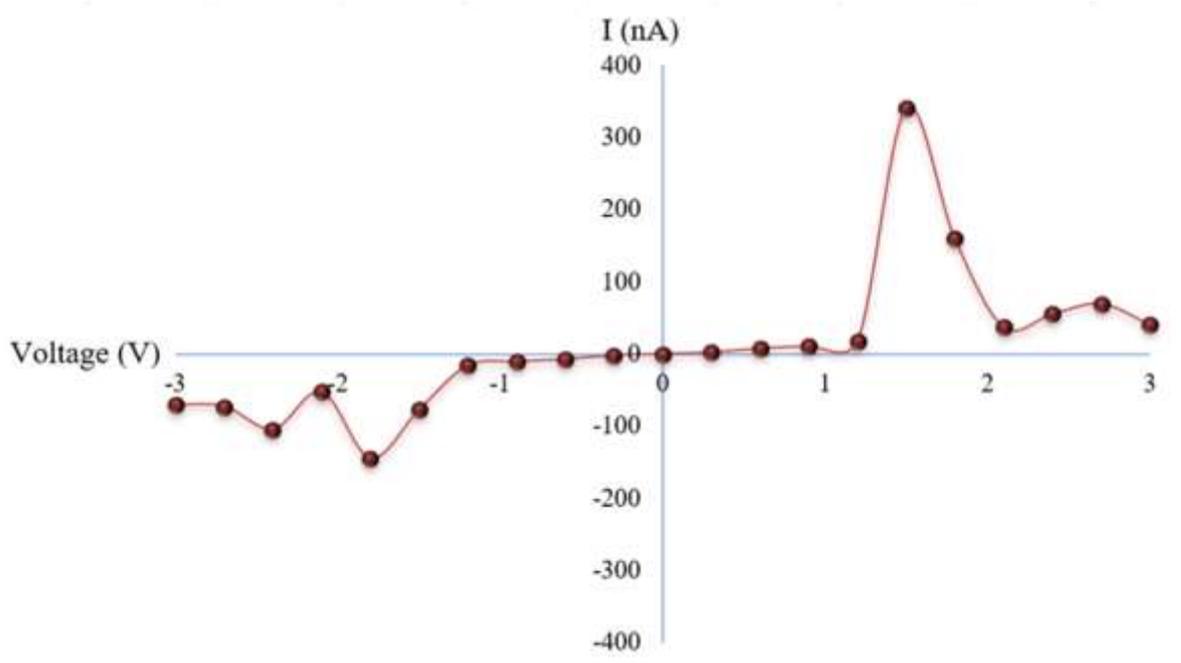


Рисунок 2 - IV характеристика наноконмутирующего устройства
на основе «Au – C₁₄H₉ – Au»

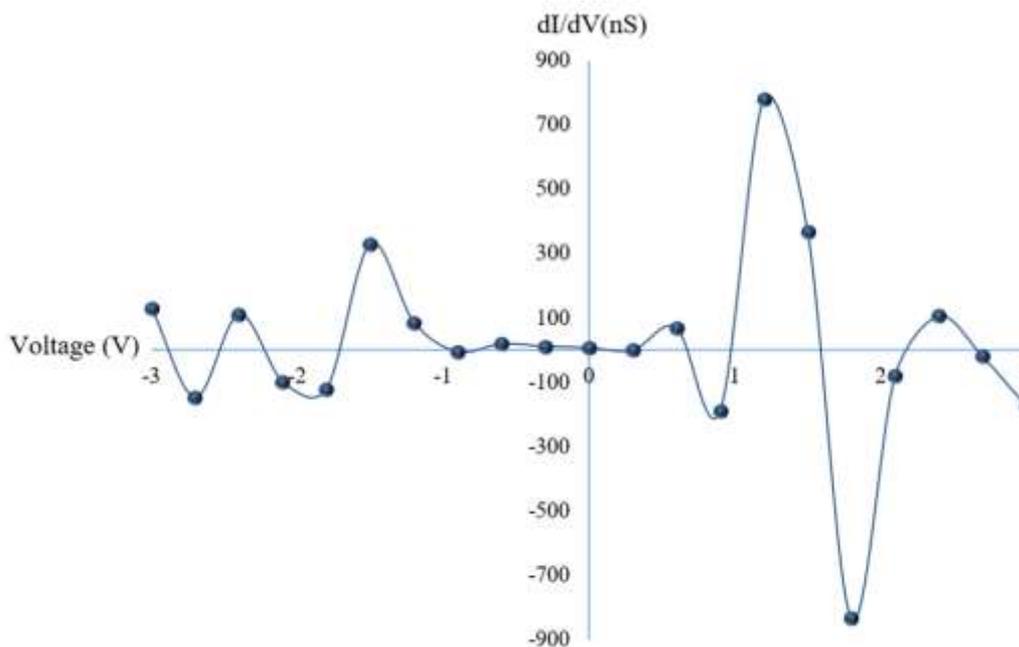


Рисунок 3 – dI/dV характеристика наноконмутующего устройства на основе «Au – C₁₄H₉ – Au»

В рамках ограниченного метода самосогласованного поля [10] была вычислена вольтамперная характеристика на основе уравнения (2) с учетом уширения γ равная 0,05 eV при $E > 0$, и γ равная 0 eV при $E < 0$

$$I_{1,2} = \frac{q}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \gamma_{1,2} [D(E - U) f_{1,2}(E) - nE] \quad (2)$$

где $D(\varepsilon) = 2 \times \frac{\gamma/2\pi}{(E-\varepsilon)^2 + (\gamma/2)^2}$ – плотность состояний, E – энергия уровня, $\gamma_{1,2}$ – уширение контактов, $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2$ – полное уширение, U – самосогласованный потенциал, $n(E)$ – электронная плотность на единицу энергии. Электронная плотность на единицу энергии определяется по формуле:

$$n(E) = D(E - U) \left(\frac{\gamma_1}{\gamma_2} f_1(E) + \frac{\gamma_2}{\gamma_1} f_2(E) \right) \quad (3)$$

Как видно, величина тока, вычисленного в рамках ограниченного метода самосогласованного поля, в интервале напряжений -0,3 В ÷ 1,6 В хорошо коррелируется со значением тока, полученного с помощью моделирования (уравнение 1, модель Хюккеля + метод НРГФ).

В работах [7-9] было обнаружено, что ОДС возникает лишь при одном знаке приложенного напряжения, а при другом знаке напряжения этот эффект отсутствует. Однако возможность проявления ОДС на обеих полуосях напряжений зависит от симметрии молекулы наноустройства [11]. В нашем случае «основной пик» ОДС наблюдается при положительном значении приложенного напряжения из-за асимметричного строения молекулы. Это приводит к неравномерному распределению электронной плотности

наноструктуры. Большая плотность электронов около правого электрода связана с асимметричностью строения молекулы.

Превалирование расчетного значения тока наноконмутирующего устройства “Au – C₁₄H₉ – Au” от аналогов позволяет создавать на его основе нанопереклюатели. Вероятность ошибочной работы таких переключателей мала и можно исключить путем подбора оптимального значения порогового тока.

Нанопереклюатель хорошо работает при пороговом значении тока ± 145 нА, так как осцилляции тока в интервале напряжении $-3 \div -1.2$ В пренебрегается. При таком подборе порогового тока ключ переходит в активный режим в интервале напряжении $\sim 1.3 \div 1.8$ В, вне этого интервала находится в режиме отсечки.

Заклучение

Таким образом, в данной работе с применением моделей Хюккеля + НРГФ определены электротранспортные характеристики (ВАХ, дифференциальная проводимость, электронная плотность) наноконтакта «Au – C₁₄H₉ – Au», и на их основе оценена возможность создания на эффективного наноконмутирующего устройства, обеспечивающего надежную работу в присутствии шумового сигнала. Выявлено, что в подобных наноконмутирующих устройствах появляется возможность исключить случайное срабатывание ключа, задавая оптимальное значение порогового тока ± 145 нА. Установлено, что в интервале напряжении $1.3 \div 1.8$ В Au – C₁₄H₉ – Au -переключатель находится в активном режиме, а вне этого интервала – в режиме отсечки.

Данная работа была выполнена в рамках проекта Комитета науки Министерства образования и науки Республики Казахстан (грант № AP08052562).

Список литературы

1. Vasileska D. Nano-Electronic: Devices Semiclassical and Quantum Transport Modeling / D. Vasileska, S. Goodnick. — New York, NY: Springer Science+Business Media, 2011. — 441 p. DOI: 10.1007/978-1-4419-8840-9
2. Cuevas J.C. Molecular Electronics: An Introduction to Theory and Experiment / J.C. Cuevas, E. Scheer. — World Scientific Publishing Company, 2017. — 848 p. DOI: 10.1142/7434
3. Evers F. Advances and challenges in single-molecule electron transport / F. Evers, R. Korytár, S. Tewari, & M.J. van Ruitenbeek // Rev. Mod. Phys. — 2020. — 92(3). DOI: 10.1103/RevModPhys.92.035001
4. Guisinger N.P. Room Temperature Negative Differential Resistance through Individual Organic Molecules on Silicon Surfaces / N.P. Guisinger, M.E. Greene, R. Basu, A.S. Baluch, M.C. Hersam // Nano Lett. — 2004. — Vol. 4, Iss. 1. — P. 55–59. DOI: 10.1021/nl0348589

5. Guisinger N.P. Observed suppression of room temperature negative differential resistance in organic monolayers on Si (100) // N.P. Guisinger, R. Basu, M.E. Greene, A.S. Baluch, & M.C. Hersam // *Nanotechnology*. — 2004. — 15(7). — S452–S458. DOI:10.1088/0957-4484/15/7/052
6. Chen J. Large On-Off Ratios and Negative Differential Resistance in a Molecular Electronic Device / J. Chen, M.A. Reed, A.M. Rawlett, & J.M. Tour // *Science*. — 1999. — 286(544). — P. 1550-1552. DOI: 10.1126/science.286.5444.1550
7. Chen J. Room-temperature negative differential resistance in nanoscale molecular junctions / J. Chen, W. Wang, M.A. Reed, A.M. Rawlett, D.W. Price, & J.M. Tour // *Applied Physics Letters* — 2000. — 77(8). — P. 1224-1226. DOI: 10.1063/1.1289650
8. Sergeyev D. Specific Features of Electron Transport in a Molecular Nanodevice Containing a Nitroamine Redox Center / D. Sergeyev // *Tech. Phys.* — 2020. — 65(4). — P. 573-577. DOI: 10.1134/S1063784220040180
9. Mukherjee A. Exploring Closed-Shell Cationic Phenalenyl: From Catalysis to Spin Electronics / A. Mukherjee, S.C. Sau, S.K. Mandal // *Acc. Chem. Res.* — 2017. — 50(7). — P.1679-1691. DOI: 10.1021/acs.accounts.7b00141
10. Naumova A.S. Hydrocarbons under Pressure: Phase Diagrams and Surprising New Compounds in the C–H System / A.S. Naumova, S.V. Lepeshkin, A.R. Oganov // *J. Phys. Chem. C*. — 2019. — 123. P. 20497–20501. DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b01353
11. Smidstrup S. First-principles Green's-function method for surface calculations: A pseudopotential localized basis set approach / S. Smidstrup, D. Stradi, J. Wellendorff, P.A. Khomyakov, U.G. Vej-Hansen, M. –E. Lee, T. Ghosh, E. Jonsson, H. Jonsson, K. Stokbro // *Phys. Rev.* — 2017. — 96(19). DOI:10.1103/PhysRevB.96.195309

References

1. Vasileska D., Goodnick S. (2011). *Nano-Electronic: Devices Semiclassical and Quantum Transport Modeling*. New York, NY: Springer Science+Business Media. DOI: 10.1007/978-1-4419-8840-9
2. Cuevas J.C., Scheer E. (2017). *Molecular Electronics: An Introduction to Theory and Experiment*. World Scientific Publishing Company. DOI: 10.1142/7434
3. Evers F., Korytár R., Tewari S., M. van Ruitenbeek J. (2020). Advances and challenges in single-molecule electron transport. *Rev. Mod. Phys.* DOI: 10.1103/RevModPhys.92.035001
4. Guisinger N.P., Greene M.E., Basu R., Baluch A.S., Hersam M.C. (2004). Room Temperature Negative Differential Resistance through Individual Organic Molecules on Silicon Surfaces. *Nano Lett.* DOI: 10.1021/nl0348589
5. Guisinger N.P., Basu R., Greene M.E., Baluch A.S., Hersam M.C. (2004). Observed

suppression of room temperature negative differential resistance in organic monolayers on Si (100). Nanotechnology. DOI: 10.1088/0957-4484/15/7/052

6. Chen J., Reed M.A., Rawlett A.M., Tour J.M. (1999). Large On-Off Ratios and Negative Differential Resistance in a Molecular Electronic Device. Science DOI: 10.1126/science.286.5444.1550

7. Chen J., Wang W., Reed M.A., Rawlett A.M., Price D.W., Tour J.M. (2000). Room-temperature negative differential resistance in nanoscale molecular junctions. Applied Physics Letters. DOI: 10.1063/1.1289650

8. Sergeyev D. (2020). Specific Features of Electron Transport in a Molecular Nanodevice Containing a Nitroamine Redox Center. Tech. Phys. DOI: 10.1134/S1063784220040180

9. Mukherjee A., Sau S.C., Mandal S.K. (2017). Exploring Closed-Shell Cationic Феналенил: From Catalysis to Spin Electronics. Acc. Chem. Res. DOI: 10.1021/acs.accounts.7b00141

10. Naumova A.S., Lepeshkin S.V., Oganov A.R. (2019). Hydrocarbons under Pressure: Phase Diagrams and Surprising New Compounds in the C–H System. J. Phys. Chem. C. DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b01353

11. Smidstrup S., Strad D.i, Wellendorff J., Khomyakov P.A., Vej-Hansen U.G., Lee M.-E., Ghosh T., Jonsson E., Jonsson H., Stokbro K. (2017). First-principles Green's-function method for surface calculations: A pseudopotential localized basis set approach. Phys. Rev. DOI:10.1103/PhysRevB.96.195309

Аu – C₁₄H₉ – Au НЕГІЗІНДЕ НАНОКОММУТАЦИЯЛАУШЫ ҚҰРЫЛҒЫНЫҢ ЭЛЕКТР СИПАТТАМАСЫНЫҢ ЕРЕКШЕЛІКТЕРІ

**Д.М. СЕРГЕЕВ^{1,*}, А.Г. ДУЙСЕНОВА¹, Е.В. ПЕТРЕНКО²,
А.Л. СОЛОВЬЁВ², Ж.М. ЕМБЕРГЕНОВ³**

¹Т.Я. Бегельдинов атындағы Өуе қорғаныс күштерінің Әскери институты
Ақтөбе қ, Қазақстан,

²Б.И. Веркина атындағы төменгі температуралы физика-техникалық институты
Харьков қ, Украина,

Ақтөбе қаласындағы физика-математика бағытындағы Назарбаев Зияткерлік мектебі,
Ақтөбе қ, Қазақстан,

*e-mail: serdau@mail.ru

Андатпа: Au - C₁₄H₉ - Au нано ажыратқышының негізгі электрлік сипаттамалары (вольт Амперлік сипаттамасы, дифференциалдық өткізгіштігі және электрондық тығыздығы) Хюккель моделінің аумағында тепе-

тең емес гриндық функциялар әдісімен бірге есептелген. Алынған нәтижелер анализінің барысында Au – C₁₄H₉ – Au молекуласының негізінде шулы сигнал әсері кезінде тоқтаусыз жұмыс істейтін нано ажыратқыш құру мүмкін екендігін айтуға болады. Мұндай нано - ажыратқыштың амплитудасы 1,03 нА құрайды, сондықтан электронды тізбекте шамамен 1 нА амплитудасы бар тербелмелі токтың (шудың) болуы нано - ажыратқыштың жұмысына тікелей әсер етеді. Мұндай наноструктуралық электрлік сипаттамаларының ерекшеліктері шекті токтың ± 145 нА оңтайлы мәнін таңдау арқылы электрондық кілттің қате іске қосылуын болдырмауға мүмкіндік беретіні анықталды, өйткені $-3 \div -1,2$ В кернеу аралығындағы токтың осцилляциясы ескерілмейді. Алынған ығысу кернеуінің мәндері осы қосқыштың жұмыс режимін анықтауға болады, $1,3 \div 1,8$ диапазонында кілт белсенді режимде, ал осы диапазоннан тыс кесу режимінде. Осылайша, нано коммутациялық құрылғының жұмыс режимдері анықталды. Бұл нәтижелер наноэлектрониканың жаңа перспективалық коммутациялық құрылғыларын құруға үлкен үлес қосады.

Түйін сөздер: нано коммутациялық құрылғы, вольт Ампер сипаттамасы, дифференциалды өткізгіштік, электронды тығыздық.

PECULIARITIES OF ELECTRICAL CHARACTERISTICS OF NANOCOMMUTING DEVICE BASED ON Au - C₁₄H₉ - Au.

D. SERGEYEV^{1,*}, A. DUSENOVA¹, E. PETRENKO², A. SOLOVIOV²,
Zh. EMBERGENOV³

¹T. Begeldinov Aktobe Aviation Institute, Aktobe, Kazakhstan,

²B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering, Kharkiv, Ukraine,

³Nazarbayev Intellectual School of the Physics and Mathematics Direction of Aktobe,
Aktobe, Kazakhstan,

*e-mail: serdau@mail.ru

Abstract: The main electrical characteristics (current - voltage characteristic, differential conductivity and electron density) of Au - C₁₄H₉ - Au nanoswitch have been calculated within the framework of the Hückel model combined with the method of nonequilibrium Green's functions. Based on the analysis of the results, we can say that the Au - C₁₄H₉ - Au nanoswitch can be created, which operates reliably under the influence of noise signals. The amplitude of this nanoswitch is 1,03 nA, therefore the presence of fluctuation current (noise) with amplitude of about 1 nA in electronic circuit has a directly influence on nanoswitch operation. It was revealed that the particularities of electric characteristics of considered nanostructures allows to exclude the error operation of nanoswitching device by selection of optimal value of threshold current ± 145 nA, as the oscillation of current in the interval of voltage $-3 \div -1.2$ V can be neglected. In this way, nano commutation device operation modes are determined. These results will provide an important contribution to the development of promising new switching devices for nanoelectronics.

Key words nanocommutating device, current-voltage characteristic, differential conductance, electron density.