

مدل سازی و شبیه سازی ترانزیستور تک الکترونی با جزیره مولکولی

مصطفی میرعلائی^۱ علی میر^۲

۱- دانشجوی دکتری- دانشکده فنی و مهندسی- دانشگاه لرستان- خرم آباد- ایران

miralaei.mo@fe.lu.ac.ir

۲- دانشیار- دانشکده فنی و مهندسی- دانشگاه لرستان- خرم آباد- ایران

mir.a@lu.ac.ir

چکیده: در این مقاله، ابتدا برای درک مفهوم تزویج به تبیین چگالی حالات مولکول های تزویج شده به الکترودهای فلزی خواهیم پرداخت و بر مبنای این مفهوم، تزویج ضعیف و قوی را برای مولکول های متصل شده به الکترودهای فلزی شرح می دهیم. در ادامه از توصیف مدل خازنی برای کشف ارتباط انرژی افزودن^۱ یا آستانه (انرژی لازم برای اضافه کردن الکترونی به مولکول) به الکترون-خواهی^۲ و انرژی یونش^۳ مولکول در محیط ترانزیستور تک الکترونی، SET^۴، استفاده خواهیم کرد و نشان می دهیم برای محاسبه جریان ترانزیستور تک الکترونی با جزیره مولکولی باید از رژیم انسداد کولنی کوانتومی بهره بگیریم. رابطه نرخ تونل زنی در رژیم انسداد کولنی کوانتومی را با جایگزین کردن یک تابع لورنسی (به عنوان عبارت احتمال عبور تونلی) در رابطه نرخ تونل زنی در نظریه ارتدکس، استنتاج خواهیم کرد. در نهایت، بر مبنای رابطه نرخ تونل زنی بدست آمده برای رژیم انسداد کولنی کوانتومی و به کمک نرم-افزار SIMON به محاسبه منحنی جریان (نوسانات کولنی) SETها با جزیره مولکولی خواهیم پرداخت. مولکول های مورد مطالعه، بنزن و کربن ۶۰ هستند.

کلمات کلیدی: ترانزیستور تک الکترونی با جزیره مولکولی، نوسانات کولنی، پهن شدگی سطوح انرژی، رژیم انسداد کولنی، انرژی افزودن، بنزن و کربن ۶۰.

تاریخ ارسال مقاله: ۱۳۹۷/۵/۷

تاریخ پذیرش مشروط مقاله: ۱۳۹۷/۱۰/۰۸

تاریخ پذیرش مقاله: ۱۳۹۷/۱۱/۱

نام نویسنده ی مسئول: دکتر علی میر

نشانی نویسنده ی مسئول: ایران - خرم آباد - کمالوند- دانشگاه لرستان- دانشکده ی فنی و مهندسی

فهرست علائم و نشانه‌ها

پارامترهای و متغیرها

t	زمان بر حسب ثانیه
e	بار الکترون
T	دما بر حسب کلوین
Γ	نرخ تولد زنی
E	انرژی بر حسب ژول یا الکترون ولت
$\psi(t)$	تابع موج الکترون
τ	طول عمر الکترون
k_B	ثابت بولتزمن
R_T	مقاومت سد تونلی
N	شماره الکترون
$u(t)$	تابع پله
E_0	تراز انرژی مولکول منزوی
\hbar	ثابت پلانک
$D(E)$	چگالی حالات الکترون
γ	پهن‌شدگی ترازهای انرژی
E_a	انرژی آستانه (افزودن)
τ_e	طول عمر همدوس الکترون
μ_S	پتانسیل الکتروشیمیایی سورس
μ_D	پتانسیل الکتروشیمیایی درین
V_{DS}	ولتاژ درین- سورس
$\mu_{molecule}(N)$	انرژی پتانسیل الکتروشیمیایی کل مولکول
$\mu_{chemical}(N)$	انرژی پتانسیل شیمیایی مولکول
$U(N)$	انرژی کل مولکول
φ_N	پتانسیل الکترواستاتیکی
C_Σ	ظرفیت کولنی بین الکترون‌های مولکول
C_s	حاصل جمع خازن‌های بین مولکول و الکتروود سورس
C_d	حاصل جمع خازن‌های بین مولکول و الکتروود درین
C_g	حاصل جمع خازن‌های بین مولکول و الکتروود گیت
E_N	انرژی N امین مولکول
E_{HOMO}	انرژی بالاترین اوربیتال مولکول اشغال شده
E_{LOMO}	انرژی پایین‌ترین اوربیتال مولکول اشغال شده
E_C	انرژی لازم برای غلبه بر دافعه کولنی
E_A	الکترون‌خواهی مولکول
E_I	انرژی یونیزاسیون مولکول
ΔU	تغییر انرژی الکترواستاتیکی
T_{if}	احتمال عبور تونلی
E_N	ترازهای گسسته انرژی
γ_N	پهنای قله چگالی حالت موضعی
α	شدت عبور

$R_T^{ortodox}$ مقاومت تونلی نظریه ارتدکس

$R_T^{discrete}$ مقاومت تونلی جزایر با سطوح انرژی گسسته

$T_{i,f}^{orthodox}$ احتمال عبور در نظریه ارتدکس

$V_{peak,i}$ ولتاژ گیت قله‌ی i ام جریان

W پهن‌شدگی هر تراز انرژی در جزیره

H ارتفاع نهایی طیف احتمال

E_g انرژی شکاف باند

۱- مقدمه

کوچک‌سازی افزاره‌های الکترونیکی در طی ۵ دهه گذشته در دستور کار محققان بوده است، به طوری که دوره دو برابرسازی تراکم مدارهای مجتمع از ۱۰ سال به ۲ سال کاهش یافته است؛ اما روند کوچک‌سازی بر اساس شیمی و فیزیک سیلیکون و نیم‌رساناهای سنتی حتی از طریق روش‌هایی مانند لیتوگرافی نوری، به انتهای دوره خود رسیده است. از این رو دیدگاه‌های جدیدی برای طراحی، ساخت و جایگزینی قطعات الکترونیکی نیاز است. در سال ۱۹۷۴ به طور نظری اثبات شد که امکان استفاده از مولکول‌های آلی به عنوان قطعات الکترونیکی وجود دارد [۱]، [۲]، [۳]، [۴]. در چند سال اخیر، تحقیقات و پیشرفت‌های قابل توجهی در زمینه طراحی و ساخت افزاره‌های الکترونیکی (مانند ترانزیستور) در مقیاس مولکولی صورت گرفته است به طوری که نتایج آن‌ها به شکل‌گیری فن‌آوری جدید الکترونیک مولکولی منجر شده است. از آنجایی که اندازه این افزاره‌های مولکولی کمتر از چند نانومتر است، لذا مطالعات نظری این ساختارهای مولکولی بر پایه محاسبات فیزیک و شیمی کوانتومی به ابزاری برای پیش‌بینی و طراحی افزاره‌های الکترونیکی تبدیل شده است [۵]، [۶]، [۷]، [۸]، [۹]، [۱۰]، [۱۱]، [۱۲]، [۱۳]، [۱۴]، [۱۵].

SET تک‌مولکولی یک افزاره بسیار جالب و خلاقانه در علوم نانو الکترونیک است بطوریکه تعداد زیادی از محققان را به سمت خود جلب کرده است. اکتشافات زیادی در زمینه مطالعات تجربی SET‌های تک‌مولکولی تاکنون صورت گرفته است [۱۲]، اما مطالعات نظری SET‌های تک‌مولکولی [۱۰] به صورت گسترده‌ای گزارش نشده است. تحقیقات تجربی اخیر در ساخت SET‌های تک‌مولکولی با رویکرد از پایین به بالا، با استفاده از مولکول‌های آلی به عنوان جزیره SET، قابلیت اجرای آن‌ها در دستگاه‌های نانو الکترونیک آینده را نشان می‌دهد.

از لحاظ نظری، می‌توان دو رژیم انتقال را برای ترانزیستورهای تک‌مولکولی بیان کرد. اول رژیم انتقال همدوس برای تزویج قوی میان مولکول و الکتروودهای فلزی و دوم رژیم انسداد کولنی که برای تزویج ضعیف است. محاسبات مبتنی بر روش اصول اولیه برای رژیم انتقال همدوس توسط روش‌های تابع گرین غیر تعادلی مبتنی بر نظریه تابع چگالی [۱۳] و مدل‌های نیمه‌تجربی [۱۴] در انواع مختلف پیوندهای مولکولی با موفقیت اجرا شده است. با این حال، در مورد SET‌های

تک مولکولی در رژیم انسداد کولنی، انتقال غیر همدوس است و روش دیگری مورد نیاز هست [۱۰]. رویکرد دیگری مبتنی بر مدل نیمه-تجربی برای شبیه سازی خواص SET های تک مولکولی در چند سال گذشته معرفی شده است [۱۱]. کارت استوکبرو چارچوب ارائه شده در مرجع [۱۱] را با گنجاندن در داخل توصیف نظریه تابع چگالی برای عملکرد SET های تک مولکولی در رژیم انسداد کولنی توسعه داده است. در مرجع [۱۰]، کارت استوکبرو محاسبات بر اساس توابع گرین غیر تعادلی مبتنی بر نظریه تابع چگالی شکل گرفته است. مدل ارائه شده در این مرجع، مبنای نرم افزار ATK^5 برای شبیه سازی ترانزیستورهای تک مولکولی قرار گرفته است. این نرم افزار قابلیت محاسبه انرژی باردار شدن مولکول به عنوان تابعی از پتانسیل گیت خارجی در یک محیط SET را داراست و بر همین مبنای قادر به محاسبه نمودار پایداری بار مولکول در محیط SET است؛ اما مشکل اصلی این نرم افزار این است که قابلیت محاسبه جریان تک الکترونی (انتقال غیر همدوس) را ندارد. بر همین مبنای در این مقاله با کمک نتایج به دست آمده از این نرم افزار (نتایج به دست آمده از روش اصول اولیه) و با معرفی ارتباط بین این نتایج با مفهوم خازنی ساختارهای اتمی (مدل خازنی) توانستیم با کمک نرم افزار SIMON به محاسبه جریان تک الکترونی افزاره SET با جزیره مولکولی دست یابیم.

دسته بندی مطالب مقاله به این شرح است: در بخش دوم، برای درک مفهوم تزویج به تبیین چگالی حالات مولکولی تزویج شده به الکترودهای فلزی خواهیم پرداخت و در ادامه بر مبنای این مفهوم، تزویج ضعیف و قوی شرح داده خواهد شد. در بخش چهارم با استفاده از توصیف مدل خازنی به بیان مفهوم انرژی افزودن، از دیدگاه روش اصول اولیه خواهیم پرداخت. در پایان بخش چهارم نشان می دهیم که برای محاسبه جریان تک الکترونی SET باید از رژیم انسداد کولنی کوانتومی استفاده شود. در بخش پنجم رابطه نرخ تونل زنی در رژیم انسداد کولنی کوانتومی را از رابطه نرخ تونل زنی در نظریه ارتدکس، استنتاج خواهیم کرد. در نهایت، در بخش ششم بر مبنای رابطه نرخ تونل زنی در رژیم انسداد کولنی کوانتومی و به کمک نرم افزار SIMON به محاسبه منحنی جریان SET های تک مولکولی خواهیم پرداخت.

۲- چگالی حالات مولکول تزویج شده به الکترودهای فلزی

چگالی حالات مولکول ها به دلیل محدودیت ذره در سه بعد، در ترازهای انرژی الکترونیکی مولکول و به صورت تابع ضربه است و فقط تا زمانی صحیح است که مولکول ها منزوی باشند. بار الکترونیکی (الکترون) اوربیتال مولکولی مربوط به مولکول منزوی دارای طول عمر نامحدودی است. بر اساس اصل عدم قطعیت، این طول عمر نامحدود متناسب با ترازهای انرژی کاملاً گسسته در مولکول منزوی است، یعنی اگر $\delta t \rightarrow \infty$ آنگاه $\delta E \rightarrow 0$. به عنوان مثال وقتی که مولکول منزوی به یک الکترون فلزی تزویج شود، این امکان وجود دارد که الکترون به

داخل فلز فرار کند؛ بنابراین در چنین وضعیتی طول عمر الکترون ها محدود است. از این رو بر اساس اصل عدم قطعیت، ترازهای انرژی الکترونیکی مولکول تزویج شده به الکترون فلزی با پهنای محدودی پهن می شوند (پهن شدگی ترازهای انرژی از حالت اولیه ی دلتا). در نتیجه، هر چقدر که میزان تزویج مولکول به الکترون فلزی بیشتر باشد پهن شدگی مربوط به ترازهای انرژی مولکول بیشتر خواهد بود. با توجه به نمایی بودن احتمال فرار الکترون از مولکول، می توان وابستگی زمانی الکترون در یک اوربیتال مولکولی مربوط به مولکول تزویج شده را به صورت زیر نوشت:

$$|\psi(t)|^2 = |\psi(0)|^2 \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (1)$$

که $\psi(t)$ تابع موج الکترون، τ طول عمر الکترون و $u(t)$ تابع پله است. با گرفتن تبدیل فوری از رابطه (۱)، داریم:

$$|\psi(E)|^2 = \frac{\hbar^2}{(E - E_0)^2 + (\hbar/2\tau)^2} \quad (2)$$

که در آن E_0 تراز انرژی مولکول منزوی و \hbar ثابت پلانک است. با بهنجار سازی رابطه (۲) و ضرب آن در ۲ به خاطر اصل طرد پائولی (تبهگنی اسپین)، چگالی حالات برای یک مولکول که به الکترون فلزی تزویج شده است، به صورت زیر به دست می آید [۱۵]:

$$D(E) = \frac{2}{\pi} \frac{\frac{\hbar}{2\tau}}{(E - E_0)^2 + (\frac{\hbar}{2\tau})^2} \quad (3)$$

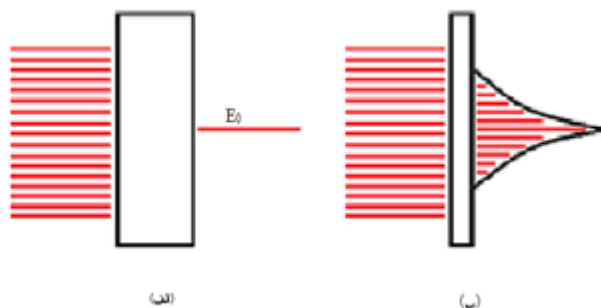
در نتیجه تزویج میان مولکول و الکترودهای فلزی می تواند به وسیله طول عمر الکترون در مولکول، τ ، یا پهن شدگی ترازهای انرژی، γ ، شرح داده شود.

$$\gamma = \frac{\hbar}{\tau} \quad (4)$$

$$D(E) = \frac{2}{\pi} \frac{\frac{\gamma}{2}}{(E - E_0)^2 + (\frac{\gamma}{2})^2} \quad (5)$$

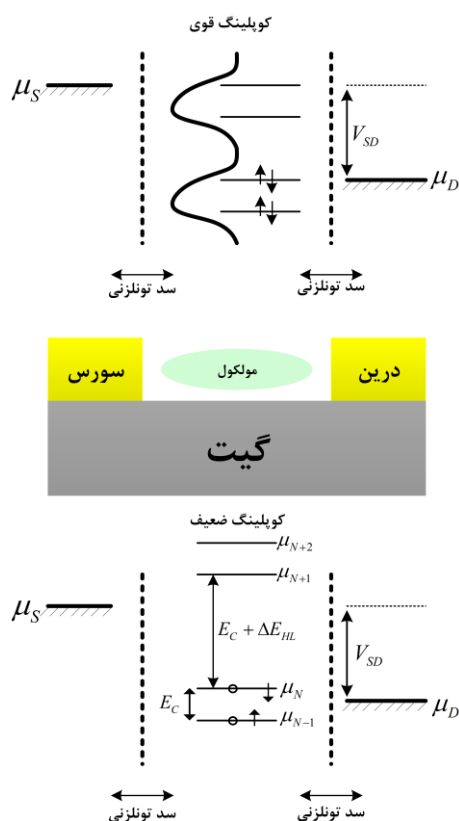
یک روش برای درک مفهوم پهن شدگی این است که بدانیم قبل از تزویج مولکول به الکترودهای فلزی، چگالی حالات مولکول تقریباً مشابه با شکل (۱- الف) است. در واقع قبل از تزویج، یک سطح تیز در مولکول و یک توزیع پیوسته از حالات الکترونی در اتصال های سورس و درین داریم. پس از تزویج، اثر کلی بدین ترتیب است که چگالی حالت مولکول از ساختار تیز اولیه (۱- الف) به یک ساختار پهن شده تبدیل می شود (۱- ب). ارتفاع های متفاوت در ساختار پهن شده بیانگر این حقیقت است که تابع موج مربوط به هر سطح الکترونی در اتصال فلزی با اندازه های متفاوتی بر روی حالت الکترونی در مولکول اثر می گذارد.

یک نکته مهم این است که اگر ما همه ارتفاع‌های متفاوت را در محدوده انرژی با هم جمع کنیم، پاسخ همچنان، همان سطح انرژی اولیه است.



شکل (۱): چگالی حالات انرژی (الف) قبل و (ب) بعد از تزویج الکترودها به جزیره مولکولی

شرط رژیم تزویج قوی را با بیان $\gamma \cdot \tau_e \ll 1$ نیز می‌توان نشان داد که τ_e طول عمر همدوس الکترون است. در این رژیم ما می‌توانیم از مدل انتقال همدوس برای شبیه‌سازی خواص الکتریکی سامانه استفاده کنیم. شرط رژیم تزویج ضعیف، $\gamma \gg E_a$ است که در آن جزیره به‌طور ضعیفی به الکترودهای سورس و درین تزویج شده است. بیان دیگر از شرط تزویج ضعیف، $\gamma \cdot \tau_e \gg 1$ هست که در این وضعیت الکترون از سورس به جزیره تونل می‌زند و برای یک مدت‌زمان نسبتاً کافی در مولکول جای‌گزیده می‌شود و سپس از مولکول به درین تونل می‌زند. به خاطر جایگزیدگی الکترون در مولکول، می‌توان نتیجه گرفت که الکترون تمام اطلاعات مربوط به حالت کوانتومی اولیه خود را از دست می‌دهد؛ بنابراین، فرآیندهای تونل‌زنی پی‌درپی از مولکول به درین مستقل از فرآیندهای تونل‌زنی از سورس به داخل مولکول خواهد بود. این سازوکار انتقال تحت عنوان تونل‌زنی پی‌درپی یا تونل‌زنی تک-الکترونی معرفی می‌شود (شکل ۲، پایین) [۱۰]. انتقال الکترون در این وضعیت فقط در صورتی امکان‌پذیر است که جزیره دارای دست‌کم یک تراز الکترونیکی در داخل پنجره بایاس درین-سورس باشد. برای ولتاژهای درین-سورس کمتر از انرژی آستانه، تنها یک تراز در داخل پنجره بایاس وجد خواهد داشت و در نتیجه سامانه به‌عنوان یک SET عمل خواهد کرد. در پایان این بخش، ذکر این نکته لازم است که بدانیم در رژیم تزویج متوسط، پدیده‌های مختلفی مربوط به اثرات همبستگی الکترون-الکترون (از قبیل اثر kondo و اثر co-tunneling) قابل مشاهده است [۱۷].



شکل (۲): هندسه یک ترانزیستور مولکولی نانومقیاس به همراه نمودار انرژی آن در دو رژیم تزویج ضعیف و قوی [۱۷].

۳- تزویج ضعیف و قوی

شکل ۲ به‌طور هندسی، تزویج یک ترانزیستور مولکولی نانومقیاس را نشان می‌دهد. هندسه افزاره شامل الکترودهای سورس و درین فلزی و یک جزیره مولکولی تزویج‌شده به این دو الکتروده است. الکترون‌ها می‌توانند از طریق جزیره از سورس به درین انتقال یابند. دقت شود که تزویج الکترودهای سورس و درین به جزیره از نوع پیوند تونلی است اما تزویج الکترودهای گیت به جزیره فقط از نوع خازنی است و الکترون‌ها نمی‌توانند از طریق گیت جریان داشته باشند. به‌وسیله پتانسیل خارجی واردشده به الکترودهای گیت، می‌توان مکان ترازهای الکترونیکی جزیره را نسبت به سطح فرمی تنظیم کرد. تزویج مولکول به الکترودهای سورس و درین باعث می‌شود تا ترازهای الکترونیکی مولکول با مقدار γ پهن شوند و به‌همین خاطر الکترون‌ها در مسیر انتقال، زمان کوتاهی در جزیره باقی خواهند ماند. با توجه به‌اینکه الکترون‌ها می‌توانند از تراز انرژی پر در مولکول، به‌طرف الکتروده خارج شوند و یا از الکتروده به تراز انرژی خالی در مولکول اضافه شوند، لذا امکان اندازه‌گیری یک انرژی به نام انرژی افزودن، E_a وجود دارد. اگر مولکول با الکترودهای سورس و درین، تزویج قوی داشته باشد، آنگاه ترازهای الکترونیکی مولکول به‌صورت قابل توجهی پهن‌تر می‌شوند (شکل ۲، بال)؛ به‌طوری‌که به‌ازای $E_a \gg \gamma$ در رژیم تزویج قوی هستیم و الکترون به‌طور همدوس از طریق جزیره عبور خواهد کرد.

۴- وابستگی انرژی آستانه به الکترون خواهی و انرژی یونش مولکول در محیط SET

همان گونه که در شکل ۲ می بینیم حالات الکترونی در الکترودهای سورس و درین تا پتانسیل های الکتروشیمیایی μ_S و μ_D پر شده اند، این پتانسیل های الکتروشیمیایی توسط ولتاژ درین-سورس $V_{SD} = (\mu_S - \mu_D) / e$ (ولتاژ اعمالی بیرونی) به هم مرتبط هستند. تا زمانی که تعداد حالات الکترونی قابل دسترس مولکول در پنجره انرژی میان μ_S و μ_D صفر (غیرصفر) باشد، انتقال از مولکول نیز صفر (غیرصفر) خواهد بود. تعداد حالات الکترونی قابل دسترس مولکول از محاسبه پتانسیل الکتروشیمیایی مولکول، $\mu_{molecule}(N)$ ، به دست می آید که به صورت کمینه انرژی لازم برای اضافه شدن N -امین الکترون به مولکول، $\mu_{molecule}(N) = U(N) - U(N-1)$ ، تعریف می شود؛ و در آن $U(N)$ انرژی کل مولکول با N الکترون در حالت پایه است. برای به دست آوردن $U(N)$ دو فرض مهم را در نظر می گیریم [۱۸]. اول اینکه که سطوح کوانتومی مولکول (طیف گسسته انرژی مولکول) می تواند مستقل از تعداد الکترون های مولکول به دست آید، دوم اینکه اندرکنش کولنی بین الکترون های مولکول با الکترون های محیط (مثلاً الکترون های الکترودهای فلزی سورس و درین) و همین طور اندرکنش کولنی بین خود الکترون های مولکول را به صورت یک خازن ثابت و منفرد (ظرفیت C_Σ) معادل سازی می کنیم. منظور از خازن ثابت و منفرد این است که ظرفیت C_Σ مستقل از تعداد الکترون های مولکول است. می توان اندرکنش های کولنی (ظرفیت C_Σ) را به صورت شکل مداری نیز نشان داد، به این ترتیب که خازن C_Σ می تواند به صورت حاصل جمع خازن های بین مولکول و الکترودهای سورس، C_S ، بین مولکول و الکترودهای درین، C_D ، بین مولکول و الکترودهای گیت، C_g ، در نظر گرفته شود $(C_\Sigma = C_S + C_D + C_g)$. این برهم کنش الکتروستاتیکی بین مولکول و الکترودهای گیت، سورس و درین را که با سه ظرفیت خازنی مؤثر (یعنی C_S ، C_D و C_g) بیان کردیم، بنام مدل خازنی شناخته می شود. اکنون با در نظر گرفتن این فرضیه ها، پتانسیل الکتروشیمیایی مولکول به صورت زیر قابل بیان است [۱۸-۲۰].

$$\mu_N = \mu_{molecule}(N) = U(N) - U(N-1) = E_N + \frac{(N - \frac{1}{2})e^2}{C_\Sigma} \quad (۶)$$

$$- \frac{e}{C_\Sigma} C_g V_g - \frac{e}{C_\Sigma} C_d V_d - \frac{e}{C_\Sigma} C_s V_s$$

که E_N انرژی N -امین سطح کوانتومی مولکول (بالترین اوربیتال مولکولی اشغال شده، $E_N = E_{HOMO}$) است و عبارت های بعد مربوط به انرژی باردار شدن الکتروستاتیکی مورد نیاز برای اضافه شدن N الکترون به مولکول در محیط SET است.

در یک شکل آشناتر داریم: $\mu_{molecule}(N) = \mu_{chemical}(N) + e\phi_N$ ، یعنی پتانسیل الکتروشیمیایی برابر با مجموع پتانسیل شیمیایی،

$\mu_{chemical}(N)$ ، و پتانسیل الکتروستاتیکی، $e\phi_N$ ، است. پتانسیل الکتروستاتیکی ϕ_N شامل یک بخش پیوسته و یک بخش گسسته است که بخش پیوسته، متناسب با ولتاژهای V_g ، V_d و V_s است. انرژی افزودن، E_a ، برابر با تغییر انرژی الکتروشیمیایی مولکول برای اضافه شدن یک الکترون جدید به مولکول است که به صورت رابطه ۷ تعیین می شود:

$$\begin{aligned} E_a(N) &= \mu_{molecule}(N+1) - \mu_{molecule}(N) \\ &= U(N+1) - U(N) - [U(N) - U(N-1)] \\ &= \frac{e^2}{C_\Sigma} + E_{N+1} - E_N \quad (۷) \\ &= \frac{e^2}{C_\Sigma} + E_{LUMO} - E_{HOMO} = E_C + \Delta E_{HL} \end{aligned}$$

E_C ، انرژی لازم برای غلبه بر دافعه کولنی میان الکترون های مختلف (انرژی کولنی برای باردار شدن یک مولکول) و ΔE_{HL} حاصل طیف گسسته انرژی مولکول (شکاف انرژی HOMO-LUMO مولکول خنثی) است. از رابطه ۷ می بینیم که انرژی آستانه (انرژی لازم برای اضافه شدن یک الکترون به مولکول) شامل قسمتی صرفاً الکتروستاتیکی (یعنی E_C) علاوه بر فاصله بین دو سطح انرژی کوانتومی گسسته (فاصله بین پایین ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده و بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده) هست. باید توجه داشت زمانی N -امین الکترون به جزیره اضافه خواهد شد که μ_N پایین تر از هر دو مقدار μ_S و μ_D قرار گرفته باشد. به همین ترتیب برای اضافه شدن یک الکترون بیشتر به مولکول (با N الکترون)، عبارات $\mu_{N+1} = \mu_N + E_C + \Delta E_{HL}$ باید پایین تر از هر دو مقدار μ_S و μ_D قرار بگیرد. برای سادگی فرض کرده ایم که ΔE_{HL} برای حالات مختلف بار مولکول تغییر نمی کند، این موضوع به ما اجازه می دهد تا از زیر نویس N برای ΔE_{HL} چشم پوشی کنیم؛ بنابراین حالت $N+1$ امین الکترون باید به اندازه $E_C + \Delta E_{HL}$ بزرگ تر از حالت مورد نظر برای N -امین الکترون باشد.

در ادامه به بیان انرژی آستانه با استفاده از اصول اولیه می پردازیم و ارتباط این انرژی با مدل خازنی را تبیین می کنیم. الکترون خواهی مولکول (E_A) و انرژی یونیزاسیون مولکول (E_I) توسط اختلاف انرژی کل در حالات باردار شده مولکول با حالت خنثی مولکول به صورت زیر تعریف می شود [۱۵].

$$E_A = A(N) = U(N) - U(N+1) \quad (۸)$$

$$E_I = I(N) = U(N-1) - U(N) \quad (۹)$$

که N معرف تعداد الکترون در حالت خنثای مولکول است. حالات باردار شده مولکول با اضافه شدن یک الکترون، $N+1$ ، و کم شدن یک الکترون، $N-1$ ، به ترتیب مربوط به آنیون و کاتیون هستند. با مقایسه

رابطه‌های ۸ و ۹ با رابطه انرژی افزودن (به‌دست‌آمده از مدل خازنی در رابطه ۷)، به رابطه زیر خواهیم رسید:

$$E_a(N) = E_C + \Delta E_{HL} = I(N) - A(N) = E_I - E_A \quad (10)$$

این رابطه به ما کمک می‌کند تا با داشتن مقادیر انرژی یونش و الکترون‌خواهی مولکول که با استفاده از روش ارائه‌شده در [۱۰] (و به کمک نرم‌افزار ATK) محاسبه می‌شوند، انرژی افزودن مولکول را تخمین بزنیم. باید توجه داشته باشیم زمانی که دو الکترون متوالی به یک تراز الکترونیکی با تبهگنی اسپین (بر اساس اصل طرد پائولی هر تراز الکترونیکی دارای حالات اسپین بالا و اسپین پایین هستند) اضافه می‌شوند، ΔE_{HL} صفر خواهد بود. به همین دلیل، اصل طرد پائولی باید در رابطه ۷ در نظر گرفته شود. اگرچه انتقال وابسته به اسپین در حضور الکتروادهای فرومغناطیسی اتفاق می‌افتد اما در اینجا ما هیچ دلیلی برای تمایز قطبش اسپین نخواهیم داشت و از این رو فرض می‌کنیم که هر دو حالت مربوط به اسپین بالا و پایین بصورت یکسان در اشغال حالت مورد نظر شرکت می‌کنند [۲۱]، [۲۲]. معادله اصلاح‌شده بصورت زیر خواهد بود:

$$\begin{cases} E_a(N) = E_C & \text{برای } N \text{ های فرد} \\ E_a(N) = E_C + \Delta E_{HL} & \text{برای } N \text{ های زوج} \end{cases} \quad (11)$$

با درک این رابطه و به کمک تعریف الکترون‌خواهی مرتبه اول بصورت زیر:

$$E_A^{-1} = A(N+1) = U(N+1) - U(N+2) \quad (12)$$

می‌توانیم انرژی باردار شدن، E_C ، را بصورت زیر تعیین کنیم:

$$E_C = E_A - E_A^{-1} = A(N) - A(N+1) \quad (13)$$

این رابطه نیز به ما کمک می‌کند تا با داشتن مقادیر الکترون‌خواهی و الکترون‌خواهی مرتبه اول مولکول که با استفاده از روش ارائه‌شده در مرجع [۱۰] (و به کمک نرم‌افزار ATK) محاسبه می‌شوند، انرژی باردار شدن مولکول را تخمین بزنیم. با استفاده از مقادیر E_C و E_a به‌دست‌آمده و با کمک نرم‌افزار SIMON، منحنی جریان عبوری از SET مولکولی را محاسبه می‌کنیم.

قبل از رفتن به بخش بعد، وابستگی دمایی را مورد بحث قرار می‌دهیم. تغییرات حرارتی، می‌تواند بیشتر اثرات تک الکترونی را خنثی کند، به‌گونه‌ای که سازوکار آرمانی انتقال را (به‌استثنای شرایط $k_B T \ll E_a$) از بین می‌برد. در این شرایط برای عملکرد صحیح افزاره در دمای اتاق، E_a ممکن است به‌اندازه چند الکترون‌ولت باشد. این قابلیت را می‌توان با کاهش اندازه جزیره SET به کم‌تر از چند نانومتر اجرا کرد. کاهش اندازه جزیره تا زیر ۲ نانومتر، می‌تواند منجر به بهبود عملکرد دمای اتاق SET شود. در این مقیاس اندازه جزیره، که E_C قابل عملکرد در دمای اتاق است (یعنی $k_B T \cong 26 \text{ meV} \ll E_C$).

ظرفیت خازنی کل مربوط به جزیره (یعنی C_{Σ}) ممکن است حدود ۰/۵ آتوفاراد یا حتی کوچک‌تر هم باشد. از این رو SET‌های با اندازه جزیره در حدود ۲ نانومتر، بیش از جزایر بزرگ‌تر از ۲ نانومتر، برای کاربردهای دمای اتاق دلگرم‌کننده هستند. علاوه‌براین، در این مقیاس اندازه جزیره، اثرات گسستگی سطوح انرژی جزیره برای عملکرد مناسب دمای اتاق اهمیت پیدا می‌کند. در جزایری که با وجود عملکرد مناسب در دمای اتاق، فاصله بین سطوح انرژی آن (یعنی ΔE) همچنان خیلی کمتر از E_C است (یعنی $E_a \approx E_C$)، رفتار انسداد کولنی بر مبنای رژیم انسداد کولنی کلاسیک (نظریه ارتدکس) شناخته شده است ($k_B T \ll E_C$). در جزایری که ΔE با E_C قابل‌مقایسه است (یعنی $E_a = E_C + \Delta E$)، رفتار انسداد کولنی دیگر بر مبنای نظری ارتدکس قابل‌بیان نیست و باید از نظریه ارتدکس اصلاح‌شده (رژیم انسداد کولنی کوانتومی) بهره برد؛ بنابراین در اینجا ما سه رژیم دمایی را از هم تفکیک می‌کنیم.

$$E_C \ll k_B T \quad (1)$$

(به عبارت دیگر رفتار تک‌الکترونی به‌وسیله تغییرات دمایی تخریب می‌شود).

$$\Delta E, k_B T \ll E_C \quad (2)$$

آن بسیاری از سطوح توسط تغییرات دمایی تحریک شده‌اند.

$$\Delta E, k_B T \ll E_C, \text{ رژیم انسداد کولنی کوانتومی که در} \quad (3)$$

آن تنها یک یا چند سطح در انتقال شرکت می‌کنند.

SETها معمولاً با استفاده از نظریه ارتدکس (رژیم انسداد کولنی

کلاسیک) که در آن گسستگی سطوح انرژی جزیره به‌طور کامل نادیده گرفته می‌شود، تحلیل شده‌اند. باید توجه کرد که این فرض فقط برای نانوذرات فلزی بزرگ‌تر از ۲ نانومتر و نقطه‌های کوانتومی نیم‌رسانای بزرگ‌تر از ۱۰ نانومتر معتبر است [۱۹]؛ بنابراین از آنجایی که گسستگی سطوح انرژی مولکول‌ها قابل صرف‌نظر نیست، برای محاسبه ویژگی‌های انتقال SETهای مبتنی بر تک مولکول‌ها، باید رژیم انسداد کولنی کوانتومی در نظر گرفته شود و نمی‌توان از رژیم انسداد کولنی کلاسیک استفاده کرد.

۵- نرخ تونل‌زنی در رژیم انسداد کولنی کوانتومی

تونل‌زنی تک‌الکترونی در نظریه ارتدکس، گسستگی انرژی الکترون جزیره را نادیده گرفته است یعنی فرض شده که طیف انرژی الکترون پیوسته است. در این مدل، نرخ عبور (نرخ تونل‌زنی) Γ برابر است با [۲۰]، [۲۳]:

$$\Gamma(N, N+1) = \frac{1}{e^{\nu} R_T} \cdot \frac{-\Delta U}{1 - \exp\left(\frac{\Delta U}{k_B T}\right)} \quad (14)$$

که در آن R_T مقاومت سد تونلی (پیوند تونلی) است و ΔU متناظر با تغییر انرژی الکترواستاتیکی مدار، زمانی که الکترونی به داخل یا خارج

جزیره تونل می‌زند، است. همچنین e ، K_B و T به ترتیب معرف الکتریکی، ثابت بولتزمن و دما (برحسب کلوین) است.

برای جزایر با سطوح انرژی گسسته، محاسبه نرخ تونل‌زنی کل می‌تواند همانند نظریه ارتدکس از قانون طلایی فرمی شروع شود. با این حال با توجه به مفهوم پهن‌شدگی سطوح انرژی، در نظر گرفتن مقداری ثابت برای احتمال عبور تونلی (T_{if}) برای تمام سطوح انرژی امکان‌پذیر نیست. بر اساس یک دیدگاه واقع‌گرایانه، باید پهن‌شدگی متفاوتی برای هر یک از سطوح گسسته انرژی در نظر گرفته شود. این موضوع می‌تواند منجر به استنتاج رابطه احتمال عبور تونلی با استفاده از یک تابع لورنسی به صورت زیر شود [۱۲]:

$$T_{i,f}(E) = \sum_N \alpha \frac{\left(\frac{\gamma_N}{\gamma}\right)^\gamma}{\left(E - E_N\right)^\gamma + \left(\frac{\gamma_N}{\gamma}\right)^\gamma} \quad (15)$$

که E_N ($N=1, 2, 3$) ترازهای گسسته انرژی در جزیره هستند. پارامتر γ_N برابر با پهنای تابع مورد نظر (پهنای قله چگالی حالت موضعی) در نصف ارتفاع بوده و وابسته به فرکانس فرار الکترون به جزیره است. دقت شود که زیر نویس N در γ_N ، امکان نابرابری مقادیر پهن‌شدگی برای سطوح انرژی مختلف را نشان می‌دهد. پارامتر شدت عبور، α ($0 < \alpha < 1$)، به ما اجازه می‌دهد تا سدهای تونلی را مطابق با شفافیت آن‌ها یعنی ارتفاع و عرض سد پتانسیل دسته‌بندی کنیم. با استفاده از این روش، استنتاج نرخ تونلی از اصول اولیه (همانند نظریه ارتدکس) منجر به همان رابطه ۱۴ می‌شود با این تفاوت که قسمت مقاومت تونلی به صورت زیر تغییر می‌کند [۱۹]، [۲۰]:

$$R_T^{discrete} = \left(R_T^{orthodox} \cdot T_{i,f}^{orthodox} \right) / \left(\frac{\alpha \left(\frac{\gamma_N}{\gamma}\right)^\gamma}{\left(E - E_N\right)^\gamma + \left(\frac{\gamma_N}{\gamma}\right)^\gamma} \right) \quad (16)$$

در این عبارت $R_T^{orthodox}$ معرف مقاومت تونلی نظریه ارتدکس برای جزایر با سطوح انرژی پیوسته و $R_T^{discrete}$ معرف مقاومت تونلی برای جزایر با سطوح انرژی گسسته است. همچنین $T_{i,f}^{orthodox}$ معرف احتمال عبور در نظریه ارتدکس است که دارای یک مقدار ثابت برای سطوح انرژی مختلف است.

در این مقاله، شبیه‌ساز SIMON مورد استفاده قرار گرفته است. این شبیه‌ساز از تابع لورنسی برای در برگرفتن اثر گسسته‌سازی سطوح انرژی استفاده می‌کند و داده‌های مربوط به انرژی باردار شدن و فاصله بین سطوح انرژی (ΔE) را به صورت جدا از هم دریافت می‌کند. SIMON سطوح انرژی گسسته جزیره را به صورت توابعی به شکل لورنسی شبیه‌سازی می‌کند، به طوری که پارامترهای H و W در آن مربوط به وابستگی انرژی احتمال عبور (به عبارت دیگر وابسته به مقاومت سد تونلی) هستند. مطابق با رابطه ۱۶، دو پارامتر H و W در SIMON برای تعیین مقاومت سد تونلی در رژیم انسداد کولنی کوانتومی استفاده شده است. پارامتر W معرف مقدار پهن‌شدگی هر

تراز انرژی در جزیره (γ_N) است و طیف احتمال عبور تونلی را تعیین می‌کند. پارامتر H برای تعیین ارتفاع نهایی طیف احتمال استفاده شده است [۱۶]، [۲۳]. پهن‌شدگی ترازهای انرژی متناسب با شدت تزویج میان جزیره و الکترودهای فلزی است و توسط شفافیت سدهای تونلی تعیین می‌شود. به دلیل اثر پهن‌شدگی نابرابر برای هر یک از ترازهای انرژی گسسته، مقاومت سد تونلی نابرابری برای هر یک از ترازهای انرژی باید در نظر گرفت.

۶- منحنی جریان (نوسانات کولنی) SETهای مولکولی

در این مقاله، از نرم‌افزارهای ATK (نتایج ارائه شده در مرجع [۱۰]) و SIMON به منظور شبیه‌سازی رفتار فیزیکی و مداری SET مولکولی استفاده شده است. ما مشخصه جریان (نوسانات کولنی) از طریق مولکول‌های بنزن و C_{60} در یک محیط SET را ارائه می‌کنیم. هندسه ساختار مورد نظر در نرم‌افزار ATK (ارائه شده توسط کارت استوکبرو) شامل یک گیت فلزی است، بطوریکه بر روی این گیت عایق به ضخامت $3/8$ آنگستروم با ثابت دی‌الکتریک 10.6 وجود دارد. مولکول در فاصله $1/2$ آنگسترومی بالای عایق قرار گرفته است. در سمت چپ و راست مولکول، الکترودهای فلزی سورس و درین وجود دارند که فاصله بین مولکول و این الکترودها $2/8$ آنگستروم است. با شبیه‌سازی این ساختار در نرم‌افزار ATK به نتایج ارائه شده در مرجع [۱۰] دست می‌یابیم. نتایج به دست آمده برای مولکول بنزن در محیط SET در جدول ۱ و برای مولکول C_{60} در جدول ۲ ارائه شده است.

جدول (۱): نتایج به دست آمده از نرم‌افزار ATK برای مولکول بنزن در

محیط SET	
مقدار	نام پارامتر
۵٫۴۱ eV	E_I
-۲٫۲۶ eV	E_A
-۴٫۸۸ eV	E_A^{-1}

جدول (۲): نتایج به دست آمده از نرم‌افزار ATK برای مولکول C_{60}

در محیط SET	
مقدار	نام پارامتر
۵٫۸۹ eV	E_I
۲٫۸۵ eV	E_A
۱٫۵۳ eV	E_A^{-1}

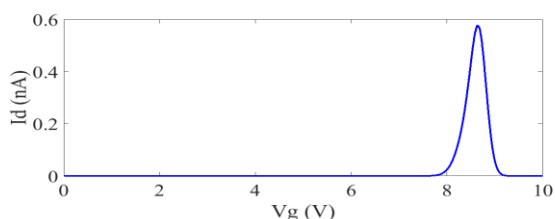
هم‌اکنون به کمک نتایج به دست آمده از ATK می‌توان انرژی باردار شدن، E_C ، و نیز اختلاف ترازهای الکترونیکی HOMO-LUMO

جدول (۵): پارامترهای شبیه‌سازی برای SET مبتنی بر مولکول بنزن

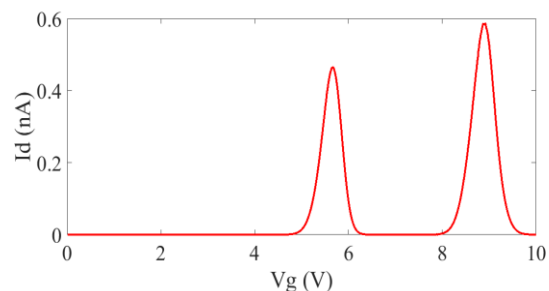
پارامترهای SET	مقدار
$C_d = C_s$	0.8×10^{-19} F
C_g	0.45×10^{-19} F
C_Σ	0.61×10^{-19} F
ΔE	5.5 eV
R_T^{orthodox}	100 M Ω
V_{ds}	100 mV
W	0.1 eV
H	1

جدول (۶): پارامترهای شبیه‌سازی برای SET مبتنی بر مولکول C_{60}

پارامترهای SET	مقدار
$C_d = C_s$	0.35×10^{-19} F
C_g	0.51×10^{-19} F
C_Σ	1.21×10^{-19} F
ΔE	1.72 eV
R_T^{orthodox}	100 M Ω
V_{ds}	100 mV
W_1	0.5 eV
W_2	0.1 eV
H	1



شکل (۳): منحنی جریان SET مبتنی بر مولکول بنزن

شکل (۴): منحنی جریان SET مبتنی بر مولکول C_{60}

(ΔE_{HL}) را برای مولکول‌های بنزن و C_{60} در محیط SET به دست آورد. مقادیر E_C و E_a ، مطابق نتایج ارائه‌شده در جداول ۱ و ۲ و به کمک روابط ۱۰ و ۱۳ بدست می‌آیند.

جدول (۳): نتایج به دست آمده برای E_C و E_a

نام پارامتر	مقدار
E_C^{benzene}	2.62 eV
E_a^{benzene}	7.67 eV
$E_C^{C_{60}}$	1.32 eV
$E_a^{C_{60}}$	3.04 eV

مقادیر ΔE_{HL} ، مطابق نتایج ارائه‌شده در جدول ۳ و به کمک تفاضل بین روابط ۱۰ و ۱۳ بدست می‌آیند.

جدول (۴): نتایج به دست آمده برای ΔE_{HL}

نام مولکول	مقدار
$\Delta E_{HL}^{\text{benzene}}$	5.05 eV
$\Delta E_{HL}^{C_{60}}$	1.72 eV

برای تعیین خازن کل (یعنی C_Σ) از رابطه $E_C = e^2 / C_\Sigma$ بهره می‌گیریم. در رژیم پاسخ خطی [یعنی: $(e/C_\Sigma) \ll V_{SD}$ ، $V_{SD} \ll (\Delta E/e)$] به پتانسیل الکتروشیمیایی، ولتاژهای گیت به صورت خطی با ضریب تناسب $\alpha = (C_g/C_\Sigma)$ تغییر می‌یابند. در واقع ضریب α فاصله بین قله‌های جریان برحسب ولتاژ گیت را به انرژی آستانه، به صورت $e \cdot \alpha \cdot (V_g^{N+1} - V_g^N)$ مرتبط می‌کند: که V_g^{N+1} و V_g^N به ترتیب ولتاژهای گیت، مربوط به N امین و $N+1$ امین قله جریان هستند. حال از آنجایی که خازن کل (یعنی C_Σ) را داریم، کافی است با تطبیق رابطه $e \cdot \alpha \cdot (V_g^{N+1} - V_g^N)$ بر نمودارهای پایداری بار ارائه شده توسط کارت استوک برو برای مولکول‌های بنزن و C_{60} در محیط SET، خازن گیت را محاسبه کنیم [۱۰]. نهایتاً با استفاده از رابطه $C_\Sigma = C_s + C_d + C_g$ ، خازن‌های سورس و درین را نیز بدست می‌آوریم [۱۶].

با توجه به اینکه نرم‌افزار ATK قابلیت محاسبه جریان از طریق مولکول‌های بنزن و C_{60} در محیط SET را ندارد، با بهره‌گیری از قابلیت نرم‌افزار SIMON برای شبیه‌سازی جزایر با سطوح انرژی گسسته در ادوات تک‌الکترونی، برای اولین بار به محاسبه جریان از طریق SET‌های مولکولی نائل می‌شویم. برای این کار، نتایج استخراج‌شده از نرم‌افزار ATK را در نرم‌افزار SIMON وارد می‌کنیم و با تغییر ولتاژ گیت، جریان درین را برحسب ولتاژ گیت برای SET‌های مولکولی موردنظر محاسبه می‌کنیم (نتایج در دو شکل ۳ و ۴ نشان داده شده‌اند). پارامترهای شبیه‌سازی در SIMON برای این SET‌ها در جداول ۵ و ۶ آورده شده است.

$$V_g = \left[\frac{e}{2C_\Sigma} + \frac{\Delta E}{e} - \frac{C_d}{C_\Sigma} V_{SD} \right] \frac{C_\Sigma}{C_g} \quad (20)$$

قله جریان هنگامی رخ می‌دهد که پایین‌ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده در میانه پنجره انرژی سطوح فرمی سورس و درین قرار گیرد. برای رخداد چنین حالتی باید ولتاژی به اندازه $(V_{SD}/2)(C_\Sigma/C_g)$ به ولتاژ گیت رابطه (20) اضافه شود؛ بنابراین ولتاژ گیتی که در آن اولین قله جریان رخ می‌دهد می‌تواند به صورت زیر تعیین گردد:

$$V_{peak,1} = \left[\frac{e}{2C_\Sigma} + \frac{\Delta E}{e} - \frac{C_d}{C_\Sigma} V_{SD} \right] \frac{C_\Sigma}{C_{g_i}} + \frac{V_{SD}}{2} \frac{C_\Sigma}{C_g} \quad (21)$$

هنگامی که این حالت رخ می‌دهد پایین‌ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده از طریق پیوند سورس-مولکول توسط یک الکترون اشغال شده است. سپس یک شکاف کولنی بین حالات اسپین بالا و اسپین پایین در این تراز انرژی تولید می‌شود که ناشی از انرژی بردار شدن مولکول است. برای اینکه جریان در حالت انرژی خالی بعدی، دوباره قله ایجاد کند پتانسیل مولکول باید به مقدار e/C_Σ کاهش یابد؛ بگونه-ای که حالت اسپین بالا یا اسپین پایین تا جایی کاهش می‌یابد که بین سطوح فرمی سورس و درین قرار گیرد. ولتاژ گیت اضافی که نیاز است اعمال شود بصورت زیر مشخص شده است:

$$V_{peak,2} = V_{peak,1} + \left(\frac{e}{C_\Sigma} \right) \frac{C_\Sigma}{C_g} \quad (22)$$

با اعمال این ولتاژ، قله بعدی جریان بدست می‌آید؛ بنابراین می‌توانیم قله‌های بعدی جریان را نیز به صورت زیر بدست آوریم:

$$V_{peak,3} = V_{peak,2} + \left(\frac{e}{C_\Sigma} + \frac{\Delta E}{e} \right) \frac{C_\Sigma}{C_g} \quad (23)$$

$$V_{peak,4} = V_{peak,3} + \left(\frac{e}{C_\Sigma} \right) \frac{C_\Sigma}{C_g} \quad (24)$$

در نتیجه اختلاف ولتاژ بین هر دو قله جریان متناظر، با توجه به تعداد الکترون‌ها در مولکول، می‌تواند به صورت زیر محاسبه شود:

$$\begin{cases} \Delta V_{peak}^n = \frac{C_\Sigma}{C_g} \left(\frac{e}{C_\Sigma} \right) = \left(\frac{e}{C_g} \right) & \text{برای } N \text{ های فرد} \\ \Delta V_{peak}^n = \frac{C_\Sigma}{C_g} \left(\frac{e}{C_\Sigma} + \frac{\Delta E}{e} \right) & \text{برای } N \text{ های زوج} \end{cases} \quad (25)$$

همانگونه که در رابطه (25) مشاهده می‌شود، مقدار ولتاژ میان قله‌های جریان برابر نیست. دلیل این پدیده، جدا شدن ترازهای انرژی به حالات اسپین بالا و پایین است. در این جا نتیجه می‌گیریم در رژیم پاسخ خطی [یعنی: $V_{SD} \ll (\Delta E/e), (e/C_\Sigma)$] به پتانسیل الکتروشیمیایی، ولتاژهای گیت به صورت خطی با ضریب تناسب $\alpha = (C_g/C_\Sigma)$ تغییر یافته‌اند. ضریب α همچنین فاصله بین قله-

از شکل‌های 3 و 4 واضح است که منحنی هدایت، نتایج تجربی به دست آمده را دنبال می‌کند [12] و محل قرار گرفتن قله‌های جریان، دقیقاً مشابه با محل‌های مورد نظر در نمودارهای پایدار بار برای مولکول‌های بنزن و C_{60} در محیط SET است [10]. برای راستی-آزمایی منحنی جریان به دست آمده، از رویکردی مبتنی بر رابطه لاندور استفاده می‌کنیم [24]:

$$R = \frac{\frac{h}{2e^2}}{T(E_f)} = \frac{12,9 \text{ k}\Omega}{T(E_f)} \quad (17)$$

که $T(E_f)$ تابع عبور تونلی از یک اتصال به اتصال دیگر است. از آنجایی که هدایت از طریق مولکول در افزاره SET شامل تونل‌زنی الکترون از الکتروود فلزی سورس به الکتروود فلزی درین است؛ لذا از این دیدگاه می‌توانیم انتقال از طریق یک مولکول به طول L با شکاف انرژی E_g را به صورت زیر تخمین بزنیم [25]:

$$T \cong \exp\left(-2\sqrt{mE_g} \frac{L}{H}\right) \quad (18)$$

حال با جایگزینی این رابطه در (17) می‌توانیم مقاومت را به صورت زیر بنویسیم:

$$R \cong 12,9 \text{ k}\Omega \exp\left(-0,7245 \sqrt{E_g L}\right) \quad (19)$$

در این رابطه، L برحسب آنگستروم و E_g برحسب الکترون-ولت است. برای مولکول بنزن در محیط SET، $E_g = 7,67 \text{ eV}$ است. با در نظر گرفتن این شکاف انرژی و همین‌طور طول مولکول بنزن در رابطه 19، مقاومت در حدود $100 \text{ M}\Omega$ به دست می‌آید. برای مولکول C_{60} در محیط SET، $E_g = 3,04 \text{ eV}$ است. حال با توجه به اینکه ولتاژ درین-سورس (V_{DS}) اعمالی ما به SET برابر 100 mV است، قله‌های جریان مربوط به منحنی جریان از طریق مولکول‌های بنزن و C_{60} در محیط SET باید در محدوده نانوامپر $100 \text{ mV}/100 \text{ M}\Omega$ باشند. از شکل‌های 3 و 4 واضح است که قله‌های جریان در محدوده نانوامپر بدست آمده است که این تطابق نسبتاً دقیق، بیانگر صحت نتایج شبیه-سازی در این مقاله است.

از آنجایی که دانستن دقیق محل قله‌های جریان SET می‌تواند در طراحی مدارات دیجیتال و کلیدزنی نقش اساسی ایفا کند، به تعیین ولتاژهایی که در آن‌ها، قله‌های جریان رخ می‌دهد خواهیم پرداخت. هنگامی که درین توسط V_{SD} بایاس شده، پتانسیل مولکول به علت تزویج خازنی که با الکتروود درین دارد به اندازه $(C_d/C_\Sigma)V_{SD}$ کاهش می‌یابد. فرض بر این است که مدار در دمای اتاق قرار دارد و تنها راه برای برقراری جریان، پایین آوردن اوربیتال‌های مولکولی اشغال نشده است، بطوریکه این حالات انرژی بین سطوح فرمی سورس و درین قرار بگیرند؛ بنابراین پتانسیل مولکول باید به مقدار $(e/2C_\Sigma) + (\Delta E_{HL}/e) - (C_d/C_\Sigma)V_{SD}$ کاهش یابد؛ که برای این کار به ولتاژ گیت رابطه (20) نیاز داریم.

های جریان برحسب ولتاژ گیت را به انرژی آستانه، به صورت $e.a.(V_g^{N+1} - V_g^N)$ مرتبط می‌کند: که V_g^N و V_g^{N+1} به ترتیب ولتاژهای گیت، مربوط به N امین و $N+1$ امین قله جریان هستند. این تقریب با رابطه (۱۱) هم‌خوانی دارد.

همان‌طور که در شکل ۴ دیده می‌شود مقدار قله جریان، با افزایش تعداد الکترون‌ها در مولکول افزایش می‌یابد. این امر می‌تواند ناشی از وابستگی نمایی پهن‌شدگی ترازهای انرژی به ارتفاع و عرض سد پتانسیل (مقاومت سد تونلی) باشد؛ به عبارت دیگر ارتفاع سد تونلی با افزایش اثر میدان الکتریکی (ناشی از افزایش ولتاژ گیت) کاهش می‌یابد و متعاقباً افزایش متناظری در پهن‌شدگی سطوح انرژی رخ می‌دهد (پهن‌شدگی‌های نابرابر در سطوح انرژی صورت می‌گیرید) که این افزایش پهن‌شدگی منجر به افزایش نمایی در احتمال تونل‌زنی می‌شود؛ بنابراین با افزایش V_g ، قله‌های جریان پهن‌تر و بلندتر می‌شوند یعنی نسبت جریان قله به دره در منحنی جریان، نابرابر می‌شوند. در نتیجه قله ابتدایی جریان در شکل ۴ از قله ثانوی جریان کوچک‌تر خواهد بود. از آنجایی که ما در این مقاله، این وابستگی نمایی به ارتفاع و عرض سد پتانسیل را از طریق مفهوم پهن‌شدگی ترازهای انرژی (یا پهن‌شدگی اوربیتال‌های مولکولی) به عبارت مقاومت سد تونلی (یعنی رابطه ۱۶) مرتبط ساختیم لذا می‌توان اینگونه استدلال کرد که افزایش پهن‌شدگی ترازهای انرژی (یا پهن‌شدگی اوربیتال‌های مولکولی) ناشی از افزایش ولتاژ گیت، باعث کاهش مقاومت سد تونلی می‌شود.

بنابراین با افزایش V_g ، و به علت افزایش پهن‌شدگی اوربیتال‌های مولکولی، قله‌های جریان پهن‌تر و بلندتر می‌شوند؛ یعنی نسبت جریان قله به دره در مشخصه جریان-ولتاژ، نابرابر می‌شود (به عبارتی پهن‌شدگی نابرابری در اوربیتال‌های مولکولی صورت می‌گیرد). در نتیجه قله ابتدایی جریان در شکل ۴ از قله ثانوی جریان کوچک‌تر خواهد بود. با افزایش ولتاژ گیت، تعداد الکترون‌ها در مولکول (یا جزیره) افزایش می‌یابند. همان‌طور که در بخش ۴ توضیح داده شد، N بیانگر تعداد الکترون‌ها در جزیره (یا مولکول) است. بنابراین با توجه به شکل ۴، دره‌ی اول معادل حالت انسداد کولنی با $N = 0$ (یعنی مولکول خنثی)، دره‌ی دوم معادل حالت انسداد کولنی با $N = 1$ (یعنی مولکول باردار شده با یک الکترون) و دره‌ی سوم معادل حالت انسداد کولنی با $N = 2$ (یعنی مولکول باردار شده با دو الکترون) است. در شکل ۳ نیز دره‌ی اول معادل حالت انسداد کولنی با $N = 0$ (یعنی مولکول خنثی) و دره‌ی دوم معادل حالت انسداد کولنی با $N = 1$ (یعنی مولکول باردار شده با یک الکترون) است.

۷- نتیجه‌گیری

از لحاظ نظری، دو رژیم انتقال برای ترانزیستورهای تک‌مولکولی وجود دارد. یکی رژیم انتقال همدوس برای تزویج قوی میان مولکول و الکترودهای فلزی و دوم رژیم انسداد کولنی که برای تزویج ضعیف تعریف می‌شود. SET‌های با جزیره مولکولی در رژیم انسداد کولنی

عمل می‌کنند و انتقال در این افزاره غیرهمدوس است. رویکرد مناسبی مبتنی بر مدل نیمه‌تجربی برای شبیه‌سازی خواص SET‌ها با جزیره مولکولی در چند سال گذشته معرفی شده است [۱۱]. مرجع [۱۰] چارچوب ارائه شده در مرجع [۱۱] را با گنجاندن در داخل توصیف نظریه تابع چگالی برای عملکرد SET‌های تک‌مولکولی در رژیم انسداد کولنی توسعه داده است. مدل ارائه‌شده در مرجع [۱۰] مبنای نرم‌افزار ATK برای شبیه‌سازی ترانزیستورهای تک‌مولکولی قرار گرفته است. این نرم‌افزار قابلیت محاسبه انرژی باردارشدن مولکول به عنوان تابعی از پتانسیل گیت خارجی در یک محیط SET را داراست و بر همین‌مبنا قادر به محاسبه نمودار پایداری بار مولکول در محیط SET است؛ اما مشکل اصلی این نرم‌افزار نداشتن قابلیت محاسبه جریان تک-الکترونی (انتقال غیرهمدوس) است. بر همین‌مبنا، برای اولین بار به کمک نتایج به‌دست‌آمده از این نرم‌افزار (نتایج به‌دست‌آمده از اصول اولیه) و با معرفی ارتباط بین این نتایج با مفهوم خازنی ساختارهای اتمی (مدل خازنی) توانستیم با استفاده از نرم‌افزار SIMON، به محاسبه جریان تک‌الکترونی افزاره SET (مبتنی بر تک‌مولکول) دست یابیم.

مراجع

- [1] N. Ghobadi, A. Afzali-Kusha, "Investigation and Modeling of Negative Bias Temperature Instability (NBTI) and Hot Carrier Injection (HCI) Induced Degradation in Multi-Gate Nano-Devices," JIAEEE, Vol. 12, No. 2, pp. 1-14, October. 2015.
- [2] H. Amin-Zadeh, M. Miralaeer, and M. A. Dashti, "Design and Modeling of Room-Temperature Analog-to-Digital Converters based on Nano-scale Semiconductor Quantum-dot Single Electron Transistors," JIAEEE, Vol. 14, No. 2, pp. 62-68, 2018.
- [3] M. Moradinasab, M. Fathipour, "A Compact Model for Current-Voltage in Doped Carbon Nanotube Field Effect Transistors," JIAEEE, Vol. 8, No. 2, pp. 68-74, 2011.
- [4] A. Aviram, M.A. Ratner, "Molecular rectifiers", Chem. Phys. Lett, Vol. 29, 1974.
- [5] David J. Perello, Sang Hoon Chae, Seunghyun Song, Young Hee Lee, "High-performance n-type black phosphorus transistors with type control via thickness and contact-metal engineering", Nature Communications Vol.6, 2016.
- [6] Yan-Dong Guo, Xiao-Hong Yan, and Yang Xiao, "Computational Investigation of DNA Detection Using Single-Electron Transistor-Based Nanopore", The Journal of Physical Chemistry C, Vol. 116, pp. 21609-21614, 2012.
- [7] Boddepalli SanthiBhushan, Mohammad Shahzad Khan, Anurag Srivastava, and Mohammad Shahid Khan, "First Principle Analysis of (10-Boranylthracene-9-yl) Borane-Based Molecular Single-Electron Transistor for High-Speed Low-Power Electronics", IEEE Transactions on electron devices, 2016.
- [8] Anurag srivastava, B. santhibhushan, Vikash sharma, Kamalpreet kaur, Md. shahzad khan, Madura marathe, Abir de sarkar, and Mohd. shahid khan, "Influence of Boron Substitution on Conductance of Pyridineand Pentane-Based Molecular Single Electron Transistors:

- First-Principles Analysis”, Journal of electronic materials, Vol. 45, No. 4, pp. 2233-2241, 2016.
- [9] Ahmed Mahmoud and Paolo Lugli, “Toward Circuit Modeling of Molecular Devices”, IEEE Transactions on Nanotechnology, Vol. 13, No. 3, pp. 510-515, 2014.
- [10] Kurt Stokbro, “First-principles modeling of molecular single electron transistors”, J Phys Chem C, Vol. 114, No. 48, pp. 20461–20465, 2010.
- [11] Kristen Kaasbjerg and Karsten Flensberg, “Strong polarization-induced reduction of additional energies in single-molecule nanojunctions”, Nano Lett, Vol. 8, pp. 3809–3814, 2008.
- [12] Sergey Kubatkin, Andrey Danilov, Mattias Hjort, Jérôme Cornil, Jean-Luc Brédas, Nicolai Stuhr-Hansen, Per Hedegard and Thomas Bjørnholm, “Single-electron transistor of a single organic molecule with access to several redox states”, Nature, Vol. 425, pp. 698–701, 2003.
- [13] Thgesen KS, Jacobsen KW, “Molecular transport calculations with wannier functions”, Chem Phys, Vol. 319, pp. 111–125, 2005.
- [14] Zahid F, Paulsson M et al, “a self-consistent transport model for molecular conduction based on extended Huckel theory with full three-dimensional electrostatics”, J Chem Phys, Vol. 123, pp. 64707, 2005.
- [15] Supriyo Datta, Quantum Transport: Atom to Transistor, Cambridge University Press, 2005.
- [16] Mostafa Miralaie, Ali Mir, “Performance analysis of single-electron transistor at room-temperature for periodic symmetric functions operation”, The Journal of Engineering (JOE), 2016.
- [17] Mostafa Miralaie, Ali Mir, and Mohammad Khaleqi Qaleh Joogh, “Design and Simulation of Room-Temperature Logic Functions Using a Three-Gate Single Electron Transistor in Silicon Quantum Dot”, Journal of Computational and Theoretical Nanoscience, Vol. 14, pp. 991–998, 2017.
- [18] Mostafa Miralaie, Ali Mir, “Evaluation of room-temperature Performance for ultra-small Single- Electron Transistors-Based Analog-to-Digital Convertors”, Journal of Circuits, Systems, and Computers, Vol. 27, No. 14, 8050217, 2018.

زیر نویس ها

-
- ¹ Addition
² Electron Affinity
³ Ionization Energy
⁴ Single Electron Transistor (SET)
⁵ Atomistix Toolkit (ATK)
⁶ Kurt Stokbro