#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

- 1. Patterned surface alignment to create complex three-dimensional nematic and chiral nematic liquid crystal / I. Nys // Liquid Crystals. 2020. Vol. 29, № 4. P. 65–83.
- 2. Complex liquid crystal superstructures induced by periodic photo-alignment at top and bottom substrates / I. Nys [et al.] // Soft Matter. – 2018. – Vol. 14, № 33. – P. 6892–6902.
- 3. Двумерная дифракционная оптическая структура на основе текстурированной фотоориентации полимеризуемого жидкого кристалла / О.С. Кабанова [и др.] // Журнал Белорусского государственного университета. Физика. – 2019. – № 3 – С. 4–11.

## О РАБОТЕ ОДНОМОЛЕКУЛЯРНОГО ТРАНЗИСТОРА В БИСТАБИЛЬНОМ РЕЖИМЕ

### А. П. Сайко, С. А. Маркевич

Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению, ул. П.Бровки, 19, 220072 Минск, Беларусь, e-mail:saiko@physics.by;markev@physics.by

Рассчитаны вольт-амперные характеристики модели одномолекулярного транзистора при учете сильного нелинейного электрон-колебательного взаимодействия в молекуле. Построены фазовые диаграммы, определяющие области существования стабильных и бистабильных режимов функционирования транзистора, в осях:  $\Gamma - \beta$ ,  $\beta - T$ ,  $V_G - T$  и  $V_G - \Gamma$ , где  $\Gamma$  – скорость туннелирования заряда,  $\beta$  – константа нелинейного электрон-колебательного взаимодействия,  $V_G$  – запирающее напряжение, T – температура термостата.

*Ключевые слова:* одномолекулярный транзистор; вольт-амперные характеристики; фазовые диаграммы.

# ON A SINGLE-MOLECULAR TRANSISTOR OPERATION IN THE BISTABLE REGIME

#### A. P. Saiko, S. A. Markevich

Scientific-Practical Material Research Centre, Belarus National Academy of Sciences, P. Brovka str. 19, 220072 Minsk, Belarus, Corresponding author: A. P. Saiko (saiko@physics.by)

The volt-ampere characteristics of a model of a single-molecule transistor are calculated taking into account the strong nonlinear electron-vibrational interaction in the molecule. Phase diagrams are constructed that determine the regions of existence of stable and bistable regimes of the transistor operation in the axes:  $\Gamma - \beta$ ,  $\beta - T$ ,  $V_G - T$ , and  $V_G - \Gamma$ , where  $\Gamma$  is the charge tunneling rate,  $\beta$  is the constant of the nonlinear electron-vibrational interaction,  $V_G$  is the blocking voltage, and T is the thermostat temperature.

Key words: single-molecule transistor; volt-ampere characteristics; phase diagrams.

#### введение

Построение электронных приборов, использующих отдельные молекулы, – одна из основных целей нанотехнологий. Важной проблемой в этой области является разработка устройств с молекулярной памятью, принцип действия которых основан на обратимом переключении молекулы между двумя проводящими состояниями при варьировании приложенного напряжения (такое переключение коренным образом отличается от стохастического переключения, не зависящего от прилагаемого напряжения). Для реализации указанного эффекта можно использовать такие экспериментальные конфигурации, например, как сканирующая туннельная микроскопия, одномолекулярный транзистор и др., в которых присутствуют контакты молекула-электрод [1–5].

#### РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В одномолекулярном транзисторе (OMT) (рис. 1) ток через молекулу с энергией «рабочего» электронного уровня  $\varepsilon_0$  описывается формулой (1):

$$I = \frac{e\Gamma}{4} \int_{-\infty}^{\infty} A(\varepsilon) \left[ f_L^0 \left( \varepsilon - \frac{eV_B}{2} \right) - f_R^0 \left( \varepsilon + \frac{eV_B}{2} \right) \right] \frac{d\varepsilon}{2\pi}$$
(1)

где

$$f_L^0 = \left[ \exp\left(\frac{\varepsilon - eV_B/2}{k_BT}\right) + 1 \right]^{-1} \quad f_R^0 = \left[ \exp\left(\frac{\varepsilon + eV_B/2}{k_BT}\right) + 1 \right]^{-1}$$
(2)

– функции распределения Ферми для электронов в левом (L) и правом (R) электродах;  $\Gamma$  – скорость туннелирования заряда от молекулы на один из электродов и обратно,  $V_B$  – приложенное к электродам напряжение,  $\varphi_L - \varphi_R = V_B$ , e – заряд электрона, T – температура,  $k_B$  – постоянная Больцмана;

$$A(\varepsilon) = 2\Gamma / [(\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_0)^2 + \Gamma^2]$$
(3)

– спектральная функция электронного состояния молекулы. Энергия электронного уровня  $\varepsilon_0$  благодаря линейному  $\lambda \sqrt{2m\omega_0} \hat{x} \hat{n}$  и квадратичному  $\beta(2m\omega_0) \hat{x}^2 \hat{n}$  взаимодействиям с внутримолекулярными колебаниями перенормируется и в приближении среднего поля становится равной  $\tilde{\varepsilon}_0$ :

$$\tilde{\varepsilon}_0 = \varepsilon_0 - \frac{2\lambda^2 n}{\omega_0 + \beta n} + \frac{\lambda^2 \beta n^2}{(\omega_0 + \beta n)^2}$$
(4)

где  $\varepsilon_0 = eV_G - eV_B / 2$ ,  $V_G$  – запирающее напряжение, которое регулирует энергию рабочего уровня,  $\omega_0$  – частота внутримолекулярного колебания,  $\hat{x}$  и *m* – вибрационное смещение и масса молекулы,  $\hat{n}$  – оператор населенности электронного уровня молекулы,  $\lambda$  и  $\beta$  – константы линейной и квадратичной электрон-колебательной (вибронной) связи, соответственно (всюду  $\hbar = 1$ ). Средний заряд (средняя населенность рабочего электронного уровня молекулы) *n* определяется с помощью согласующего уравнения:

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} A(\varepsilon) \left[ f_L^0 \left( \varepsilon - \frac{eV_B}{2} \right) + f_R^0 \left( \varepsilon + \frac{eV_B}{2} \right) \right] \frac{d\varepsilon}{2\pi}.$$
 (5)



Рисунок 1. Принципиальная схема одномолекулярного транзистора

Как вольт-амперные характеристики ОМТ, так и заселенность уровня энергии молекулы, через который происходит перенос заряда, в первую очередь зависят от параметров системы: скорости туннелирования заряда  $\Gamma$ , констант вибронной связи  $\lambda$  и  $\beta$ , перенормированной энергии  $\tilde{\varepsilon}_0$  рабочего электронного уровня молекулы, температуры T термостата, в который погружена рассматриваемая система. При определенных значениях этих параметров процесс переноса заряда в такой системе становится нестабильным, в данном случае – бистабильным.

Вольт-амперные характеристики ОМТ, рассчитанные по формуле (1) с учетом соотношений (2) – (5), приведены на рис. 2.



Рисунок 2. Рассчитанные вольт-амперные характеристики одномолекулярного транзистора;  $\Gamma / \omega_0 = 5$ ,  $k_B T / \omega_0 = 0.25$ ,  $\lambda / \omega_0 = 5$ 

При учете только линейной  $\lambda$  и слабой квадратичной  $\beta$  (>0) вибронной связи бистабильная кривая имеет двухпетлевый вид; с увеличением квадратичного вибронного взаимодействия начинает формироваться еще одна – третья – область бистабильности. Однако при достаточно больших значениях квадратичной константы связи  $\beta$  трехпетлевая бистабильная кривая вырождается в одну более узкую область бистабильности (по сравнению со случаем  $\beta = 0$ ). Для положительных значений  $V_B$  направление обхода контура этой вырожденной гистерезисной кривой  $I(V_B)$  прямо противоположно случаю, когда отсутствует квадратичного вибронное взаимодействия происходит качественное изменение в поведении бистабильной кривой: обход гистерезисной кривой заменяется на обратный, а смена низкопроводящего состояния на высокопроводящее (или наоборот) при понижении напряжения происходит уже не при нулевом его значении; при этом область бистабильности, т.е. разность  $V_{on} - V_{off}$ , сильно сокращается. Теоретически рассчитанные зависимости находятся в достаточно хорошем качественном согласии с данными эксперимента [1].

Нестабильный режим действия ОМТ обусловлен следующими причинами. Вопервых, благодаря сильному электрон-колебательному взаимодействию энергия электронного состояния молекулы становится немонотонно зависящей от среднего заряда на ней. Благодаря этому молекула может находиться или в низкопроводящем состоянии или же, наоборот, в высокопроводящем в зависимости от приложенного к электродам напряжения  $V_B$ . Во-вторых, если преобладает линейное вибронное взаимодействие, то ОМТ находится в высокопроводящем состоянии при повышении напряжения вплоть до некоторого предельного, а затем переходит в низкопроводящее состояние и при понижении напряжения находится в нем до тех пор, пока напряжение не достигнет нуля. Если же квадратичное вибронное взаимодействие также достаточно сильное, то поведение туннельного тока в ОМТ качественно изменяется: сначала (при повышении напряжения) реализуется низкопроводящее состояние, а затем – высокопроводящее, причем область бистабильности существенно сокращается.

Области существования стабильных и бистабильных режимов функционирования ОМТ в зависимости от параметров  $\Gamma$ ,  $\lambda$ ,  $\beta$ , T,  $eV_G$  определяются путем построения фазовых диаграмм на основе уравнений (1)–(5). На рис. З представлены рассчитанные фазовые диаграммы в осях:  $\Gamma / \omega_0 - \beta / \omega_0$ ,  $\beta / \omega_0 - k_B T / \omega_0$ ,  $eV_G / \omega_0 - k_B T / \omega_0$ ,  $eV_G / \omega_0 - \Gamma / \omega_0$ . Всюду на графиках точками показаны расчетные значения, сплошной линией – аппроксимирующая кривая.



Рисунок 3. Фазовые диаграммы,  $\lambda / \omega_0 = 3$ , для (*a*) и (*s*)  $k_B T / \omega_0 = 0,25$ , для (*б*) и (*г*)  $\Gamma / \omega_0 = 5$ 

Фазовая диаграмма  $\Gamma(\beta)$  на рис. 3, *а* показывает, что для сохранения бистабильного режима в работе ОМТ необходимо, чтобы при сильном квадратичном вибронном взаимодействии  $\beta$  скорость туннелирования  $\Gamma$  была как можно меньшей. Следовательно область бистабильности лежит под кривой  $\Gamma(\beta)$ . Из фазовой диаграммы  $\beta(T)$  на рис. 3,  $\delta$  вытекает, что для сохранения гистерезисного поведения вольтамперных характеристик ОМТ необходимо при увеличении  $\beta$  уменьшать температуру термостата T. Область бистабильности лежит под кривой  $\beta(T)$ . Возрастание запирающего напряжения  $V_G$  уменьшает энергию рабочего электронного уровня, что содействует установлению бистабильного режима функционирования ОМТ, поэтому, согласно диаграмме  $eV_G(\Gamma)$  на рис.3, e, гистерезис вольт-амперных характеристик реализуется в области над кривой  $eV_G(\Gamma)$ . Согласно диаграмме  $eV_G(T)$  на рис. 3, e

для поддержания бистабильного режима необходимо, чтобы с увеличением температуры увеличивалось запирающее напряжение, т.е. гистерезис вольт-амперных характеристик можно наблюдать только в области, лежащей над кривой  $eV_G(T)$ . Отметим, что другие фазовые диаграммы в осях  $k_BT / \omega_0 - \Gamma / \omega_0$ ,  $\Gamma / \omega_0 - \lambda / \omega_0$  ранее были построены в [4].

# ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассчитанные фазовые диаграммы в осях  $\Gamma / \omega_0 - \beta / \omega_0$ ,  $\beta / \omega_0 - k_B T / \omega_0$ ,  $eV_G / \omega_0 - k_B T / \omega_0$ ,  $eV_G / \omega_0 - k_B T / \omega_0$ ,  $eV_G / \omega_0 - \Gamma / \omega_0$  позволяют заключить, что для обеспечения функционирования одномолекулярного транзистора в бистабильном режиме необходимо, чтобы: а) при сильном квадратичном электрон-колебательном взаимодействии  $\beta$  скорость туннелирования  $\Gamma$  была как можно меньшей; б) с увеличением  $\beta$  обеспечивалось уменьшение температуры термостата T, в который погружена рассматриваемая система; в) с возрастанием запирающего напряжения  $V_G$  увеличивалась скорость туннелирования  $\Gamma$ ; г) с увеличением температуры T увеличивалось запирающее напряжение  $V_G$ .

### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

- Three-terminal devices to examine single-molecule conductance switching / Z. K. Keane [et al.] // Nano Letters. – 2006. – №6, №7. – P. 1518–1521.
- Santamore, D. H. Vibrationally mediated transport in molecular transistors / D. H. Santamore, N. Lambert, F. Nori // Physical Review B. – 2013. – №87, №7. – 075422 (1-9).
- 3. Galperin, M. Hysteresis, switching, and negative differential resistance in molecular junctions: a polaron model / M. Galperin, M. A. Ratner, A. Nitzan // Nano Letters. 2005. №5, № 1. P. 125–130.
- Charge-memory polaron effect in molecular junctions / D. A. Ryndyk [et al.] // Physical Review B. 2008. – №78, №8. – P. 1301 (1–6).
- Kalla, M. Transient dynamics of a single molecular transistor in the presence of local electronphonon and electron-electron interactions and quantum dissipation / M. Kalla, N. R. Chebrolu, A. Chatterjee // Scientific Reports. - 2022. - № 12, № 1. - P. 9444 (1-12).

#### БИОЗОНД НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСОВ УЛЬТРАДИСПЕРСНЫХ АЛМАЗОВ С МЕРОЦИАНИНОВЫМ КРАСИТЕЛЕМ

# Д. С. Тарасов<sup>1</sup>, А. А. Луговский<sup>2</sup>, А. Л. Гурский<sup>2</sup>, Г. А. Гусаков<sup>1</sup>, М. П. Самцов<sup>1</sup>

 <sup>1)</sup> НИУ «Институт прикладных физических проблем имени А.Н.Севченко» БГУ, ул. Курчатова, 7, 220045 Минск, Беларусь, e-mail: dmitrij-tarasov@list.ru
 <sup>2)</sup> Учреждение БГУ «Республиканский центр проблем человека», ул. Курчатова, 7, 220064 Минск, Беларусь, e-mail: lugovski@bsu.by

Разработаны нанокомплексы ультрадисперсных алмазов (УДА) с новым мероцианиновым красителем и исследованы их фотофизические свойства в водных растворах. Отсутствие агрегации мероцианинового красителя в комплексе с УДА по сравнению с исходным красителем, а также увеличение на порядок длительности затухания флуоресценции свидетельствуют об их комплексообразовании.

*Ключевые слова:* мероцианиновые красители; ультрадисперсные алмазы; биозонд.