

Research Paper

How Alligator-Clip Compounds Affect The I-V Characteristic of Molecular Devices, A DFT Approach¹

Fatemeh Bagherloo², Mansoure Ilkhani^{3*} and Reza Faghih Mirzaee⁴

Received: 2022.04.19

Revised: 2022.06.12

Accepted: 2022.07.13

Abstract

In this paper, using density functional theory combined with non-equilibrium Green's function, the effects of alligator-clip compounds on the electronic transport properties of benzene-based molecular devices are investigated. For this purpose, once a single Benzene molecule and once again two Benzene molecules with an acetylene spacer in between are considered as the central element of the molecular device between two gold electrodes. The spin polarization effects in the presence of Nickel and Iron anchors are studied. In the previous studies, other alligator-clip compounds such as Sulfur and organic molecular ones have been utilized. It is important to study the properties and behavior of different elements for the realization of high-performance molecular devices in the future. By utilizing Siesta and Transiesta codes, when excluding spin polarization effects, in all of the structures (except Nickel-Benzene), negative differential resistance is observed. It is an essential property that allows fast switching in certain types of electronic devices. However, when the spin polarization is considered, none of the combinations show the negative differential resistance feature. The I-V characteristics show that all of the combinations have linear behavior in low voltages no matter whether the spin polarization is considered or not. The voltage ranges from -2V to +2V are taken into account in order to investigate the probability of rectification.

Keywords: *Molecular Electronics, Electronic Transport, Benzene-based Molecular Devices, Alligator-clip, I-V Characteristic.*

¹ DOI: 10.22051/ijap.2022.40137.1275

² M. Sc. Graduated, Department of Computer Engineering, Shahr-e-Qods Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran. Email: f.bagherloo@gmail.com

³ Assistant Professor, Department of Physics, Shahr-e-Qods Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran. (Corresponding Author) Email: m.ilkhani@qodsiau.ac.ir

⁴ Associate Professor, Department of Computer Engineering, Shahr-e-Qods Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran. Email: r.f.mirzaee@qodsiau.ac.ir



بررسی تأثیر جنس گیره در بهبود مشخصه جریان-ولتاژ افزاده‌های مولکولی با به کارگیری نظریه تابعی چگالی^۱ فاطمه باقرلو^۲، منصوره ایلخانی^{۳*} و رضا فقیه میرزایی^۴

تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۰۱/۳۰

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۱/۰۳/۲۲

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۱/۰۴/۲۲

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا

سال دوازدهم، پیاپی ۳۰، پاییز ۱۴۰۱

صص ۳۴ - ۴۶

چکیده:

در این مقاله، ابتدا با استفاده از محاسبات با به کارگیری نظریه تابعی چگالی و تابع گرین غیرتعادلی، تأثیر جنس گیره بر ویژگی‌های ترابرد سیم مولکولی با پایه بنزن بررسی می‌شود. به این منظور، ابتدا تک مولکول بنزن و سپس دو مولکول بنزن با جداکننده استیلن به عنوان ناحیه مرکزی بین دو الکتروود طلا قرار داده شده است. همچنین، از فلزات نیکل و آهن به عنوان گیره استفاده می‌شود، تا اثر پلاریزاسیون اسپینی در حضور آن‌ها مورد بررسی قرار گیرد. در مطالعات پیشین، از سایر گیره‌ها مانند گیره‌های گوگردی و مولکول‌های ارگانیک استفاده شده است. مشاهده ویژگی‌ها و رفتار عناصر مختلف برای دستیابی به افزاره‌های مولکولی با کارایی بالا در آینده از اهمیت بالایی برخوردار است. نتیجه محاسبات با استفاده از کدهای محاسباتی سیستماتر و ترنسیستانتان می‌دهد که بدون در نظر گرفتن اثر اسپین، در همه ساختارها (به غیر از ترکیب نیکل-بنزن)، مقاومت تفاضلی منفی روی می‌دهد. مقاومت تفاضلی منفی عامل مهمی برای سویچ سریع در افزاره‌های مولکولی است. لازم به یادآوری است که با در نظر گرفتن اثر اسپین، در هیچ یک از ساختارها ویژگی مقاومت تفاضلی منفی بروز نمی‌کند. بررسی مشخصه‌های جریان-ولتاژ نیز نشان می‌دهد که بدون در نظر گرفتن اثر اسپین و همچنین با در نظر گرفتن اثر اسپین، همه ساختارها در بایاس پایین رفتار خطی دارند. به منظور بررسی احتمال یکسوسازی در این پیکربندی‌ها، محاسبات در بازه ولتاژ ۲- تا ۲+ ولت انجام شده است. **واژگان کلیدی:** الکترونیک مولکولی، ترابرد الکترونی، افزاره مولکولی بنزنی، گیره، مشخصه جریان-ولتاژ.

^۱ DOI: 10.22051/ijap.2022.40137.1275

^۲ دانش‌آموخته کارشناسی ارشد، گروه مهندسی کامپیوتر، واحد شهرقدس، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران.

Email: f.bagherloo@gmail.com

^۳ استادیار، گروه فیزیک، واحد شهرقدس، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران. (نویسنده مسئول). Email: m.ilkhani@qodsiau.ac.ir

^۴ دانشیار، گروه مهندسی کامپیوتر، واحد شهرقدس، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران. Email: r.fmirzaee@qodsiau.ac.ir



۱. مقدمه

در سال ۱۹۷۴ و برای اولین بار اویرام و راتر، دستگاه‌هایی بر پایه الکترونیک مولکولی را معرفی کردند [۱]. تایج آزمایشگاهی و تجزیه و تحلیل نظری مرتبط نشان می‌دهد که مولکول‌های کوچک دارای ویژگی‌های الکتریکی هستند که می‌توان از آن‌ها برای طراحی و ساخت افزارها و مدارهای الکترونیکی استفاده نمود. سیم‌های مولکولی پلی‌فینیل^۱ و سویچ‌های مولکولی شامل زنجیره‌ای از حلقه‌های آروماتیک بنزن هستند. تا سال‌های کنونی، این تردید وجود داشت که آیا چنین مولکول‌های کوچکی که به طور انفرادی به کار گرفته می‌شوند، رسانایی قابل ملاحظه‌ای دارند یا خیر. در چند سال گذشته چندین گروه پژوهشی به طور تجربی نشان دادند که مولکول‌های پلی‌فینیل می‌توانند جریان‌های الکتریکی کوچک را هدایت کنند [۲-۵].

در مدارهای مولکولی، پیوندگاه مولکول و الکتروود اهمیت بسیاری دارد، و روی ویژگی‌های ترابرد افزارهای مولکولی تأثیر می‌گذارد. در حقیقت، ماهیت جفت‌شدگی مولکول ارگانیک و الکتروود غیرارگانیک در طراحی افزارهای مولکولی نقش مهمی را ایفا می‌کند. سوال مهم این است که چگونه اتم یا مولکول محل اتصال را انتخاب کنیم؟ تا کنون مطالعات زیادی روی انتخاب مناسب این اتصالات انجام شده است و همچنان نیز تحقیقات روی یافتن گیره‌های^۲ مناسب‌تر در جریان است [۶-۱۰]. برای مثال، ویژگی‌های الکتریکی، دمایی، و ترابرد گیره‌های مولکولی ارگانیک بررسی شده است [۱۱]. از دیدگاه دیگر، ویژگی‌های یک سوئیچ تک مولکولی در حضور اتصالات طلا، نقره، پلاتین، و پالادیم مورد مطالعه قرار گرفته است [۱۲]. در نهایت، ویژگی‌های الکتریکی در انواع اتصال حلقه‌های بنزنی به یکدیگر در سال ۲۰۱۹ در پژوهش هی و همکارانش بررسی شد [۱۳].

افزون بر این، با توجه به این که امروزه کوچک‌سازی مدارهای الکترونیکی و دروازه‌های منطقی یکی از چالش‌های مهم صنایع الکترونیک است، پژوهش‌های زیادی در بهبود ساخت قطعات مدارهای مولکولی مثل انواع سیم تور^۳، دیودها و ترانزیستورهای مولکولی با به کارگیری مولکول ارگانیک بنزن صورت گرفته است.

تمرکز این مقاله روی سیم‌های الکترونیک مولکولی با پایه پلی‌فینیل $(C_6H_4)_n$ است که چگالی جریان آن‌ها ده بار بزرگ‌تر از لوله‌های کربنی است [۱۴]. تمام مدارهای مولکولی شامل یک ناحیه

¹ Polyphenylene

² Clip

³ Tour Wire

مرکزی هستند، که به آن ناحیه پراکندگی نیز گفته می‌شود. این ناحیه مرکزی باید با یک اتصال مناسب به الکترودها وصل شود. جنس این اتصال تأثیر قابل توجهی روی ترابرد الکترونی دارد [۱۵، ۱۶]. از طرف دیگر، آزمون و خطا در ساخت آزمایشگاهی این اتصالات نیازمند صرف هزینه‌های گزاف (حتی اگر امکان دسترسی به ابزارها و فناوری ساخت آنها باشد) است؛ در حالی که می‌توان با شبیه‌سازی بسیاری از نتایج را پیش‌بینی نمود.

در مقاله حاضر، به منظور بررسی ویژگی‌های ترابرد این مدارها، با به کارگیری نظریه تابعی چگالی^۱ و محاسبات ابتدا به ساکن^۲، نانو سیم‌های پلی‌فینیلنی شبیه‌سازی می‌شوند. تمرکز اصلی مقاله بر روی جنس اتصالات خواهد بود، به صورتی که مشخصه جریان-ولتاژ بهبود یابد. مشاهده ویژگی‌ها و رفتار عناصر مختلف برای طراحی و ساخت افزاره‌های مولکولی با کارایی بالا در آینده از اهمیت بسزایی برخوردار است. اگرچه، امکان ساخت آزمایشگاهی برای به دست آوردن نتایج حقیقی از محدودیت‌های این پژوهش نمی‌باشد. در بخش دوم، جزئیات روش محاسباتی بیان شده است. در بخش سوم، نتایج بدست آمده از محاسبات ارائه شده و خروجی‌های بدست آمده تجزیه و تحلیل شده‌اند. در پایان، بخش چهارم، به نتیجه‌گیری پرداخته شده است.

۲. روش محاسباتی

در این پژوهش، بر روی تأثیر جنس گیره روی ویژگی‌های ترابرد مدارهای مولکولی تمرکز شده است. به این منظور، ساختارهای زیر در بازه ۲- ولت تا ۲+ ولت، با و بدون در نظر گرفتن اثر اسپین، مورد بررسی قرار می‌گیرند:

۱- تک مولکول بنزن با گیره نیکل (Ni-Bz)

۲- دو مولکول بنزن با گیره نیکل که بین آن‌ها استیلن قرار گرفته است (Ni-2Bz)

۳- تک مولکول بنزن با گیره آهن (Fe-Bz)

۴- دو مولکول بنزن با گیره آهن که بین آن‌ها استیلن قرار گرفته است (Fe-2Bz)

به صورت نمونه، ساختار دو مولکول بنزن با گیره‌های نیکل (Ni-2Bz) که بین آنها یک مولکول استیلن قرار گرفته است در شکل (۱) نشان داده شده است. در این پژوهش، مشخصه‌های جریان-ولتاژ، نمودار عبور و نسبت یکسوسازی^۳ جهت مقایسه و تحلیل نتایج بدست می‌آیند.

¹ Density Functional Theory

² Ab Initio Calculations

³ Rectification Ratio



برای ساخت الکترودها، بلور طلا در امتداد صفحه (۱۱۱) برش زده شده است. سوپرسل طلا با ابعاد $2 \times 3 \times 3$ شامل ۶ صفحه بلوری است، که هر یک در برگیرنده ۹ اتم طلا است. اتصال گیره‌های نیکلی و آهنی به الکترودها، در شبکه FCC از سطح طلا انجام شده است. برای اتم‌های طلا، اوربیتال‌های مولکولی SZP، و برای اتم‌های کربن، هیدروژن، نیکل و آهن اوربیتال‌های DZP در نظر گرفته شده‌اند. تقسیم‌بندی منطقه بریلوئن به روش مونخورست-پک^۱ با تعداد بهینه شده k برابر $1 \times 3 \times 3$ و انرژی قطع^۲ برابر ۳۵۰ ریذبرگ انجام شده است. همچنین، یک لایه خلاء به ضخامت ۲۰ آنگستروم برای بهینه‌سازی ساختار و محاسبه ترابرد الکترونی بکار گرفته شده است.

برای شبیه‌سازی، از کدهای محاسباتی سیستا و ترنسیستا^۳ استفاده شده است. پس از شبیه‌سازی اولیه ساختارهای مبتنی بر پایه پلی‌فیلین، برای یافتن ساختار بهینه با کمترین نیروی وارد بر اتم‌ها، آسایش^۴ ساختار اجرا شده است. برای مشاهده وضعیت و مکان اتم‌های موجود در افزاره و نیز اندازه‌گیری طول پیوندها، از نرم افزار وستا^۵ استفاده شده است. در نهایت، مشخصه‌های جریان-ولتاژ رسم و با توجه به خروجی‌ها، استیلین به ساختار اضافه و بررسی بالا تکرار شده است. ترنسیستا یک کد محاسباتی است که بر پایه مدل تابع گرین غیرتعادلی کار می‌کند. در این کد برای یک ولتاژ مستقیم اعمال شده به سیستم، مقدار جریان با استفاده از تابع گرین و انرژی مربوطه توسط فرمول لانداور-بوتیکر^۶ محاسبه می‌شود [۱۵]:

$$I(V) = \frac{2e}{h} \int \{T(E, V) [f_L(E - \mu_L) - f_R(E - \mu_R)]\} dE \quad (1)$$

که در آن e برابر با بار الکترون، h ثابت پلانک، و $T(E, V)$ ضریب عبور در انرژی E تحت ولتاژ بایاس V است. همچنین، f_L و f_R توابع توزیع فرمی-دیراک الکترودهای چپ و راست هستند، که در آن‌ها $\mu_{R/L}$ پتانسیل الکتروشیمیایی الکترودها چپ/راست و برابر اختلاف پتانسیل الکتروشیمیایی بر حسب الکترون ولت، با ولتاژ مستقیم اعمال شده V به صورت زیر هستند:

$$\mu_L = \mu(0) - \frac{eV}{2} \quad (2)$$

¹ Monkhorst-Pak

² Cut-off Energy

³ Siesta & Transiesta

⁴ Relax

⁵ Vesta

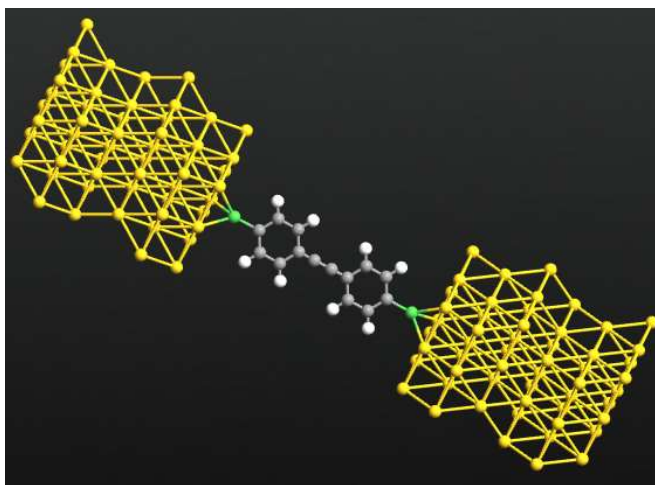
⁶ Landauer- Büttiker



$$\mu_R = \mu(0) + \frac{eV}{2} \quad (۳)$$

$$\mu_{R/L}(0) = E_F \quad (۴)$$

در رابطه‌های بالا نیز $\mu(0)$ پتانسیل الکتروشیمیایی در بایاس صفر و E_F انرژی فرمی^{۲۴} است.



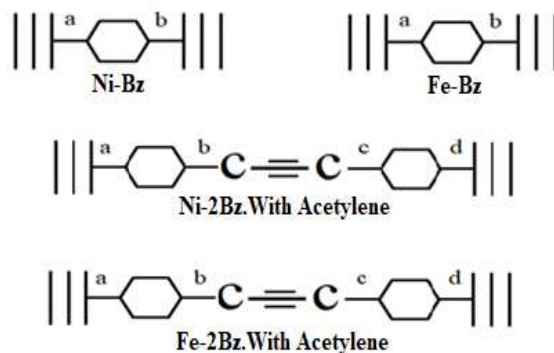
شکل ۱ ساختار دو مولکول بنزن با گیره‌های نیکل (Ni-2Bz) که بین آن‌ها یک مولکول استیلین قرار گرفته است.

۳. نتایج و بحث

۱.۳ آسایش ساختارها

ابتدا آسایش ساختارهای شبیه‌سازی شده انجام می‌شود تا مولکول‌ها در وضعیتی قرار گیرند که نیروی وارد بر آن‌ها از طرف سایر اجزای ساختار کمتر از 0.5 الکترون ولت بر آنگستروم باشد. طول تعادلی پیوندها پس از آسایش ساختار با توجه به شکل (۲)، در جدول ۱ نشان داده شده است.





شکل ۲ معرفی پیکربندی‌های مورد مطالعه.

جدول ۱ مقایسه طول پیوند تعادلی بین مولکولی بر حسب آنگستروم قبل و بعد از آسایش ساختار.

نمونه‌ها	قبل و بعد آسایش	A	B	C	D
Ni-Bz	قبل	۱/۷۵	۱/۷۶۵	-	-
	بعد	۱/۷۵	۱/۷۶۵	-	-
Fe-Bz	قبل	۱/۷۵	۱/۷۵	-	-
	بعد	۱/۷۵	۱/۷۵	-	-
Ni-2Bz	قبل	۱/۷۵	۱/۰۹۵	۱/۰۹۵	۱/۷۵
	بعد	۱/۸۴۳	۱/۴۳۲	۱/۴۳۳	۱/۸۴۴
Fe-2Bz	قبل	۱/۷۵	۱/۰۹۵	۱/۰۹۵	۱/۷۵
	بعد	۱/۸۵۸	۱/۴۳۶	۱/۴۳۳	۱/۸۵۳

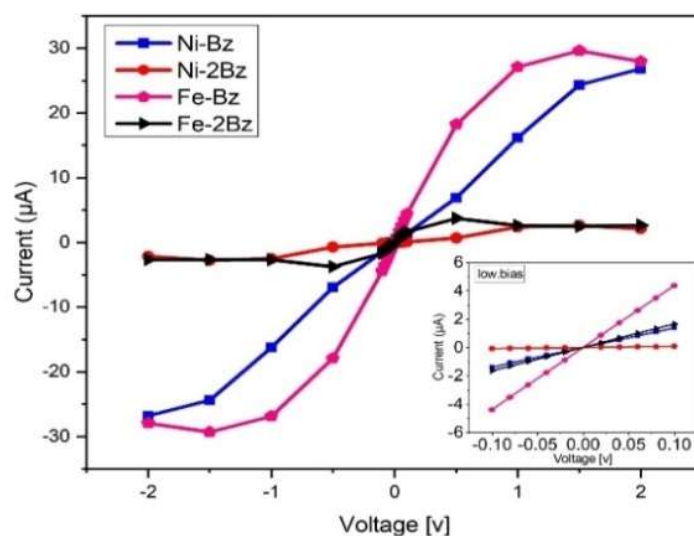
۲.۳ منحنی مشخصه‌های جریان- ولتاژ بدون در نظر گرفتن اثر اسپین و با در نظر گرفتن اثر اسپین

مشخصه‌های جریان- ولتاژ در همه ساختارها در بازه ولتاژ ۲- ولت تا ۲+ ولت رسم شده‌اند. در شکل (۳) مشاهده می‌شود که در همه ساختارها بدون در نظر گرفتن اثر اسپین مقاومت تفاضلی منفی^۱ روی داده است، و این موضوع فقط در Ni-Bz مشاهده نمی‌شود. مقاومت تفاضلی منفی ویژگی

^۱ Negative Differential Resistance (NDR)

غیرمعمولی است که در تعداد کمی از مولفه‌های الکترونیکی غیرخطی^۱ بروز می‌کند و با افزایش ولتاژ، شدت جریان عبوری از مدار کاهش می‌یابد. مقاومت تفاضلی (dv/di) منفی عامل مهمی در سویچ سریع افزاره‌های مولکولی است. این افزاره‌ها کاربردهای وسیعی در دیودهای تونلی، لامپ‌های نئون و فلورسنت، ترانزیستورها و فیلترهای اکتیو دارند. افزون بر این، بررسی شکل (۳) نشان می‌دهد که نمودار جریان-ولتاژ Ni-2Bz و Fe-2Bz کمابیش مسطح شده است. از این رو، جریانی که از این مدارها می‌گذرد نسبت به مدارهای دیگر بسیار کوچک است. این موضوع نمایانگر ویژگی نیم‌رسانایی است؛ درحالی که رفتار جریان-ولتاژ Ni-Bz و Fe-Bz نشان دهنده ویژگی رسانایی است.

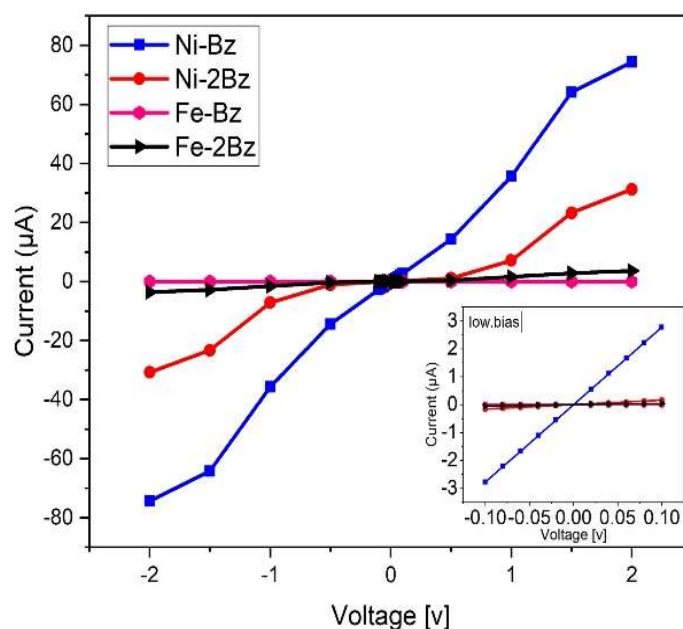
با توجه به شکل (۴)، مشاهده می‌شود که با اضافه نمودن اثر اسپین در ساختارهای مختلف، با استیلن یا بدون استیلن، مقاومت تفاضلی منفی در نمودار جریان عبوری روی نمی‌دهد. در بایاس پایین، تغییرات جریان بر حسب ولتاژ برای Ni-Bz نسبت به سایر ساختارها دارای شیب تندتری است. در حقیقت، این ساختار حساسیت بیشتری نسبت به تغییرات ولتاژ از خود نشان می‌دهد.



شکل ۳ مقایسه جریان عبوری بدون در نظر گرفتن اثر اسپین در ساختارهای مختلف.

^۱ نمودار جریان-ولتاژ غیرخطی است.





شکل ۴ مقایسه جریان عبوری با در نظر گرفتن اثر اسپین در ساختارهای مختلف.

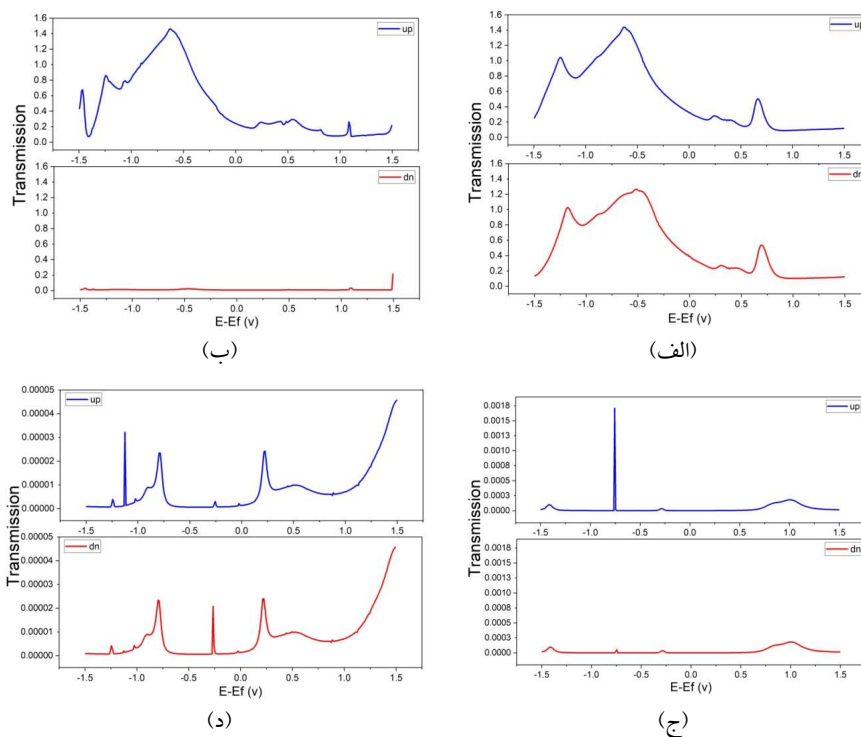
۳.۳ نمودارهای عبور

برای تمام ساختارها، نمودارهای عبور در ولتاژهای ۰/۰۲ ولت و ۱ ولت بدون در نظر گرفتن و همچنین با در نظر گرفتن اثر اسپین رسم شده است (شکل‌های (۵) و (۶)). کد ترنسیستا در محاسبات اسپینی یک بار کل الکترون‌ها را با اسپین بالا (up) و بار دیگر کل الکترون‌ها را با اسپین پایین (dn) در نظر گرفته و جریان را محاسبه می‌کند.

شکل‌های (۵-الف) و (۵-ب) نمودار عبور مربوط به ساختار Ni-Bz را نشان می‌دهند. در ولتاژ پایین (۰/۰۲ ولت)، الکترون‌های با اسپین بالا و پایین دارای سهم‌های مساوی در رسانش الکتریکی هستند، اما در ولتاژ بالا (۱ ولت) الکترون‌های با اسپین پایین تقریباً هیچ سهمی در رسانش ندارند و جریان ناشی از الکترون‌های با اسپین بالا است. این مهم نویدبخش بکارگیری این مدار در کاربردهای اسپین ترونیک^۱ است. شکل‌های (۵-پ) و (۵-ت) نمودار عبور مربوط به ساختار Fe-

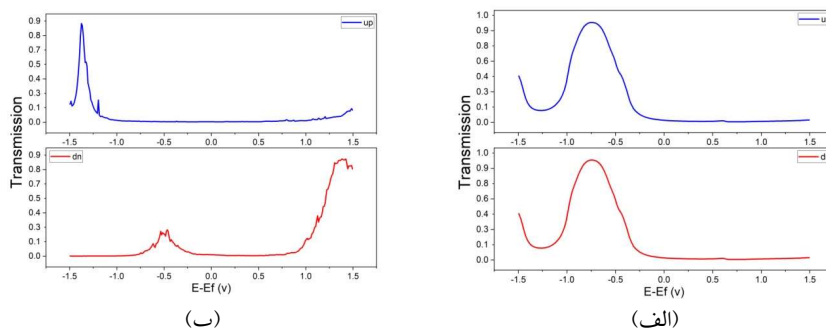
¹ Spintronics

Bz را نشان می‌دهند. در ولتاژ بالا (۱ ولت)، الکترون‌های با اسپین بالا و پایین دارای سهم‌های مساوی در رسانش الکتریکی هستند، اما در ولتاژ پایین (۰/۰۲ ولت)، الکترون‌های با اسپین پایین تقریباً هیچ سهمی در رسانش ندارند و جریان، ناشی از الکترون‌های با اسپین بالا است. شکل (۶) نمودارهای عبور Ni-2Bz و Fe-2Bz را نشان می‌دهد. با توجه به شکل‌های (۶-الف) و (۶-ب) نیز مشاهده می‌شود که در ولتاژهای منفی الکترون‌های با اسپین بالا و در ولتاژهای مثبت الکترون‌های با اسپین پایین مشارکت بیشتری دارند.



شکل ۵ نمودارهای عبور Ni-Bz و Fe-Bz با در نظر گرفتن اثر اسپین، (الف) Ni-Bz در بایاس ۰/۰۲ ولت، (ب) Ni-Bz در بایاس یک ولت، (ج) Fe-Bz در بایاس ۰/۰۲ ولت، (د) Fe-Bz در بایاس یک ولت.





شکل ۶ نمودارهای عبور (Fe-2Bz) و (Ni-2Bz) با اسپین و با در نظر گرفتن اثر اسپین، (الف) Ni-2Bz در بایاس ۰/۰۲ ولت، (ب) Fe-2bz در بایاس یک ولت.

۴.۳ نمودار نسبت یکسوسازی

برای بررسی میزان تقارن در مشخصه جریان-ولتاژ، نسبت یکسوسازی به صورت زیر تعریف و محاسبه می‌شود:

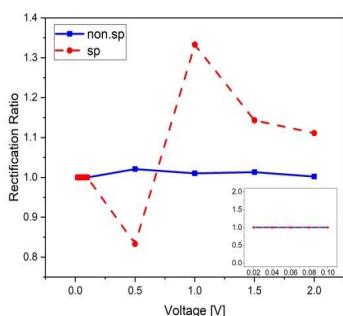
$$R(V) = \left| \frac{I(+V)}{I(-V)} \right| \quad (۵)$$

در این رابطه، $I(+V)$ جریان عبوری در بایاس مثبت، و $I(-V)$ جریان عبوری متناظر همان ولتاژ در بایاس منفی است. هرگاه $R(V)=1$ باشد، یکسوسازی نداریم، و $R(V)>1$ نیز به این معنا است که جریان در جهت مثبت بزرگ‌تر از جریان در جهت منفی است.

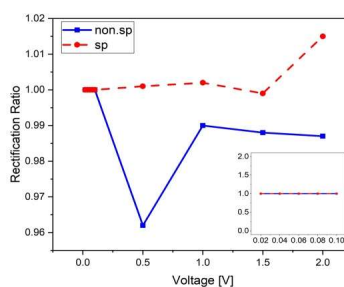
در شکل (۷)، نتایج بدست آمده از محاسبه نسبت‌های یکسوسازی بر حسب ولتاژ بایاس اعمال شده برای ساختارهای Ni-Bz، Fe-Bz، Ni-2Bz، و Fe-2Bz رسم شده است. محاسبات برای تمام ساختارها در دو حالت بدون اعمال اثر اسپین و با اعمال اثر اسپین انجام شده‌اند. مقایسه نمودارها نشان می‌دهد که اگر از تفاوت‌های جزئی جریان عبوری (در حد صدم آمپر) چشم‌پوشی شود، کمابیش در هیچ یک از ساختارها یکسوسازی نه در ولتاژ بالا و نه در ولتاژ پایین رخ نداده است. تنها مورد استثناء ساختار Fe-Bz (شکل ۷-ب) است که با اعمال اثر اسپینی، تفاوتی از مرتبه دهم آمپر در جریان عبوری قابل مشاهده است.

در مقاله نظری و همکاران، مطالعات صورت گرفته نشان می‌دهد که در صورت استفاده از گیره‌های گوگردی، ویژگی‌های ترابرد سیستم تک مولکول بنزن بدون در نظر گرفتن اثر اسپین و با در نظر

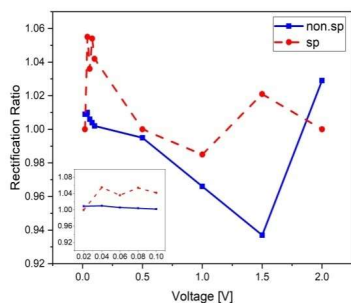
گرفتن اثر اسپین یکسان است [۱۶]. در بایاس پایین، ساختارها رفتار خطی دارند، ولی در بایاس بالا رفتار خطی مشاهده نمی‌شود. همچنین، در هیچ یک از ساختارها مقاومت تفاضلی منفی روی نداده و یکسوسازی نیز مشاهده نشده است. اما مطالعات انجام شده در مقاله حاضر نشان می‌دهد که در صورت استفاده از گیره‌های آهن و نیکل، جریان عبوری در بایاس پایین، بدون در نظر گرفتن اثر اسپین و با در نظر گرفتن اثر اسپین، رفتار خطی دارد. همچنین در جریان عبوری تمام ساختارها، به جز Ni-Bz، در حالت بدون در نظر گرفتن اثر اسپین مقاومت تفاضلی منفی مشاهده می‌شود. بنابراین، با تغییر جنس گیره می‌توان ویژگی‌های ترابرد و کارکرد افزاره طراحی شده را پایش نمود.



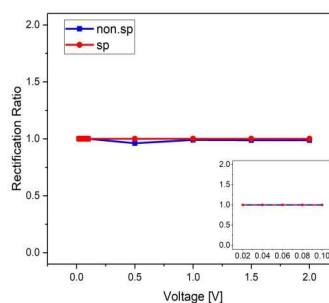
(ب)



(الف)



(د)



(ج)

شکل ۷ نسبت یکسوسازی بر حسب ولتاژ بایاس اعمال شده، بدون در نظر گرفتن اثر اسپین و با در نظر گرفتن اثر اسپین، (الف) Ni-Bz، (ب) Fe-Bz، (ج) Ni-2Bz، (د) Fe-2Bz.



۴. نتیجه گیری

در این پژوهش، سیم‌های مولکولی تور در آرایش‌های مختلف شبیه‌سازی شدند. نتایج محاسباتی نشان داد که در ساختارهای مورد مطالعه، بدون در نظر گرفتن اثر اسپین، مقاومت تفاضلی منفی فقط بر روی تک مولکول بنزن با گیره نیکل (Ni-Bz) رخ نداده است. این مورد در سایر ساختارها نیز مشاهده شد. از طرف دیگر، با در نظر گرفتن اثر اسپین، در هیچ یک از ساختارها مقاومت تفاضلی منفی مشاهده نشد.

از مقایسه نمودارهای عبور Ni-Bz و Fe-Bz مشاهده می‌شود که با در نظر گرفتن اثر اسپین در ولتاژ پایین (۰/۰۲ ولت)، الکترون‌های با اسپین بالا و پایین دارای سهم‌های مساوی در رسانش الکتریکی هستند؛ اما در ولتاژ بالا (۱ ولت)، الکترون‌های با اسپین پایین کمابیش هیچ سهمی در رسانش ندارند و جریان تنها ناشی از الکترون‌ها با اسپین بالا است. این موضوع نویدبخش توانایی به کارگیری این مدار در کاربردهای اسپین ترونیک است.

از آنجا که استفاده از گیره آهنی یا نیکلی موجب بروز این پدیده شده است، این امکان وجود دارد که با استفاده از سایر فلزات 3d به عنوان گیره نیز بتوان به ویژگی‌های جالبی دست یافت. این موضوع می‌تواند مبنای پژوهش‌های بیشتری در آینده باشد.

همچنین، مقایسه نمودارهای چگالی حالت الکترونی در ساختارهای Ni-Bz و Ni-2Bz با در نظر گرفتن اثر اسپین نیز نشان می‌دهد که در ولتاژ بالا (۱ ولت) و نیز در ولتاژ پایین (۰/۰۲ ولت) الکترون‌ها با اسپین بالا و پایین دارای سهم‌های مساوی در رسانش الکتریکی هستند؛ اگرچه در ساختار Fe-Bz با در نظر گرفتن اثر اسپین در ولتاژهای بالا (۱ ولت) و پایین (۰/۰۲ ولت) به ترتیب الکترون‌های با اسپین پایین و بالا سهم بیشتری در رسانش دارند. در ساختار Fe-2Bz نیز الکترون‌های با اسپین بالا عامل رسانش هستند. در نهایت، ویژگی یکسوسازی در هیچ یک از ساختارها مشاهده نشد.

منابع

- [1] Aviram A., and Ratner M.A., Molecular rectifiers, *Chemical Physics Letters*, **29**, 277-283, November 1974.
- [2] Ellenbogen J.C., and Love J.C., Architectures for molecular electronic computers. I. Logic structures and an adder designed from molecular electronic diodes, *Proceedings of the IEEE*, **88**, 386-426, March 2000.
- [3] Balzani V., Credi A., and Venturi M., *Molecular devices and machines: concepts and perspectives for the nanoworld*, John Wiley & Sons, 2008.
- [4] Ding S., Peng H., Ren H., Xie T., Yao X., and Song K., Investigation on preparation and properties of novel polyphenylene oxide-based composites by injection molding, *Ceramics International*, **46**, 29067-29072, December 2020.



- [5] Nie Y., Zhang H., Miao J., Wang Y., Li Y., Tu D., Yan H., Sun G., and Jiang X., Highly efficient aggregation-induced emission and stimuli-responsive fluorochromism triggered by carborane-induced charge transfer state, *Inorganic Chemistry Communications*, **106**, 1-5, August 2019.
- [6] Yaliraki S.N., Kemp M., and Ratner M.A., Conductance of Molecular Wires: Influence of Molecule- Electrode Binding, *Journal of the American Chemical Society*, **121**, 3428-3434, April 1999.
- [7] Xue Y., and Ratner M.A., Microscopic study of electrical transport through individual molecules with metallic contacts. I. Band lineup, voltage drop, and high-field transport, *Physical Review B*, **68**, 115406, September 2003.
- [8] Long M.Q., Wang L., Chen K.Q., Li X.F., Zou B.S., and Shuai Z., Coupling effect on the electronic transport through dimolecular junctions, *Physics Letters A*, **365**, 489-494, June 2007.
- [9] Hong W., Manrique D.Z., Moreno-Garcia P., Gulcur M., Mishchenko A., Lambert C.J., Bryce M.R., and Wandlowski T., Single molecular conductance of tolanes: experimental and theoretical study on the junction evolution dependent on the anchoring group, *Journal of the American Chemical Society*, **134**, 2292-2304, February 2012.
- [10] Kamiński W., Topolnicki R., Hapala P., Jelínek P., and Kucharczyk R., Tuning the conductance of benzene-based single-molecule junctions, *Organic Electronics*, **34**, 254-261, July 2016.
- [11] Akbarabadi S.R., and Madadi Asl M., Anchoring groups determine conductance, thermopower and thermoelectric figure of merit of an organic molecular junction, *Front. Phys.*, **9**, August 2021.
- [12] Tharammal R.K., Kumar A., Rajak A.R., and Gaidhane V.H., Theoretical investigation of design methodology, optimized molecular geometries, and electronic properties of benzene-based single molecular switch with metal nanoelectrodes, *Journal of Nanomaterials*, September 2020.
- [13] He Y., Cheng N., and Zhao J., First- principle study on the conductance of benzene-based molecules with various bonding characteristics, *Computational and Theoretical Chemistry*, **1154**, 1-10, April 2019.
- [14] Tseng G.Y., and Ellenbogen J.C., Architectures for molecular electronic computers: 3. Design for a memory cell built from molecular electronic devices, *MITRE CORP MCLEAN VA*, October 1991.
- [15] Li M.J., Xu H., Chen K.Q., and Long M.Q., Electronic transport properties in benzene-based heterostructure: Effects of anchoring groups, *Physics Letters A*, **376**, 1692-1697, April 2012.
- [15] Min Y., Zhong C.G., Yang P.P., and Yao K.L., Low bias negative differential resistance in tour wires predicted by first-principles study, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **119**, 238-241, August 2018.
- [16] Nazari H., Ilkhani M., and Mirzaee R.F., Ab initio study of spin polarization and acetylene transition distance effects on structural and transconductance properties of molecular Tour wires, *2nd International Conference on Applied Research in Mathematical Sciences and Physics (MATHCO'19)*, February 2019 (in Persian).

© 2020 Alzahra University, Tehran, Iran. This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).

