

PACS numbers: 05.60.Gg, 73.23.Hk, 73.63.Rt, 85.35.Gv, 85.65.+h

Керування мікрострумами у наномолекулах шляхом варіації зв'язку молекули з електродами

Я. Р. Зелінський, Е. Г. Петров, В. І. Тесленко

*Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України,
вул. Метрологічна, 14^а,
03143 Київ, Україна*

Запропоновано кінетичний модель для опису комбінованої пружної та непружної стрибкової трансмісії електрона через короткий молекулярний провід у випадку сильного Кульонового відштовхування між електронами, що переносяться. Показано, що формування струму через провід відбувається шляхом конкуренції двох механізмів: пружного міжелектродного тунелювання через локалізовані рівні енергії термінальних груп проводу та непружного стрибкового процесу між електродами і центрами електронної локалізації. Одержано аналітичний вираз для стаціонарного струму і досліджено вплив пружної та непружної трансмісії електронів на формування вольт-амперних характеристик струму через провід. Виявлено ефект блокування струму, обумовлений як участю локалізованих енергетичних рівнів проводу у трансмісії електрона, так і впливом суперобміну між термінальними ланками молекулярного ланцюжка. Показано, що у випадку неідентичного зв'язку молекули з сусідніми електродами має місце ефект випростування струму.

Kinetics model is proposed to describe combined elastic and inelastic hopping electron transmission through a short molecular wire for the case of strong Coulomb repulsion between the transferred electrons. As shown, the current formation occurs through concurrence of two mechanisms: elastic inter-electrode tunnelling through localized energy levels of terminal groups of the wire and inelastic hopping process between electrodes and centres of electron localization. Analytical expression for steady current is obtained, and impact of elastic and inelastic electron transmission on current–voltage characteristics of the wire is investigated. An effect of current blockage caused by both participation of localized energy levels of the wire in electron transmission and influence of superexchange between the terminal links of molecular circuit is detected. As shown in the case of molecule–electrode coupling asymmetry, a current rectification effect takes place.

Предложена кинетическая модель для описания комбинированной упру-

гой и неупругой прыжковой трансмиссии электрона через короткий молекулярный провод в случае сильного кулоновского отталкивания между переносимыми электронами. Показано, что формирование тока происходит путем конкуренции двух механизмов: упругого междueleктродного туннелирования через локализованные уровни энергии, отнесенные к терминальным группам провода, а также неупругого прыжкового процесса между электродами и центрами электронной локализации. Получено аналитическое выражение для стационарного тока и исследовано влияние упругой и неупругой трансмиссии электрона на формирование вольт-амперных характеристик тока через провод. Обнаружен эффект блокировки тока, который обусловлен как участием локализованных энергетических уровней провода в трансмиссии электрона, так и влиянием суперобмена между терминальными звеньями молекулярной цепи. Показано, что в случае неидентичной связи молекулы с соседними электродами имеет место эффект выпрямления тока.

Ключові слова: молекулярний провід, міжелектродний струм, різниця потенціалів.

(Отримано 28 листопада 2007 р.)

1. ВСТУП

Бурхливий розвиток інформаційних технологій, який відбувся за останні 20 років, був обумовлений насамперед значними досягненням напівпровідникових технологій, спрямованих на удосконалення та мінімізацію кремнієвих транзисторів, що становлять основу сучасних мікрочипів. Кожні півтора–два роки відбувається подвоєння кількості компонент електронних схем, розміщених на одній площі кристалу, що призводить до збільшення як швидкодії побудованих на основі таких чипів обчислювальних систем, так і до зменшення самих їх розмірів [1, 2]. Однак вже зараз перед технологічним світом гостро постала проблема пошуку нових метод мінімізації, яка направлена на використання нових матеріалів, що в недалекому майбутньому можуть прийти на заміну твердотільним напівпровідниковим аналогам.

Однією з таких метод є ідея використання окремих органічних молекул у ролі прототипів компонент електронних схем [3]. Останні експериментальні дослідження, основані на використанні сканувальної тунельної мікроскопії [4] та методи розриву сполук [5, 6] показали, що індивідуальні молекули можуть виступати у ролі провідників [7], діод [8], транзисторів [9], логічних та запам'ятовувальних пристроїв [10, 11]. Співставлення основних властивостей молекулярних структур з їх функціональними характеристиками вимагає побудови теорії, яка ставить собі на меті з'ясування основних механізмів зарядового переносу у системах типу мікроелектрода–молекула–

мікроелектрода. Дискретність енергетичної структури молекулі [12], вплив контактів на її провідні властивості [13, 14], зокрема характеру взаємодії заключних центрів молекулі з металом [15], а також роль релаксаційних процесів, що супроводжують електрон-транспортні процеси у молекулярних наноструктурах, є лише декілька факторів, що вказують на суттєву відмінність таких об'єктів від напівпровідникових гетероструктур.

Значний прогрес у дослідженні одномолекулярної провідності був досягнутий при вивченні пружної трансмісії електрона із використанням квантово-хімічних метод, переважно основаних на методі функціоналу густини [16], у поєднанні із методом нерівноважної Грінової функції [17–20]. Обчислення струму при цьому базувалося на використанні відомої формули Бутікера–Ланде [21], спеціальним чином адаптованої до опису провідності окремих молекул.

В даній роботі ми розглянемо кінетичний модель формування комбінованого термічно-активованого непружного та дистанційного міжелектродного пружного струму через молекулярний провід з активними термінальними групами. Основна увага буде зосереджена на вивченні ролі зв'язку молекулі з електродами та його впливу на формування асиметричних вольт-амперних характеристик струму.

Експериментальні та теоретичні дослідження одномолекулярної провідності показали важливу роль контактів при формуванні як пружного, так і непружного струму [22–24]. Так, при дослідженні похідних молекулі антрацену були виявлені асиметричні $I(V)$ характеристики для повністю симетричної молекулі [25]. Така асиметрія обумовлена неідентичністю контактної взаємодії на обох кінцях молекулі, яка призводить до асиметричного падіння потенціалу між молекулою та прилеглою до неї електродою [26]. При вивченні провідних властивостей молекулі бензолу із використанням методи функціоналу густини [27] було показано, що важливу роль при формуванні струму відіграють термінальні атоми, які сполучають молекулі з контактами. Їх природа, а також локальна контактна конфігурація забезпечує величину контактної взаємодії, яка, в свою чергу, визначає провідність молекулі [28, 29]. Різна природа взаємодії молекулі з контактами призводить до різних провідних властивостей однієї і тієї ж молекулі, що було явно показано, наприклад, при дослідженні похідних молекулі біпіридину [15].

2. КІНЕТИЧНИЙ МОДЕЛЬ ФОРМУВАННЯ СТРУМУ

Для вивчення ефектів впливу металевих контактів на формування пружної та непружної трансмісії електрона розглянемо молекулярний провід, який складається з двох металевих мікроелектрод L і R та молекулярного ланцюжка, розміщеного між ними. Заклучні

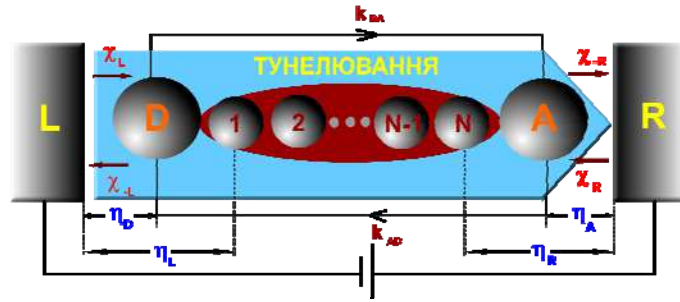


Рис. 1. Кінетична схема пружної та непружної трансмісії електрона через молекулярний провід, розміщений між двома електродами.

центри проводу, що безпосередньо контактують з мікроелектродами і які позначатимемо через **D** та **A**, з'єднані між собою регулярною містковою структурою, що складається з N центрів електронної локалізації (рис. 1). Вважатимемо, що рівні найнижчих незаповнених молекулярних орбіталей (ННМО), віднесених до заключних центрів проводу, знаходяться значно нижче за ННМО місткової структури, а також що взаємодія термінальних груп проводу з містковою структурою є слабкою у порівнянні із взаємодією всередині містка. Це призводить до виникнення специфічної суперобмінної взаємодії між **D** та **A** групами, а також до того, що електрон може локалізуватися лише на заключних центрах проводу. При такій умові електронно-транспортний процес буде характеризуватися одноелектронними прямими і зворотними стрибками між електродами і відповідними термінальними групами проводу, які позначатимемо через $\chi_{L(R)}$ і $\chi_{-L(-R)}$, а також має місце дистанційне тунелювання електрона через дельокалізовані молекулярні орбіталі місткової структури шляхом суперобмінного механізму з ефективною прямою k_{DA} і зворотною k_{AD} швидкостями. Як контактні, так і дистанційні стрибки електрона є можливими лише у випадку відсутності надлишкового електрона на тому центрі, куди він повинен потрапити у результаті стрибка.

В рамках нашого моделю трансмісія електрона відбувається між трьома електронними станами проводу. До тих станів належать: $|00\rangle$ — провід «пустий» і не містить жодного захопленого електрона, $|D0\rangle$ — електрон локалізований на **D** центрі, $|0A\rangle$ — електрон, захоплений **A**-центром. Вважатимемо, що додатково через провід можливе пружне міжелектродне тунелювання, яке відбувається лише у випадку відсутності локалізованого електрона на жодному із заключних центрів проводу. Кожному із станів відповідає ймовірність його реалізації $P_{00}(t)$, $P_{D0}(t)$, $P_{0A}(t)$, кожна з яких пов'язана з електронними заселеностями термінальних груп проводу наступними співвідношеннями: $P_{00} = (1 - P_D(t))(1 - P_A(t))$, $P_{D0} = P_D(t)(1 - P_A(t))$, $P_{0A} = P_A(t)(1 - P_D(t))$.

Для знаходження міжелектродного струму ми скористаємось загальним виразом типу

$$I = -e\dot{N}_L(t), \quad (1)$$

де $e > 0$ позначатиме абсолютне значення заряду електрона, а $\dot{N}_L(t) = (-\dot{N}_R(t))$ є еволюцією числа вільних електронів із заданою проекцією спіну, здатних переноситися з одного електроду на інший через молекулярний ланцюжок. Для знаходження величини $\dot{N}_{L(R)}(t)$ ми скористаємося системою кінетичних рівнянь для заселень кожного із центрів електронної локалізації в проводі. Процедура одержання замкненої системи кінетичних рівнянь описана в роботі [30], у випадку нашого моделю вона набуде наступного вигляду:

$$\begin{aligned} \dot{N}_L(t) &= -\chi_{-L}(1 - P_D(t))(1 - P_A(t)) + \chi_L P_D(t) \times \\ &\quad \times (1 - P_A(t)) - Q_{L \rightarrow R}(1 - P_D(t))(1 - P_A(t)), \\ \dot{P}_D(t) &= -(\chi_L + k_{DA})P_D(t)(1 - P_A(t)) + k_{DA}P_A(t) \times \\ &\quad \times (1 - P_D(t)) + \chi_{-L}(1 - P_D(t))(1 - P_A(t)), \\ \dot{P}_A(t) &= k_{DA}P_D(t)(1 - P_A(t)) - (\chi_R + k_{AD})P_A(t) \times \\ &\quad \times (1 - P_D(t)) + \chi_{-R}(1 - P_D(t))(1 - P_A(t)), \\ \dot{N}_R(t) &= -\chi_{-R}(1 - P_D(t))(1 - P_A(t)) + \chi_R P_A(t) \times \\ &\quad \times (1 - P_D(t)) - Q_{R \rightarrow L}(1 - P_D(t))(1 - P_A(t)). \end{aligned} \quad (2)$$

У системі кінетичних рівнянь (2) величини $Q_{L \rightarrow R}$ і $Q_{R \rightarrow L}$ характеризують дистанційний пружній міжелектродний потік електронів, вираз для яких у випадку пружнього тунелювання через локалізовані термінальні і дельокалізовані місткові стани проводу наведено нижче.

Ми обмежимося стаціонарним випадком, тобто коли $\dot{P}_{D(A)}(t) = 0$ та $\dot{N}_L = -\dot{N}_R = \text{const}$, для цього випадку можна одержати аналітичні вирази для інтегральних заселень термінальних груп проводу:

$$P_D = \frac{U_D}{1 + U_D}, \quad P_A = \frac{U_A}{1 + U_A}, \quad (3)$$

де

$$U_D = \frac{\chi_{-L}\chi_R + (\chi_{-L} + \chi_{-R})k_{AD}}{\chi_L\chi_R + \chi_L k_{AD} + \chi_R k_{DA}}, \quad U_A = \frac{\chi_{-R}\chi_L + (\chi_{-L} + \chi_{-R})k_{DA}}{\chi_L\chi_R + \chi_L k_{AD} + \chi_R k_{DA}}. \quad (4)$$

В результаті стаціонарний міжелектродний струм можна представити у такому вигляді:

$$I(V) = I_{dir}(V) + I_{inel}(V). \quad (5)$$

У формулі (3) пружня $I_{dir}(V)$ та стрибкова $I_{inel}(V)$ компоненти струму визначаються наступними співвідношеннями:

$$I_{dir}(V) = Q_{L \rightarrow R} / (1 + U_D)(1 + U_A), \quad (6)$$

$$I_{inel}(V) = I_{inel}^{(+)}(V) + (1 - \theta(V)) I_{inel}^{(-)}(V),$$

$$I_{inel}^{(+)}(V) = I_0 2\pi \frac{\chi_L U_D - \chi_{-L}}{(1 + U_D)(1 + U_A)}, \quad I_{inel}^{(-)}(V) = -I_0 2\pi \frac{\chi_R U_A - \chi_{-R}}{(1 + U_D)(1 + U_A)}. \quad (7)$$

У формулах (6)–(7) параметер $I_0 \equiv e / \pi \hbar \times 1 \text{ eV} \approx 77,5 \text{ мкА}$, а $\theta(V)$ є тета-функцією. Пружній дистанційний міжелектродний потік визначається за допомогою загального виразу типу [30]

$$Q_{L \rightarrow R} = \frac{e}{\pi \hbar} \int_{E_F}^{E_F + eV} T(E, V) dE, \quad (8)$$

де $T(E, V)$ носить назву трансмісійної функції, вигляд якої залежить від конкретного моделю. При пружній трансмісії електрона через льюкалізовані рівні енергії термінальних груп та дельокалізовані рівні енергії містка, $T(E, V)$ набуде наступного вигляду [31]:

$$T(E, V) = \frac{\Gamma_L \Gamma_R \beta_D^2 \beta_A^2}{\left[(E - E_D(V))^2 + \Gamma_L^2 / 4 \right] \left[(E - E_A(V))^2 + \Gamma_R^2 / 4 \right]} \times \left| \frac{|V_B|^{N-1}}{\prod_{\mu=1}^N (E - E_\mu(V))} \right|^2. \quad (9)$$

Для чисельних розрахунків струму необхідно встановити енергетичне положення електрона в проводі, а також визначити вирази для швидкостей електронного переносу між електродами та заключними ланками проводу.

3. ОДНОЕЛЕКТРОННІ ШВИДКОСТІ ПЕРЕНОСУ

Для знаходження швидкостей встановимо енергетичне положення електрона в проводі. Нехай E_D^0 та E_A^0 є рівні ННМО віднесені до термінальних груп проводу у випадку відсутності прикладеної до мікроелектрод різниці потенціалів, а E_B^0 — до містка. Тоді збурені полем рівні ННМО визначатимуться як:

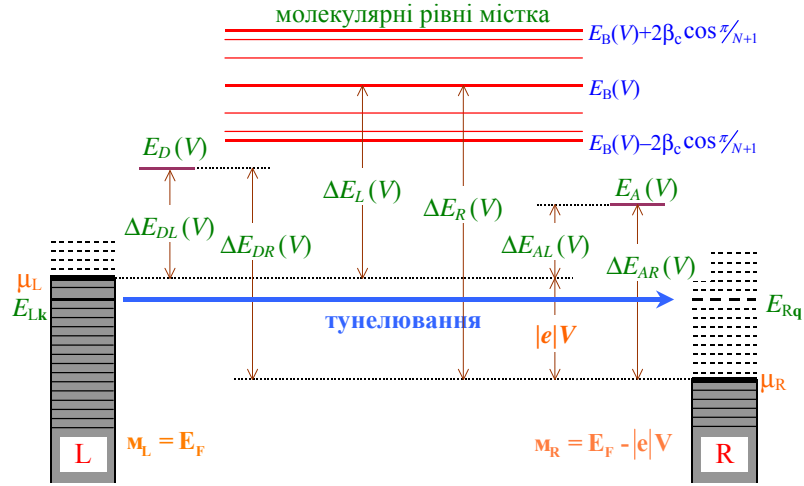


Рис. 2. Схема розташування енергетичних рівнів молекулярного проводу при прикладеній до мікроелектрод різниці потенціалів V .

$$\begin{aligned}
 E_D(V) &= E_D^0 - |e|V \eta_D, \\
 E_\mu(V) &= E_B(V) - 2|V_B| \cos \left[\frac{\pi \mu}{N+1} \right], \\
 E_B(V) &= E_B^0 - \frac{|e|V}{2} (1 + \eta_L - \eta_R), \\
 E_A(V) &= E_A^0 - |e|V (1 - \eta_A).
 \end{aligned} \tag{10}$$

Параметри η_D і η_A визначають енергетичний спад між відповідним рівнем ННМО крайнього центру проводу та Фермієвим рівнем сусіднього електроду в залежності від прикладеної різниці потенціалів V , η_R і η_L характеризує енергетичний спад між крайніми центрами містка і відповідними Фермієвими рівнями контактів. $E_\mu(V)$ є дельокалізована молекулярна орбіталь, віднесена до місткової структури. Визначення енергетичного положення електрона в проводі дозволяє нам записати вирази для енергетичних щілин, які схематично показані на рис. 2.

$$\begin{aligned}
 \Delta E_{DL} &= \Delta E_D - eV \eta_D, \quad \Delta E_{DR} = \Delta E_D + eV (1 - \eta_D), \\
 \Delta E_{AL} &= \Delta E_A - eV (1 - \eta_A), \quad \Delta E_{AR} = \Delta E_D + eV \eta_A.
 \end{aligned} \tag{11}$$

Аналогічно запишемо для енергетичних щілин між дельокалізованим рівнем енергії містка $E_B(V)$ та положенням Фермієвого рівня металу E_F :

$$\Delta E_{LB} = \Delta E_B - \frac{eV}{2}(1 + \eta_L - \eta_R), \quad \Delta E_{RB} = \Delta E_B + \frac{eV}{2}(1 - \eta_L + \eta_R). \quad (12)$$

У формулах (11)–(12) введені позначення для незбурених електричним полем щілин $\Delta E_D \equiv E_D^0 - E_F$, $\Delta E_A \equiv E_A^0 - E_F$, $\Delta E_B \equiv E_B^0 - E_F$.

Для обчислення струму ми скористаємося виразами для швидкостей переносу між електродами і прилеглими до них термінальними групами, одержаними в наближенні широкої зони металу [32]:

$$\begin{aligned} \chi_L &= \frac{1}{\hbar} \Gamma_L n_F(\Delta E_{LD}), \quad \chi_{-L} = \frac{1}{\hbar} \Gamma_L (1 - n_F(\Delta E_{LD})), \\ \chi_R &= \frac{1}{\hbar} \Gamma_R n_F(\Delta E_{AR}), \quad \chi_{-R} = \frac{1}{\hbar} \Gamma_R (1 - n_F(\Delta E_{AR})). \end{aligned} \quad (13)$$

У формулі (13) $n_F(\Delta E_{xy}) = [\exp(\Delta E_{xy} / k_B T) + 1]^{-1}$ є функцією Фермієвого розподілу, а $\Gamma_{L(R)}$ визначають розширення електронних рівнів термінальних груп проводу, обумовлене як наявністю металевих електродів, так і оточення.

Для швидкостей, які характеризують дистанційний суперобмінний перенос електрона між заключними центрами проводу, ми скористаємося Маркусовими формулами [33] для прямої і зворотної швидкості:

$$\begin{aligned} k_{DA} &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{|\beta_{DA}(N)|^2}{\sqrt{4\pi\lambda_{DA} k_B T}} \exp\left[-\frac{(\Delta E_{DA} - \lambda_{DA})^2}{4\lambda_{DA} k_B T}\right], \\ k_{AD} &= k_{DA} \exp[-\Delta E_{DA} / k_B T]. \end{aligned} \quad (14)$$

В (14) $\Delta E_{DA} = E_D - E_A = \Delta E_{DA}^0 + eV(1 - \eta_D - \eta_A)$, а $|\beta_{DA}(N)|^2$ є квадратом матричного елемента суперобмінної взаємодії, вираз для якого добре відомий з теорії донорно-акцепторного переносу [34]. В наших позначеннях він набуде наступного вигляду:

$$\begin{aligned} |\beta_{DA}(N)|^2 &= |\beta_{DA}(1)|^2 \exp[-(\xi_D + \xi_A)(N - 1)], \\ |\beta_{DA}(1)|^2 &= \frac{\beta_D^2 \beta_A^2}{\Delta E_D(V) E_A(V)}, \\ \xi_{D(A)} &= \ln \left[\frac{2|V_B|}{\Delta E_{D(A)}(V) - \sqrt{\Delta E_{D(A)}^2(V) - 4|V_B|^2}} \right]. \end{aligned} \quad (15)$$

У формулі (14) введені енергетичні щілини $\Delta E_{D(A)} \equiv E_B(V) - E_{D(A)}(V)$, а параметри β_D і β_A характеризують взаємодію термінальних груп проводу з прилеглими центрами місткової структури. Величини $|\beta_{DA}(1)|^2$, а та-

кож параметр $\xi_{D(A)}$ залежать від різниці прикладених до мікроелектрод потенціалів, що призводить до підсилення суперобміну. Однак, як показано в роботі [35], таке підсилення є незначним при малому числі атомів місткової структури, тому при наших розрахунках у формулі (15) ми вважатимемо, що $\Delta E_{D(A)}(V) \approx \Delta E_{D(A)}(0)$.

4. ОБГОВОРЕННЯ ТА ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ

Формула (5) разом із виразами для непружної (6) та пружної (7) компонент струму дозволяють проаналізувати $I(V)$ характеристику струму, а також диференційної провідності dI/dV у широкому діапазоні напруг. На рисунку 3 показана симетрична вольт-амперна характеристика струму у випадку ідентичного зв'язку молекули з електродами ($\Gamma_L = \Gamma_R$). Виявлено, що пружний механізм електронної трансмісії є домінуючим над непружним стрибковим вже навіть при малих значеннях прикладених до мікроелектрод різниць потенціалів. Так що можна вважати, що $I(V) \approx I_{dir}(V)$. Враховуючи явний вигляд для дельокалізованих енергій містка (9), а також формулу (10) і базуючись на результатах роботи [34], одержимо наступний вираз для струму:

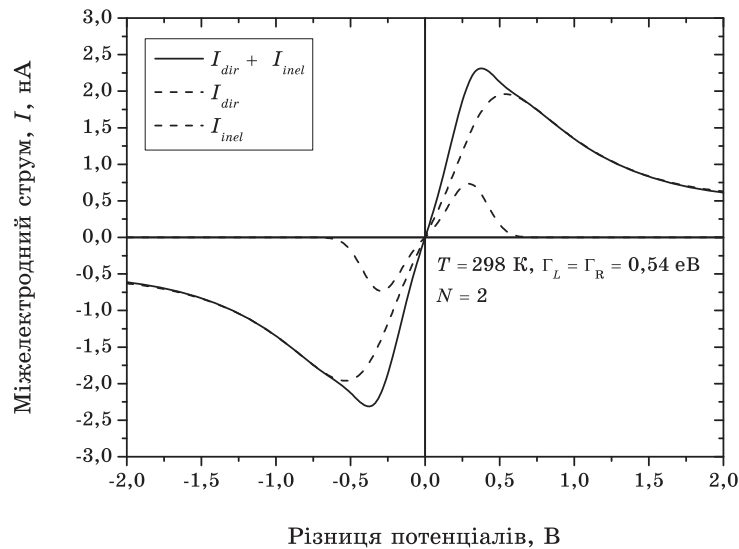


Рис. 3. $I(V)$ характеристика струму в широкому діапазоні напруг, а також поведінка пружної $I_{dir}(V)$ та непружної $I_{inel}(V)$ компонент струму від різниці прикладених до мікроелектрод потенціалів. Обчислення зроблені із використанням формул (5)–(7). Показано, що із збільшенням V пружна трансмісія є домінуючою при формуванні струму.

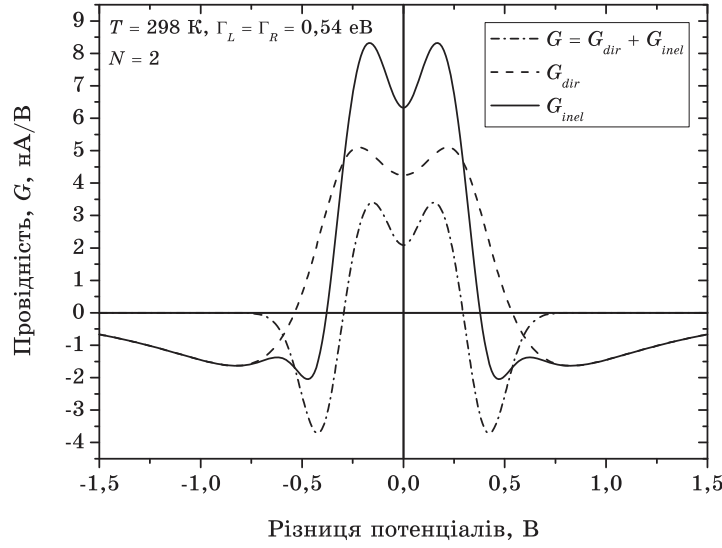


Рис. 4. Залежність диференційної провідності від різниці потенціалів, прикладених до мікроелектрод.

$$I(V) \approx Q_{L \rightarrow R} / (1 + U_D)(1 + U_A). \quad (16)$$

де

$$Q_{L \rightarrow R} = -\frac{\Gamma_L \Gamma_R \beta_D^2 \beta_A^2}{|V_B|^2} \times \int_{E_F}^{E_F + eV} \frac{\sinh^2[\Lambda]}{\sinh^2[(N+1)\Lambda]} \frac{1}{\left[(E - E_D(V))^2 + \Gamma_L^2 / 4\right] \left[(E - E_A(V))^2 + \Gamma_R^2 / 4\right]} dE, \quad (17)$$

де введений параметр Λ задається наступним виразом:

$$\Lambda \equiv \ln \left[(E_B(V) - E)^2 + \sqrt{(E_B(V) - E)^2 - 4|V_B|^2} / 2|V_B| \right].$$

При подальшому зростанні прикладеної напруги як пружня $I_{dir}(V)$, так і непружня $I_{inel}(V)$ компоненти струму досягають свого максимального значення. Це відбувається при включенні резонансної трансмісії, коли рівень ННМО термінальної групи проводу співпадає з Фермійовим рівнем електроди. Значення таких резонансних напруг є

$$V_L^{res} = \Delta E_A / |e| V (1 - \eta_A), \quad V_R^{res} = \Delta E_D / |e| V (1 - \eta_D). \quad (18)$$

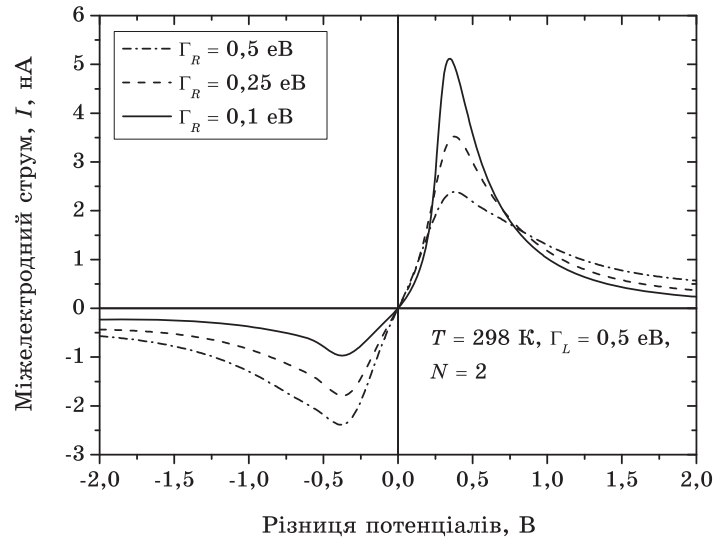


Рис. 5. Випростування струму у випадку неідентичності зв'язку термінальних груп молекулярного проводу з електродами.

При $V > V_{L(R)}^{res}$ відбувається блокування струму, обумовлене як роллю локалізованих станів при пружній трансмісії електрона [31], так і спадом дистанційних суперобмінних швидкостей $k_{DA}(V)$ та $k_{AD}(V)$ [29]. В результаті спостерігається негативна диференціальна провідність проводу (рис. 4).

При неідентичній взаємодії термінальних груп проводу з електродами спостерігаються асиметричні характеристики, з явним ефектом випростування струму (рис. 5). Цей ефект стає тим сильнішим, чим більше відрізняються величини контактної взаємодії. Так, при $\Gamma_R / \Gamma_L = 0,2$, пікові значення прямого і зворотного струмів відрізняються майже на порядок $I_{forward}^{max} / I_{backward}^{max} \cong 10$.

5. ВИСНОВКИ

У даній роботі нами було запропоновано кінетичний модель формування комбінованого дистанційного пружнього та стрибкового непружного міжелектродного струму через короткий молекулярний провід із сильним Кульоновим відштовхуванням між електронами, що переносяться. Ми розглянули молекулярний провід з двома активними термінальними групами D та A (рис. 1), здатними локалізувати на собі електрон в процесі трансмісії, які з'єднані регулярною містковою структурою з сильним міжцентровим зв'язком. Наявність місткової структури, енергетично розташованої вище по

відношенню до рівнів енергії термінальних груп, забезпечує утворення специфічної суперобмінної взаємодії між заключними центрами проводу. Це дозволяє окрім непружних стрибкових процесів між електродами та молекулярним ланцюжком розглядати також дистанційне тунелювання електрона між D та A групами шляхом суперобміну. В рамках моделю було також розглянуто пружне міжелектродне тунелювання за участю локалізованих рівнів енергії, віднесених до заключних центрів проводу та дельокалізованих енергетичних рівнів містка. Було одержано вираз для стаціонарного струму (5), який може бути представлений у вигляді адитивної суми дистанційної міжелектродної пружної (6) та стрибкової непружної (7) компонент. При проведенні чисельної аналізи $I(V)$ характеристик було виявлено, що пружня компонента струму $I_{dir}(V)$ є домінуючою при формуванні вольт-амперних характеристик, рис. 3. Одержані вирази для струму були використані при дослідженні впливу зв'язку молекули з контактами, де було показано, що при неідентичному зв'язку проводу з електродами (параметри Γ_L і Γ_R) може спостерігатися ефект випростування для струму (рис. 4).

Роботу виконано в рамках програми «Наноструктурні системи, наноматеріали, нанотехнології» (проєкт № 3/07-Н).

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. G. E. Moore, *Electronics*, **38**, No. 8: 1 (1965).
2. R. Hiremane, *Technology@Intel Magazine*, April 2005: 1 (2005).
3. A. Aviram and M. A. Ratner, *Chem. Phys. Lett.*, **29**: 277 (1974).
4. L. Chen, Z. Hu, A. Zhao, B. Wang, Y. Luo, J. Yang, and J. G. Hou, *Phys. Rev. Lett.*, **99**: 146803 (2007).
5. L. Venkataraman, Y. S. Park, A. C. Whalley, C. Nuckolls, M. S. Hybertsen, and M. L. Steigerwald, *Nano Lett.*, **6**: 2238 (2006).
6. M. T. González, S. Wu, R. Huber, S. J. van der Molen, C. Schonenberger, and M. Calame, *Nano Lett.*, **7**: 502 (2006).
7. L. Venkataraman, J. E. Klare, I. W. Tam, C. Nuckolls, M. S. Hybertsen, and M. L. Steigerwald, *Nano Lett.*, **6**: 458 (2006).
8. M. D. Austin and S. Y. Chou, *Nano Lett.*, **3**: 1687 (2003).
9. Z. K. Keane, J. W. Ciszek, J. M. Tour, and D. Natelson, *Nano Lett.*, **6**: 1518 (2006).
10. S. Ssenyange, H. Yan, and R. L. McCreer, *Langmuir*, **22**: 10689 (2006).
11. J. Chen, J. Su, W. Wang, and M. A. Reed, *Physica E*, **16**: 17 (2003).
12. S. Datta, *Nanotechnology*, **15**: S433 (2004).
13. X. Xiao, B. Xu, and N. J. Tao, *Nano Lett.*, **4**: 267 (2004).
14. L. Grill and F. Moresco, *J. Phys.: Condensed Matter*, **18**: S1887 (2006).
15. S. Hou, J. Ning, Z. Shen, X. Zhao, and Z. Xue, *Chem. Phys.*, **327**: 1 (2006).
16. N. D. Lang and C. R. Kagan, *Nano Lett.*, **6**: 2955 (2006).
17. Z. Li and D. S. Kosov, *J. Phys. Chem. B*, **110**: 9893 (2006).
18. B. Zou, Z.-L. Li, X.-N. Song, Y. Luo, and C.-K. Wang, *Chem. Phys. Lett.*, **447**:

- 69 (2007).
19. A. A. Farajian, R. V. Belosludov, H. Mizuseki, Y. Kawazoe, T. Hashizume, and B. I. Yakobson, *J. Chem. Phys.*, **127**: 024901 (2007).
 20. T. Fukuda, H. Oymak, and J. Hong, *Phys. Rev. B*, **75**: 195498 (2007).
 21. M. Buttiker and R. Ladauer, *Phys. Rev. A*, **23**, No. 3: 1397 (1981).
 22. S. Stojkovic, C. Joachim, L. Grill, and F. Moresco, *Chem. Phys. Lett.*, **408**: 134 (2005).
 23. E. G. Petrov, Ya. R. Zelinsky, and V. I. Teslenko, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **467**: 93 (2007).
 24. Я. Р. Зелінський, М. В. Коваль, Е. Г. Петров, *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*, **5**, № 2: 649 (2007).
 25. F. Zahid, A.W. Ghosh, M. Paulson, E. Polizzi, and S. Datta, *Phys. Rev. B*, **70**: 2453 (2004).
 26. K. Walczak, *Physica B*, **365**: 193 (2005).
 27. S.-H. Ke, H. U. Baranger, and W. Yang, *J. Am. Chem. Soc.*, **126**: 15897 (2004).
 28. Z. Li and D. S. Kosov, *J. Phys. Chem. B*, **110**: 9893 (2006).
 29. E. G. Petrov, Ya. R. Zelinsky, V. May, and P. Hänggi, *J. Chem. Phys.*, **127**: 084709 (2007).
 30. E. G. Petrov, V. May, and P. Hänggi, *Chem. Phys.*, **319**: 380 (2005).
 31. E. G. Petrov, *Low Temp. Phys.*, **31**: 338 (2005).
 32. E. G. Petrov, V. May, and P. Hänggi, *Phys. Rev. B*, **73**: 0454081 (2006).
 33. R. A. Marcus and N. Sutin, *Biochim. Biophys. Acta*, **811**: 265 (1985).
 34. E. G. Petrov, I. S. Tolokh, A. A. Demidenko, and V. V. Gorbach, *Chem. Phys.*, **193**: 237 (1995).
 35. Э. Г. Петров, Е. В. Шевченко, В. И. Тесленко, *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*, **6**, № 3: 731 (2008).