

## TRANSISTOR PHÂN TỬ ĐƠN: MÔ HÌNH VÀ MÔ PHỎNG SINGLE MOLECULAR TRANSISTOR: MODELING AND SIMULATION

Lê Hoàng Minh, Huỳnh Hoàng Trung, Dương Thị Cẩm Tú  
 Trường Đại học Sư Phạm Kỹ Thuật Tp. Hồ Chí Minh

### TÓM TẮT

Trong công trình này, chúng tôi giới thiệu mô hình Transistor phân tử đơn (Single molecular transistor - SMT). Cấu trúc của SMT giống MOSFET truyền thống, nhưng kênh dẫn được thay bằng phân tử vòng benzene ghép 1-4.

Transistor phân tử đơn là ứng cử viên đầy hứa hẹn để thay thế transistor trường MOSFET trong tương lai vì kích thước nhỏ, công suất tiêu thụ thấp và tốc độ cao.

Chúng tôi sử dụng phương pháp hàm Green không cân bằng để tính hàm truyền và cuối cùng đặc trưng dòng thế của SMT. Chương trình mô phỏng sử dụng GUI trong Matlab. Chúng tôi nhận thấy sự khác nhau giữa đặc trưng dòng - thế của SMT và MOSFET truyền thống. Thêm vào đó, ảnh hưởng của vật liệu, nhiệt độ và điện thế thiên áp đến đặc trưng dòng - thế của SMT cũng đã được khảo sát. Nhờ GUI trong Matlab, những kết quả mô phỏng được thể hiện một cách trực quan.

**Từ khoá:** Transistor phân tử đơn, điện tử học phân tử, điện tử học nano.

### ABSTRACT

In this work, we introduce a model of three-terminal Single molecular transistor (SMT). The structure of the SMT is in shape like traditional MOSFET, but its conductive channel is replaced by a benzene-1,4-dithiolate molecule.

SMT is a promising alternative candidate of traditional MOSFET in future due to its small size, low power and high speed.

We use non-equilibrium Green's function method to compute transport function of charges and ultimately, the current-voltage (I-V) characteristics. The program is written by using graphic user guide (GUI) in Matlab. We have found difference of I-V characteristics between MOSFET and SMT. In addition, impacts of types of material, temperature, and bias on I-V characteristics of the SMT have been considered. Using GUI in Matlab, obtained results of simulations are intuitively displayed.

**Key words:** Single Molecular Transistor, Molecular electronics, Nanoelectronics.

### I. GIỚI THIỆU

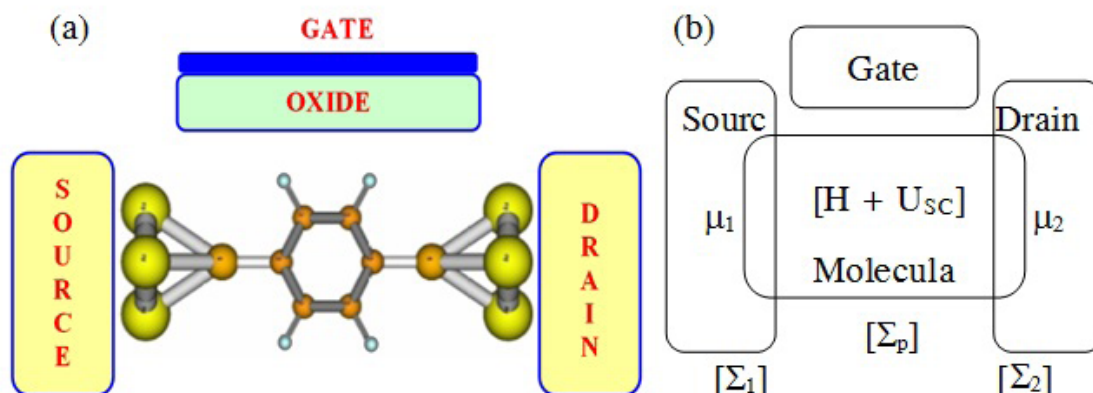
Điện tử học nano là lĩnh vực tính toán và điều khiển hệ thống ở kích thước nano sử dụng những thuộc tính điện tử của vật liệu. Mạch logic có thể được sử dụng tính toán, truyền tin, những hệ thống điều khiển và lưu trữ thông tin. Những linh kiện điện tử nano bao gồm transistor Si kích thước nano, transistor đơn điện tử SET,

diode xuyên hầm cộng hưởng RTD, transistor xuyên hầm cộng hưởng RTT, những linh kiện spin từ tính và những linh kiện phân tử.

Điện tử học phân tử là lĩnh vực nghiên cứu cho công nghệ thông tin tương lai. Trọng tâm của công trình này là nghiên cứu về linh kiện điện tử phân tử có ba điện cực được gọi là transistor phân tử đơn (Single molecular

transistor - SMT). SMT là ứng cử viên đầy hứa hẹn để thay thế transistor trường MOSFET trong tương lai vì kích thước nhỏ (kích thước khoảng 10 nm), công suất tiêu thụ thấp và tốc độ cao. Cấu trúc SMT được xây dựng có dạng như của MOSFET truyền thống. Kênh dẫn của SMT là phân tử benzene ghép 1-4 (BDT) tiếp xúc với các phân tử vàng (Au) làm điện cực nguồn (Source - S) và điện cực máng (Drain - D), điện cực cổng (Gate - G) được cách ly với kênh dẫn phân tử BDT bởi lớp cách điện Silicon dioxide (SiO<sub>2</sub>). Điện thế áp vào điện cực cổng

$V_G$  điều khiển mật độ dòng điện tử bên trong kênh dẫn phân tử BDT. Kênh dẫn phân tử BDT gồm có các mức năng lượng được phân thành ba vùng rõ ràng: vùng dẫn, vùng cấm và vùng hoá trị. Mức năng lượng Fermi của các tiếp xúc điện cực nguồn và điện cực máng với kênh dẫn phân tử BDT ở trạng thái cân bằng ( $V_D = 0V$ ) ở khoảng giữa vùng cấm giới hạn bởi mức năng lượng thấp nhất của vùng dẫn LUMO và mức năng lượng cao nhất của vùng hoá trị HOMO [1,2, 3].



Hình 1: (a) Cấu trúc của transistor phân tử đơn - SMT. (b) Phân tử dùng làm kênh dẫn được mô tả bởi toán tử Hamilton  $H$  và điện thế self-consistent  $U_{sc}$ . Hiệu ứng của tiếp xúc mở rộng được diễn tả bằng những ma trận self-energy  $\Sigma_{1,2}$ . Quá trình tán xạ có thể diễn tả bằng ma trận self-energy khác  $\Sigma_p$ . Những tiếp xúc điện cực S, D được xác định lần lượt bằng những mức năng lượng Fermi  $\mu_1$  và  $\mu_2$ .

## II. PHƯƠNG PHÁP HÀM GREEN KHÔNG CÂN BẰNG (NEGF)

### 1. Mô hình kênh dẫn phân tử một mức năng lượng

Những tiếp xúc điện cực S, D được xác định lần lượt bằng những mức năng lượng Fermi  $\mu_1$  và  $\mu_2$ . Ở trạng thái cân bằng, điện thế ngoài áp vào điện cực D đối với S,  $V_D = 0V$  nên mức năng lượng Fermi  $\mu_1 = \mu_2$ . Số điện tử trên một mức năng lượng được xác định bởi hàm phân bố Fermi (hàm xác suất Fermi – Dirac).

$$f(E) = \frac{1}{e^{k(E-\mu)/k_B T} + 1} = f_0(E - \mu) \quad (1)$$

Mức năng lượng Fermi không đổi trong toàn bộ hệ thống. Khi này không có dòng điện tử chảy trong kênh dẫn phân tử BDT, dòng điện  $I_D = 0$ .

Điện thế ngoài áp vào điện cực D đối với S,  $V_D \neq 0V$  tạo nên sự chênh lệch mức năng lượng Fermi ở hai điện cực S và D là  $\mu_1 - \mu_2 = qV_D$ , kênh dẫn phân tử BDT được đặt trong trạng thái không cân bằng mức năng lượng Fermi ở hai điện cực. Điện thế ngoài áp vào điện cực G ( $V_G \neq 0V$ ) làm dịch chuyển các mức năng lượng của vùng dẫn hay vùng hoá trị của kênh dẫn vào khoảng giới hạn giữa của sự chênh lệch mức năng lượng Fermi  $\mu_1$  và  $\mu_2$ , dòng điện tử chảy từ tiếp xúc điện cực S sang kênh dẫn rồi đến tiếp xúc điện cực D, dòng điện  $I_D$  trong mạch ngoài được tạo thành [3].

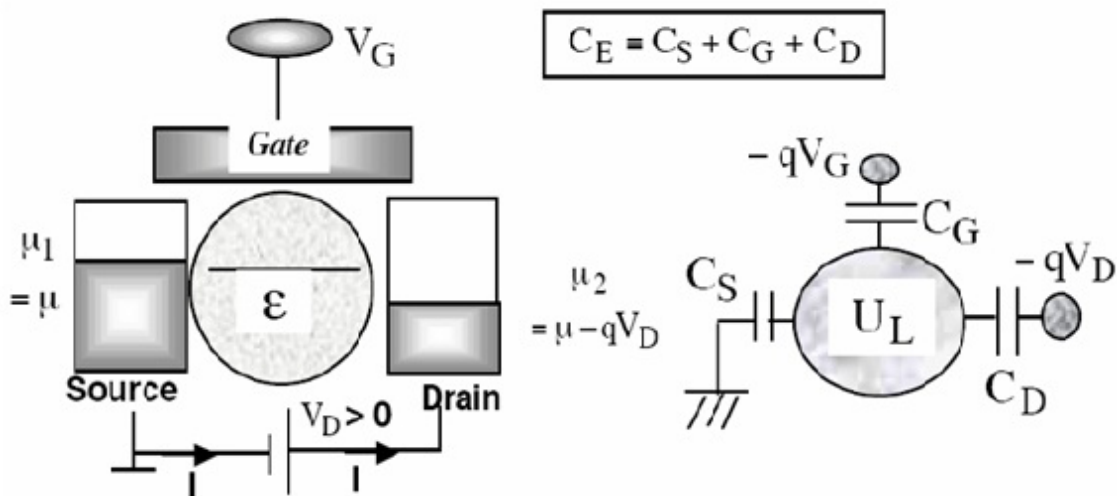
Vì sự liên kết giữa các nguyên tử, trạng thái mức năng lượng được mở rộng thành một dải trong khoảng giới hạn giữa của sự chênh lệch mức năng lượng Fermi  $\mu_1$  và  $\mu_2$  có mật độ trạng thái (Density of states - DOS)  $D_\varepsilon(E)$  cho bởi hàm toán tử Lorentz có trạng thái mức năng lượng  $E = \varepsilon$  ở trung tâm:

$$D_\varepsilon(E) = \frac{\gamma/2\pi}{(E-\varepsilon)^2 + (\gamma/2)^2}, \quad \gamma = \gamma_1 + \gamma_2 \quad (2)$$

Xét một kênh dẫn BDT có bề dài  $L$  và bề rộng  $W$  xác định thì mật độ trạng thái  $D_\varepsilon(E)$  là:

$$D_\varepsilon(E) = \frac{m^* WL}{\pi \hbar^2} \theta(E - E_c) \quad (3)$$

với  $\theta$  là hàm bước đơn vị,  $E_c$  là năng lượng dải dẫn.



Hình 2: Mô hình transistor phân tử đơn một mức năng lượng và mô hình mạch điện tương đương.

Dựa vào phương pháp lý thuyết hàm Green không cân bằng NEGF số điện tử  $N$  được xác định:

$$N = \int_{-\infty}^{+\infty} D_\varepsilon(E-U) \frac{\gamma_1 f_1(E) + \gamma_2 f_2(E)}{\gamma_1 + \gamma_2} dE \quad (4)$$

và dòng điện  $I_D$  cũng được xác định:

$$I_D = \frac{2q}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} 2\pi D_\varepsilon(E-U) \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} [f_1(E) - f_2(E)] dE \quad (5a)$$

hay:

$$I_D = \frac{2q}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{T}(E-U) [f_1(E) - f_2(E)] dE \quad (5b)$$

trong đó:  $\bar{T}(E) = 2\pi D_\varepsilon(E) \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} = \frac{\gamma_1 \gamma_2}{(E - \varepsilon)^2 + (\gamma/2)^2}$ : hệ số truyền.

Trong biểu thức (5a) và (5b) có U xuất hiện ở vế phải, được gọi là năng lượng điện thế bên trong kênh dẫn và nó là hàm của số điện tử N. Thông qua mô hình mạch điện tương đương, U được xác định:

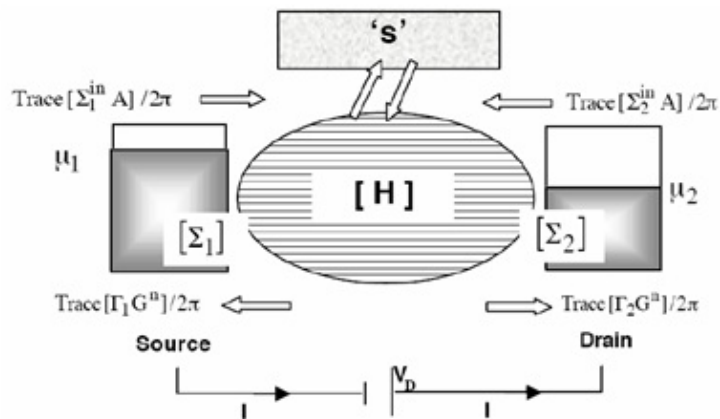
$$U = U_L + \frac{q^2}{C_E} (N - N_0) \quad (6)$$

trong đó:  $U_L = \frac{C_G}{C_E} (-qV_G) + \frac{C_D}{C_E} (-qV_D)$  điện thế Laplace với  $C_E = C_S + C_G + C_D$  [5].

## 2. Mô hình kênh dẫn phân tử nhiều mức năng lượng

Sử dụng toán tử Hamilton H và điện thế self – consistent  $U_{SC}$  thay thế cho mức năng lượng  $\varepsilon$  và năng lượng điện thế U để mô tả cho phân tử dùng làm kênh dẫn. Hiệu ứng của tiếp xúc mở rộng điện cực nguồn S và điện cực máng D được diễn tả bằng những ma trận self – energy  $\Sigma_1$  và  $\Sigma_2$  thay thế cho  $\gamma_1$  và  $\gamma_2$ . Quá trình tán xạ có thể diễn tả bằng ma trận self – energy khác  $\Sigma_p$ . Tuy nhiên, trong nghiên cứu này chỉ khảo

sát sự vận chuyển đơn đạo nên  $\Sigma_p = 0$ . Những tiếp xúc điện cực S, D được xác định lần lượt bằng những mức năng lượng Fermi  $\mu_1$  và  $\mu_2$  (hình 1b). Trong việc mô phỏng bao gồm việc: dựa vào H,  $U_{SC}$ ,  $\Sigma_1$ ,  $\Sigma_2$ ,  $\mu_1$  và  $\mu_2$  xác định ma trận mật độ  $\rho$  bằng việc sử dụng những hàm tương quan có trong phương pháp hàm Green không cân bằng, mật độ điện tử và dòng điện được tính toán được xác định từ  $\rho$ ; ma trận mật độ  $\rho$  được tính toán khi chúng ta giải phương trình Poisson thu được điện thế self – consistent  $U_{SC}$  [3, 4].



Hình 3: Mô hình tính dòng điện tử truyền qua transistor phân tử đơn (SMT) sử dụng phương pháp hàm Green không cân bằng NEGF.

**Self – energy:** Ma trận self – energy tiếp xúc  $\Sigma$  được tính qua hàm Green tiếp xúc bề mặt  $g$  và những ghép nối phân tử và tiếp xúc  $\tau$ . Hàm Green phân tử cho phân tử ghép nối hai tiếp xúc điện cực S, D tại năng lượng E có thể viết như sau:

$$G(E) = [EI - H - U_{sc} - \Sigma_1 - \Sigma_2]^{-1} \quad (7)$$

ở đây, I: ma trận đơn vị, H: toán tử Hamilton phân tử,  $U_{sc}$ : điện thế self – consistent.

Trong đó nhưng ma trận self – energy tiếp xúc là:

$$\Sigma_{1,2}(E) = \tau_{1,2} g_{1,2} \tau_{1,2}^+ \quad (8)$$

Ma trận mật độ được xác định rõ thông qua hàm tương quan –  $iG^<(E)$ :

$$\rho = \int dE [-iG^<(E)/2\pi] \quad (9)$$

Hàm tương quan thì được xác định từ hàm Green  $G(E)$  và những hàm mở rộng  $\Gamma_{1,2}$ :

$$-iG^<(E) = G(f_1\Gamma_1 + f_2\Gamma_2)G^+ \quad (10)$$

$$\Gamma_{1,2} = i(\Sigma_{1,2} - \Sigma_{1,2}^+) \quad (11)$$

Trong đó  $f_{1,2}(E)$  là những hàm Fermi với những mức năng lượng Fermi  $\mu_{1,2}$ :

$$f_{1,2}(E) = \frac{1}{e^{[E - \mu_{1,2}]/k_B T} + 1} \quad (12)$$

Ma trận mật độ được sử dụng để tính mật độ điện tử  $n(\vec{r})$  trong không gian thực sử dụng những vector trị riêng của toán tử Hamilton  $\Psi_\alpha(\vec{r})$  trong không gian thực:

$$n(\vec{r}) = \sum_{\alpha, \beta} \Psi_\alpha(\vec{r}) \Psi_\beta^*(\vec{r}) \rho_{\alpha\beta} \quad (13)$$

Phương trình Poisson được giải cho sự thay đổi mật độ điện tử và phụ thuộc vào năng lượng điện thế bên trong kênh dẫn:

$$\vec{\nabla} \cdot (\epsilon \vec{\nabla} U(\vec{r})) = -q^2(n(\vec{r}) - n_0(\vec{r})) \quad (14)$$

với điện thế self – consistent  $U_{sc}$  được tính theo  $U_{sc} = UI$  (I: ma trận đơn vị) cùng kích thước với ma trận toán tử Hamilton H [4].

Tổng số điện tử N có thể thu được từ ma trận mật độ  $\rho$  như sau:

$$N = \text{Trace}(\rho) \quad (15)$$

Dòng điện giữa hai tiếp xúc điện cực S, D được xác định như sau:

$$I_D = \frac{2q}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T(E) [f_1(E) - f_2(E)] dE \quad (16)$$

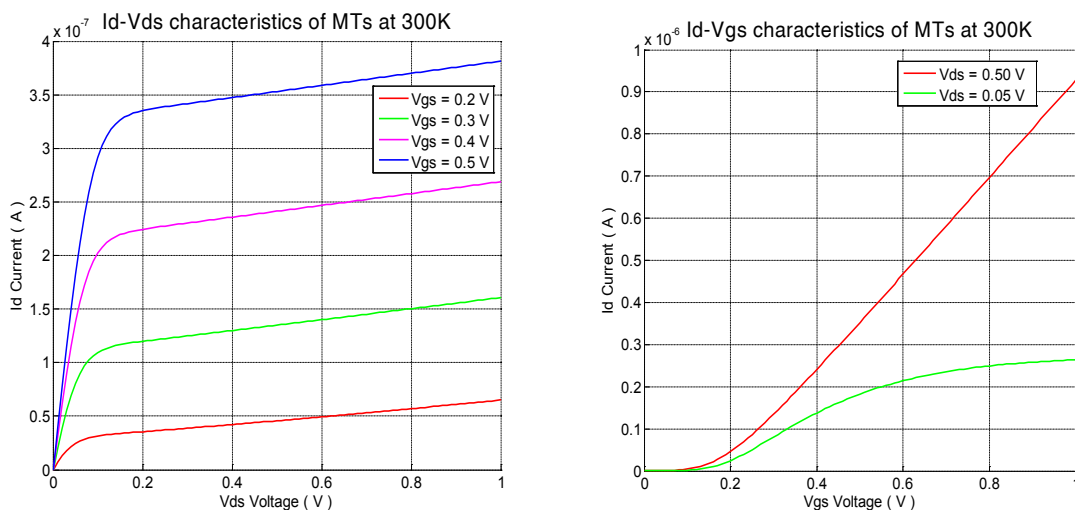
trong đó hệ số truyền  $T(E)$  (hàm truyền) được định nghĩa bởi:

$$T(E) = \text{Trace}[\Gamma_1 G \Gamma_2 G^+] \quad (17)$$

### III. KẾT QUẢ

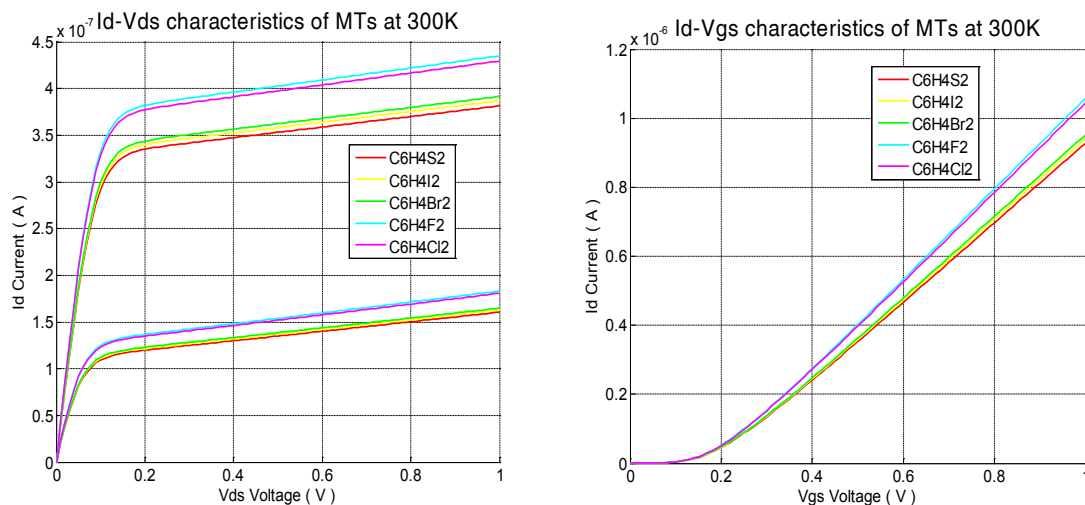
Mô phỏng được các đặc trưng dòng - thế của transistor phân tử đơn (SMT). Thêm vào đó, ảnh hưởng của vật liệu, nhiệt độ và điện thế thiên áp đến đặc trưng dòng - thế của SMT cũng đã được khảo sát. Nhờ GUI trong Matlab, những kết quả mô phỏng được thể hiện một cách trực quan.

Đặc trưng dòng - thế của transistor phân tử đơn được mô phỏng tại thế thiên áp khác nhau được trình bày trong hình 4. Thế ngưỡng của SMT trong trường hợp này  $V_T = 0,2V$



Hình 4: Đặc trưng  $I_D = f(V_{DS})$  và  $I_D = f(V_{GS})$  của SMT tại thế thiên áp khác nhau.

Đặc trưng dòng - thế của transistor phân tử đơn được mô phỏng dưới sự ảnh hưởng của vật liệu làm kênh dẫn được trình bày trong hình 5.



Hình 5: Đặc trưng  $I_D = f(V_{DS})$  và  $I_D = f(V_{GS})$  của SMT dưới sự ảnh hưởng của vật liệu làm kênh dẫn.

Khi thay đổi phân tử benzene ghép 1-4 BDT làm kênh dẫn làm cho bề dài  $L$  và bề rộng  $W$  của kênh dẫn phân tử thay đổi. Điện dung của tụ điện điện cực  $G$  tạo ra giữa kênh dẫn phân tử BDT và lớp cách điện  $\text{SiO}_2$  thay đổi theo biểu thức:

$$C_G = \frac{\epsilon_0 \epsilon_r W L}{t_{ox}} \quad (18)$$

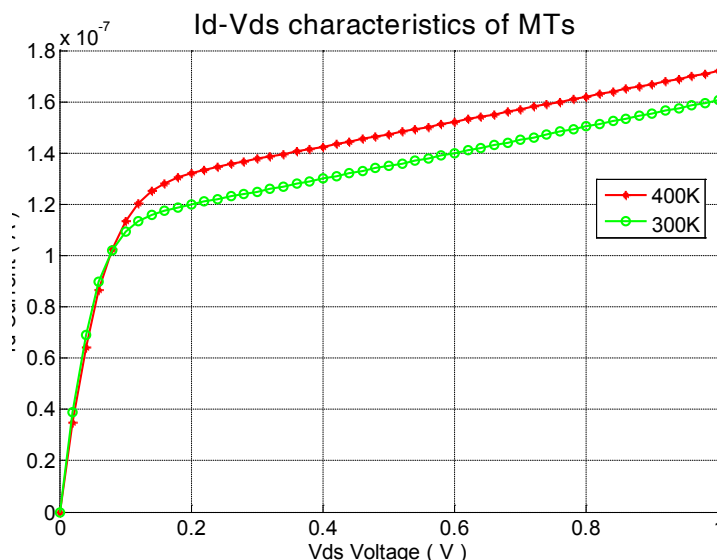
Trong đó:  $t_{ox} = 1,5 \text{ nm}$  là độ dày của lớp  $\text{SiO}_2$ ,  $\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ F/m}$ ,  $\epsilon_r = 3,9$  là hằng số điện môi tương đối của  $\text{SiO}_2$ . Điện thế Laplace  $U_L$  cũng sẽ thay đổi theo sự thay đổi giá trị của điện dung của tụ điện  $C_G$ .

**Bảng 1:** Phân tử benzene ghép 1-4 khác nhau có bề dài L và bề rộng W khác nhau.

Phân tử	$C_6H_4S_2$	$C_6H_4I_2$	$C_6H_4Br_2$	$C_6H_4F_2$	$C_6H_4Cl_2$
Bề dài L (nm)	0,8460	1,0321	1,0025	0,7957	0,9340
Bề rộng W (nm)	0,6542	0,6637	0,6714	0,7460	0,7365

Tỷ số W/L là đại lượng cơ bản đặc trưng cho những đặc trưng dòng - thế mong muốn của transistor phân tử đơn (SMT).

Đặc trưng dòng - thế của transistor phân tử đơn được mô phỏng tại nhiệt độ khác nhau được trình bày trong hình 6.



Hình 6: Đặc trưng  $I_D = f(V_{DS})$  và  $I_D = f(V_{GS})$  của SMT tại nhiệt độ 400K và 300K.

Nhiệt độ tăng bổ sung năng lượng nhiệt cho điện tử và làm dịch chuyển các mức năng lượng bên trong kênh dẫn phân tử BDT lên cao nên đường đặc trưng dòng - thế càng nâng cao khi tăng nhiệt độ.

#### IV. KẾT LUẬN

Dựa vào mô hình transistor phân tử đơn, chúng tôi tính hàm phân bố, mật độ trạng thái của điện tử. Mật độ điện tử trong transistor

phân tử, dòng điện nguồn - máng của transistor phân tử đơn được tính dựa vào phương pháp hàm Green không cân bằng NEGF. Một số kết quả mô phỏng đặc trưng của transistor phân tử đơn gồm: ảnh hưởng của vật liệu, ảnh hưởng của nhiệt độ, thế thiên áp lên đặc trưng cũng đã được khảo sát. Những kết quả mô phỏng khá phù hợp với những kết quả thực nghiệm được công bố trong thời gian gần đây trên thế giới.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. W. Su, *First principles study of Molecular electronic devices*, Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden, 2006.
2. P. S. Damle, *Nanoscale device modeling: from MOSFETs to Molecules*, PhD thesis, Purdue University, in USA, May 2003.
3. Supriyo Datta, *Quantum transport: Atom to Transistor*, Cambridge University Press, 2005.
4. M. Lundstrom and H. Pal, *Nanoscale MOSFET Physics for Compact Models*, Purdue University, in USA, May 2007.
5. S. Luryi, *Quantum Capacitance Devices*, Appl. Phys. Lett 52, 501, 1988.
6. M. Lundstrom, *Simple Theory of the Ballistic Nanotransistor*, Purdue University, in USA, May 2007.
7. PGS. TS Đinh Sỹ Hiền, *Linh kiện bán dẫn*, Nxb Đại học Quốc gia Tp. Hồ Chí Minh, 2008.