

## TRANSISTOR PHÂN TỬ

Trần Tiến Phúc

Trường Đại học Nha Trang

(Bài nhận ngày 19 tháng 03 năm 2007, hoàn chỉnh sửa chữa ngày 15 tháng 07 năm 2007)

**TÓM TẮT:** Bài báo này trình bày cơ sở lý thuyết của transistor phân tử, một hướng nghiên cứu tiếp cận từ dưới lên (bottom-up) của điện tử nano. Tác giả đã dùng GUI trong MATLAB để mô phỏng hoạt động của transistor có kênh phân tử là Diiodo-Benzene ( $C_6H_4I_2$ ). Các kết quả thu được họ đặc tuyến I-V có dạng như MOSFET bán dẫn khối. Khi thay đổi kích thước kênh phân tử ở những giá trị như hóa học lượng tử đã tính và thế cổng từ 0,2V đến 0,6V cho ta thấy tính khả thi về một linh kiện mới sẽ ra đời trong tương lai rất gần – transistor phân tử Diiodo-Benzene có kích thước chỉ vài nanômét.

**Từ khoá:** transistor phân tử, điện tử nano

### 1. ĐẶT VẤN ĐỀ

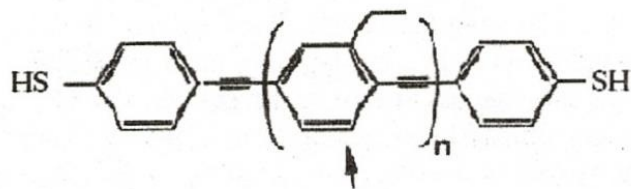
Linh kiện bán dẫn khối với kích thước hàng trăm nanômét trở lên có nhược điểm là khó chế tạo hàng triệu hoặc hàng tỷ linh kiện giống nhau trong chip có mật độ cực cao. Những phân tử riêng có cấu trúc thang nanômét tự nhiên rất dễ dàng chế tạo chính xác như nhau và chúng tự hình thành, tự lắp ráp. Các nhà nghiên cứu đang cố gắng mô phỏng, thiết kế, chế tạo và kiểm tra các phân tử riêng và các cấu trúc siêu phân tử nano hoạt động như các chuyển mạch điện, có tính chất giống như các transistor bán dẫn nhỏ. Điện tử học phân tử và nguyên tử là một hướng tiếp cận từ dưới đáy lên (bottom up) của điện tử nano.

Có ít nhất bốn loại linh kiện chuyển mạch điện tử phân tử đang được nghiên cứu [1, tr.32]:

- *Chuyển mạch điện tử phân tử điều khiển bằng điện trường*, dựa trên các hiệu ứng lượng tử phân tử.
- *Linh kiện cơ điện tử phân tử*, sử dụng các lực được áp vào bằng điện hay cơ học để thay đổi cấu tạo, làm chuyển động một phân tử hoặc một nhóm các phân tử gây nên hiệu ứng chuyển mạch.
- *Chuyển mạch phân tử quang hoạt/đổi màu theo ánh sáng*, sử dụng ánh sáng để thay đổi hình dạng, định hướng hay cấu hình điện tử của phân tử gây nên hiệu ứng chuyển mạch.
- *Linh kiện phân tử cơ điện tử*, sử dụng phản ứng điện hóa để thay đổi hình dạng, định hướng hoặc cấu hình điện tử của một phân tử từ đó gây nên hiệu ứng chuyển mạch.

Chính lưu phân tử đã được Aviram và Ratner nghiên cứu từ năm 1974. Về sau, Tour và các cộng sự đã tổng hợp chuyển mạch do Aviram đề xuất và chính lưu phân tử đã được thực hiện. Nhiều công trình đã đo được độ dẫn và các tính chất điện của các phân tử riêng hay mô phỏng chúng. Càng ngày càng có thêm nhiều nhóm nghiên cứu quan tâm đến điện tử phân tử nhờ sự hỗ trợ của các phần mềm mô phỏng hóa học và kính hiển vi đầu dò quét (Scanning Probe Microscopy – SPM) để tạo ảnh, phân tích bề mặt có độ phân giải cao cũng như thao tác đến từng nguyên tử.

Theo quan niệm cổ điển, điện trở phụ thuộc tiết diện dây dẫn. Tiết diện dây dẫn giảm tới kích thước phân tử thì những hiệu ứng mới xuất hiện, dây phân tử có khả năng dẫn dòng không tuân theo định luật Ohm.



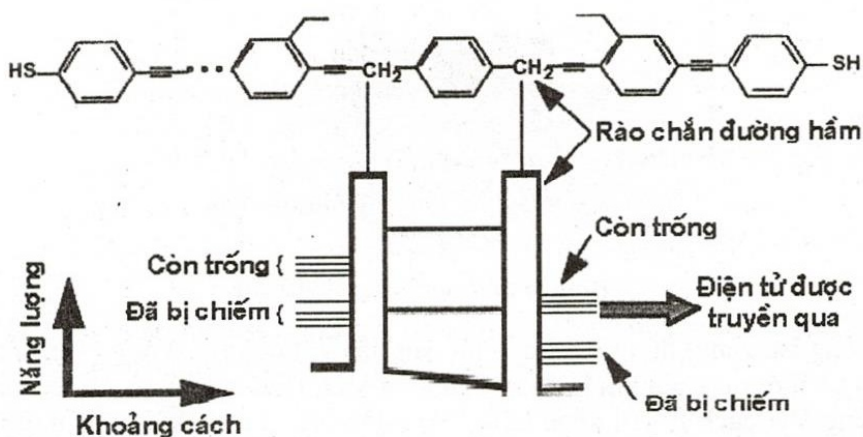
n nhóm liên kết với nhau

Hình 1: Dây phân tử có khả năng dẫn điện

Hình 1 trình bày cấu trúc của một dây phân tử do Tour phát hiện và đã chứng minh được độ dẫn điện của một phân tử. Những dây phân tử có thể được chế tạo rất dài bằng phương pháp tổng hợp hóa học.

Một chuỗi các vòng benzene được nối bằng liên kết axetylen. Những quỹ đạo hay những đám mây điện tử kết hợp với nhau hay tương tác để tạo thành một quỹ đạo lớn xuyên suốt chiều dài của dây cho phép các điện tử linh động chảy theo chiều điện trường và tạo nên dòng điện.

Một số công trình về điện tử phân tử đã nghiên cứu cách tạo các giếng thế để giữ các điện tử linh động của phân tử hình thành chuyển mạch (Hình 2).



Hình 2: Cấu trúc và cơ chế của RTD phân tử

Một giếng lượng tử được hình thành từ một dây phân tử mà hai bên là rào thế CH<sub>2</sub> làm gãy chuỗi các quỹ đạo kết hợp hình  $\pi$ . Trong đó, hiệu ứng đường hầm được điều khiển bằng điện trường hay hiệu ứng chuyển mạch đơn điện tử. Cấu trúc đó có thể tạo nên điốt đường hầm cộng hưởng (resonant tunneling diode, RTD) hay transistor đường hầm cộng hưởng (resonant tunneling transistor, RTT).

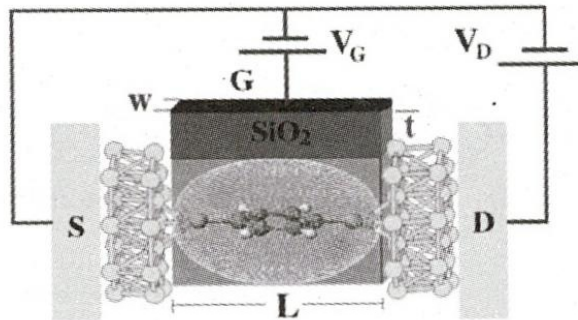
Trong công trình này tác giả trình bày những kết quả nghiên cứu và mô phỏng loại linh kiện chuyển mạch điện tử phân tử điều khiển bằng điện trường – transistor phân tử. Đây là loại linh kiện có dạng họ đặc tuyến lối ra giống như MOSFET trong bán dẫn khối. Transistor phân tử là loại linh kiện điện tử nano hứa hẹn nhất trong những năm tới so với bốn loại nêu trên. Ba loại sau có hạn chế cơ bản khi chế tạo và sử dụng vì mật độ linh kiện cao mà dùng tới ánh sáng và lực cơ học.

Transistor phân tử dựa trên vòng benzene đã được nghiên cứu trong vài năm gần đây [5-12-14-15]. Hầu hết các nghiên cứu đã công bố dùng phân tử C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>S<sub>2</sub> hay C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>S<sub>2</sub>-2H làm kênh phân tử và mô phỏng cho nguyên tử Lưu huỳnh (S) tiếp xúc với ba nguyên tử Vàng (Au) trong cấu tạo transistor. Tuy nhiên khi mô phỏng phân tử này trên phần mềm hóa học CAChe 6.1 thì tác giả nhận thấy nguyên tử S trong phân tử không có đủ 3 liên kết kép đôi với Au như giả thuyết để tính toán. Mặt khác, các nghiên cứu trên đều cho kích thước phân tử dưới dạng giả định và đường đặc tuyến có được còn mang tính chất đơn lẻ.

Lần đầu tiên, tác giả của nghiên cứu này đã tìm các phân tử hóa học (Bảng 1) có sẵn trên thị trường về mặt thương mại, tối ưu hóa bằng phần mềm hóa học [6] để lấy các tham số cho chương trình mô phỏng linh kiện trong GUI của MATLAB. Chính điều đó đã tạo nên những kết quả mới và càng củng cố thêm tính hiện thực của transistor phân tử.

## 2. CƠ SỞ LÝ THUYẾT CỦA TRANSISTOR PHÂN TỬ

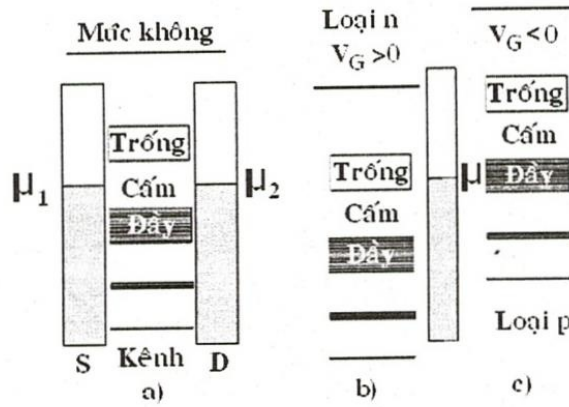
Ta hãy xét một linh kiện phân tử có cấu trúc như Hình 3.



Hình 3: Cấu tạo transistor phân tử

Phân tử (vòng benzene) đóng vai trò kênh dẫn liên kết qua lớp Vàng (Au) rồi tiếp xúc với hai điện cực D và S được khép kín bằng nguồn nuôi VD. Điều khiển độ dẫn của phân tử thông qua thế cực cổng VG cách ly với kênh bằng lớp SiO<sub>2</sub> [9]. Trong kênh phân tử, do tương tác giữa các nguyên tử mà mức năng lượng bị lượng tử hóa thành dải. Một số phân tử có dải năng lượng phân thành vùng đầy, vùng trống và xen giữa là vùng cấm rất rõ rệt. Trong trường hợp đó ta có thể mô hình hóa thành các trường hợp cụ thể để xét tính chất điện của nó.

Trên Hình 4 [11, tr.2], khi VD = 0, VG = 0, hai điện cực D và S có thể điện hóa tương ứng là  $\mu_S = \mu_1$  và  $\mu_D = \mu_2$ . Mức thế điện hóa ở vào giữa vùng cấm của mức năng lượng phân tử, dòng điện trong kênh bằng không, phân tử không có tính chất cách điện (Hình 4a).



Hình 4: Tính dẫn điện của phân tử

Nếu tác động một thế cổng  $V_G > 0$ , hệ mức năng lượng bị đẩy xuống. Khi các mức năng lượng trong vùng trống ngang mức thế điện hóa, các điện tử dễ dàng từ lớp tiếp xúc vào chiếm các mức năng lượng trong vùng trống, phân tử mang điện tích âm, tính chất dẫn điện của kênh là loại n (Hình 4b). Ngược lại, nếu tác động một thế cổng  $V_G < 0$ , hệ mức năng lượng được nâng cao lên. Khi các mức năng lượng trong vùng đầy ngang mức thế điện hóa, các điện tử trong phân tử dễ dàng qua lớp tiếp xúc đi vào các điện cực D, S để lại trong kênh phân tử các lỗ trống. Trong trường hợp này, phân tử mang điện tích dương, tính chất dẫn điện của kênh là loại p (Hình 4c). Nếu thế nguồn VD khác không thì thế cổng  $V_G$  có tác dụng điều khiển độ dẫn của kênh phân tử, hiệu ứng transistor được hình thành. Dòng điện tích vận chuyển qua lại giữa phân tử sang các điện cực S và D tương ứng qua lớp tiếp xúc trên một mức năng lượng là:

$$I_1 = (-q) \frac{\gamma_1}{\hbar} (f_1 - N) \quad (1)$$

$$I_2 = (-q) \frac{\gamma_2}{\hbar} (f_2 - N) \quad (2)$$

Trong đó  $f_i$  là hàm Fermi trên tiếp xúc giữa cực S với phân tử và  $f_2$  là hàm Fermi trên tiếp xúc phân tử với cực D;  $\gamma_1/\hbar$  và  $\gamma_2/\hbar$  là mức thoát của điện tích qua tiếp xúc;  $q$  là điện tích của electron;  $N$  là trị số trung bình các electron trong phân tử ở trạng thái ổn định khoảng giữa  $f_1$  và  $f_2$ . Ở trạng thái ổn định ban đầu, khi chưa cấp nguồn  $V_D$  thì  $I_1 + I_2 = 0$  nên ta có:

$$N = \frac{\gamma_1 f_1 + \gamma_2 f_2}{\gamma_1 + \gamma_2} \quad (3)$$

Khi cấp nguồn  $V_D \neq 0$ , dòng điện trong mạch từ D sang S là nối tiếp [10, tr.S437] nên:

$$I = I_1 = -I_2 = \frac{q}{\hbar} \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} [f_1(\varepsilon) - f_2(\varepsilon)] \quad (4)$$

Trường hợp dải năng lượng  $E$  có mật độ trạng thái  $D(E)$  thì dòng toàn phần chạy qua kênh phân tử là [11, tr.15]:

$$I = \frac{q}{\hbar} \int dE D(E) \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} [f_1(E) - f_2(E)] \quad (5)$$

Trong đó [8]:

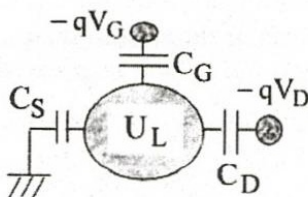
$$f_1 \equiv \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu_1}{K_B T_1}\right)} \quad (6)$$

$$f_2 \equiv \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu_2}{K_B T_2}\right)} \quad (7)$$

Xét kênh phân tử có độ rộng  $W$ , độ dài  $L$  thì  $D(E) = mWL/2\pi\hbar^2$ . Nếu chọn phân tử có tính liên kết đối xứng hai đầu với điện cực D và S thì:

$$\frac{\gamma_1}{\hbar} = \frac{\gamma_2}{\hbar} = \frac{v_x}{L} \quad (8)$$

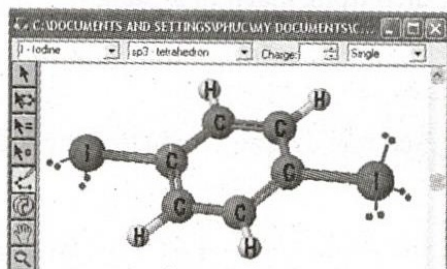
Trong đó  $v_x$  là vận tốc thoát của điện tích theo hướng trục SD. Để giải được phương trình (5) trong MATLAB ta cần chuyển cấu trúc transistor phân tử thành sơ đồ điện tương đương như Hình 5. Trong đó  $U_L$  là do  $V_D$  gây sụt áp trên phân tử.  $U_L$  có ảnh hưởng lên  $v_x$ . Khi có giá trị đủ lớn,  $U_L$  sẽ làm mở rộng dải năng lượng  $E$  và tăng số mức năng lượng cho phép điện tử chiếm trong đó lên đáng kể [11] gây nên tính chất gần bão hòa của đặc tuyến dòng – thế ở transistor phân tử.



Hình 5: Sơ đồ tương đương

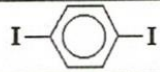


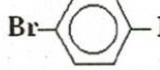
#### 4. KẾT QUẢ MÔ PHỎNG LINH KIỆN TRANSISTOR PHÂN TỬ

Tra cứu số liệu các phân tử [6 - 13] để chọn các vòng benzene có cấu trúc, dải các mức năng lượng tạo nên vùng đầy, vùng trống, vùng cấm và những tham số liên quan phù hợp với lý thuyết transistor phân tử mà đặc biệt là dải nhiệt độ có khả năng chế tạo, ứng dụng vào thực tế. Những chất ở trạng thái rắn trong điều kiện áp suất và nhiệt độ phòng được ưu tiên lựa chọn. Ngược lại, các chất ở trạng thái khí hay lỏng chưa xem xét trong đề tài này.



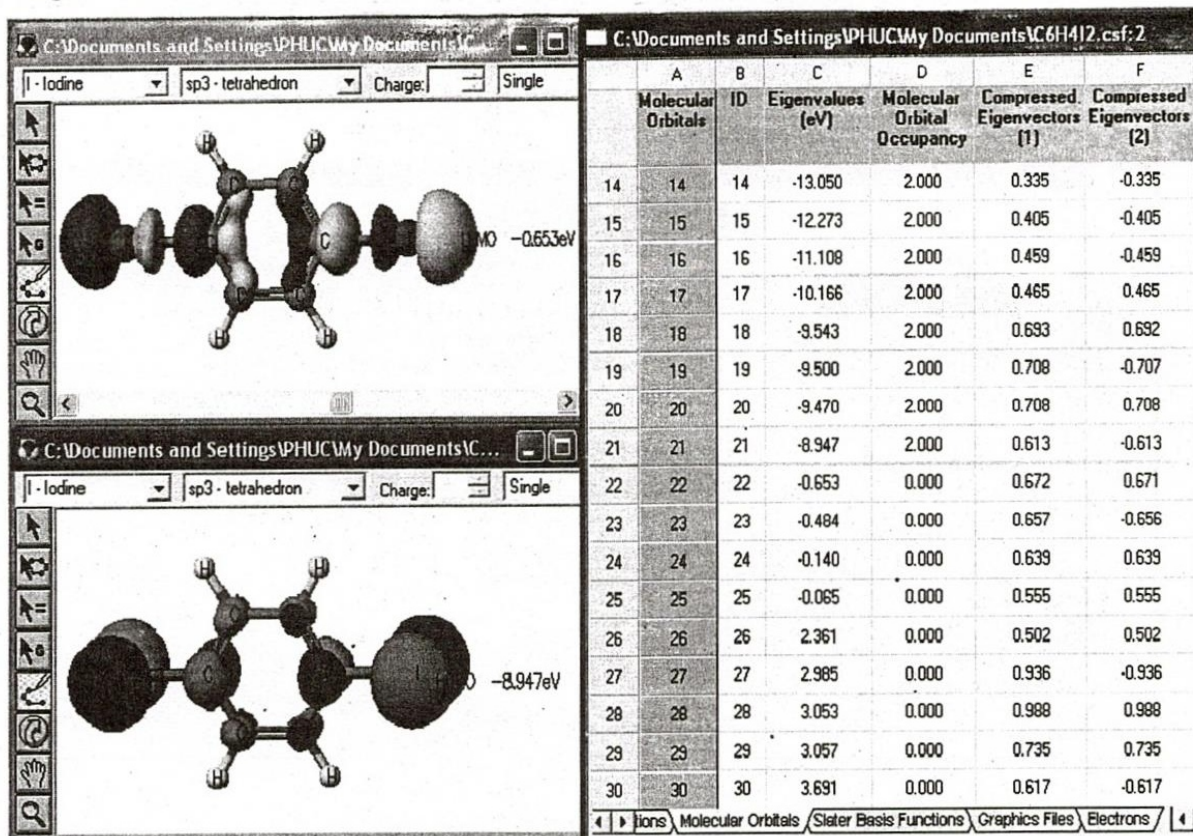
Hình 6: Có 3 liên kết kép đối với I

**Bảng 1:** Một số vòng Benzene có thể làm kênh dẫn trong transistor phân tử [13]

Chất	Tên gọi	Nhiệt độ chuyển pha rắn/lỏng T <sup>o</sup> (K)	Cấu tạo phân tử
C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> I <sub>2</sub>	Diiodo-Benzene	402,15	
C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> F <sub>2</sub>	Difloro-Benzene	249,6	
C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> Br <sub>2</sub>	Dibromo-Benzene	360,0 ± 3,0	
C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> BrI	Bromo-iodo-Benzene	363,25	

Bảng 1 cho thấy số liệu ở phân tử C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>I<sub>2</sub> có nhiệt độ chuyển pha cao, tính khả thi của linh kiện vào thực tế tốt hơn nên tác giả chọn phân tử này để tiếp tục nghiên cứu. Thiết kế phân tử và tối ưu hóa trên phần mềm CAChe 6.1 để lấy các kết quả cần thiết: kích thước theo lực tương tác Van der Waals, khả năng và số liên kết kép đôi với các phân tử Vàng.

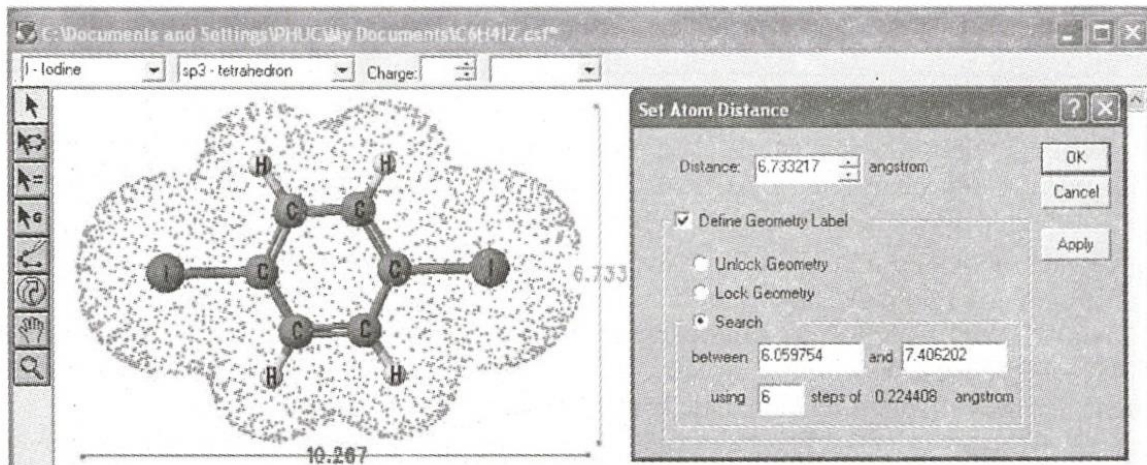
Kết quả mô phỏng trên Hình 6 cho thấy nguyên tử Iot (Iodine-I) có ba liên kết kép đôi với ba phân tử Vàng (Gold-Au) trong lớp tiếp xúc. Mức năng lượng cao nhất trong vùng đầy (đã bị chiếm) HOMO = -8,947eV. Mức năng lượng thấp nhất trong vùng trống (chưa bị chiếm) LUMO = -0,653 eV. Độ rộng vùng cấm là -8,294eV (Hình 7). Mức năng lượng Fermi của Vàng là -9,50 eV. Trong linh kiện, hàm công của Vàng ở vào khoảng ~ - 5,3eV. [5, tr.27]



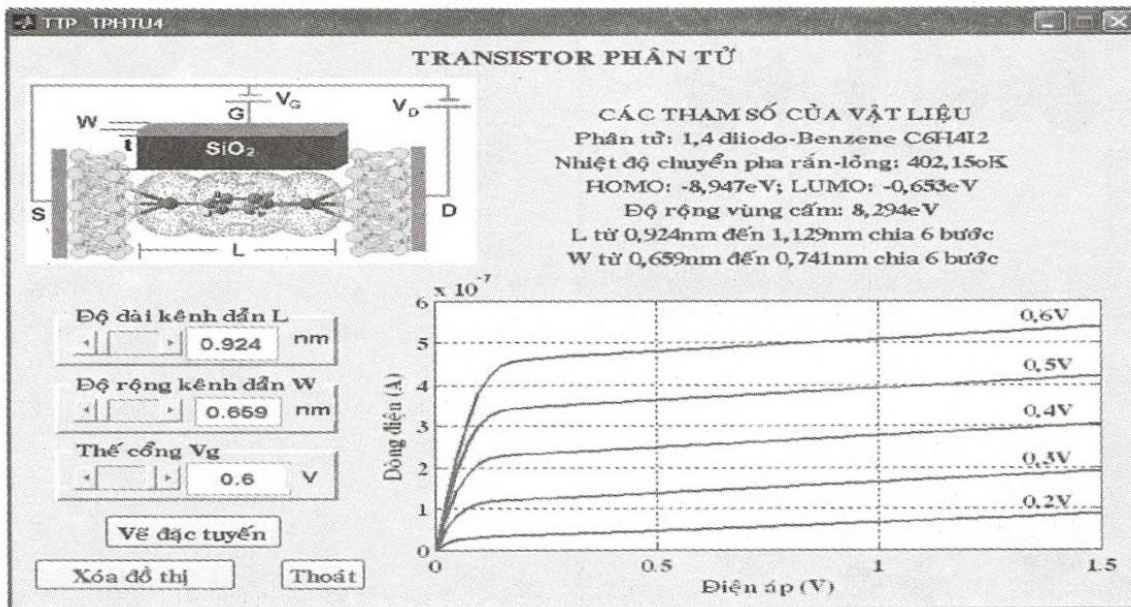
**Hình 7:** Xác định mức năng lượng bằng phần mềm CAChe 6.1

Mô phỏng hóa học cho các tham số như trong Hình 7 và Hình 8. Độ dài  $L$  của phân tử tính theo lực Van der Waals có giá trị trung bình 1,0267nm. Độ dài  $L$  có thể thay đổi trong khoảng 0,9239nm đến 1,1292nm chia làm 6 bước. Mỗi bước thay đổi độ dài là 0,03421nm. Tương tự như vậy, độ rộng  $W$  của phân tử có giá trị trung bình 0,6733nm. Độ rộng  $W$  có thể thay đổi trong khoảng 0,6059nm đến 0,7406nm chia làm 6 bước. Mỗi bước thay đổi độ rộng là 0,0224nm. Độ dày trung bình của một lớp phân tử  $\text{SiO}_2$  qua mô phỏng là 0,5304nm. Giả thiết màng  $\text{SiO}_2$  được chế tạo trong linh kiện này là  $t = 1,5\text{nm}$  (khoảng ba lớp phân tử  $\text{SiO}_2$ ).

Lập chương trình mô phỏng trong GUI của MATLAB 2006b ta vẽ được họ đặc tuyến I-V với các giá trị độ dài và độ rộng kênh phân tử ở các thế cổng  $V_G$  khác nhau (Hình 9).



Hình 8: Kích thước phân tử tính theo lực Van der Waals



Hình 9: Layout của GUI về transistor phân tử dùng  $\text{C}_6\text{H}_4\text{I}_2$

#### 4. THẢO LUẬN

Họ đặc tuyến có dạng tương tự như MOSFET bán dẫn khối, Họ đặc tuyến chia thành hai vùng rõ rệt. Vùng có độ dốc lớn, dòng điện tăng nhanh khi thế  $V_{DS} < 0,2V$ . Vùng gần bão hòa  $V_{DS} > 0,2V$ . Ta có thể giải thích kết quả đó như sau:

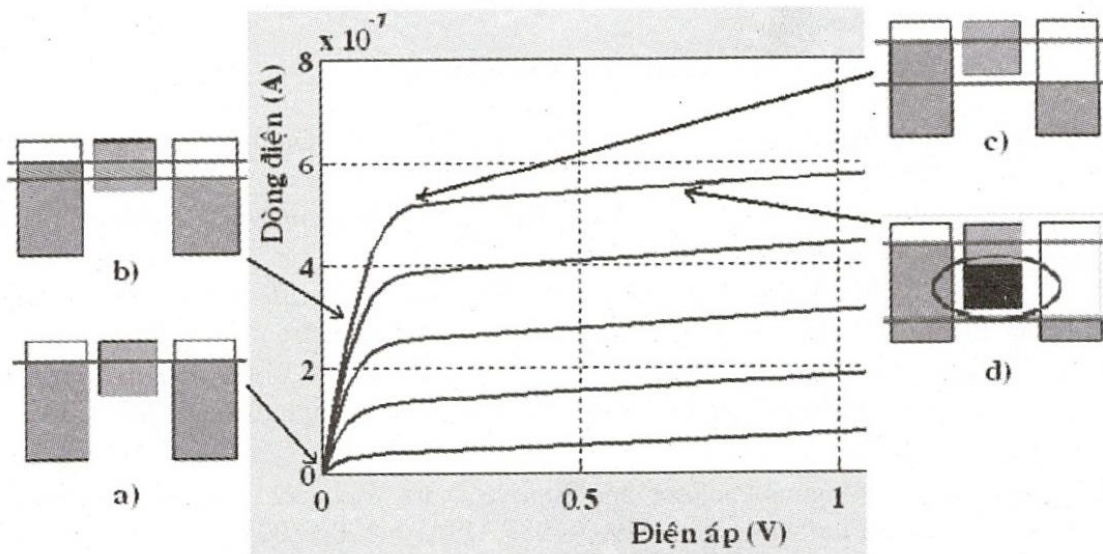
a) Thế cổng làm dịch chuyển vùng chứa các mức năng lượng cho phép (vùng trống- chưa bị điện tử chiếm) giao với mức thế điện hóa. Do thế điện hóa  $\mu_1 = \mu_2$  nên điện tích ra vào kênh phân tử ở trạng thái cân bằng, dòng  $I_D = 0$ .

b) Tại một giá trị thế cổng  $V_G$  không đổi nhưng  $V_D \neq 0$  thì  $\mu_1 \neq \mu_2$ , dòng điện tăng lên. Do  $\mu_1 - \mu_2 = qV_D$  nên  $V_D$  tăng trong khoảng này làm tăng nhanh số mức năng lượng trong dải cho phép điện tử chiếm. Điều này tương tự như kênh dẫn được mở rộng nên dòng điện tăng theo tương ứng.

c) Thế  $V_D$  tiếp tục tăng làm mức thế điện hóa  $\mu_2$  thấp hơn cả mức LUMO của phân tử thì số mức năng lượng cho phép trong vùng dẫn không tăng tương ứng nên dòng điện biến thiên tăng chậm lại.

d) Thế  $V_D$  tăng cao tác động lên mức LUMO làm kênh dẫn mở rộng thêm một số ít mức năng lượng cho phép; dòng điện tăng rất chậm, đặc tuyến gần bão hòa.

Thiết kế layout có các slider để thay đổi  $L$  và  $W$  từng bước tương ứng như kết quả tính toán ở phần mềm hóa học cho ta một số kết quả đáng lưu ý. Khi thay đổi kích thước dài  $L$  của phân tử trên slider đường đặc tuyến I-V không thay đổi. Điều này phù hợp với lý thuyết về độ dẫn trên một mức năng lượng của phân tử là  $G = q^2/h = 25,8k\Omega^{-1}$ . Ngược lại, tăng kích thước rộng  $W$  của phân tử, đường đặc tuyến I-V nâng lên. Khi tăng  $W$  chúng ta đã làm tăng diện tích bản tụ tương đương  $C_D$  và  $C_E$ , tức là tăng điện dung lượng tử.



Hình 10: Dải các mức năng lượng tương ứng với các đoạn đặc tuyến

#### 5. KẾT LUẬN

Kết quả tính toán với transistor phân tử  $C_6H_4I_2$  cho thấy, dòng và thế trong mạch điện nhỏ nên công suất tiêu tán thấp, đó là lợi thế để tăng mật độ linh kiện trên một chip đơn. Họ đặc tuyến có dạng tương tự như MOSFET ở bán dẫn khối. Kết quả này chưa xét tới ảnh hưởng của



biến thiên nhiệt độ và độ dày phân tử. Tuy nhiên, dạng họ đặc tuyến thu được không thay đổi khi lấy 6 giá trị khác nhau của  $L$  và  $W$  cho phép chúng ta hy vọng loại transistor phân tử có vòng benzene với kích thước hàng nanômét sớm hiện thực. Transistor phân tử có thể được chế tạo ra từ các phòng thí nghiệm hóa học.

Kết hợp các kết quả mô phỏng hóa học phân tử với layout của GUI trong MATLAB cùng lý thuyết transistor phân tử đã cho ta một hình ảnh trực quan hơn về loại linh kiện điện tử nano mới mẻ này.

## MOLECULAR TRANSISTOR

Tran Tien Phuc  
Nha Trang University

**ABSTRACT:** *This article presents the foundation of molecular transistors theory – the bottom-up approach method of nanoelectronics. In this article, Matlab is used to simulate the operation of molecular channel-transistor of Diode-Benzene ( $C_6H_4I_2$ ). The achieved results show that the  $I$ - $V$  curves are in shape like block semiconductor MOSFET's. If the size of channel is changed via the values such as the calculated quantum chemistry and the gate voltage from 0.2V to 0.6V, the appearance of a new device in the near future - Diode-Benzene molecular transistors with the size in nano meter unit – is possible.*

**Keywords:** *molecular transistor, nanoelectronics*

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. Đinh Sỹ Hiền, *Điện tử nano - linh kiện và công nghệ*, Nxb Đại học Quốc gia Tp. Hồ Chí Minh, (2005).
- [2]. Ngụy Hữu Tâm, *Công nghệ nano-hiện trạng, thách thức và những siêu ý tưởng*, Nxb Khoa học và kỹ thuật, Hà nội, (2004).
- [3]. A.Rahman, J. Guo, S. Datta and M. Lundstrom, *Theory of ballistic transistors*, IEEE Trans. Electron Devices 50 1853 (Special Issue on Nanoelectronics), (2003).
- [4]. G. C. Liang, A. W. Ghosh, M. Paulsson, and S. Datta, *Electrostatic potential profiles of molecular conductors*, Purdue University, West Lafayette, Indiana 47907, USA, [5]. 08 September, (2006).
- [6]. Ferdows Zahid, Magnus Paulsson and Supriyo Datta, *Electrical Conduction through Molecules*, West Lafayette, IN - 47907-1285, USA, July 8, (2003).
- [7]. Fujitsu, *Cache Worksystem Pro 6.1*, (2003).
- [8]. Justin Mullins, *Quantum effect offers molecular transistors*, NewScientist.com, news published 8 March (2004).
- [9]. M. Paulsson, S. Datta, *Thermoelectric effects in Molecular electronics*, Phys. Rev. B67241403(R), (2003).
- [10]. S. Datta, *Quantum Transport: Atom to Transistor*, Cambridge University Press, (2004).

- [11]. S. Datta, *Electrical resistance: an atomistic view*, 47907,USA, (2004).
- [12]. S. Datta, *Lecture#2: Quantum Transport: Atom to Transistor*, Cambridge, (2005).
- [13]. <http://dynamo.ecn.purdue.edu/~datta/>
- [14]. <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
- [15]. <http://www.mitre.org/tech/nanotech/>
- [16]. <https://www.nanohub.org/>