




Transporte electrónico a través de moléculas orgánicas

Electronic transport through molecules organic

Morales Valenzuela Luis Germán¹, Iglesias Vázquez Priscilla Elizabeth², Villarreal Sánchez Rubén Cesar ¹

¹Facultad de Ingeniería, Arquitectura y Diseño, Universidad Autónoma de Baja California. Carretera Tijuana-Ensenada Km 106, 22800 Ensenada, Baja California, México

²Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Baja California. Carretera Tijuana- Ensenada Km 106, 22800 Ensenada, Baja California, México

Autor de correspondencia: Priscilla Elizabeth Iglesias Vázquez, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Baja California, Carretera Transpeninsular Ensenada-Tijuana 3917, Colonia Playitas, Ensenada, Baja California, México. E-mail: piglesias@uabc.edu.mx

Recibido: 31 de Julio del 2018

Aceptado: 20 de Marzo del 2019

Publicado: 03 de Mayo del 2019

Resumen. - *El uso de moléculas como componentes electrónicos ha marcado una tendencia de miniaturización en dispositivos conocida como electrónica molecular. En este trabajo se realizan cálculos teóricos del coeficiente de transmisión cuántico y la corriente eléctrica a través de una molécula de benceno conectada a terminales eléctricas. El coeficiente de transmisión es obtenido mediante el cálculo recursivo de la función de Green del sistema. Se modela también la influencia de un electrodo móvil puntual (small movable gate SMG) sobre la transmisión. Los resultados muestran que el coeficiente de transmisión oscila como función de la energía incidente de los electrones, y la corriente eléctrica muestra que la molécula de benceno tiene un carácter semiconductor. Las oscilaciones en la transmisión pueden ser manipuladas por la posición de las terminales en la molécula y por la influencia del SMG en una región cercana a un átomo en particular.*

Palabras clave: Transporte electrónico; Función de Green; Corriente eléctrica; Benceno; Electrónica molecular; Electrodo móvil puntual.

Abstract. - *The use of molecules as electronic components has marked a trend of miniaturization in devices known as molecular electronics. It has been performed theoretical calculations of the quantum transmission coefficient and the electric current through a molecule of benzene connected to electrical terminals. The transmission coefficient is obtained by recursively calculating the Green function of the system. The influence of a small movable gate SMG on the transmission is also modeled. The results show that the transmission coefficient oscillates as a function of the incident energy of the electrons, and the electric current shows that the benzene molecule has a semiconductor character. The oscillations in the transmission can be manipulated either by the position of the terminals in the molecule or influence of the SMG in a region close to a particular atom.*

Keywords: Electronic transport; Green function; Electrical current; Benzene; Molecular Electronics; Small movable gate.



1. Introducción

El desarrollo de dispositivos electrónicos cada vez más pequeños, incluso de dimensiones nanométricas, ha hecho necesario el uso de moléculas con ciertas características físicas y químicas como componentes electrónicos [1]. Los avances recientes en la manipulación de moléculas permiten conectar una sola molécula entre dos electrodos metálicos y medir propiedades de transporte electrónico a

través de ella [2]. Para esto es necesario de átomos que sirvan como puentes entre la molécula y los electrodos [2-4].

En este trabajo se presentan cálculos del coeficiente de transmisión y corriente electrónica través de una molécula de benceno conectada a terminales eléctricas atómicas (Figura 1). Además, se estudia la influencia de un electrodo móvil puntual en proximidad a una región particular de la molécula.

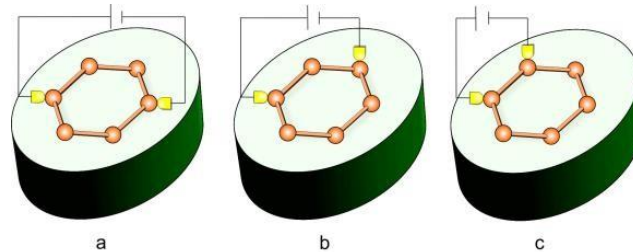


Figura 1. Molécula de benceno con diferentes configuraciones: (a) *para-p*, (b) *meta-m* y (c) *orto-o* de las terminales eléctricas.

2. Modelo teórico

La molécula de benceno y las terminales son modeladas con el formalismo de *amarre fuerte (tight binding)* [5], en donde cada átomo de carbono, de los 6 que constituyen el anillo bencénico, representa un sitio con energía α y un parámetro de traslape (hopping) β entre los átomos. Para calcular el Para-benceno coeficiente de transmisión (T) a través de la molécula se utiliza el formalismo dispersivo de Lippman-Schwinger [6]. En éste método se debe calcular recursivamente la función de Green asociada a la molécula, la cual se reduce de forma efectiva a un dímero con parámetros renormalizados de energía de sitio $\tilde{\alpha}_n$ para el átomo n , y parámetro de traslape $\tilde{\beta}$ entre los átomos n y m . La expresión analítica para T a través de la molécula es [7]:

$$T = \frac{(1 + 2\gamma)^2(4 - X^2)}{(1 - 2Q)^2(4 - X^2) + 4(P - QX)^2} \quad (1)$$

Donde:

$$P = Z_0 + Z_1, \quad Q = Z_0Z_1 - \gamma - \gamma^2 \quad (2)$$

Con:

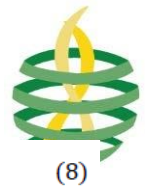
$$Z_j = \frac{(\alpha_j - \alpha)}{2\beta} \quad \text{con } j = 0,1 \quad (3)$$

$$\gamma = \frac{\beta\alpha_1 - \beta}{2\beta}, \quad X = \frac{E - \alpha}{\beta} \quad (4)$$

La corriente eléctrica (I) que pasa por la molécula de benceno está dada por [5]:

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dET(E)[f_L(E) - f_R(E)] \quad (5)$$

Donde f_L y f_R corresponde a la función de distribución de Fermi para las terminales izquierda (L) y derecha (R) respectivamente, h es la constante de Planck y e la carga eléctrica del electrón. A continuación, se muestran las expresiones de los parámetros renormalizados. Estos parámetros fueron utilizados para calcular la corriente eléctrica de forma numérica en Fortran.



2.1. Para-benceno

$$\tilde{\alpha}_1 = \alpha + \frac{\beta}{X} \left[\frac{(2X^2 - 1)s + \beta(X^2 - 1)}{(X^2 - 1)s} \right] \quad (6)$$

$$\tilde{\beta}_{14} = \beta \left[\frac{s + \beta(X^2 - 1)}{(X^2 - 1)s} \right] \quad (8)$$

$$\tilde{\alpha}_4 = \alpha + \beta X \left[\frac{\beta(X^2 - 1) + s}{(X^2 - 1)s} \right] \quad (7)$$

Donde:

$$s = EX - \alpha_3 X + \beta \quad (9)$$

f

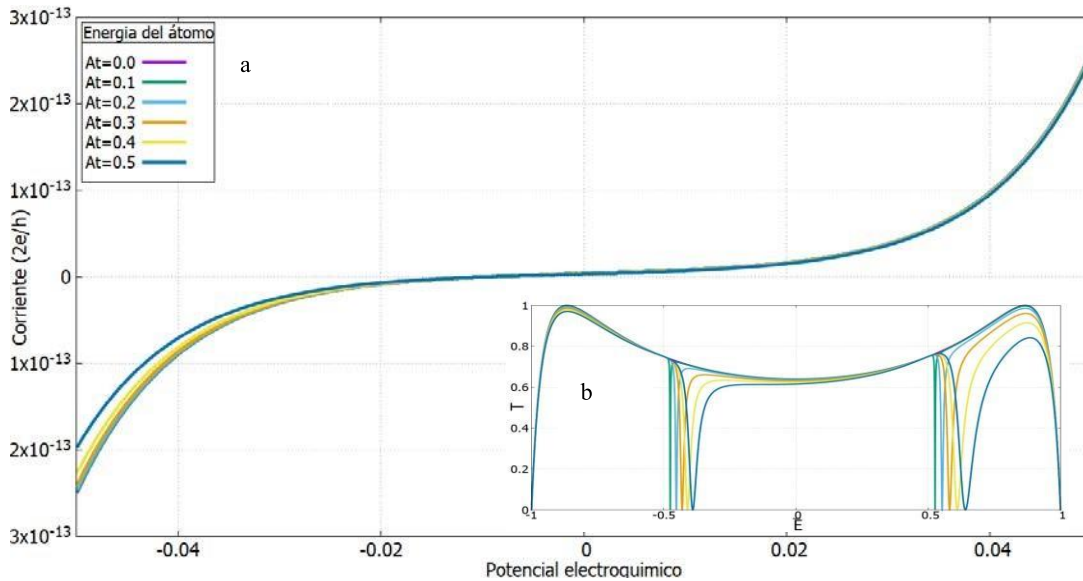


Figura 2. (a) Corriente eléctrica p-benceno para diferentes magnitudes del SMG vs diferencia de potencial, (b) Coeficiente de Transmisión vs energía.

2.2. Meta-benceno

$$\tilde{\beta}_{15} = \beta X^{-1} \left[\frac{\beta X + s}{s} \right] \quad (10)$$

$$\tilde{\alpha}_5 = \alpha + \beta X^{-1} \left[\frac{s + \beta X(X^2 - 1)}{s} \right] \quad (12)$$

$$\tilde{\alpha}_1 = \alpha + 2\beta X^{-1} + \frac{\beta X^{-1}}{(X^2 - 1)} \left[\frac{s + \beta X}{s} \right] \quad (11)$$

Donde:

$$s = E(X^2 - 1) - \alpha_4(X^2 - 1) - \beta X \quad (13)$$

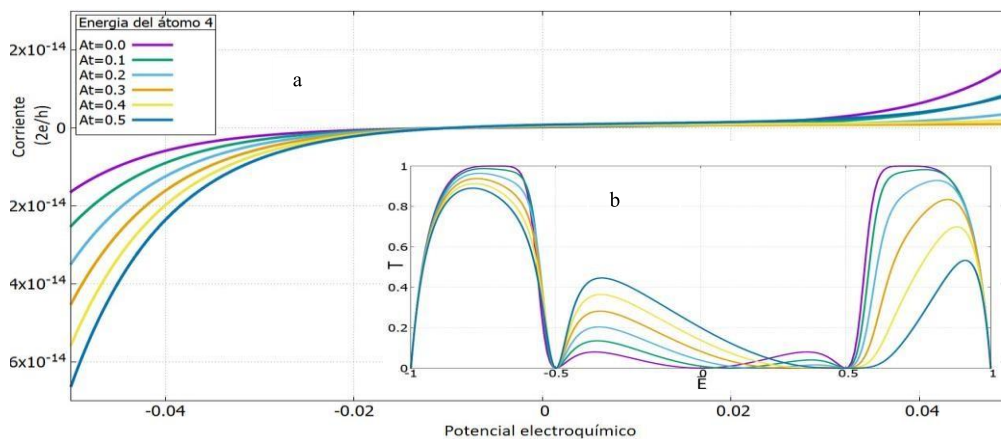


Figura 3: (a) Corriente eléctrica m-benceno para diferentes magnitudes del SMG vs diferencia de potencial, (b) Coeficiente de Transmisión vs energía.



2.3. Orto-benceno

$$\tilde{\beta}_{15} = \frac{\beta^2}{s} + \beta \tag{14}$$

$$\tilde{\alpha}_1 = \alpha + \frac{\beta X}{(X^2 - 1)} + \frac{\beta}{X(X^2 - 1)(X^2 - 2)} + \frac{\beta^2}{X(X^2 - 2)s} \tag{15}$$

$$\tilde{\alpha}_5 = \alpha + \frac{\beta^2 X(X^2 - 2)}{s} \tag{16}$$

Donde:

$$s = X(E - \alpha_5)(X^2 - 2) - \beta(X^2 - 1) \tag{17}$$

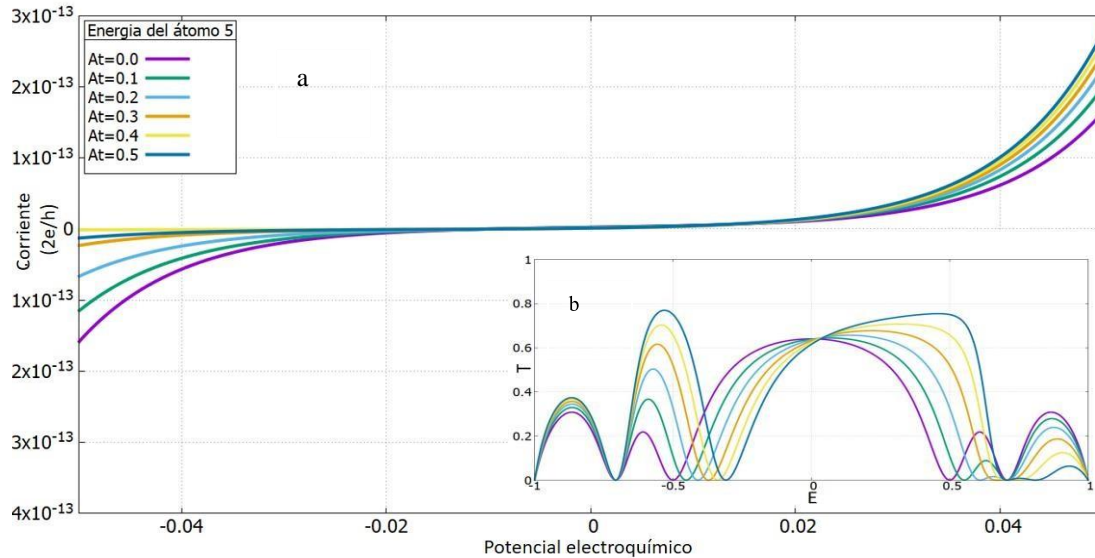


Figura 4: (a) Corriente eléctrica o-benceno para diferentes magnitudes del SMG vs diferencia de potencial, (b) Coeficiente de Transmisión vs energía.

3. Resultados

En la Figura 2,3,4 (b) se muestra la gráfica del coeficiente de transmisión para las distintas configuraciones de las terminales como función de la energía en unidades de β . Se puede observar en la figura 2(b) que la configuración (p) tiene una mayor probabilidad de transmisión a una energía dada que las otras dos configuraciones. El caso extremo es la configuración (m) representada en la figura 3(b), en donde la transmisión prácticamente se anula en un rango de energía. Además, se observa la influencia de perturbar la energía de sitio de un átomo de la molécula con un electrodo móvil puntual (*small movable gate SMG*) de un potencial dado. Es posible observar (Fig. 2(b)) que se inducen caídas en el valor del coeficiente de transmisión para la

configuración, mientras que para las configuraciones (o) y (m) se favorece un incremento en la transmisión a ciertas energías.

Las figuras 2,3,4 (a) muestran las gráficas de la corriente eléctrica calculada a partir del coeficiente de transmisión mediante la ecuación (5). Se puede observar un rango de energía en donde la corriente eléctrica se anula, poniendo de manifiesto el comportamiento semiconductor de la molécula. Este comportamiento es debido a la contribución de las caídas en el coeficiente de transmisión para las diferentes configuraciones. Además, se observa el efecto sobre la corriente de un potencial puntual a través de la influencia electrostática de un SMG.



4. Conclusiones

En este trabajo se presentan cálculos del transporte electrónico a través de una molécula de benceno conectada entre terminales eléctricas. Los resultados muestran que es posible manipular el carácter semiconductor de la molécula mediante diferentes configuraciones de las terminales y la influencia electrostática de un electrodo móvil puntual en una región particular. Este tipo de arreglos moleculares pueden ser utilizados como componentes en dispositivos de electrónica molecular.

Referencias

[1] J. Heurich, J. Cuevas, W. Wenzel and G. Schön, "Electrical Transport through Single-Molecule Junctions: From Molecular Orbitals to Conduction Channels," *Physical Review Letters*, vol. 88, no. 25, pp. 256803 1-4, 6 June 2002. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.256803>

[2] F. Chen, X. Li, J. Hihath, Z. Huang and N. Tao, "Effect of Anchoring Groups on Single-Molecule Conductance: Comparative Study of Thiol-, Amine-, and Carboxylic-Acid-Terminated Molecules," *Journal of the American Chemical Society*, vol. 128, no. 49, pp. 15874-15881, 11

August 2006. <https://doi.org/10.1021/ja065864k>
[3] C. Ko, M. Huang, M. Fu and C. Chen, "Superior Contact for Single-Molecule Conductance: Electronic Coupling of Thiolate and Isothiocyanate on Pt, Pd, and Au," *Journal of the American Chemical Society*, vol. 132, no. 2, pp. 756-764, 2010. <https://doi.org/10.1021/ja9084012>

[4] G. Schuster, *Long-Range Charge Transfer in DNA I*. Berlin: Springer Berlin, 2013. <https://www.springer.com/gp/book/9783540201311>

[5] S. Datta., *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press, 2001. <https://www.amazon.com/Electronic-Mesoscopic-Semiconductor-Microelectronic-Engineering-ebook/dp/B00AKE1T2O>

[6] P. Mello and N. Kumar, *Quantum transport in mesoscopic systems*. Oxford, New York: Oxford Univ. Press, 2010. <https://global.oup.com/academic/product/quantum-transport-in-mesoscopic-systems-9780198525820?cc=mx&lang=en&>

[7] K.W. Sulston, S.G. Davison, "Transmission of renormalized benzene circuits", arXiv: 1505.03808, 13 May 2015. <https://www.cnyn.unam.mx/simposio/archivos/simposio/2018/PROCEEDINGS%20IVSNN.pdf>



Este texto está protegido por una licencia [Creative Commons 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

Usted es libre para Compartir —copiar y redistribuir el material en cualquier medio o formato— y Adaptar el documento —remezclar, transformar y crear a partir del material— para cualquier propósito, incluso para fines comerciales, siempre que cumpla la condición de:

Atribución: Usted debe dar crédito a la obra original de manera adecuada, proporcionar un enlace a la licencia, e indicar si se han realizado cambios. Puede hacerlo en cualquier forma razonable, pero no de forma tal que sugiera que tiene el apoyo del licenciante o lo recibe por el uso que hace de la obra.

[Resumen de licencia - Texto completo de la licencia](#)