

# Nanoelectrónica: Ejercicio 3.11

Adrián D. Escañuela Copado

25 de abril de 2021

Se pide la obtención de las curvas características intensidad-tensión y de conductancia-tensión numéricamente para un dispositivo molecular a dos terminales con las características siguientes:

$$\left\{ \begin{array}{l} \eta = 0.5 \\ E_F = -5 \text{ eV} \\ \epsilon = -5.5 \text{ eV} \quad \text{centro del HOMO} \\ \Gamma_S = \Gamma_D = 0.1 \text{ eV} \quad \text{y} \quad \Gamma = \Gamma_S + \Gamma_D \\ T = 298 \text{ K} \\ (i) \quad g(E - U) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(E - \epsilon)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad \text{Distribución Lorentziana} \\ (ii) \quad g(E - U) = 2\delta(E - U - \epsilon) \text{ eV} \quad \text{Distribución delta de Dirac} \\ q^2/C_{ES} = 1 \text{ eV} \end{array} \right. \quad (1)$$

Ahora se deberá comparar las curvas que obtenemos en el caso de que la función densidad de estados sea una distribución delta de Dirac o una distribución Lorentziana.

Para eso, al algoritmo utilizado en los ejercicios posteriores se le añade una función, que se llamará DoS y que tendrá en cuenta a la densidad de estados Lorentziana.

Ahora no ocurre como con la delta de Dirac, donde podíamos ahorrarnos la valoración de la integral, así que se incluye en el código un paquete que nos permite evaluar integrales, from `scipy.integrate` import `quad`.

Ahora que ya está todo preparado para la utilización de la nueva densidad de estados, se pasa a la implementación de esto en nuestro antiguo algoritmo, que ahora pasará a ser:

```
def algoritmo(n:int, rangoV:int, q2_entre_C_ES:float, I1:float,
             I2:float, Ef:float)->float:

    #Lorentziana
    #-----
    infy=20*gamma #el limite de nuestras integrales
    q=1.602176565e-19

    N01=quad(lambda E: fermi(E, 0, T) * DoS(E, gamma, homo, Ef),
             -infy, infy)[0]

    i=0
    alpha=1e-2
    for Vds in np.arange(-rangoV, rangoV, 2*rangoV/n):

        mu_s=eta*Vds
        mu_d=mu_s-Vds
```

```

Uaux,U=0,1 #Valores para el U auxiliar y U iniciales
eps=1e-5 #Epsilon: diferencia entre U y U auxiliar deseada

while(abs(U-Uaux)>=eps):
    Uaux=U
    N1=quad(lambda E: DoS(E-U, gamma, homo, Ef)
            * ( (tau_d*fermi(E,mu_s,T))
              + (tau_s*fermi(E,mu_d,T)) ) / (tau_s+tau_d),
            -infty, infty)[0]
    U=q2_entre_C_ES*(N1-N01)
    U=Uaux+alpha*(U-Uaux)
#end-while

I1[i] =1e6*q*quad(lambda E: DoS(E-U, gamma, homo, Ef)
                  * ( fermi(E,mu_s,T)
                    - fermi(E,mu_d,T) ) / (tau_s+tau_d), -infty, infty)[0]

i+=1

#etc con Dirac...(I2)

```

Con esto y junto con lo que ya se tenía del ejercicio 3.9, se obtiene lo que se ve en la figura 1.

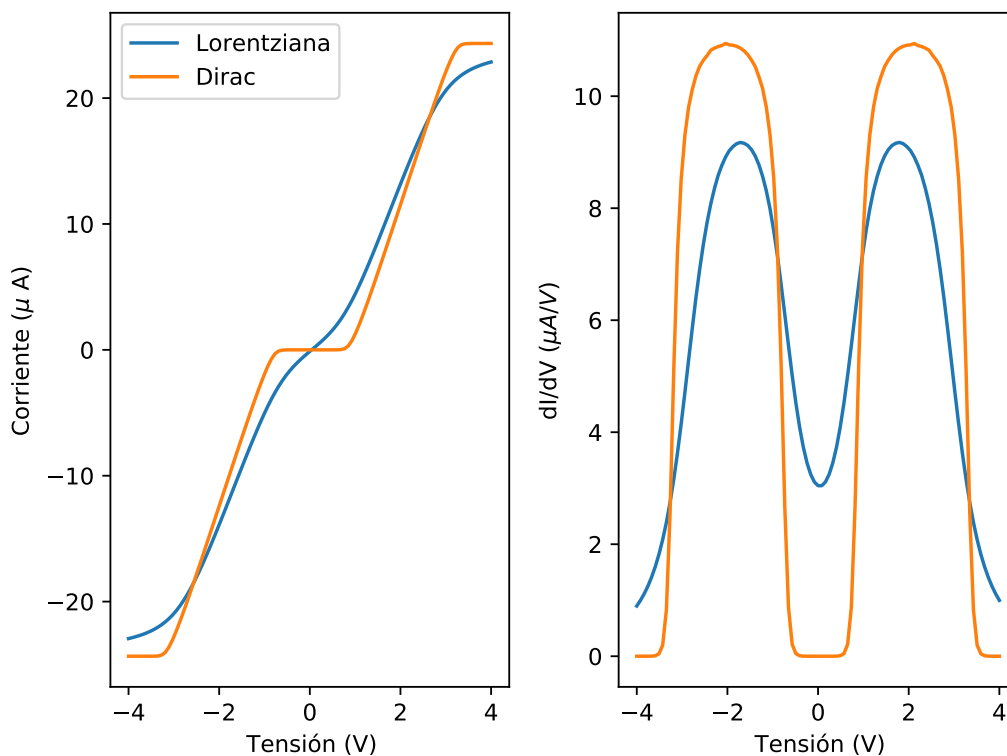


Figure 1: Curva intensidad-tensión y conductancia-tensión del sistema con una distribución Lorentziana como densidad de estados a comparar con el mismo sistema modelado según una distribución delta de Dirac como densidad de estados.

Se puede apreciar que la curva se ha suavizado por el uso de una densidad de estados con determinada anchura alrededor del HOMO, ya que anteriormente era completamente puntual sobre el centro de dicho nivel energético.

## Preguntas

- ¿Cómo espera que cambie la IV si  $\Gamma_S > \Gamma_D$ ? Explíquelo.

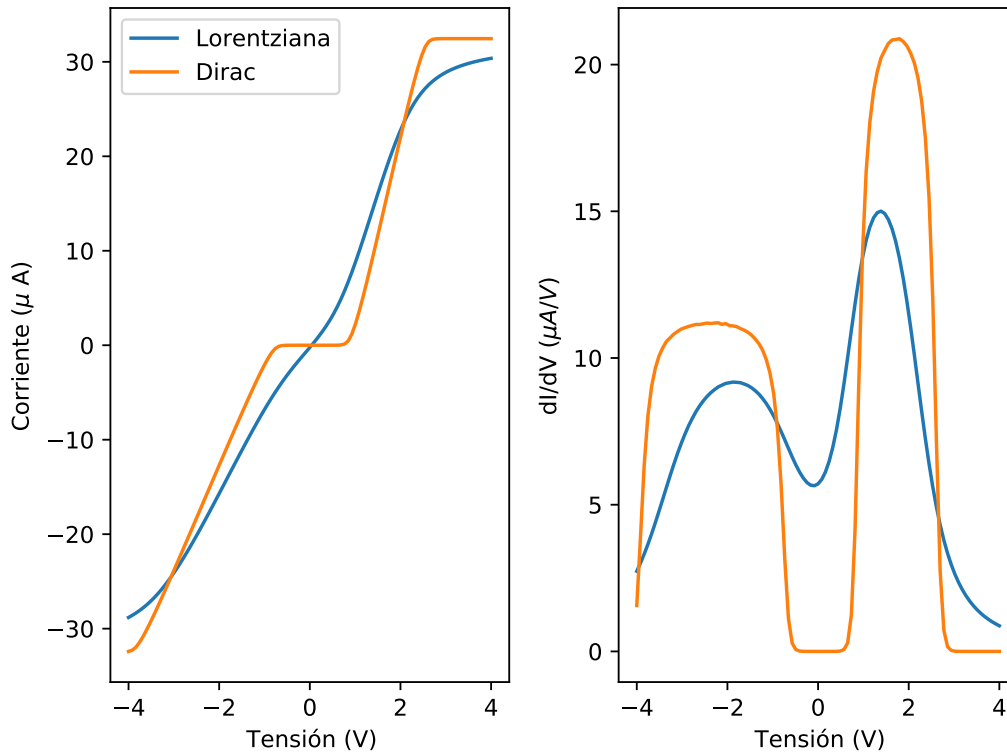


Figure 2: Curva intensidad-tensión y conductancia-tensión del sistema con una distribución Lorentziana/delta de Dirac como densidad de estados cuando  $\Gamma_S = 2\Gamma_D = 0.2$  eV

Aumentar una de las  $\Gamma$  con respecto a la del otro lado se traduce en un menor tiempo de tránsito del contacto a la molécula en el lado donde  $\Gamma$  sea mayor, puesto que  $\Gamma = \hbar/\tau$

Estaríamos haciendo un contacto más eficiente en el lado de la fuente si  $\Gamma_S > \Gamma_D$ .

Para modelar esto, asumamos que cambiamos la  $\Gamma_S$  en un factor 2 con respecto a la original y la  $\Gamma_D$  la dejamos intacta.  $\Gamma_S = 2\Gamma_D = 0.2$  eV.

Supongamos que aplicamos una tensión positiva. El nivel  $\mu_S$  subirá en una cantidad  $0.5 qV_{DS}$ . Ahora que tenemos una menor  $\tau$ , el tránsito de electrones de este nivel al HOMO es más eficiente. Los electrones pasan menos tiempo entre metal y molécula, y es así que se da un mayor paso de cargas por unidad de tiempo, que es justo como definimos la intensidad. Así que, en definitiva, con una menor tensión conseguimos una mayor intensidad.

Pero consideremos también como afecta la tensión positiva en el otro contacto (D). Este contacto tiene un menor tiempo de tránsito, está frenando a los electrones que vienen de la fuente, produciéndose un efecto de acumulación en la molécula. Esto tiene implicaciones; la molécula se satura de electrones más rápido que originalmente. Es decir, la mejora que se conseguía en conductividad se da para un valor reducido de tensiones, ya que en el sistema permanecerá saturado.

Al final, lo que encontramos para tensiones positivas es que la conductancia es mayor (más pendiente en IV), pero la saturación es más brusca (mayor curvatura en IV). Esto es más fácil de ver en la gráfica de conductancia, en la que esa mayor pendiente se traduce en valores más grandes de conductancia y esa mayor curvatura en un ancho de conducción más estrecho, como vemos en la figura 2.

Ahora bien, al cambiar las  $\Gamma$  estamos haciendo que un contacto sea más "perfecto" que el otro, los electrones pasan con más facilidad por un lado que por el otro. Es por esto por lo que el sistema se vuelve asimétrico, y para ilustrarlo consideremos el caso de aplicar una tensión negativa.

Si la tensión aplicada es negativa, los electrones se mueven del drenador a la fuente. Del drenador a la molécula pasan en un tiempo  $\tau_D$ , que es mayor que el tiempo que pasan entre molécula y fuente,  $\tau_S$ . Esto hace que no haya una acumulación en la molécula tan fuerte como la que se imponía en el caso anterior, puesto que  $\tau_S$  está facilitando la conducción,  $\tau_S$  no nos impone limitaciones. Esto es por esto por lo que la gráfica que encontramos para el lado de tensiones negativas es tan similar a del caso con iguales  $\Gamma$  (figura 1), puesto que el factor limitante aquí sería la rapidez con la que el drenador inyecta electrones (que era la misma que antes, con  $\tau_S = \tau_D$ ), mientras que en el caso de tensiones positivas el factor limitante era el cuello de botella que producía el drenador con su  $\tau_D$  mayor.