

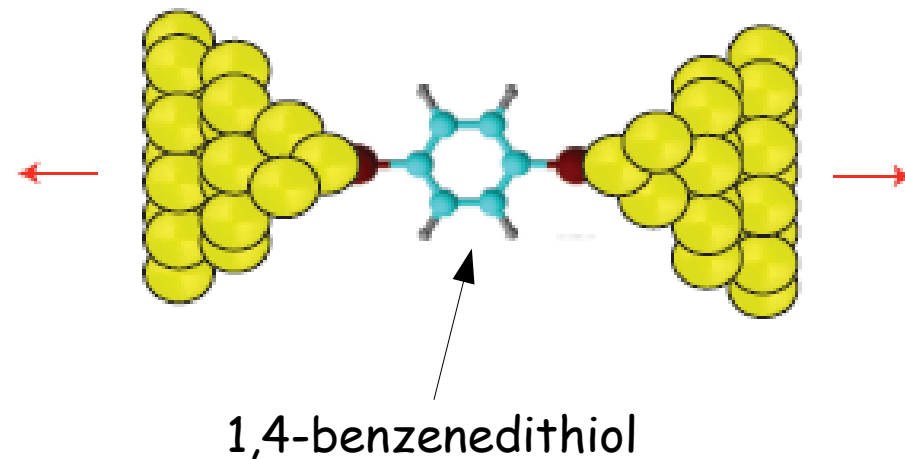
# Mechanically controlled molecular orbital alignment in single molecule junctions

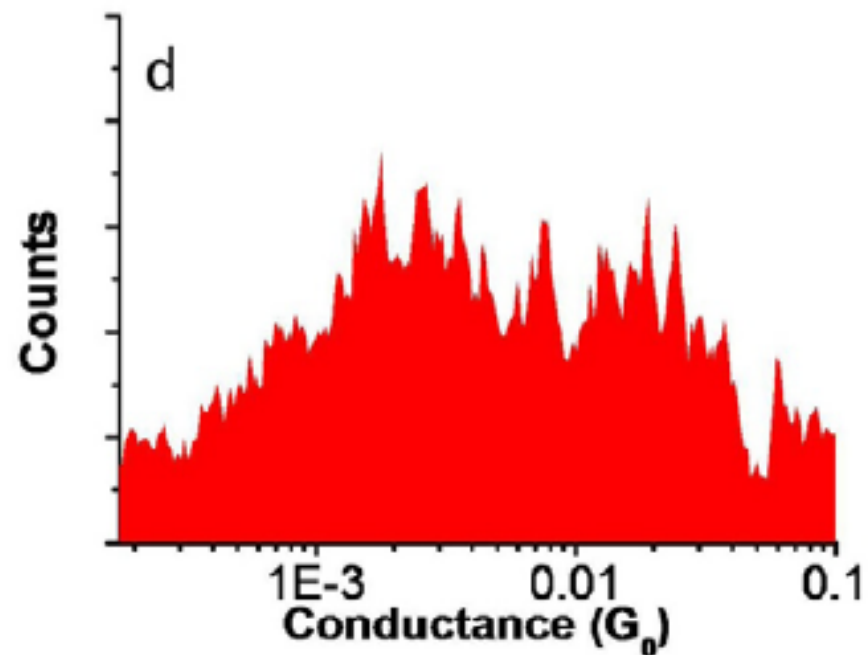
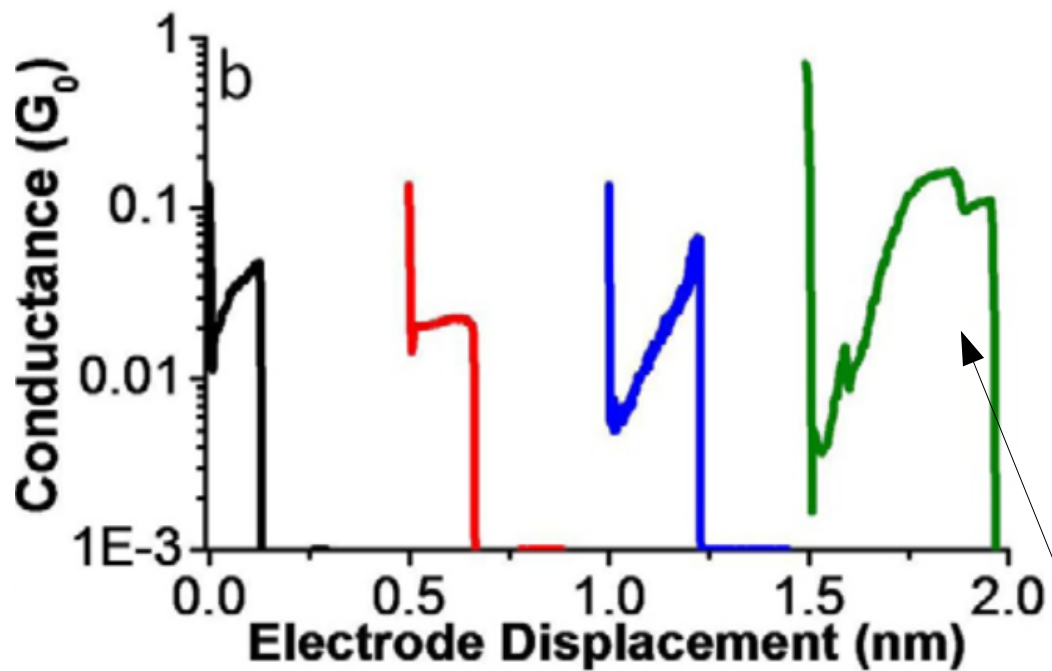
Christopher Bruot<sup>1</sup>, Joshua Hihath<sup>1,2</sup> and Nongjian Tao<sup>1\*</sup>

Balogh Zoltán

Nanofizika szeminárium

2012.02.09.





A két elektróda relatív elmozdulása. A 0 távolság az alagút tartomány kezdetéhez definiált.

Az intuitív várakozásokkal ellentétes viselkedés, a széthúzás alatt nő a vezetőképesség.

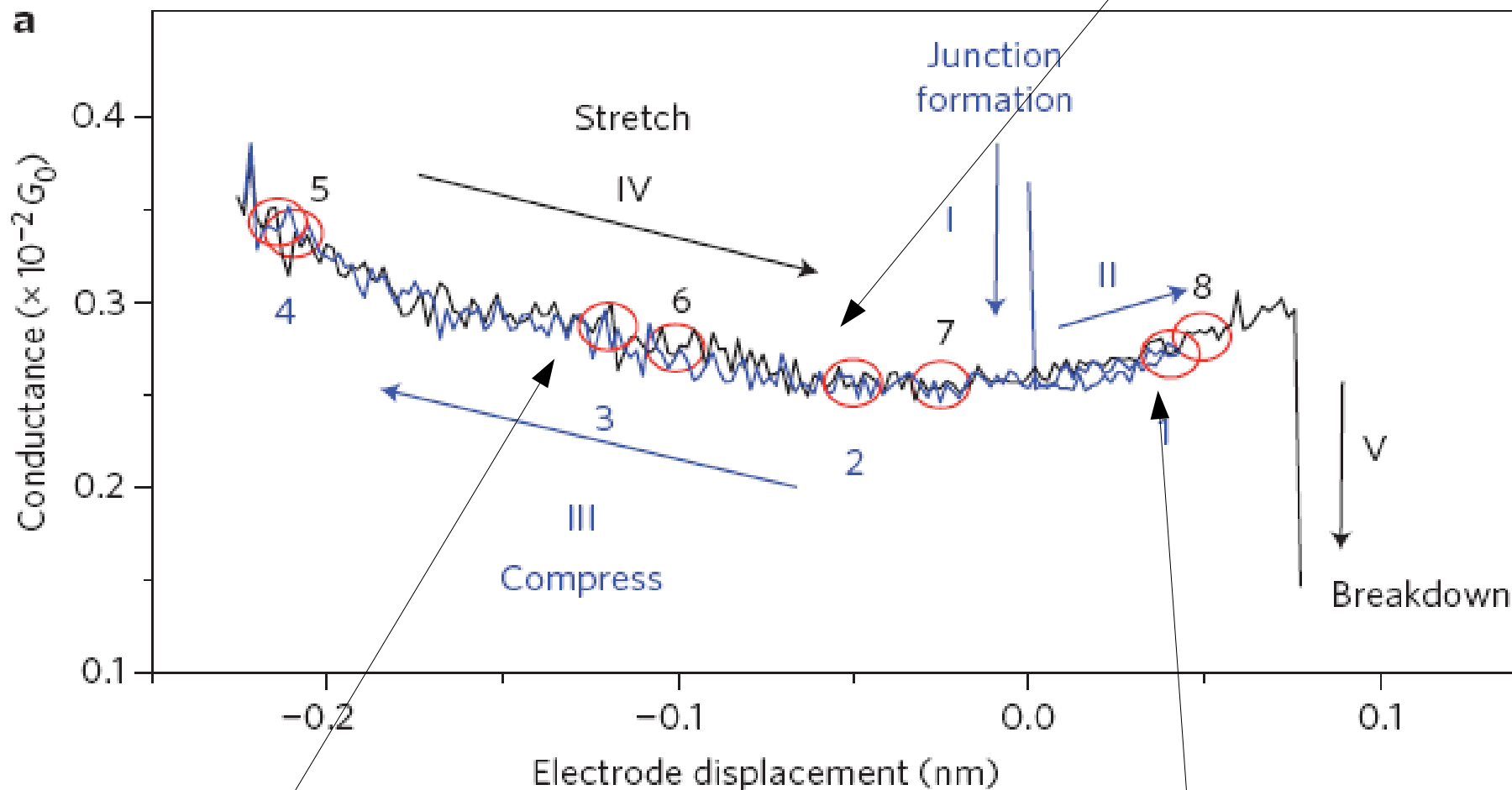
A számított és mért vezetőképesség értékek nagy eltérést mutatnak.

Széthúzás közben akár egy nagyságrendnyi növekedés

Az utolsó szakaszbeli vezetőképesség értékek a számított értékek tartományába esnek.

0.01nm-es lépésköz a szakítás és összenyomás alatt

Széthúzás majd összenyomás alatt ugyan olyan görbe, reverzibilis folyamat.

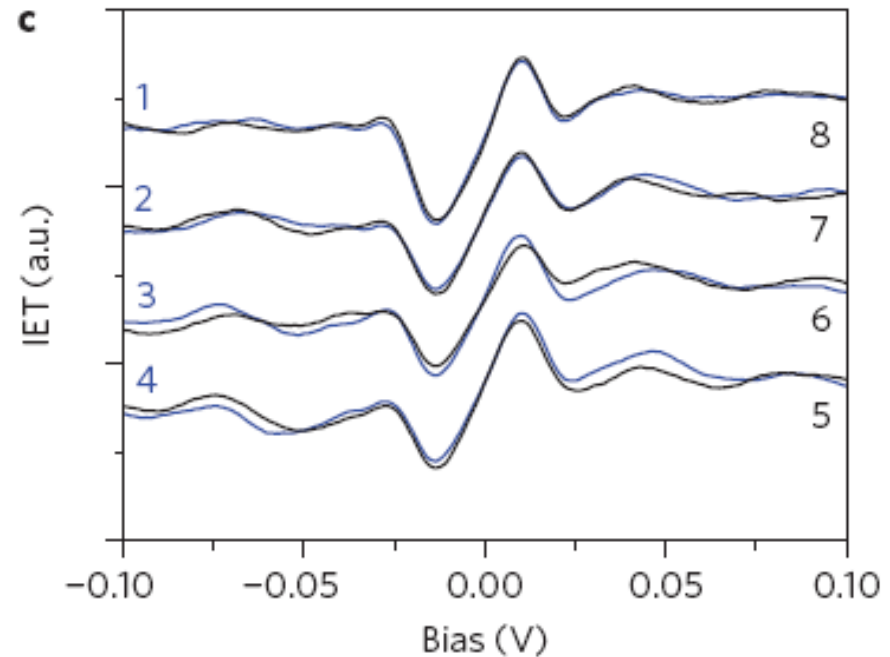
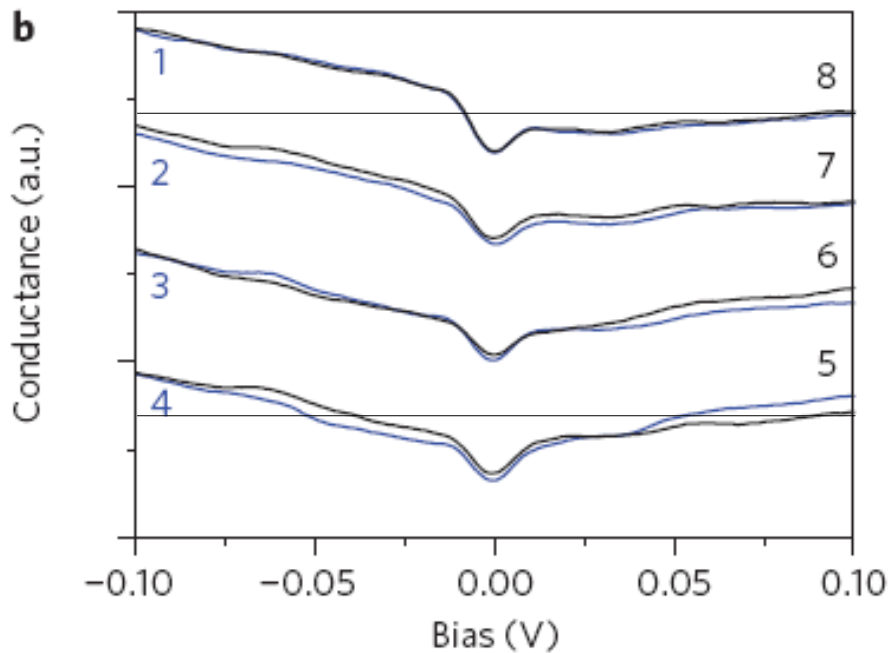


Molekula tengelye elhajlik a kontaktus tengelyéhez képest, erősödő  $\pi$  pálya csatolás

HOMO szint hangolása: „erő-indukált rezonáns alagutazás”

Vezetőképesség-feszültség és IET spektrumok különböző elektróda távolságoknál.

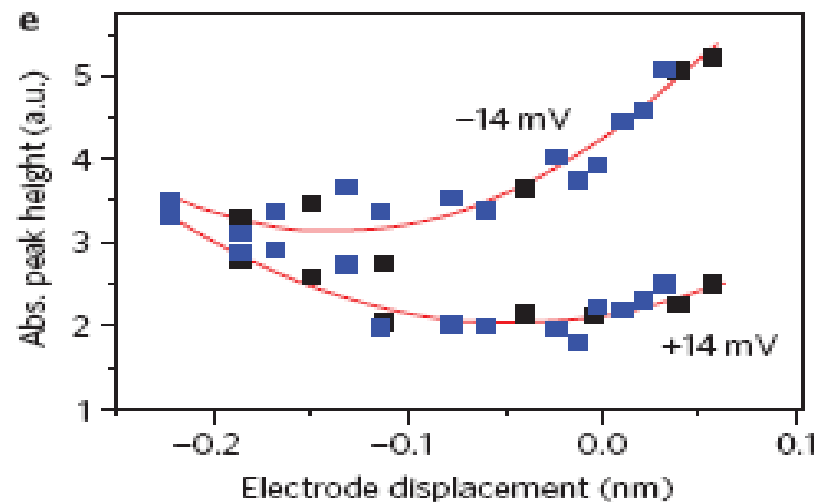
A széthúzás hatására jelentősen megnövő asszimmetria.



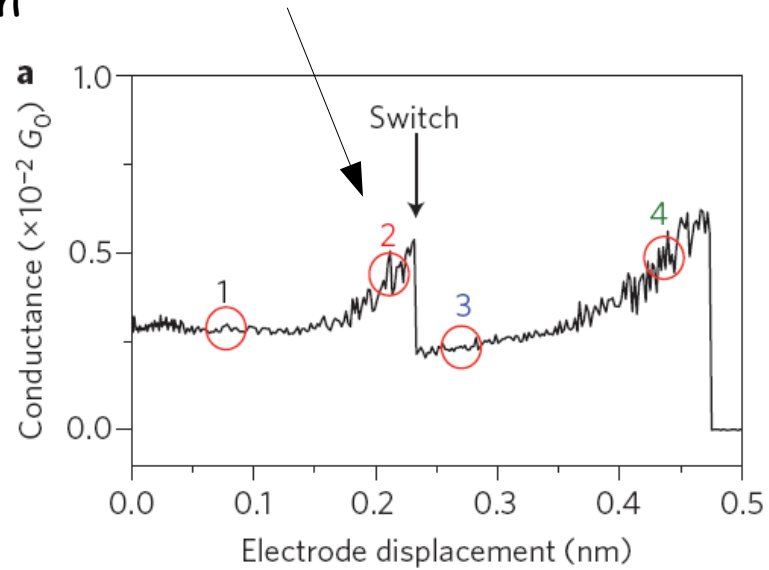
Mivel a molekula szimmetrikus, az asszimmetriát a molekula és a két aranykontaktus közti aszimmetrikus csatolódás adja.

A gyengébben csatolódott elektróda a széthúzás során nagyobb mértékben nyúlik meg, ez növeli az asszimmetriát.

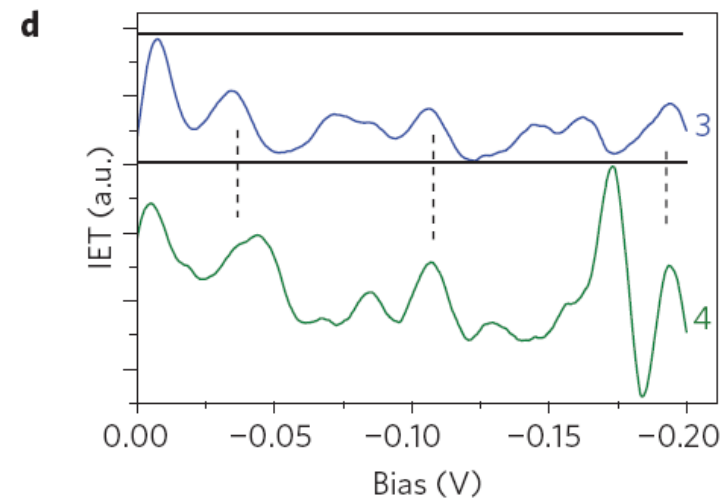
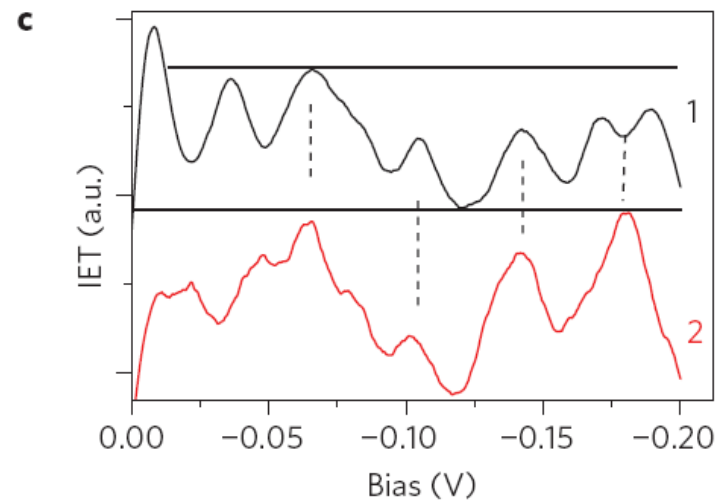
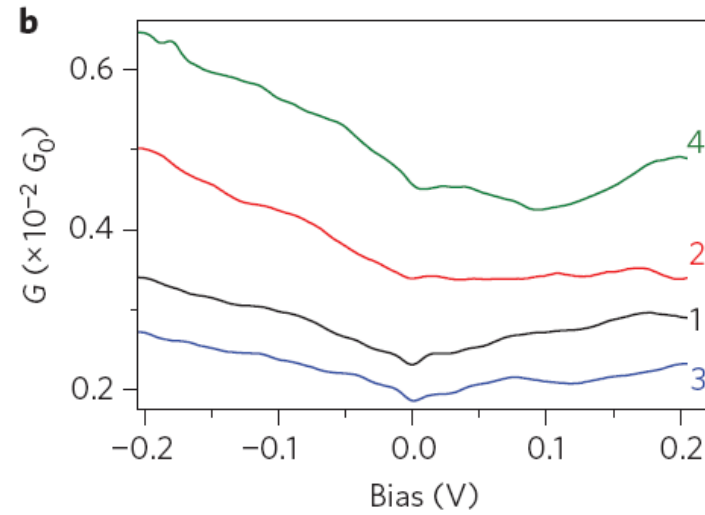
A  $\pm 14$  mV-os csúcs amplitúdójában is jelentős asszimmetria jelenik meg

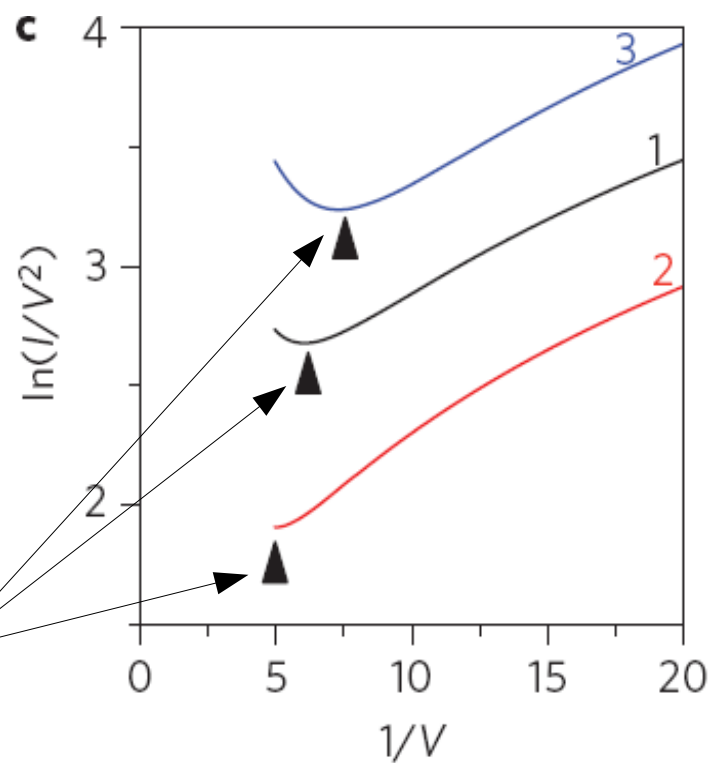
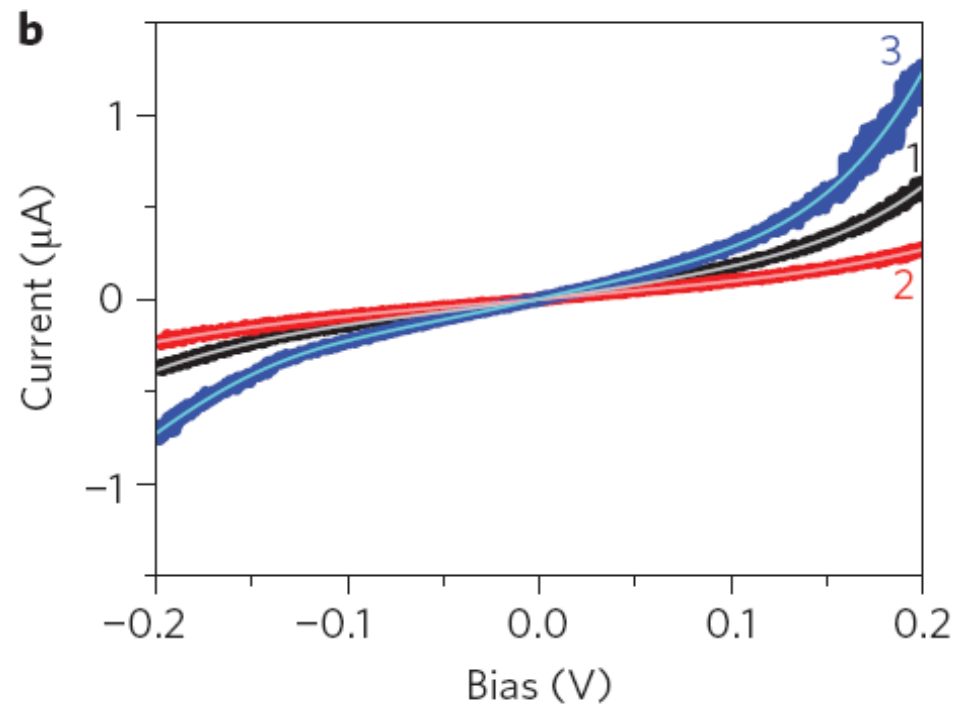
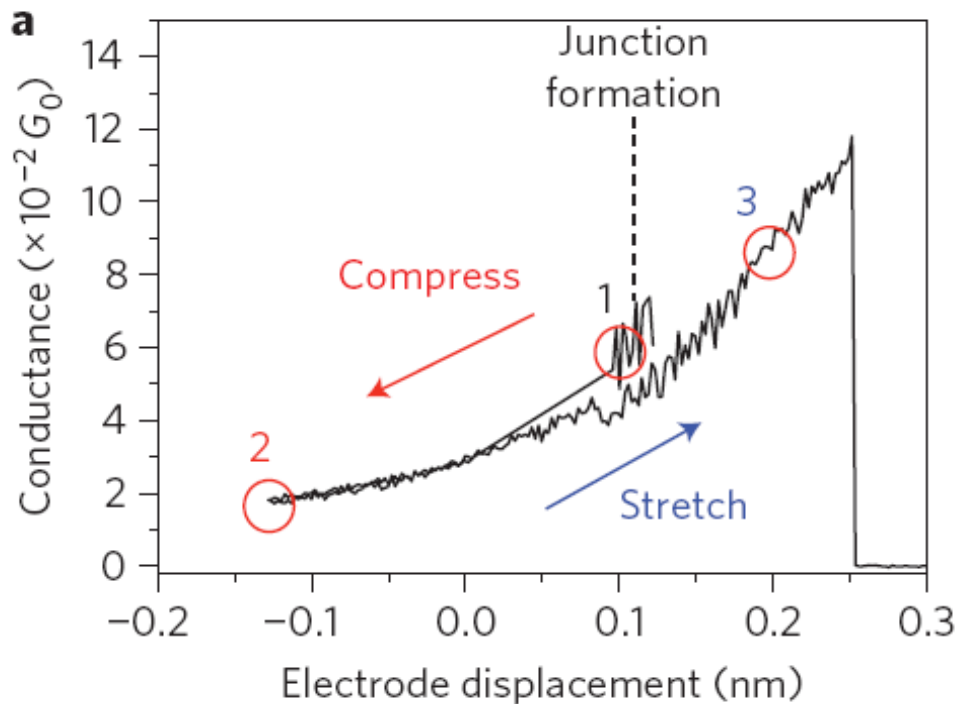


Néhány esetben a folytonos változás mellett ugrások is megjelentek a vezetőképesség görbéken



A hirtelen változás körülbelül az Au atom méretének megfelelő elektródátávolságnál látható





Minimális  
barrier  
magasság  
~0.14eV

Gyorsabban sweepelt elektródatávolság  
és bias feszültség

Elszakadás előtt nagyobb vezetőképesség  
érhető el.

A kontaktus feszítése hatására növekvő  
nemlinearitás tapasztalható

**Transition voltage spectroscopy:**

Minimum helye a barrier magassággal  
változik

## Konklúzió:

BDT molekula intuitív várakozásokkal  
ellentétes effektusokat mutat



Rezonáns  
alagutazással  
magyarázható

Ez az effektus a vezetőképességben akár egy nagyságrendnyi növekedést is eredményezhet, ami magyarázza a mérések és számolások értékei közti különbséget.

Többféle mérési módszerrel sikerült alátámasztani a jelenség magyarázatát adó elképzelést.

**Egy olyan elektronikai „eszköz-t” mutattak be, ahol mechanikai úton lehet hangolni az elektron transzport tulajdonságokat reverzibilis és jól reprodukálómódon**