

УДК 539.2, 539.8

С. В. ВАСИЛЮК, Ю. А. МЯГЧЕНКО

ВИВЧЕННЯ КОНТРОЛЬОВАНОГО ЕЛЕКТРОННОГО ПЕРЕНОСУ КРІЗЬ ОДИНОЧНУ ОРГАНІЧНУ МОЛЕКУЛУ

Ціль дослідження полягає в тому, щоб вивчити квантовані стабільні стани на графіку залежності опору органічних молекул від часу, поміщених між механічно контрольованими наноконтактами при заданому значенні сили струму. Передбачається знайти найбільш придатні діапазони значень опору для наступного одержання вольт-амперних характеристик досліджуваних нових органічних речовин для молекулярної електроніки.

Ключові слова: молекулярна електроніка, нанотехнологія, квантова хімія, одномолекулярний транзистор, механічно контрольовані розривні контакти.

Цель исследования заключается в том, чтобы изучить квантованные стабильные состояния на графике зависимости сопротивления органических молекул от времени, помещенных между механически контролируемые наноконтактами при заданном значении силы тока. Предполагается найти наиболее подходящие диапазоны значений сопротивления для последующего получения вольт-амперных характеристик исследуемых новых органических веществ для молекулярной электроники.

Ключевые слова: молекулярная электроника, нанотехнология, квантовая химия, одномолекулярный транзистор, механически контролируемые разрывные контакты.

The purpose of research will be to study the quantum stable states on the dependence schedule of organic molecules resistance versus time, placed between mechanically controllable break junctions at a present value of current. It is supposed to find the most suitable ranges of resistance values for the subsequent reception current versus voltage characteristics of the researched new organic substances necessary for molecular electronics requests. Organic semiconductors can be defined as solid, containing a significant amount of carbon-carbon bonds that are capable of supporting electronic conductivity. At this time, it became possible to synthesize semiconductors with desired electrical properties using organic chemistry, contributing to the rapid development of this area. It was possible to obtain substances with a wide range of mechanical properties by preparing specific molecular structures. If this possibility can be spread on electrical parameters, it will lead to increasing use of semiconductors beyond the use of industrially important inorganic semiconductors like silicon and germanium.

Development of nanotechnologies foretells revolutionary changes in microelectronics. The wide fronts of scientific researches, interest of large firms in manufacturing of molecular devices provide fast development of "moletronics".

The development of the modern electronic technology which conditionally began 50 years ago with the invention of the transistor and ten years later – the solid-state integrated circuit. It is still entered in the law opened in 1965 by the employee of Intel Corporation Gordon Moore: each new chip made in 18-24 months after the previous one, has approximately twice as big as the capacity of memory. The given process should end naturally in 10-15 years in view of evolution necessity to use elements interaction on the quantum mechanics basis. Really, in this case the sizes of elements should be commensurable with nanometer, equal 10^{-9} meters. As a result, huge opportunities on reduction of the sizes of microcircuits are open. If you replace all gates of modern semi-conductor devices with atoms, it is possible to reduce the size of microcircuits in ten thousand times and correspondingly to increase the speed of their work.

Keywords: molecular electronics, mechanically controllable break junctions, nanotechnology, quantum chemistry, single-molecule transistor

Вступ. Потенційні можливості традиційної мікроелектроніки будуть вичерпані в найближче десятиліття і далі стане можливим розвивати електроніку тільки на базі нових фізичних ідей. Десятки років для підвищення функціональної складності і швидкодії приладів експлуатували ідею збільшення щільності розміщення і зменшення розмірів мікроелементів, принцип дії яких не залежав від їхнього масштабу. При переході до розмірів елементів порядку нанометрів виникає якісно інша ситуація, зміст якої в тім, що квантові ефекти дуже впливають на фізичні процеси в наноструктурах і роботу приладів на їхній основі.

Створення таких наноструктур вимагає нових технологій, які стали активно розвиватися останні п'ятнадцять років по декількох напрямках: виготовлення електронних схем з активними елементами, розміри яких порівнянні з молекулярними, розробка і виготовлення мікро- і наномашин, розміри яких порядку декількох молекул, модифікація поверхні твердотільних молекул за допомогою маніпуляцій окремими атомами і зборка з них наноструктур [1].

Розвиток нанотехнологій передвіщає революційні зміни в мікроелектроніці. Широкий фронт наукових досліджень, зацікавленість великих фірм у виробництві молекулярних пристроїв забезпечують швидкий розвиток "молетроніки" [2]. Розвиток сучасної електронної технології, що умовно почалося 50 років тому з винаходу транзистора і десятьма роками пізніше – інтегральної схеми, як і раніше вписується у від-

критий у 1965 році співробітником корпорації Intel Гордоном Муром [3] закон: кожен новий чіп, зроблений через 18–24 місяців після попереднього, має приблизно удвічі більшу ємність пам'яті. Це повинно природним чином закінчитися через 10–15 років через необхідність переходу до використання взаємодії елементів на основі квантової механіки. Однак в останні роки позначився реальний вихід з цього положення, заснований на досягненнях хімічних наук [4]. Відповідні технології побудови пристроїв обчислювальної техніки одержали назву нанотехнологій [5].

Багатообіцяючим є створення наноструктур, у яких роль функціональних елементів виконують окремі молекули, які можливо ув'язати собі підключеними в електричне коло в якості діоду чи перемикача, як, наприклад на рис. 1.

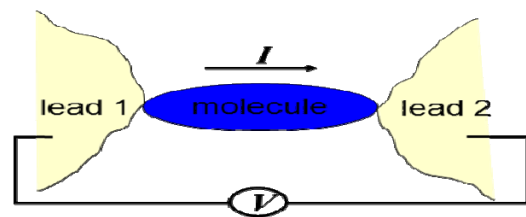


Рис. 1 – Схематичне зображення підключення одномолекулярного пристрою до металевих контактів на електричному колі та спроби вивчення властивостей нанорозмірних об'єктів

© С. В. Василюк, Ю. А. Мягченко 2016

У перспективі це дозволить використовувати принципи прийому і переробки інформації, реалізовані в біологічних об'єктах (як пропонує молекулярна електроніка – в якості молекулярних діодів, потрібно тільки зробити наноконтакти – рис. 2.

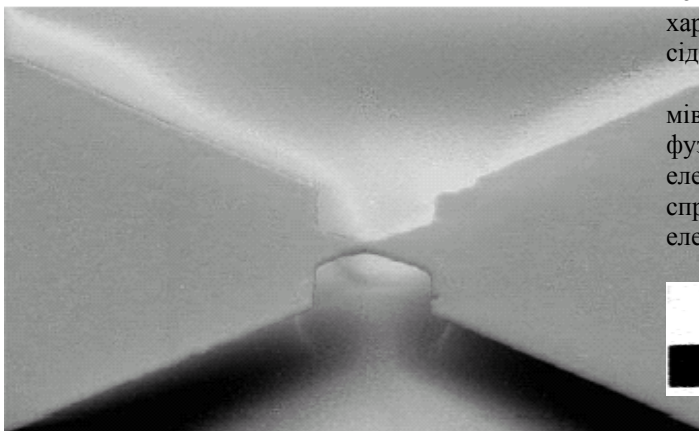


Рис. 2 – Механічно керований розривний контакт - нанолітографія, велике збільшення [4]

Вона входить у більш велику галузь – нанобіотехнологію [6], що займається біологічними об'єктами і біопроцесами на молекулярному і клітинному рівнях, що вирішує багато проблем екології, медицини, сільськогосподарства й національної оборони.

Електроміграція, причини та наслідки. У процесі експлуатації мікросхем і інших напівпровідникових приладів відбувається деградація фізико-хімічних властивостей металевих провідників, що може привести до параметричних чи катастрофічних відмов. Відмови, зв'язані з процесами, що протікають у провідниках, є основними для інтегральних мікросхем у випадку їхнього використання при підвищених навантаженнях (близько 25 % усіх відмов). Причина відмов може складатися в розриві провідників на сходах оксиду, у корозії металу, у взаємодії оксиду з металом при локальних збільшеннях температури, розриві провідників і порушенні контакту з кремнієм внаслідок електроміграції іонів металу провідника [7].



Рис. 3 – Фотографії реальних наслідків електроміграційно стимульованої деградації напівпровідникової електроніки при зростанні температури, збільшена інтегральна мікросхема

При щільності струму більше 100 A/mm^2 (при температурах вище $150 \text{ }^\circ\text{C}$) можлива міграція атомів металу в бік одного з електродів – зміна розмірів металевої шини на ізолюваній підкладці за рахунок пере-

носу атомів металу. Перенос називається електроміграцією [8].

У процесі теплового руху іони металу можуть займати нерегулярні положення в кристалічних ґратах. У процесі теплового руху відбувається рух іонів по міжвузлях, генерація і заповнення вакансій, тобто характер цього руху – послідовність перескоків у сусідні вакантні вузли.

Цей процес аналогічний механізму дифузії атомів у твердій фазі, тому часто називається – самодифузія (електродифузія) іонів. При наявності дрейфу електронів вони підштовхують іони. Відбувається спрямований рух іонів. Захоплення іонів дрейфом електронів називають "електронним вітром" [9].



Рис. 4 – Фотографії реальних наслідків електроміграційно стимульованої деградації напівпровідникової електроніки, ще точніше збільшена інтегральна мікросхема при зростанні температури, видно метал та оксиди металу в товщі напівпровіднику

Іони накопичуються в кінці провідника з високим потенціалом, утворюючи уздовж провідника кристаліти у виді "горбків", "вусів" і т.д., здатні закоротити близько розташовані провідники. Вакансії рухаються в напрямку кінця провідника з низьким потенціалом, у результаті чого в окремих ділянках утворюються порожнечі, і, як наслідок, розриви металізації [9].

У металевому провіднику на термічно збуджений міжвузельний іон діють дві протилежно спрямованих сили: сила F_z з боку електричного поля в провіднику і сила F_e , обумовлена захопленням іона електронним вітром. Результируюча сила F_z буде дорівнювати:

$$F_i = (q_i - enl\sigma)E,$$

де q_i – заряд іона; e – заряд електрона; n – концентрація електронів; l – довжина вільного пробігу електронів; σ – переріз розсіювання електронів на міжвузельних іонах; E – напруженість поля в провіднику [10].

У результаті екрануючого впливу електронів провідності дія електричного поля на іони металу незначна. Тому при підвищених температурах і великих густинах струму переважає сила F_e , під впливом якої міжвузельні іони захоплюються "електронним вітром" і переміщуються в сусідню вакансію переважно в напрямку руху електронів.

Іони накопчуються в кінці провідника з високим потенціалом, утворюють уздовж провідника кристаліти у виді "горбків", "вусів" і т.д., здатні закоротити близько розташовані провідники, як видно на рис. 4-6. Вакансії рухаються в напрямку кінця провідника з низьким потенціалом, у результаті чого в окремих ділянках утворюються порожнечі, і, як наслідок, розриви металізації [6–10].

Швидкість електроміграції іонів v_i у провіднику визначається виразом:

$$v_i = \frac{D}{kT} (q_i - enl\sigma) \rho j = \frac{D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right)}{kT} (q_i - enl\sigma) \rho j,$$

де ρ – питомий опір провідника; j – щільність струму; D – коефіцієнт дифузії; E_a – енергія активації дифузії.

Електроміграція іонів у провіднику здійснюється по границях зерен, оскільки в цих місцях енергія активації дифузії нижче, ніж у самому зерні [11] тому що металеві іони в цих областях є більш слабо зв'язаними, чим у правильних кристалічних ґратах, що коли електронний вітер досягає деякої сили, атоми відокремлюються від границі зерна і транспортуються в напрямку потоку. Цей напрямок також впливає на границю зерна безпосередньо, тому що атоми мають тенденцію проходити границі зерен.

Порожнини найчастіше виникають у місцях перетинання границь зерен, у так званих "потрійних точках". Тому в дрібнозернистих структурах електроміграція виявляється сильніше, і дрібнозернисті плівки (за інших рівних умов) деградують швидше, ніж грубозернисті. Процеси розповсюдження, викликані електроміграцією, можуть бути розділені на розповсюдження границі зерна, групове і поверхнєве розповсюдження [12]. Узагалі, розповсюдження границі зерна – головний процес при русі електроміграції в алюмінієвих проводах, тоді як поверхнєве є домінуючим у мідних сполучених проводах [13]. На відмови, викликані електроміграцією, також впливають градієнти температур і структурна неоднорідність металевої плівки.

Процеси міграції істотно підсилюються у випадку нерівномірної товщини шини [14]. Під дією "електронного вітру" тонка частина шини стає тонше і тонше аж до руйнування [15].

Існують емпіричні формули, що дають оцінку середнього часу життя шини під струмом до обриву – τ :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_0} \cdot \left(\frac{j}{j_0}\right)^n \cdot e^{-\frac{E_a}{kT}}$$

де E_a – енергія активації утворення вакансії в кристалічних ґратах металу [16].

Відомо, що чиста мідь є більш стійкою до електроміграції, ніж алюміній. Мідні проводи можуть протистояти приблизно в п'ять разів більшої щільності електричного струму, чим алюмінієві проводи при прийнятті подібних вимог надійності. Це відбувається головним чином через більш високі рівні енергії активації міді, викликаною її переважаючою електричною і тепловою провідністю так само, як і її більш високою точкою плавлення [17].

Опис експерименту шляхом методики механічно-розривного наноконтакту. Контроль експерименту здійснюється за допомогою пакета комп'ютерних програм і приладів – мультиметрів фірми Keithley 2400, 2010 (на схемі використовуються як вольтметри), та Keithley 617 (працює джерелом напруги для п'єзоелемента). Використовуючи пакет програм Labview 7.0, одержуємо графіки залежностей опору і

провідності нашого зразка від часу.

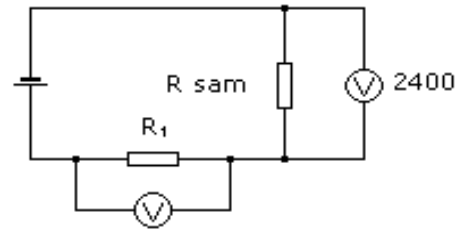


Рис. 5 – Схема електричного кола експерименту

Установка складалася з металевого корпуса – коробки зі зйомною кришкою для захисту від пилу, у середині якого знаходилися електрична плата, сполучні проводи і перемикач на 12 різних положень для вибору різних контактів на електронному чіпі, в електронний чіп поміщений варіант напилювання, що виглядає як сукупність мікроскопічних напівконусів, з'єднаних верхівками по два, нанесених на підкладку за допомогою електронно-променевої літографії [18].

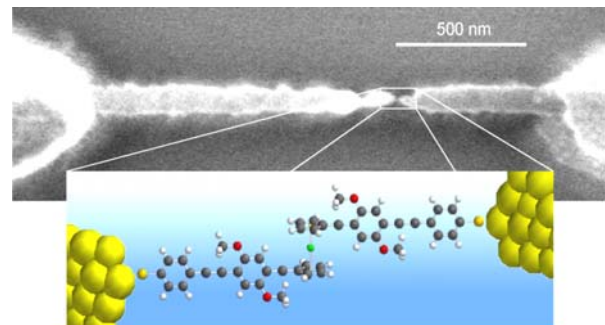


Рис. 6 – Фотографія наноконтакту та схематичне зображення поміщеної в нього молекули, що сідає на золоту дротину

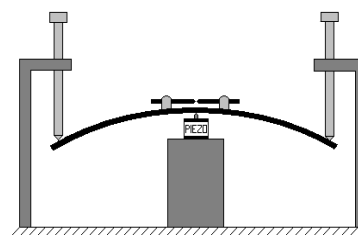


Рис. 7 – Схема зразку механічно-контрольованих розривних контактів в установці з гвинтами для розведення та розриву золотої дротинки

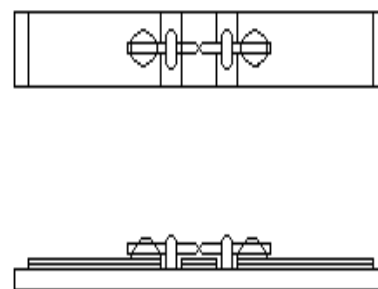


Рис. 8 – Схема зразку механічно-контрольованих розривних контактів з золотою дротиною зафіксованою в установці

Цей місток на рис.6-8 між двома клинами золота необхідно зруйнувати за допомогою електроміграції [19], щоб в отриманий у такий спосіб нанометровий проміжок змогла зануритися з водяного розчину одична органічна молекула. Коли вона замкне розірваний золотий наноконтакт, то стане можливим вимірити її провідність[20].

Оцінка максимально припустимої густини струму в умовах даного експерименту [21]. Розглянемо схему установки, де досліджуваний зразок - система, що складається з двох провідників, виконана з металу. Провідники з'єднуються таким чином, що весь струм з одного провідника тече через місце їхнього з'єднання в іншій [22] на мал. 9.

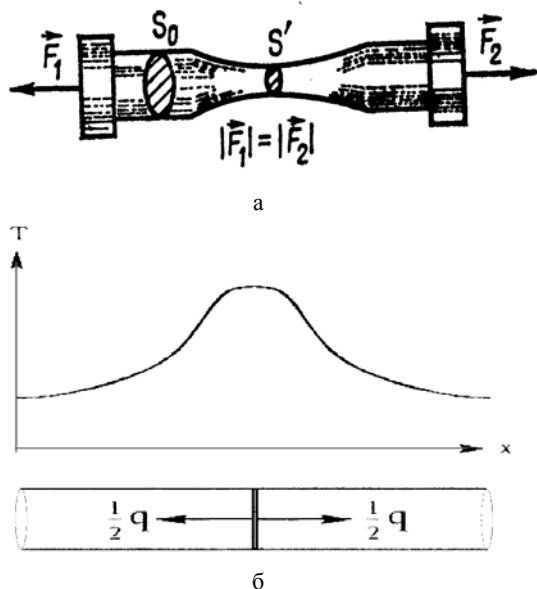


Рис. 9 – Розподіл теплової енергії в провіднику: а – схематичне зображення золотої дрітінки, що розтягується та руйнується; б – та графік розподілу тепла від довжини зразка

При протіканні постійного струму через перехід з опором у ньому виділяється тепла енергія потужністю

$$\frac{dQ}{dt} = I^2 R, \tag{1}$$

де I – значення струму $i(t)$. Тому що теплопровідність навколишнього повітря набагато нижче теплопровідності металу, то в нашій моделі енергія, що виділяється в переході, буде йти в провідники, рівною мірою розділяючи між ними (рис. 9):

$$q = \frac{1}{2} \frac{dQ}{dt} = \frac{I^2 R}{2}, \tag{2}$$

Якщо коефіцієнт теплопровідності матеріалу провідника дорівнює k , то потік тепла через перетин площею S буде:

$$q = kS \frac{dT}{dx}, \tag{3}$$

Оскільки праві частини (2) і (3) рівні, то:

$$I = \sqrt{\frac{2kS}{R} \frac{dT}{dx}}, \tag{4}$$

Якщо обмежити градієнт температури в провіднику значенням 1 К/мкм і взяти параметри технології $0,18 \text{ мкм}$ ($R < 20, S = 0.14 \cdot 10^{-12} \text{ м}^2, k = 237 \frac{\text{А}\delta}{i \cdot E}$), то одержимо, що діючий струм у провіднику не може перевищувати значення $I_{\text{max}} = 1.8 \text{ мА}$, що відповідає щільності струму $1.28 \cdot 10^6 \text{ А/см}^2$. Для Au параметри технології: $20 \text{ нм} * 50 \text{ нм}$, $S = 1 \cdot 10^{-16} \text{ м}^2$. Максимальне значення діючого струму $I_{\text{max}} \cong 0.9 \text{ А}$ та відповідна густина струму $j_{\text{max}} \sim 10^{13} \text{ А/м}^2$ [23].

Використовуємо струм 1 мікроампер . Задаємо фіксоване значення сили струму. Міряємо напругу на зразку. Межа напруги – 21 Вольт , це значення реєструється приладом, коли контакт між двома обривками золотого дроту відсутній чи коли досліджувана молекула між ними розірвана. За допомогою пакета програм можемо спостерігати залежність опору і провідності зразка від часу. В результаті дії електричної іскри при пережиганні провідного містка дуже пошкоджувався матеріал підкладки й утворювалася велика кількість різних хімічних сполук матеріалу підкладки, металу електродів і газів навколишнього повітря.

Результати вимірів опору органічних молекул. З раніше отриманих матеріалів (рис. 10) [24, 25], видно, що опір розривного контакту без молекул збільшується дискретно, яскраво вираженими сходянками, де останні сходянки рівні приблизно величині опору приблизно рівної $R_0 = 12,9 \text{ КОм}$.

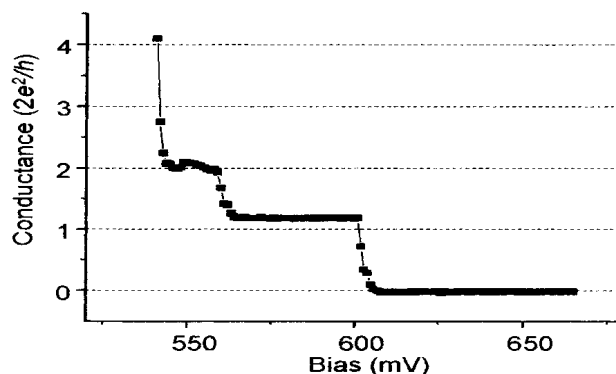


Рис. 10 – Графік зміни провідності наноконтакту в залежності від напруги в процесі розриву золотого дроту [19].

Це молекули: – (TEAH) $9 \text{ Na}_2 (\text{H}_{12}\text{KW}_{36}\text{O}_{120} (\text{H}_2\text{O}) 21$;
 – $\text{C}_{54}\text{H}_{198}\text{KN}_9\text{Na}_2\text{O}_{168}\text{W}_{36}$ - умовний код D98;
 – $(\text{NH}_4) 52 \text{ Mo}_{132}\text{O}_{272} (\text{H}_2\text{O}) 72 (\text{C}_2\text{H}_3\text{COO}) 40 (\text{H}_2\text{O}) 200$;
 – $\text{C}_{120}\text{H}_{872}\text{Mo}_{132}\text{N}_{52}\text{O}_{624}$ – умовний код D83.

Усього було проведено більше 150 експериментів з молекулами D83, D98 і H_2O . Результати були оброблені за допомогою редактора Excel і представлені ни-

жче. При аналізі отриманих результатів було помічено, що опір того самого типу молекули в різних експериментах відрізняється один від одного приблизно як 1; 1/2; 1/3, і так далі, що свідчить про те, що між електродами знаходяться 1; 2; 3 і більш молекул. Тому обрані графіки з максимальним опором, що відповідають одній молекулі між електродами. Це явище представлено на рис. 11.

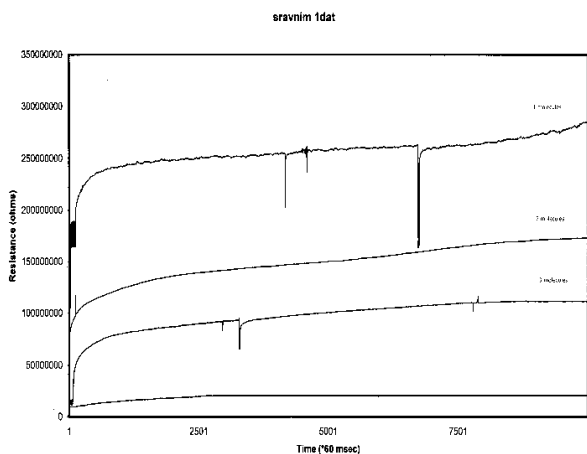


Рис. 11 – Опір різних квантових станів, що відповідають одній, двом і трьом молекулам відповідно

Крім того, при проведенні експериментів було виявлено, що графіки опору досліджуваних молекул мають безліч провалів опору майже до осі абсцис. Можливо, частина з них є перешкодами, але з великим ступенем імовірності можна затверджувати, що це явище підтверджує наявність електроміграції й обумовлено утворенням і руйнуванням провідних містків з атомів золота між електродами. А оскільки при великих густинах струму під впливом "електронного вітру" атоми золота переміщуються крізь молекулу, то стає можливим замінити атом металу в молекулі на атом золота й одержати нову хімічну сполуку за допомогою електроміграції. Природно, заміна атома можлива тільки при наявності в складі органічної формули металу, що стоїть в таблиці Менделєєва в одному стовпці з металом електродів, інакше порушиться просторова структура молекули і вона зруйнується, чи заміни не відбудеться. Інакше кажучи, для електродів із золота необхідно підібрати органічні молекули що мають у своєму складі атоми міді чи срібла. Різка зміна електричного опору молекули після провалу і встановлення його на новому рівні буде свідчити про те, що заміна атома відбулася.

Легко бачити, що в даній системі не виключене явище електролізу, тому що експерименти проводилися на відкритому повітрі при відносній вологості 50–80%, і крім процесу електроміграції існує і процес електролізу. Інакше кажучи, на результати проведених експериментів впливає сукупність процесів, що проходять у розчині, коли через нього пропускається електричний струм. Тоді в речовині відбуваються: переміщення іонів (де позитивні частки залучаються до катода і негативні до анода), електроміграція через розчин органічних молекул у воді, поширення іонів,

що втрачають заряд на електродах, електрохімічні реакції іонів, вторинні хімічні реакції продуктів електролізу один з одним і з речовиною електроліту й електрода. Але висока температура в районі контактів випаровує наявну вологу і процес може вважатися (з відомим ступенем наближення) чистою електроміграцією. Експериментально процес розриву був вивчений у роботах Парка [26, 27] і був виконаний при температурі нижче 4 К в кріостаті на рідкому гелії. Формування стабільного одноатомного ланцюжка – наноконтактів не вивчалось при кімнатній температурі, в основному, тому що атомної конфігурації речовини контактів при більш високих температурах, ніж 4 К, нестабільні, не говорячи вже про більш складні процеси у випадку органічних молекул, що замикають нанометровий проміжок.

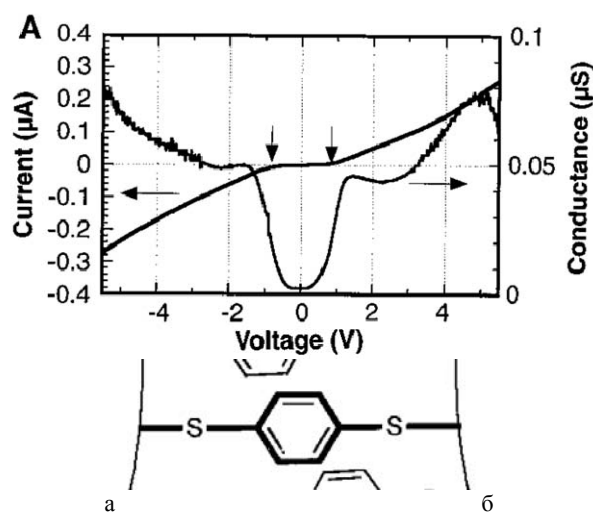


Рис. 12 – Графік зміни провідності в процесі розриву золотого дроту [19]: а – отримані вольтамперні характеристики осадженої органічної молекули; б – формула органічної молекули, що сідає на золоті наноконтакти

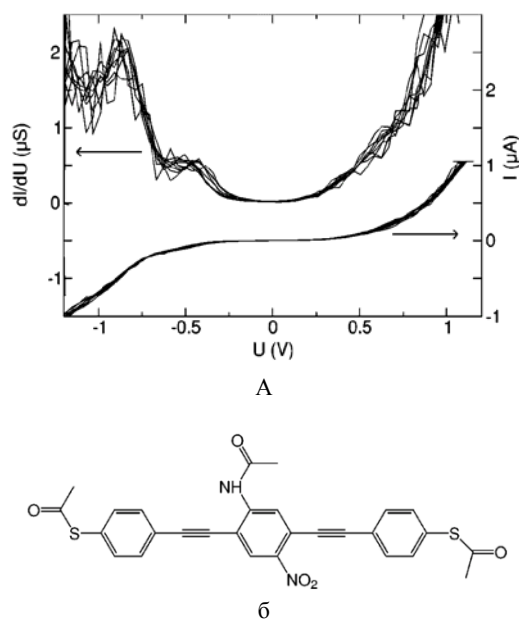


Рис. 13 – Графік зміни провідності та вольт-амперні характеристики органічної молекули: а – в процесі пропускання електричного струму через складну молекулу; б – поміщену в місце розриву золотого дроту [19]

Подібні думки виникають також із приводу відкритості системи: висока вологість повітря (50–85 %) сприяє формуванню на золоті тонкої плівки конденсату, що у плинні експерименту адсорбує з навколишнього повітря пил і частинки бруду. Взаємодіючи з газами, що входять до складу повітря, і з досліджуваною молекулою, вони утворюють нові з'єднання, що вносять помилки в результати експерименту.

Коливання температури повітря впродовж часу проведення експерименту також впливають на результати, тому що міняються лінійні розміри установки і величина зазору між електродами. Виключити ці явища можна, якщо проводити експерименти в вакуумі чи в середовищі інертного газу при постійній температурі. Необхідно, щоб речовини розтікались по металу тонким шаром в одну молекулу. Існує також інший варіант експерименту, де ці САМ поміщаються між перехресненням проводів [28, 29].

Становить великий інтерес поведінка органічної молекули, вкладеної між наноелектродами в електромагнітному полі при протіканні через неї струму, у змісті створення малоінерційних: електричного запобіжника, електричного ключа, генератора змінного струму, нанодротини[30].

Висновки. У роботі були вивчені процеси розриву і з'єднання золотих контактів шляхом виміру залежності їхньої провідності від часу. Було встановлено, що при розриві зразка його провідність квантується і змінюється у формі сходинок. Були побудовані графіки залежності опору від часу запропонованих для дослідження органічних молекул та самих контактів. Потім, користуючись статистичними методами розрахунку, було оброблено графіки та на їхній основі були побудовані залежності провідності запропонованих молекул. З'ясовано, що вони істотно відрізняються друг від друга і при акумуляції відповідної бази даних можлива ідентифікація різних органічних молекул, що може знайти застосування в промисловості і криміналістиці.

Список літератури:

1. Kornilovitch, P. (2003). Single-Molecule Designs for Electric Switches and Rectifiers [Text] / P. Kornilovitch, A. Bratkovsky, S. Williams // *Annals of the New York Academy of Sciences*. – № 1006 (1). – P. 198–211. doi: [10.1196/annals.1292.013](https://doi.org/10.1196/annals.1292.013)
2. Kwok, K. S. Moletronics: future electronics [Text] / K. S. Kwok, J. C. Ellenbogen // *Materials Today*. – 2002. – № 5 (2). – P. 28–37. doi: [10.1016/s1369-7021\(02\)05227-6](https://doi.org/10.1016/s1369-7021(02)05227-6)
3. Mohr, P. J. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2014. [Text] / P. J. Mohr, D. B. Newell, B. N. Taylor. – 2015. – doi: [10.6028/nist.sp.961r2015](https://doi.org/10.6028/nist.sp.961r2015)
4. Ball, P. High-density memory: a switch in time [Text] / P. Ball // *Nature*. – 2007. – № 445. – P. 362–363.
5. Green, J. E. A 160-kilobit molecular electronic memory patterned at 1011 bits per square centimetre [Text] / J. E. Green, J. Wook Choi, A. Boukai, Y. Bunimovich, E. Johnston-Halperin, E. Delonno, J. R. Heath // *Nature*. – 2007. – № 445 (7126). – P. 414–417. doi: [10.1038/nature05462](https://doi.org/10.1038/nature05462)
6. Rinaldi, R. A Protein-Based Three Terminal Electronic Device [Text] / R. Rinaldi, G. Maruccio, A. Biasco, P. Visconti, V. Arima, R. Cingolani // *Annals of the New York Academy of Sciences*. – 2003. – № 1006 (1). – P. 187–197. doi: [10.1196/annals.1292.012](https://doi.org/10.1196/annals.1292.012)
7. Chandrakasan, A. Design of High-Performance Microprocessor Circuits [Text] / A. Chandrakasan, W. J. Bowhill, F. Fox. – Wiley-IEEE Press, 2000. – 578 p. doi: [10.1109/9780470544365](https://doi.org/10.1109/9780470544365)
8. Landauer, R. Spatial conductivity modulation at metallic point defects [Text] / R. Landauer // *Journal of Physics C: Solid State Physics*. – 1975. – № 8 (6). – P. 761–766. doi: [10.1088/0022-3719/8/6/006](https://doi.org/10.1088/0022-3719/8/6/006)
9. Black, J. R. Electromigration: A brief survey and some recent results [Text] / J. R. Black // *IEEE Transactions on Electron Devices*. – 1969. – № 16 (4). – P. 338–347. doi: [10.1109/t-ed.1969.16754](https://doi.org/10.1109/t-ed.1969.16754)
10. Murayama, H. Electromigration and electrochemical reaction mixed failure mechanism in gold interconnection system [Text] / H. Murayama, M. Yamazaki, S. Nakajima // *Microelectronics Reliability*. – 2001. – № 41 (8). – P. 1265–1272. doi: [10.1016/s0026-2714\(01\)00112-3](https://doi.org/10.1016/s0026-2714(01)00112-3)
11. Krumbein, S. Metallic Electromigration Phenomena [Text] / S. Krumbein // *IEEE Transactions on Components, Hybrids, and Manufacturing Technology*. – 1988. – № 11 (1). – P. 5–15. doi: [10.1109/tchmt.1988.113488](https://doi.org/10.1109/tchmt.1988.113488)
12. Black, J. R. RF power transistor metallization failure [Text] / J. R. Black // *IEEE Transactions on Electron Devices*. – 1970. – № 17 (9). – P. 800–803. doi: [10.1109/t-ed.1970.17077](https://doi.org/10.1109/t-ed.1970.17077)
13. Ames, I. Reduction of Electromigration in Aluminum Films by Copper Doping [Text] / I. Ames, F. M. Heurle, R. E. Horstmann // *IBM Journal of Research and Development*. – 1970. – № 14 (4). – P. 461–463. doi: [10.1147/rd.144.0461](https://doi.org/10.1147/rd.144.0461)
14. Hu, C. K. Rodbell, K. P. Sullivan, T. D. Lee, K. Y. Bouldin, D. P. Electromigration and stress-induced voiding in fine Al and Al-alloy thin-film lines [Text] / C. K. Hu, K. P. Rodbell, T. D. Sullivan, K. Y. Lee, D. P. Bouldin // *IBM Journal of Research and Development*. – 1995. – № 39 (4). – P. 465–497. doi: [10.1147/rd.394.0465](https://doi.org/10.1147/rd.394.0465)
15. Thompson, C. V., Kahn, H. Effects of microstructure on interconnect and via reliability: Multimodal failure statistics [Text] / C. V. Thompson, H. Kahn // *Journal of Electronic Materials*. – 1993. – № 22 (6). – P. 581–587. doi: [10.1007/bf02666402](https://doi.org/10.1007/bf02666402)
16. D'Heurle, F. M. Electromigration and failure in electronics: An introduction [Text] / F. M. D'Heurle // *Proceedings of the IEEE*. – 1971. – № 59 (10). – P. 1409–1418. doi: [10.1109/proc.1971.8447](https://doi.org/10.1109/proc.1971.8447)
17. International Electron Devices Meeting. IEDM Technical Digest [Text]. – International Electron Devices Meeting IEDM Technical Digest IEDM-97. – 1997. doi: [10.1109/iedm.1997.649430](https://doi.org/10.1109/iedm.1997.649430)
18. Selzer, Y. Temperature effects on conduction through a molecular junction [Text] / Y. Selzer, M. A. Cabassi, T. S. Mayer, D. L. Allara // *Nanotechnology*. – 2004. – № 15 (7). – P. S483–S488. doi: [10.1088/0957-4484/15/7/057](https://doi.org/10.1088/0957-4484/15/7/057)
19. Landauer, R. Spatial carrier density modulation effects in metallic conductivity [Text] / R. Landauer // *Physical Review*. – 1976. – № 14 (4). – P. 1474–1479. doi: [10.1103/physrevb.14.1474](https://doi.org/10.1103/physrevb.14.1474)
20. Mahapatro, A. K. Pairs of Gold Electrodes with Nanometer Separation Performed over SiO₂ Substrates with a Molecular Adhesion Monolayer [Electronic resource] / A. K. Mahapatro, S. Ghosh, D. B. Janes. – 2005. – Available at: <https://arxiv.org/pdf/cond-mat/0503656.pdf>
21. Liang, W. Kondo resonance in a single-molecule transistor [Text] / W. Liang, M. P. Shores, M. Bockrath, J. R. Long, H. Park // *Nature*. – 2002. – № 417 (6890). – P. 725–729. doi: [10.1038/nature00790](https://doi.org/10.1038/nature00790)
22. Jiang, T. An electromigration failure model for interconnects under pulsed and bidirectional current stressing [Text] / T. Jiang, N. W. Cheung, Hu. Chenming // *IEEE Transactions on Electron Devices*. – 1994. – № 41 (4). – P. 539–545. doi: [10.1109/16.278507](https://doi.org/10.1109/16.278507)
23. Ramachandran, G. K. Nanometre gaps in gold wires are formed by thermal migration [Text] / G. K. Ramachandran, M. D. Edelstein, D. L. Blackburn, J. S. Suehle, E. M. Vogel, C. A. Richter // *Nanotechnology*. – 2005. – № 16 (8). – P. 1294–1299. doi: [10.1088/0957-4484/16/8/052](https://doi.org/10.1088/0957-4484/16/8/052)
24. Tour, J. M. Self-Assembled Monolayers and Multilayers of Conjugated Thiols, α,ω -Dithiols, and Thioacetyl-Containing Adsorbates. Understanding Attachments between Potential Molecular Wires and Gold Surfaces [Text] / J. M. Tour, L. Jones, D. L. Pearson, J. J. S. Lamba, T. P. Burgin, G. M. Whitesides, S. Atre // *Journal of the American Chemical Society*. – 1995. – № 117 (37). – P. 9529–9534. doi: [10.1021/ja00142a021](https://doi.org/10.1021/ja00142a021)
25. Van Wees, B. J. Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas [Text] / B. J. Van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, C. T. Foxon // *Physical Review*

- Letters. – 1988. – № 60 (9). – P. 848–850. doi: [10.1103/physrevlett.60.848](https://doi.org/10.1103/physrevlett.60.848)
26. Park, J. Coulomb blockade and the Kondo effect in single-atom transistors [Text] / J. Park, A. N. Pasupathy, J. I. Goldsmith, C. Chang, Y. Yaish, J. R. Petta, D. C. Ralph // Nature. – 2002. – № 417 (6890). – P. 722–725. doi: [10.1038/nature00791](https://doi.org/10.1038/nature00791)
 27. Ochs, R. Fast temporal fluctuations in single-molecule junctions [Text] / R. Ochs, D. Secker, M. Elbing, M. Mayor, H. B. Weber, // Faraday Discuss. – 2006. – № 131. – P. 281–289. doi: [10.1039/b506390f](https://doi.org/10.1039/b506390f)
 28. Kushmerick, J. G. Conductance Scaling of Molecular Wires in Parallel [Text] / J. G. Kushmerick, J. Naciri, J. C. Yang, R. Shashidhar // Nano Letters. – 2003. – № 3 (7). – P. 897–900. doi: [10.1021/nl034201n](https://doi.org/10.1021/nl034201n)
 29. Blum, A. S. Molecularly inherent voltage-controlled conductance switching [Text] / A. S. Blum, J. G. Kushmerick, D. P. Long, C. H. Patterson, J. C. Yang, J. C. Henderson, B. R. Ratna // Nature Materials. – 2005. – № 4 (2). – P. 167–172. doi: [10.1038/nmat1309](https://doi.org/10.1038/nmat1309)
 30. Vasylyuk, S. V. The Investigation of Relaxation Paths in Dioxaborine Anionic Polymethine Dyes Detected by Low-Temperature Time-Resolved Fluorescence [Text] / S. V. Vasylyuk, V. M. Yashchuk, O. O. Viniyuchuk, Y. P. Piryatinski, M. M. Sevryukova, A. O. Gerasov, O. D. Kachkovsky // Molecular Crystals and Liquid Crystals. – 2011. – № 535 (1). – P. 123–131. doi: [10.1080/15421406.2011.537959](https://doi.org/10.1080/15421406.2011.537959)
- Bibliography (transliterated):**
1. Kornilovitch, P., Bratkovsky, A., Williams, S. (2003). Single-Molecule Designs for Electric Switches and Rectifiers. *Annals of the New York Academy of Sciences*, 1006 (1), 198–211. doi: [10.1196/annals.1292.013](https://doi.org/10.1196/annals.1292.013)
 2. Kwok, K. S., Ellenbogen, J. C. (2002). Moletronics: future electronics. *Materials Today*, 5(2), 28–37. doi: [10.1016/s1369-7021\(02\)05227-6](https://doi.org/10.1016/s1369-7021(02)05227-6)
 3. Mohr, P. J., Newell, D. B., Taylor, B. N. (2015). CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2014. doi: [10.6028/nist.sp.961r2015](https://doi.org/10.6028/nist.sp.961r2015)
 4. Ball, P. (2007). High-density memory: a switch in time. *Nature*, 445, 362–363.
 5. Green, J. E., Wook Choi, J., Boukai, A., Bunimovich, Y., Johnston-Halperin, E., DeIonno, E., Heath, J. R. (2007). A 160-kilobit molecular electronic memory patterned at 1011 bits per square centimetre. *Nature*, 445 (7126), 414–417. doi: [10.1038/nature05462](https://doi.org/10.1038/nature05462)
 6. Rinaldi, R., Maruccio, G., Biasco, A., Visconti, P., Arima, V., Cingolani, R. (2003). A Protein-Based Three Terminal Electronic Device. *Annals of the New York Academy of Sciences*, 1006 (1), 187–197. doi: [10.1196/annals.1292.012](https://doi.org/10.1196/annals.1292.012)
 7. Chandrakasan, A., Bowhill, W. J., Fox, F. (2000). Design of High-Performance Microprocessor Circuits. Wiley-IEEE Press, 578. doi: [10.1109/9780470544365](https://doi.org/10.1109/9780470544365)
 8. Landauer, R. (1975). Spatial conductivity modulation at metallic point defects. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 8 (6), 761–766. doi: [10.1088/0022-3719/8/6/006](https://doi.org/10.1088/0022-3719/8/6/006)
 9. Black, J. R. (1969). Electromigration: A brief survey and some recent results. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 16 (4), 338–347. doi: [10.1109/t-ed.1969.16754](https://doi.org/10.1109/t-ed.1969.16754)
 10. Murayama, H., Yamazaki, M., Nakajima, S. (2001). Electromigration and electrochemical reaction mixed failure mechanism in gold interconnection system. *Microelectronics Reliability*, 41 (8), 1265–1272. doi: [10.1016/s0026-2714\(01\)00112-3](https://doi.org/10.1016/s0026-2714(01)00112-3)
 11. Krumbein, S. (1988). Metallic Electromigration Phenomena. *IEEE Transactions on Components, Hybrids, and Manufacturing Technology*, 11 (1), 5–15. doi: [10.1109/tchmt.1988.113488](https://doi.org/10.1109/tchmt.1988.113488)
 12. Black, J. R. (1970). RF power transistor metallization failure. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 17 (9), 800–803. doi: [10.1109/t-ed.1970.17077](https://doi.org/10.1109/t-ed.1970.17077)
 13. Ames, I., Heurle, F. M., Horstmann, R. E. (1970). Reduction of Electromigration in Aluminum Films by Copper Doping. *IBM Journal of Research and Development*, 14 (4), 461–463. doi: [10.1147/rd.144.0461](https://doi.org/10.1147/rd.144.0461)
 14. Hu, C.-K., Rodbell, K. P., Sullivan, T. D., Lee, K. Y., Bouldin, D. P. (1995). Electromigration and stress-induced voiding in fine Al and Al-alloy thin-film lines. *IBM Journal of Research and Development*, 39 (4), 465–497. doi: [10.1147/rd.394.0465](https://doi.org/10.1147/rd.394.0465)
 15. Thompson, C. V., Kahn, H. (1993). Effects of microstructure on interconnect and via reliability: Multimodal failure statistics. *Journal of Electronic Materials*, 22 (6), 581–587. doi: [10.1007/bf02666402](https://doi.org/10.1007/bf02666402)
 16. D' Heurle, F. M. (1971). Electromigration and failure in electronics: An introduction. *Proceedings of the IEEE*, 59 (10), 1409–1418. doi: [10.1109/proc.1971.8447](https://doi.org/10.1109/proc.1971.8447)
 17. International Electron Devices Meeting. IEDM Technical Digest. (1997). International Electron Devices Meeting IEDM Technical Digest IEDM-97. doi: [10.1109/iedm.1997.649430](https://doi.org/10.1109/iedm.1997.649430)
 18. Selzer, Y., Cabassi, M. A., Mayer, T. S., Allara, D. L. (2004). Temperature effects on conduction through a molecular junction. *Nanotechnology*, 15 (7), S483–S488. doi: [10.1088/0957-4484/15/7/057](https://doi.org/10.1088/0957-4484/15/7/057)
 19. Landauer, R. (1976). Spatial carrier density modulation effects in metallic conductivity. *Physical Review B*, 14 (4), 1474–1479. doi: [10.1103/physrevb.14.1474](https://doi.org/10.1103/physrevb.14.1474)
 20. Mahapatro, A. K., Ghosh, S., Janes, D. B. (2005). Pairs of Gold Electrodes with Nanometer Separation Performed over SiO₂ Substrates with a Molecular Adhesion Monolayer. Available at: <https://arxiv.org/pdf/cond-mat/0503656.pdf>
 21. Liang, W., Shores, M. P., Bockrath, M., Long, J. R., Park, H. (2002). Kondo resonance in a single-molecule transistor. *Nature*, 417 (6890), 725–729. doi: [10.1038/nature00790](https://doi.org/10.1038/nature00790)
 22. Jiang, T., Cheung, N. W., Chenming Hu. (1994). An electromigration failure model for interconnects under pulsed and bidirectional current stressing. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 41 (4), 539–545. doi: [10.1109/16.278507](https://doi.org/10.1109/16.278507)
 23. Ramachandran, G. K., Edelstein, M. D., Blackburn, D. L., Suehle, J. S., Vogel, E. M., & Richter, C. A. (2005). Nanometre gaps in gold wires are formed by thermal migration. *Nanotechnology*, 16 (8), 1294–1299. doi: [10.1088/0957-4484/16/8/052](https://doi.org/10.1088/0957-4484/16/8/052)
 24. Tour, J. M., Jones, L., Pearson, D. L., Lamba, J. J. S., Burgin, T. P., Whitesides, G. M., ... Atre, S. (1995). Self-Assembled Monolayers and Multilayers of Conjugated Thiols, α,ω -Dithiols, and Thioacetyl-Containing Adsorbates. Understanding Attachments between Potential Molecular Wires and Gold Surfaces. *Journal of the American Chemical Society*, 117 (37), 9529–9534. doi: [10.1021/ja00142a021](https://doi.org/10.1021/ja00142a021)
 25. Van Wees, B. J., van Houten, H., Beenakker, C. W. J., Williamson, J. G., Kouwenhoven, L. P., van der Marel, D., Foxon, C. T. (1988). Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. *Physical Review Letters*, 60 (9), 848–850. doi: [10.1103/physrevlett.60.848](https://doi.org/10.1103/physrevlett.60.848)
 26. Park, J., Pasupathy, A. N., Goldsmith, J. I., Chang, C., Yaish, Y., Petta, J. R., Ralph, D. C. (2002). Coulomb blockade and the Kondo effect in single-atom transistors. *Nature*, 417 (6890), 722–725. doi: [10.1038/nature00791](https://doi.org/10.1038/nature00791)
 27. Ochs, R., Secker, D., Elbing, M., Mayor, M., Weber, H. B. (2006). Fast temporal fluctuations in single-molecule junctions. *Faraday Discuss*, 131, 281–289. doi: [10.1039/b506390f](https://doi.org/10.1039/b506390f)
 28. Kushmerick, J. G., Naciri, J., Yang, J. C., Shashidhar, R. (2003). Conductance Scaling of Molecular Wires in Parallel. *Nano Letters*, 3 (7), 897–900. doi: [10.1021/nl034201n](https://doi.org/10.1021/nl034201n)
 29. Blum, A. S., Kushmerick, J. G., Long, D. P., Patterson, C. H., Yang, J. C., Henderson, J. C., Ratna, B. R. (2005). Molecularly inherent voltage-controlled conductance switching. *Nature Materials*, 4 (2), 167–172. doi: [10.1038/nmat1309](https://doi.org/10.1038/nmat1309)
 30. Vasylyuk, S. V., Yashchuk, V. M., Viniyuchuk, O. O., Piryatinski, Y. P., Sevryukova, M. M., Gerasov, A. O., Kachkovsky, O. D. (2011). The Investigation of Relaxation Paths in Dioxaborine Anionic Polymethine Dyes Detected by Low-Temperature Time-Resolved Fluorescence. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 535 (1), 123–131. doi: [10.1080/15421406.2011.537959](https://doi.org/10.1080/15421406.2011.537959)

Надійшла (received) 07.11.2016

Бібліографічні описи / Библиографические описания / Bibliographic descriptions

Вивчення контрольованого електронного переносу крізь одиночну органічну молекулу/ С. В. Василюк, Ю. А. Мягченко // Вісник НТУ «ХПІ». Серія: Механіко-технологічні системи та комплекси. – Харків : НТУ «ХПІ», 2016. – № 50(1222). – С.29–36. – Бібліогр.: 10 назв. – ISSN 2079-5459.

Изучение контролируемого электронного переноса через одиночную органическую молекулу/ С. В. Василюк, Ю. А. Мягченко// Вісник НТУ «ХПІ». Серія: Механіко-технологічні системи та комплекси. – Харків : НТУ «ХПІ», 2016. – No 50(1222). – С.29–36. – Бібліогр.: 10 назв. – ISSN 2079-5459.

Controlled study of electron transport through single organic molecule/ S. Vasylyuk, Y. Myahchenko//Bulletin of NTU “KhPI”. Series: Mechanical-technological systems and complexes. – Kharkov: NTU “KhPI”, 2016. – No 50 (1222).– P.29–36 . – Bibliogr.: 10. – ISSN 2079-5459.

Відомості про авторів / Сведения об авторах / About the Authors

Василюк Світлана Вікторівна – аспірант, Кафедра експериментальної фізики фізичного факультету інженер, Кафедра молекулярної фізики, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, вул. Володимирська, 60, м. Київ, Україна, 01033.

Мягченко Юрій Олександрович – Кандидат фізико-математичних наук, доцент, Кафедра експериментальної фізики фізичного факультету, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, вул. Володимирська, 60, м. Київ, 01033

Василюк Светлана Викторовна – аспірант, Кафедра експериментальної фізики фізического факультета, інженер, Кафедра молекулярної фізики, Киевський національний університет имени Тараса Шевченка; вул. Владимирская, 60, г. Київ, Украина, 01033.

Мягченко Юий Александрович – Кандидат физико-математических наук, доцент, Кафедра экспериментальной физики физического факультета, Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, ул. Владимирская, 60, г. Киев, Украина, 01033

Myahchenko Yurii – Associate Professor, Department of Experimental Physics, Department of Physics, Taras Shevchenko National University of Kyiv, Volodymyrska str., 60, Kyiv, Ukraine, 01033.

Vasylyuk Svitlana – graduate student, Engineer, Department of Molecular Physics, Taras Shevchenko National University of Kyiv; Volodymyrska str., 60, Kyiv, Ukraine, 01033.

УДК 535.2

П. С. ЗАДОРЖНИЙ

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОХОДЖЕННЯ СВІТЛА ЧЕРЕЗ НАПІВПРОЗОРИ СЕРЕДОВИЩА

Оскільки моделювання розповсюдження світла в середині напівпрозорих середовищ за допомогою звичайних методів має доволі значну похибку, потрібно розробити та узагальнити математичну модель що врахує всі процеси які впливають на розповсюдження світла в неоднорідних або напівпрозорих середовищах. Але враховуючи всю варіативну різноманітність середовищ важливо зауважити що для кожного окремого випадку варто розробляти індивідуальну математичну модель, що повною мірою зможе описати процес проходження випромінювання у видимому, УФ і ІЧ спектрах. В даній роботі буде розглянуте середовище у вигляді прибережної зони водойми.

Ключові слова: світлове поле, напівпрозоре середовище, неоднорідне середовище, прозорість, колоїдна система, математична модель.

Поскольку моделирование распространения света внутри полупрозрачной среды с помощью обычных методов имеет довольно значительную погрешность, нужно разработать и обобщить математическую модель что позволит учесть все процессы, воздействующие на распространение света в неоднородной или полупрозрачной среде. Но учитывая все вариативное разнообразие сред важно отметить что для каждого отдельного случая следует разрабатывать индивидуальную математическую модель, что в полной мере сможет описать процесс прохождения излучения в видимом, УФ и ИК диапазонах. В данной работе рассмотрена среда в виде прибережной зоны водоема.

Ключевые слова: световое поле, полупрозрачная среда, неоднородная среда, прозрачность, коллоидная система, математическая модель.

Since the simulation of light propagation within a semitransparent medium using conventional methods has a rather significant error, it is necessary to develop and generalize a mathematical model that will allow to take into account all processes affecting the propagation of light in an inhomogeneous or semitransparent medium. But taking into account all the variability of media, it is important to note that for each individual case, an individual mathematical model should be developed that will fully describe the process of radiation transmission in the visible, UV and IR ranges. In this paper, we consider the medium in the form of a coastal zone of a reservoir. In this paper, we analyze the radiation field in a layer of a semitransparent medium at the boundary of which collimated and noncollimating (diffuse) light flux falls. This model was used to calculate the radiation field in a reservoir, which is formed under the influence of the incident solar flux and radiation from the celestial vault. To solve the problem, an approach based on a modified method of average flows (AF-method) is considered. This method by its wide possibilities for taking into account the optical properties of the medium and boundaries along with the relative simplicity of the numerical algorithm. For solving the problem was proposed the S-transformation method, as another algorithm.

Keywords: light field, semitransparent medium, inhomogeneous medium, transparency, colloidal system, mathematical model.

Вступ. Інтерес до завдань побудови світлового та оптичного поля в напівпрозорих середовищах, де світлове поле формується падаючим колімованим (вузконаправленим) випромінюванням, обумовлений їх широким практичним значенням. Наприклад, постановки таких завдань мають місце при дослідженні кристалізації тугоплавких оксидів, що нагріваються за допомогою лазерного випромінювання [2-3]. Лазери,

як джерело світла, використовуються для вивчення дисперсних біологічних об'єктів, таких як кров людини [4]. Тепловий стан водойм визначається падаючим сонячним потоком, також представляє собою колімованість випромінювання [5]. А також безліч інших прикладів середовищ, що представляють собою колоїдну систему.

© П. С. Задоржний. 2016