

УДК 537.9:538.935

РАСЧЕТ ЧИСЛА КАНАЛОВ ПРОВОДИМОСТИ В ОДНОЭЛЕКТРОННОЙ РЕЗЕРВУАРНОЙ СЕТИ НА МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСНЫХ ПОЛИМЕРАХ

© 2023 г. С. А. Панкратов^{1, 2, *}, А. А. Паршинцев^{1, 2, 3}, Д. Е. Преснов^{1, 2, 4}, В. В. Шорохов^{1, 2}

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”, физический факультет, Москва, Россия

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”,
Центр квантовых технологий, Москва, Россия

³Университет Бернардо О’Хиггинс, Сантьяго, Чили

⁴Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”,
Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына, Москва, Россия

*E-mail: pankratov.sa18@physics.msu.ru

Поступила в редакцию 29.08.2022 г.

После доработки 16.09.2022 г.

Принята к публикации 26.09.2022 г.

С помощью теории функционала плотности получены одночастичные спектры фрагментов одномерной цепочки металлоорганического координационного полимера. Рассчитано эффективное сопротивление органического участка звена, характерная кулоновская энергия и емкость зарядового центра. Получена оценка количества каналов проводимости в экспериментально исследуемой резервуарной сети на основе рассматриваемых полимерных цепочек.

DOI: 10.31857/S0367676522700132, EDN: JJOAC

ВВЕДЕНИЕ

Технологические возможности изготовления базовых функциональных элементов в сверхбольших и производительных современных микросхемах приближаются вплотную к атомарным масштабам. Тем не менее, полные размеры самых миниатюрных простейших функциональных элементов в таких микросхемах все еще составляют десятки нанометров. Дальнейшее увеличение плотности размещения таких элементов потребует перехода к устройствам, в которых базовые функциональными элементами будут состоять из единичных или небольших групп атомов и, по сути, будут являться наноэлектронными устройствами с атомной функциональной структурой. В этой связи особый интерес исследователей представляют атомарные и молекулярные одноэлектронные структуры — наноэлектронные устройства, работающие на новых физических принципах [1]. В таких устройствах перенос заряда осуществляется посредством туннелирования одиночных электронов. Ключевой особенностью таких устройств является наличие сильных кулоновских эффектов, среди которых можно выделить корреляцию туннельного переноса заряда и

кулоновскую блокаду туннельного тока при определенных распределениях дополнительных и поляризационных зарядов на рабочих атомах или молекулах [2, 3].

К устройствам, в которых используется специальным образом созданное распределение молекул на поверхности диэлектрика или примесных атомов в приповерхностном слое полупроводника, относятся одноэлектронные резервуарные вычислительные сети, отличающиеся новыми функциональными свойствами и компактностью. В качестве примеров таких устройств можно привести структуры, описанные в исследованиях [4, 5]. В этих работах представлены одноэлектронные устройства на основе неупорядоченных систем зарядовых центров, состоящих из золотых нанокластеров и примесных атомов бора в кремниевой подложке соответственно. Одноэлектронные резервуарные сети в работах [4, 5] представляют собой локализованные в областях диаметром 100–200 нм системы зарядовых центров, связанных между собой туннельным образом и окруженных системой управляющих наноэлектродов. Количество зарядовых центров в рабочей области таких устройств может составлять от десят-

ков до десятков тысяч штук и зависит от расстояния между электродами и типов используемых центров.

Механизм работы одноэлектронных резервуарных сетей заключается в задании потенциального рельефа в области локализации зарядовых центров с помощью управляющих электродов и управлении наведенными на центры зарядами. Такое управление позволяет активировать различные подгруппы зарядовых центров и зарядовые состояния, открывая одни каналы туннелирования и закрывая другие. Определение величин необходимых потенциалов для реализации той или иной функции резервуарной сети осуществляется методами машинного обучения [4]. Таким образом осуществляется управление одноэлектронным транспортом в этих структурах и их программирование на выполнение различных логических функций.

С одной стороны, сверхкомпактная одноэлектронная резервуарная сеть — универсальный многоконтактный динамический перестраиваемый аналоговый элемент. На его основе можно создавать динамически перестраиваемые элементы двоичной и троичной логики [4], перестраиваемые нелинейные аналоговые функциональные элементы, а также сенсоры заряда и электрического поля. С другой стороны, такие одноэлектронные резервуарные сети могут быть использованы в качестве нейросетей [6], для распознавания образов или моделирования мозговой активности, где использование традиционной электроники или программных аналогов затруднительно и дорого [5]. Однако в данных устройствах активная внутренняя структура зарядовых центров сильно неупорядочена, что негативно сказывается на предсказуемости и повторяемости внутренних транспортных процессов и функциональных свойств системы.

Возможной реализацией одноэлектронных резервуарных сетей с упорядоченной структурой зарядовых центров является использование металлоорганических каркасных полимеров (англ. metal-organic frameworks, MOF, МКП) [7]. Это пористые кристаллические материалы, в которых ионы металлов или иные полиядерные неорганические кластеры связаны между собой органическими молекулами, называемыми лигандами. Связь между органической и неорганической составляющими осуществляется за счет донации и акцепции электронов атомами и называется координационной [8]. Использование металлоорганических каркасных полимеров позволяет в перспективе создавать сверхкомпактные наноэлектронные резервуарные сети с одномерными, двумерными и трехмерным упорядоченным расположением зарядовых центров, что необходимо для получения стабильных характеристик в будущих

устройствах с атомной функциональной структурой. Кроме того, МКП обладает рядом свойств, которые могут быть полезны для исследователей в области наноэлектроники [9]. МКП могут быть синтезированы на рабочих поверхностях с помощью самосборки, что может упростить технологию изготовления устройств на их основе. Широкий выбор лигандов и металлических центров позволяет подобрать полимер с нужными свойствами, структурой и размерностью для конкретной задачи [7]. Кроме того, МКП являются модифицируемыми и могут обратимо менять свои свойства под внешним воздействием.

Металлоорганические каркасные полимеры уже активно используются в качестве активных структур во множестве устройств. Например, в работах [10, 11] был продемонстрирован одноатомный одноэлектронный транзистор на основе одного звена МКП с металлическими центрами на ионах кобальта и родия, отделенными от управляющих электродов непроводящими лигандами. С помощью затвора авторы могли управлять одноэлектронным током в системе при температурах вплоть до комнатных, а посредством выбора лиганда и металлического центра — варьировать характеристики устройства. Также МКП могут быть использованы для построения двух- и трехмерных систем молекулярных кубитов [12, 13]. Существует большое количество хорошо отработанных способов осаждения МКП, что позволяет синтезировать исследуемую систему практически на любой подложке [14]. Благодаря упорядоченной и настраиваемой структуре МКП оказывается возможным управление количеством кубитов и дистанцией между ними. Некоторые полимеры обладают высокими временами спин-решеточной релаксации даже при комнатной температуре [14], что задает более высокий предел для времени когерентности кубита, определяющего стабильность его состояния и количество ошибок при работе с ним. Кроме того, пористость материала позволяет молекулам анализируемых веществ попадать внутрь полимера, что может быть использовано для детектирования биохимических агентов с помощью кубитов [15]. МКП также успешно применяются в сцинтилляторных детекторах непрямого обнаружения [16] и детекторах излучения [17]. Немаловажным является то, что МКП могут быть также использованы в качестве активных элементов сенсорных устройств. Эти полимеры могут проявлять отклик на внешние воздействия, такие как изменение температуры, давления, электромагнитного поля или химического окружения [9]. Например, в работе [18] представлен электронный сенсор на основе протеиновых нанопроводов, модифицированных молекулами-аттракторами и объединенных в большой массив. Конструкция сенсора позволяет заменить нанопровод на одномерную цепочку МКП, что мо-

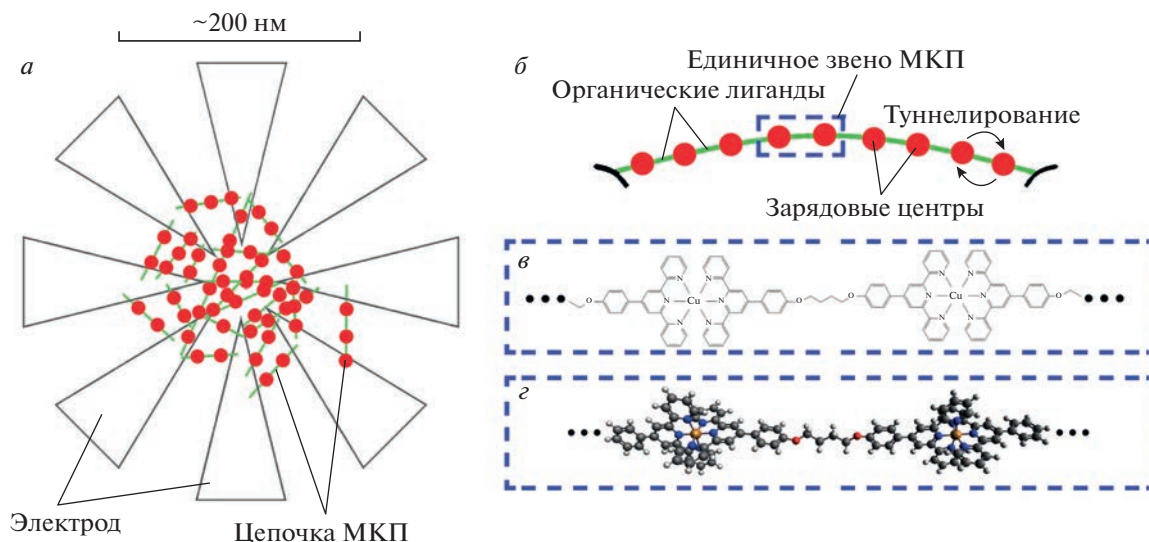


Рис. 1. Схема исследуемой одноэлектронной резервуарной сети на основе МКП (вид сверху) (а). Треугольниками обозначены нанoeлектроды, размещенные на непроводящей твердотельной подложке. Зелеными линиями с красными кружками — МКП, красные кружки — зарядовые центры на ионах меди с лигандами терпиридина. Схематическое изображение полимерной цепочки с обозначениями ее составных частей (б). Структурная формула звена МКП (в). Трехмерное изображение звена МКП (г).

жет улучшить характеристики устройства [9]. Металлорганические координационные полимеры имеют практически неограниченный потенциал для модификации благодаря своей вариативности, что может расширить круг детектируемых веществ одним сенсором [7].

По предварительным оценкам применение МКП как активного компонента одноэлектронной резервуарной сети позволит довести рабочую температуру вплоть до комнатной. При этом механизм функционирования устройства значительно не изменится: металлические центры МКП будут образовывать сеть изолированных одноатомных зарядовых центров, между которыми будут туннелировать носители заряда. Однако малые размеры и, следовательно, малые емкости зарядовых центров должны обеспечить большие изменения зарядовых энергий при туннелировании электронов

$$\Delta E = \frac{e^2}{2C}, \quad (1)$$

где C — собственная эффективная электрическая емкость зарядового центра [19], e — заряд электрона. Это должно обеспечить малость тепловых флуктуаций с энергией $k_B T$, где k_B — постоянная Больцмана, T — температура, наблюдаемость одноэлектронных эффектов и стабильную работу устройства даже при комнатной температуре.

Проведено теоретическое изучение проводящих свойств металлорганического одномерного координационного полимера, замыкающего си-

стему управляющих нанoeлектродов в резервуарной одноэлектронной сети. Рассмотрен одномерный МКП, в котором в качестве органического лиганда, соединяющего два выделенных зарядовых центра — атома меди(II), является терпиридин (см. рис. 1б). Одномерный МКП был выбран в качестве первоначального объекта исследования, как более простое химическое соединение для изготовления и расчета его модельных свойств.

МЕТОД РАСЧЕТА

Теоретически рассматриваемая в данной работе одноэлектронная резервуарная сеть на основе МКП представлена схематично на рис. 1а [20]. На систему расположенных по кругу золотых нанoeлектродов, минимальное расстояние между которыми составляет 40 нм, осаждаются одномерные МКП, представленные зелеными линиями с красными кружками. Красными кружками схематично обозначены зарядовые центры — атомы меди, окруженные лигандной оболочкой (терпиридин). На рисунке число зарядовых центров не соответствует реальной системе, поскольку даже в самом коротком МКП, соединяющем соседние электроды, число зарядовых центров — атомов меди 15 и более. Структурная формула одного звена МКП с двумя зарядовыми центрами представлена на рис. 1в. Такие звенья, соединяясь последовательно, образуют структуру одномерного МКП, представляя собой один проводящий канал. Поскольку в реальном эксперименте одно-

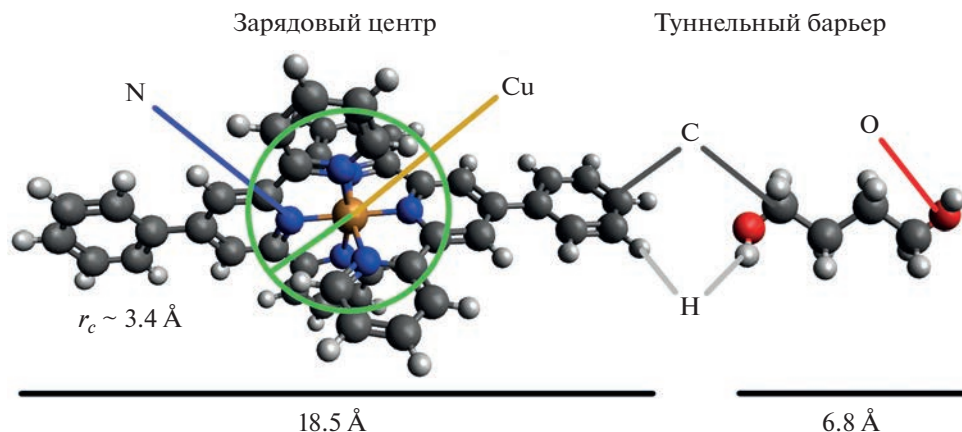


Рис. 2. Составные части исследуемого МКП: зарядовый центр на ионе меди с лигандами терпиридина (слева) и эффективный туннельный барьер, образуемый бутан-содержащим участком МКП (справа) с указанием химических элементов и характерных размеров.

мерные МКП осаждаются на нанoeлектроды случайным образом, часть осажденных молекул может и не замыкать нанoeлектроды, будучи прикрепленными только одним концом к ним. Сопротивление, измеряемое на каждой паре электродов, обратно пропорционально числу каналов МКП, замыкающих их, и определяется сопротивлением каждого канала, которое, в свою очередь, определяется числом звеньев в каждом канале МКП и прозрачностью туннельного барьера в каждом звене [21]

$$\frac{1}{R_{ij}} = \sum_{\alpha} \frac{1}{R_{ij,\alpha}} = \sum_{\alpha} \frac{1}{n_{ij,\alpha} r} = \tau G_0 \sum_{\alpha} \frac{1}{n_{ij,\alpha}}, \quad (2)$$

где R_{ij} — сопротивление измеряемое между электродами i и j ; N_{ij} — число МКП, замыкающих электроды i и j ; $R_{ij,\alpha}$ — сопротивление одного канала МКП; $n_{ij,\alpha}$ — число звеньев к каналу с индексом α , соединяющем электроды i и j ; τ — прозрачность туннельного барьера между двумя соседними зарядовыми центрами МКП; $G_0 = e^2/h$ — квант проводимости. Выражение (2) показывает, что основной вклад в электропроводность между парой электродов i и j дают каналы, замыкающие их и имеющие наименьшее число $n_{ij,\alpha}$. В предположении, что каналы МКП имеют примерно одинаковую минимальную длину, выражение (2) может быть записано в приближенной форме

$$\frac{1}{R_{ij}} \approx \tau G_0 \frac{N_{ij}}{\langle n_{ij,\alpha} \rangle}, \quad (3)$$

где $\langle n_{ij,\alpha} \rangle$ — среднее число звеньев в МКП. Выражение (3) может быть использовано для оценки числа каналов, замыкающих каждую пару электродов, если известна величина прозрачности

туннельного барьера между соседними зарядовыми центрами τ . Точное значение коэффициента прозрачности туннельного барьера между соседними зарядовыми центрами может быть рассчитано методом матрицы переноса [22]. Для приближенной оценки может быть использована формула для прямоугольного потенциального барьера с эквивалентной площадью:

$$\tau \approx 1 / \left(1 + \frac{U_0^2 \sin^2(h^2 \kappa a)}{4E(U_0 E)} \right), \quad (4)$$

$$\sqrt{2mU_0}a = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx,$$

где U_0 и a — высота и ширина эквивалентного прямоугольного туннельного барьера, E и m — энергия и масса туннелирующего электрона, $\kappa = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$ — подбарьерный коэффициент затухания, $U(x)$ — распределение эффективного потенциала между соседними зарядовыми центрами. Это распределение вычисляется по данным о распределении электронной плотности, положениям и зарядам ядер, которые могут быть вычислены с помощью квантово-химических пакетов.

Для вычисления сопротивления одного канала МКП в этой работе использовался подход, основанный на формуле (3). На первом этапе рассматривался участок МКП, состоящий из двух зарядовых центров меди. Каждый зарядовый центр — координационное соединение иона меди, окруженное двумя лигандами терпиридина с молекулами бензола (рис. 2). Полная структура молекулы изображена на рис. 1в и 1г. Она образуется двумя зарядовыми центрами, соединенными через атомы кислорода с бутаном. Для задания атомной струк-

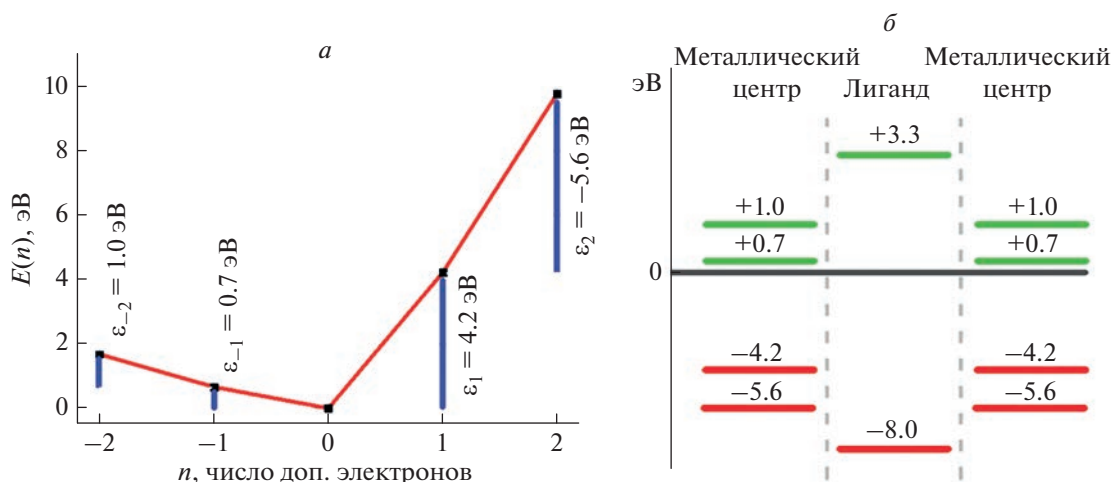


Рис. 3. Зависимости полной энергии фрагмента МКП с зарядовым центром меди от зарядового состояния n . Синими отрезками показаны разности полной энергии, соответствующие потенциалам ионизации и поясняющие расчет электронного одночастичного спектра (а). Хартри–Фока-подобный электронный одночастичный энергетический спектр участков МКП, полученный методом ТФП (б). Красным цветом изображены занятые уровни, а зеленым — незанятые.

туры этого участка МКП использовались сведения из базы данных рентгеноструктурного анализа Кембриджского центра кристаллографии (The Cambridge Crystallographic Data Centre, CCDC). Для определения электрического сопротивления этого участка МКП он был разделен на два фрагмента — зарядовый центр, состоящий из проводящих бензольных колец, терпиридина и атома меди, и непроводящий — бутан-содержащий участок с присоединенными атомами кислорода, который выступает в качестве туннельного барьера. В этой работе эффективный потенциальный барьер был определен геометрическим образом по непроводящему участку (бутан и атомы кислорода) между зарядовыми центрами. Отсутствие возможности делокализации на этом участке определяется наличием только одинарных ковалентных химических связей и соответствующим одночастичным электронным спектром.

Для каждого такого фрагмента звена МКП программным комплексом NWChem [23] нами были вычислены электронные одночастичные энергетические спектры с помощью метода теории функционала плотности (ТФП). Для этих целей значение полной энергии $E(n)$ для ряда зарядовых состояний $n = -3 \dots +3$, где $n > 0$ — недостаток электронов, а $n < 0$ — избыток электронов во фрагменте. В расчетах ТФП использовался функционал B3LYP и атомный базис 6-31G для всех атомов фрагментов. Согласно теореме Купманса [24], i -ый потенциал ионизации фрагмента, который также является химическим потенциалом в соответствующем зарядовом состоянии, может быть определен как

$$I_n = \mu_n = E(n) - E(n-1). \quad (5)$$

Значения I_n для отрицательных n определяют сродство к электрону:

$$A_{-n+1} = I_n, \quad \text{для } n \leq 0. \quad (6)$$

Согласно теореме Купманса, если за уровень отсчета энергии принять континуум, то положение i -го одночастичного уровня в спектре может быть представлено как

$$\epsilon_i = -I_i. \quad (7)$$

Если фрагмент молекулы находится в состоянии с наименьшей мультиплетностью, то одночастичный электронный энергетический уровень ϵ_1 одновременно является верхним заполненным одночастичным электронным состоянием $\epsilon_1 = \epsilon_{\text{НОМО}}$. Энергетический уровень $\epsilon_0 = \epsilon_{\text{ЛУМО}}$ соответствует нижнему незаполненному энергетическому состоянию. Значение эффективной емкости в зарядовом состоянии n определяется как [19]

$$C_n = \frac{e^2}{\mu_{n+1} - \mu_n} = \frac{e^2}{E_{n+1} + E_{n-1} - 2E_n}. \quad (8)$$

РЕЗУЛЬТАТЫ

Рассчитанные значения полной энергии фрагментов звена МКП с зарядовым центром представлены на рис. 3а. На этом рисунке можно видеть, что точки зависимости $E(n)$ имеют характерный перегиб в точке $n = 0$, что связано с тем, что два верхних заполненных одночастичных валентных энергетических уровня фрагмента с зарядовым центром связаны с локализованными состояниями на ионе меди. Незанятые уровни соответствуют лигандной оболочке. Рассчитанные

одночастичные электронные энергетические спектры молекулярного фрагмента зарядового центра и туннельного барьера представлены на рис. 3б. Положение верхнего занятого энергетического уровня фрагмента с зарядовым центром относительно континуума $\epsilon_{\text{НОМО}} = -4.2$ эВ. Представленный вид электронного одночастичного спектра фрагмента с зарядовым центром относительно одночастичного электронного спектра непроводящего фрагмента позволяет оценить высоту эффективного потенциального барьера для электрона, туннелирующего с одного иона меди на другой. Из представленного спектра видно, что у непроводящего фрагмента нет близлежащих одночастичных состояний вблизи уровня $\epsilon_{\text{НОМО}}$. Нижний заполненный уровень этого фрагмента $\epsilon_{\text{НОМО}}^{\text{ТБ}} = -8$ эВ, верхний незаполненный уровень $\epsilon_{\text{ЛУМО}}^{\text{ТБ}} = +3$ эВ, поэтому наиболее вероятным механизмом переноса заряда будет туннелирование электрона через туннельный барьер высотой $U_0 \sim 4.2$ эВ, определенный непроводящим лигандом без локализации (“посещения”) на промежуточных одночастичных состояниях.

Используя выражение (4), известные значения высоты $U_0 \approx 4.2$ эВ и ширины туннельного барьера $a \approx 3.9$ нм, которая приблизительно равна длине непроводящего фрагмента МКП, можно оценить прозрачность звена МКП. Сделанная нами оценка для проницаемости эффективного туннельного барьера составила $\tau = 6 \cdot 10^{-3}$. Эффективное сопротивление одного звена МКП по формуле (3) составляет $R_0 \approx 4.3$ МОм, что говорит о том, что сопротивление между двумя зарядовыми центрами с очень хорошим запасом соответствует условию малости квантовых флуктуаций заряда для возможности одноэлектронного туннелирования [25].

Для вычисления собственной эффективной емкости зарядового центра на ионе меди воспользуемся выражением (1) и полученным хартри-фока-подобным энергетическим спектром зарядового центра (рис. 3б). Величина щели НОМО-ЛУМО для фрагмента МКП с зарядовым центром составляет $E_C = \epsilon_{\text{ЛУМО}} - \epsilon_{\text{НОМО}} \approx 4.9$ эВ позволяет оценить эффективную емкость зарядового центра и радиус локализации дополнительного электрона $C \approx 3.8 \cdot 10^{-20}$ Ф и $r_C = C/4\pi\epsilon_0 = e^2/4\pi\epsilon_0 E_C \approx 3.4$ Å соответственно. Указанная оценка радиуса локализации r_C сделана для проводящей сферы, имеющей электрическую емкость равную эффективной емкости зарядового центра. Для сравнения на рис. 2 на фрагмент МКП с металлическим зарядовым центром наложен круг радиуса 3.4 Å.

Полученное выражение кулоновской энергии более чем на два порядка превышает среднюю

энергию тепловых флуктуаций при комнатной температуре

$$E_C \approx 4.9 \text{ эВ} \gg k_B T \approx 26 \text{ мэВ} \quad (9)$$

и, следовательно, гарантированно удовлетворяет условию малости тепловых флуктуаций и обеспечивает существование кулоновских эффектов в таких системах при такой температуре [25].

Кроме того, на основе результатов полученных расчетов нами была проведена оценка величины туннельного матричного элемента, который фигурирует в выражении для золотого правила Ферми [22] для темпов туннелирования

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |T|^2 \delta(E_f - E_i - \Delta F), \quad (10)$$

где Γ — темп туннелирования, E_i и E_f — энергия начального и конечного состояния туннелирующего электрона, ΔF — изменение свободной энергии системы в процессе туннелирования. Определить Γ в этом выражении можно на основе оценки частоты движения электрона в области с характерным размером порядка радиуса локализации дополнительного электрона r_C на зарядовом центре и прозрачности туннельного барьера

$$\Gamma \sim \nu \tau. \quad (11)$$

Оценку на частоту обращения нерелятивистского электрона можно сделать на основе энергии размерного квантования в яме с размером $2r_C$:

$$\nu = \frac{\hbar}{4mr_C^2} \approx 2.5 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}. \quad (12)$$

Оценка на темп туннелирования при такой частоте обращения:

$$\Gamma \sim \nu \tau \approx 1.5 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}. \quad (13)$$

Окончательно величину туннельного матричного элемента можно определить как

$$|\tilde{T}| \sim \hbar \Gamma \approx 1 \text{ мэВ}. \quad (14)$$

Полученная оценка позволяет определить, насколько уширены валентные уровни в металлическом зарядовом центре из-за квантовых флуктуаций заряда. Можно заметить, что $|\tilde{T}| \ll k_B T$ при комнатной температуре, следовательно, основной вклад в уширение валентных энергетических уровней зарядового центра будут вносить тепловые флуктуации.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученное сопротивление одного звена МКП $R_0 = 4.3$ МОм позволяет определить сопротивление всей цепочки МКП. Для цепочки минимальной длины, соединяющей соседние нанoeлектроды i и j и состоящей из 15 звеньев, это со-

противление составляет $R_{ij} = 64.5$ МОм. Цепочка МКП, которая может замкнуть дальние электроды резервуарной сети и может содержать 80 и более звеньев, обладает сопротивлением $R_{ij} \geq 344$ МОм. Исходя из размера и межэлектродного сопротивления, измеренного в эксперименте с одноэлектронной резервуарной сетью, с опорой на теоретическое значение одного звена МКП был произведен расчет возможного числа каналов проводимости (количество проводящих цепочек). Количество каналов проводимости в рассматриваемой системе (см. рис. 1) с длиной 45 нм составило 4 штуки, а для 100 нм — 10 штук соответственно.

Наблюдаемость одноэлектронных эффектов в системе на основе координационного соединения, в котором в качестве органического лиганда выступает сложное соединение терпиридина, бензола, кислорода и бутана, а в качестве металлических центров — ионы меди, при комнатной температуре подтверждается экспериментально [20]. Проведенные нами в этой работе расчеты подтверждают эту возможность теоретически.

Таким образом, в данной работе с помощью метода теории функционала плотности были получены одночастичные спектры фрагментов соединения на основе терпиридина с двумя выделенными одноатомными зарядовыми центрами. Были исследованы свойства проводимости этого соединения: рассчитана прозрачность эффективного туннельного барьера, обусловленного непроводящим бутан-содержащим участком. Для одного звена МКП было определено электрическое сопротивление и на его основе сделана оценка сопротивления цепочек МКП разной длины. Для зарядового центра на основе атома меди было получено значение эффективной емкости и радиуса локализации дополнительного электрона на нем. Теоретически предсказана наблюдаемость одноэлектронных эффектов в системе на основе рассматриваемого соединения при комнатной температуре. Для многоэлектродной нанoeлектронной системы, замкнутой группой одномерных цепочек МКП, состоящих из исследуемых соединений-звеньев, были получены оценки количества проводящих цепочек разных длин.

Данное исследование выполнено при поддержке Междисциплинарной научно-образовательной школы Московского университета “Фотонные и квантовые технологии. Цифровая медицина”. В работе использовалось оборудование Учебно-методического центра литографии и микроскопии МГУ им. М.В. Ломоносова. Авторы благодарят д.х.н. профессора Белоглазкину Е.К. и д.ф.-м.н. Крупенина В.А. за консультации и полезное обсуждение этой работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Likharev K.K.* // Proc. IEEE. 1999. V. 87. No. 4. P. 606.
2. *Gubin S.P., Gulayev Y.V., Khomutov G.B. et al.* // Nanotechnology. 2002. V. 13. No. 2. P. 185.
3. *Shorokhov V.V., Presnov D.E., Amitonov S.V. et al.* // Nanoscale. 2017. V. 9. No. 2. P. 613.
4. *Bose S.K., Lawrence C.P., Liu Z. et al.* // Nature Nanotechnol. 2015. V. 10. No. 12. P. 1048.
5. *Chen T., Gelder J., Ven B. et al.* // Nature. 2020. V. 577. No. 7790. P. 341.
6. *Грибачев В.* // Комп. технол. 2006. № 61. P. 100.
7. *Cheetham A.K., Rao C.N.R., Feller R.K.* // Chem. Commun. 2006. No. 46. P. 4780.
8. *Beloglazkina E.K., Barskaya E.S., Majouga A.G. et al.* // Mendeleev Commun. 2015. V. 2. No. 25. P. 148.
9. *Allendorf M.D., Schwartzberg A., Stavila V. et al.* // Chem. Eur. J. 2011. V. 17. No. 41. P. 11372.
10. *Liang W., Shores M.P., Bockrath M. et al.* // Nature. 2002. V. 417. No. 6890. P. 725.
11. *Морозова Е.К., Лялина А.М., Санков И.В. и др.* // Инфокомм. и радиоэлектрон. технол. 2019. Т. 2. № 2. С. 204.
12. *Urtizberea A., Natividad E. Alonso P.J. et al.* // Adv. Funct. Mater. 2018. V. 28. No. 31. Art. No. 1801695.
13. *Zadrozny J.M., Gallagher A.T., Harris T.D. et al.* // J. Amer. Chem. Soc. 2017. V. 139. No. 20. P. 7089.
14. *Yamabayashi T., Atzori M., Tesi L. et al.* // J. Amer. Chem. Soc. 2018. V. 140. No. 38. Art. No. 12090.
15. *Degen C.L., Reinhard F., Cappellaro P.* // Rev. Mod. Phys. 2017. V. 89. No. 3. Art. No. 035002.
16. *Doty F.P., Bauer C.A., Skulan A.J. et al.* // Adv. Mater. 2009. V. 21. No. 1. P. 95.
17. *Wang Y., Liu X., Li X. et al.* // J. Amer. Chem. Soc. 2019. V. 141. No. 20. P. 8030.
18. *Fuller C.W., Padayatti P.S., Abderrahim H. et al.* // Proc. National Acad. Sci. USA. 2022. V. 119. No. 5. Art. No. e2112812119.
19. *Шорохов В.В., Солдатов Е.С., Губин С.П.* // Радиотехн. и электрон. 2011. Т. 56. № 3. С. 352.
20. *Pankratov S.A., Bozhev I.V., Shorokhov V.V. et al.* // Proc. ICMNE-2021 (Moscow, 2021). Art. No. O1-03-13.
21. *Landauer R.* // IBM J. Res. Dev. 1957. V. 1. No. 3. P. 223.
22. *Burstein E., Lundqvist S.* Tunneling phenomena in solids. N.Y.: Plenum Press, 1967. P. 427.
23. *Apra E., Bylaska E.J., Jong W.A. et al.* // J. Chem. Phys. 2020. V. 152. No. 18. Art. No. 184102.
24. *Politzer P., Abu-Awwad F.* // Theor. Chem. Acc. 1998. V. 99. No. 2. P. 83.
25. *Averin D.V., Likharev K.K.* // J. Low Temp. Phys. 1986. V. 62. No. 3. P. 345.

Calculation of the number of conduction channels in a single-electron reservoir network on metal-organic framework polymers

S. A. Pankratov^{a, b, *}, A. A. Parshintsev^{a, b, c}, D. E. Presnov^{a, b, d}, V. V. Shorokhov^{a, b}

^a*Lomonosov Moscow State University, Physics Faculty, Moscow, 119991 Russia*

^b*Lomonosov Moscow State University, Quantum Technology Centre, Moscow, 119991 Russia*

^c*Bernardo O'Higgins University, Santiago, 8370993 Chile*

^d*Lomonosov Moscow State University, Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Moscow, 119991 Russia*

^{*}*e-mail: pankratov.sa18@physics.msu.ru*

Single-particle energy spectra of one-dimensional metal-organic framework chain's fragments were obtained with the density functional theory method. An effective resistance of an organic part of the polymer, coulomb energy and effective capacitance of a charge center were calculated. The number of conductive channels in an experimentally studied reservoir network based on the observed polymer chains was estimated.