

硼氮原子取代掺杂对分子器件负微分电阻效应的影响*

范志强^{1)†} 谢芳²⁾

1) (长沙理工大学物理与电子科学学院, 长沙 410004)

2) (宜春学院物理科学与工程技术学院, 宜春 336000)

(2011年6月28日收到; 2011年8月19日收到修改稿)

利用基于非平衡格林函数和密度泛函理论相结合的第一性原理计算方法, 研究了硼氮原子取代掺杂对三并苯分子电子输运性质的影响. 计算结果表明, 三并苯分子器件的电流在特定偏压区间内随电压的增加而减小呈现出负微分电阻效应, 电流的峰谷之比高达 5.12. 用硼原子或者氮原子取代分子的中心原子后, 器件 0.8 V 以内的电流明显增加, 但是负微分电阻效应减弱, 相应的电流峰谷比分别降至 3.83 和 3.61. 分析认为, 输运系数在特定偏压下的移动是器件负微分电阻效应的主要成因. 核外电子数的差异导致硼氮原子掺杂取代可以使器件轨道及其透射峰分别向高能方向或者低能方向移动从而有效地调控了器件的低偏压下的电子传输能力和负微分电阻效应.

关键词: 非平衡格林函数, 密度泛函理论, 电子输运, 负微分电阻效应

PACS: 73.63.-b, 85.65.+h

1 引言

近年来, 微观操控技术和自组装技术的不断完善与发展实现了人类操控单个分子并将其组装成分子器件的梦想. 分子器件有望成为解决传统硅基半导体器件尺寸趋于极限的最有效途径之一, 其电子输运性质的研究逐渐成为一个研究热点. 随着研究的深入, 分子器件的各种奇特的物理性质, 例如, 单电子效应^[1]、开关效应^[2-4]、整流效应^[5-7]、负微分电阻效应^[8-10]、巨磁阻效应^[11,12]等引起了科学家们广泛的关注. 其中, 负微分电阻效应的研究最为引人注目, 因为它在放大器、逻辑门、信息存储和快速开关等很多领域都有广泛的应用前景.

负微分电阻效应是一种器件电流在特定电压区域随着电压的增大而减小的奇特现象. 该现象最早由 Esaki 在研究隧穿二极管的电学性能时发现^[13]. 随后, 科学家们在研究双量子阱^[14]、共振隧穿二极管^[15]、超晶格^[16,17]等物理体系的时候

也发现了该现象. 近年来, 科学家们发现很多分子器件同样可以观察到负微分电阻效应, 例如, 有机分子器件^[18,19]、C₆₀分子器件^[20,21]、碳纳米管分子器件^[22,23]、石墨烯分子器件^[24,25]等. 最近的研究结果表明, 负微分电阻效应并不是一个稳定的电子传输现象, 它可以伴随着分子器件外部环境或者内部电子结构的改变而发生变化, 从而扩大其应用潜力^[26-28]. 因此, 科学家们在研究负微分电阻效应成因的同时, 也在极力探寻调控该现象的有效方法.

大量的研究表明, 硼氮原子取代掺杂是调控分子器件电子输运性质非常有效的方法之一. Zhang 等人研究发现硼氮原子取代掺杂对 C₆₀ 分子器件的电子输运性产生很大的影响^[29]. 未掺杂的 C₆₀ 分子器件在特定偏压区间会出现负微分电阻效应, 然而硼氮原子取代掺杂都可以使该现象消失. 当双 C₆₀ 分子同时分别掺入硼原子和氮原子, 器件的电流 - 电压曲线会呈现出明显的整流现象^[30]. 郑等人在研究单层石墨纳米带的自旋极化

* 国家自然科学基金 (批准号: 11147188), 湖南处教育厅科研基金 (批准号: 11c0066) 和长沙理工大学重点学科建设项目资助的课题.

† E-mail: zhiqiangfan@yahoo.cn

输运时发现,当单个氮原子或者单个硼原子掺入中心散射区同一个位置会对两个自旋分量的电流产生完全相反的影响^[31].还有研究表明,硼原子取代掺杂的(8,0)碳纳米管对甲醛气体有很强的敏感性,其束缚能大大增加可以制作成检测甲醛的纳米传感器或者光电器件^[32].

既然硼氮原子取代掺杂可以对分子器件产生如此大影响,所以本文研究了硼氮原子取代掺杂三并苯分子器件的电子输运性质.研究结果表明硼氮原子不仅可以改变器件低偏压下的电流,同时也是调控三并苯分子器件的负微分电阻效应的一种有效手段.通过对透射系数,核外电子数和前线分子轨道的自洽投影哈密顿量(MPSH)的分析发现,透射谱在特定偏压下的移动是器件负微分电阻效应的成因,而核外电子数的差异导致硼氮原子取代可以使器件轨道及其透射峰分别向高能方向或者低能方向移动从而有效地调控了器件的低偏压下的电子传输能力和负微分电阻效应.

2 模型和方法

图1为我们模拟的三并苯分子与 3×3 的半无限长金(111)面电极所构成的双探针分子器件示意图.分子通过硫原子与金电极紧密相连形成稳定的构型,中心原子 R 为硼氮原子的取代掺杂的位置.

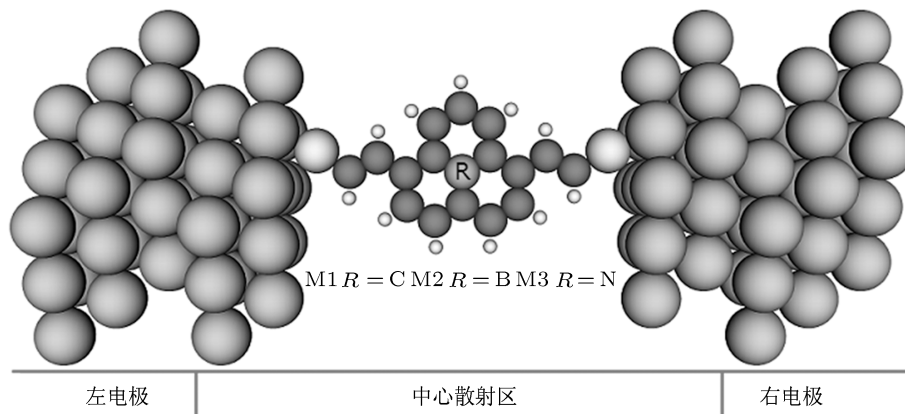


图1 三并苯分子与金电极构成的双探针分子器件结构示意图(M1, M2和M3分别为分子中心原子 R 未取代、由硼原子取代和由氮原子取代后的器件结构)

本文中器件几何结构的优化、电子结构和电流-电压特性的计算全部是利用基于非平衡格林函数和密度泛函理论相结合的第一性原理计算方法(ATK软件)^[34,35].为了得到合理的器件几何构型,我们首先对分子进行准Newton方法优化使原

M1, M2和M3分别对应分子未取代、由硼原子取代和由氮原子取代三种不同的器件构型.整个器件分为三个部分:左电极、右电极以及中心散射区,中心散射区包含了三并苯分子与左右金电极的各两层原子.引入部分原子的目的是为了屏蔽分子对电极的势扰动.中心散射区外部的Kohn-Sham势设定为左右电极的块体势,该势可以通过独立的计算得到并且可以严格地按照外部电压的变化发生相应的移动.因此,为中心散射区提供了一个自然的实空间边界条件.

器件的电流可由Landauer-Büttiker公式求得^[33]:

$$I(V_b) = \left(\frac{2e}{h}\right) \int_{\mu_L}^{\mu_R} (f_L - f_R) T(E, V_b) dE, \quad (1)$$

其中, μ_L 和 μ_R 分别为左右电极的化学势, V_b 为左右电极的电压差, f_L 和 f_R 分别为两个电极的电子费米分布函数, $T(E, V_b)$ 是在偏压为 V_b ,能量为 E 时的透射系数可以由下式求得:

$$T(E, V_b) = \text{Tr} [\Gamma_L(E) G^R(E) \Gamma_R(E) G^A(E)], \quad (2)$$

其中, $G^R(E)$ 和 $G^A(E)$ 分别为散射区的延迟和超前格林函数, $\Gamma_{L,R} = i(\sum_{L,R}^R(E) - \sum_{L,R}^A(E))$ 为展宽函数, $\sum_{L,R}^R(E)$ 和 $\sum_{L,R}^A(E)$ 为左右电极对散射区的自能.

子上的平均应力小于 0.05 eV/\AA .整个分子与硫原子的价电子轨道的基函数设定为DZP(双 $\zeta+$ 极化),金原子的价电子轨道的基函数则设定为SZP(单 $\zeta+$ 极化).为了平衡计算精度和计算时间,我们选取截断能为150 Ry交换关联泛函采用的是局域密度近

似(LDA), 输运方向(z 方向)上的 K 点取为 200, 与传输方向垂直的两个方向(x 和 y 方向)均取为 3.

3 计算结果与讨论

3.1 电流 - 电压特性

图 2 为器件 M1, M2 和 M3 在 [0V, 2V] 范围内的电流 - 电压特性曲线. 从图中我们可以清楚地看到硼原子和氮原子取代掺杂对器件电流 - 电压特性的影响主要表现在两个方面: 第一, 当分子中心的碳原子由硼原子和氮原子取代后, 低偏压下的电流会有不同程度的增加. 图上显示 0.8 V 以内电流值的次序为 $I_{M3} > I_{M2} > I_{M1}$, 这说明硼氮原子取代掺杂都可以增大器件在低偏压范围内的电子传输能力; 第二, 三并苯分子器件在 1.2 V 至 1.8 V 间的电流随着电压的增大而减小呈现出明显的负微分电阻效应, 其电流的峰谷比 $R_{M1} = I_{\text{峰}}/I_{\text{谷}}$ 高达 5.12. 但是, 硼氮原子取代分子中心的碳原子之后, 器件的负微分电阻效应会明显地减弱, 负微分电阻效应形成的电压范围变化为 1.4 V 至 1.8 V, 相应的峰谷比 R_{M2} 和 R_{M3} 也分别降为 3.83 和 3.61. 这说明氮原子取代掺杂对器件负微分电阻效应的削弱作用也最明显. 由前文可知, 负微分电阻效应在放大器、逻辑门、信息存储和快速开关等很多领域都有广泛的应用前景. 硼氮原子取代掺杂对三并苯分子器件负微分电阻效应的调制作用将增大该器件的应用性能.

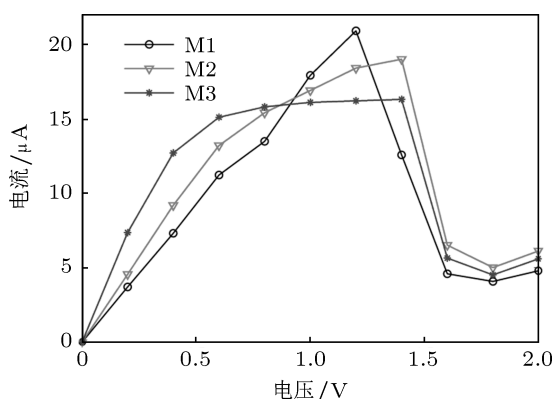


图 2 器件 M1, M2 和 M3 的电流 - 电压特性曲线

3.2 体系的透射谱和 MPSH 分析

为了解释硼氮原子取代掺杂对器件电流 - 电压特性的调制作用, 图 3 给出了器件 M1, M2 和 M3 的零偏压透射谱. 当分子与电极相互连接构成双探

针系统后, 分子轨道与电极轨道的耦合作用导致分子的电子结构发生变化, 在分子电子态扩展到电极的同时, 电极的电子态也会扩展到分子中, 从而使得分子的电子态与电极的电子态发生一定的杂化. 此时, 分子的电子态起到连通两边电极电子库的作用, 相当于电子传输的桥梁. 当左右电极存在电势差时, 具有特定能量的电子就会按照一定的透射概率从高能级电极通过分子传递到低能级电极, 形成电流. 从朗道公式中可知, 电流的大小直接取决于与电压相对应的能量区间内的透射系数总和. 而透射系数又取决于前线分子轨道的数目, 轨道的透射概率和轨道的能量排布位置等等. 当前线分子轨道的数目越多, 轨道的透射概率越大以及能量排布位置越靠近费米能级相应的电流也就越大, 反之就会越小. 这里, 我们把透射谱中低于费米能级的第一个隧穿峰定义为最高占据分子轨道 (HOMO) 隧穿峰, 而把高于费米能级的第一个隧穿峰定义为最低未占据分子轨道 (LUMO) 隧穿峰. 从图 3(a) 中, 我们可以看到器件 M1 的 HOMO 轨道和 LUMO 轨道的隧穿峰的透射概率都接近于 1, 但是 HOMO 轨道的隧穿峰很宽而 LUMO 轨道的隧穿峰相对狭窄, 这说明 HOMO 轨道的电子透射能力要高于 LUMO 轨道. 然而, HOMO 轨道与 LUMO 轨道分别距离费米能级 0.5 eV 和 0.25 eV, 平衡态下费米能级对应的透射概率不是很大. 只有当电压增大到一定值时, 这两个轨道才能参与电子传输.

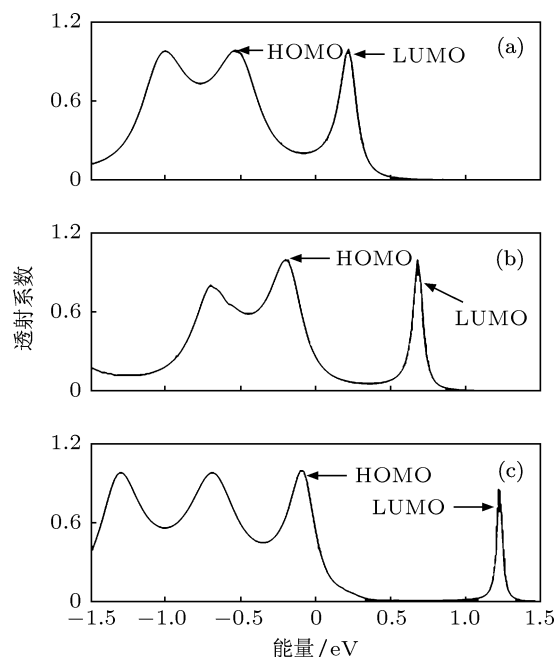
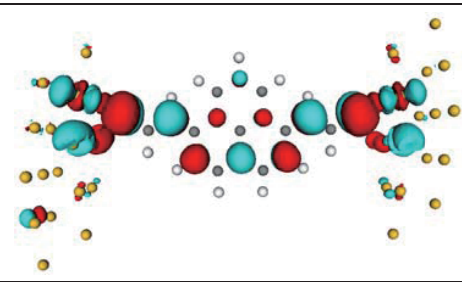
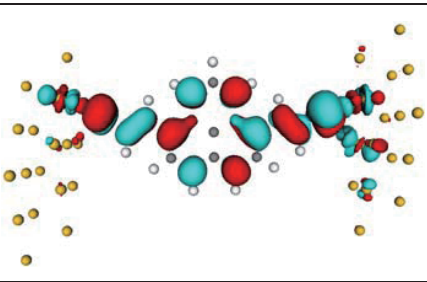
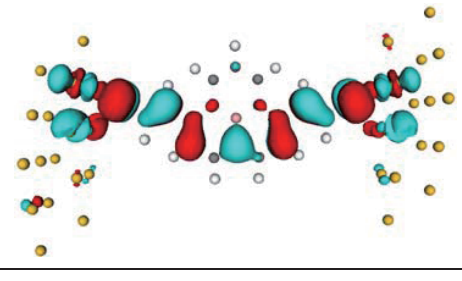
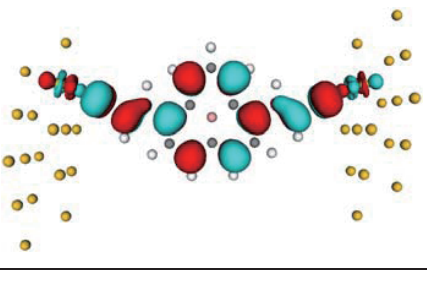
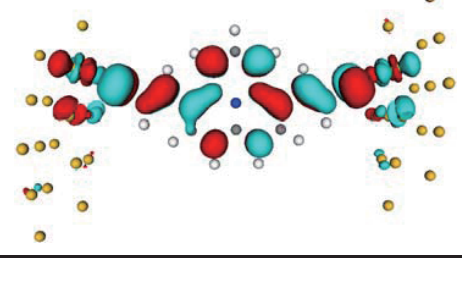
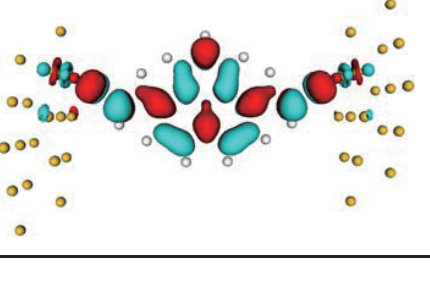


图 3 (a)–(c) 为器件 M1, M2 和 M3 零偏压下的透射谱

当分子由硼原子取代掺杂后, 图 3(b) 中透射谱整体向高能方向移动. 尽管器件 M2 的 HOMO 轨道与 LUMO 轨道对应的透射峰相对于器件 M1 的透射峰变得狭窄, 但是对应的透射概率仍然接近于 1. 同时, 硼原子取代掺杂对透射谱的移动作用使得 HOMO 轨道非常接近费米能级. 由 Landauer-Büttiker 公式可知, 同偏压下偏压窗内的透射系数总和越大其积分所得的电流值越大. 由于器件 M2 的 HOMO 轨道相对于器件 M1 的 HOMO 轨道更加接近费米能级, 也就会越早地参与电子传输, 因

此图 2 中器件 M2 的低偏压下的电流大于 M1 的电流. 然而, 当分子由氮原子取代掺杂后, 图 3(c) 中透射谱整体向低能方向移动. 器件 M1 中的 LUMO 轨道向左移动越过费米能级成为器件 M3 的 HOMO 轨道且几乎与费米能级相重合, 原 LUMO+1 轨道成为 M3 的 LUMO 轨道. 根据前文的解释, 由于器件 M3 的 HOMO 轨道最接近费米能级因此也就最早能进入偏压窗口参与电子传输. 因此图 2 中器件 M3 在低偏压下的电流大于另外两种结构的电流.

表 1 器件 M1, M2 和 M3 零偏压下 HOMO 与 LUMO 轨道的 MPSH 空间分布

分子轨道	HOMO	LUMO
M1		
M2		
M3		

由透射谱的分析可知, 硼氮原子取代掺杂对器件轨道及其透射峰的影响是不相同的. 该现象主要是由硼原子和氮原子的核外电子数目的差异所引起. 硼碳氮三种元素在元素周期表中依次排列, 核外电子数依次增大. 以碳原子为标准, 硼原子掺杂取代后体系的总电子数减少一个, 而氮原子掺杂取代使得体系的总电子数增加一个. 硼氮

原子取代掺杂对分子轨道和透射谱的作用已经在张等人研究工作中得到了很好的论证^[29]. 该小组的研究结果表明硼氮原子的取代掺杂作用可以导致分子器件的 HOMO 与 LUMO 轨道特性发生变化, 从而使透射峰得位置发生改变. 为了更好地验证硼氮原子取代掺杂对透射谱和分子轨道的作用, 我们在表 1 中给出了器件 M1, M2 和 M3 平衡

态下的 HOMO 与 LUMO 轨道的分子投影自洽投影哈密顿量 (MPSH). MPSH 是系统的自洽哈密顿量在分子上的投影, 与自由分子的哈密顿量相比, 它包含了左右电极对分子轨道的影响. 从 HOMO 与 LUMO 的空间分布, 我们能够很好地了解分子与电极的耦合程度, 各原子对隧穿峰的贡献等. 从图中我们可以看到, 器件 M1 的 HOMO 轨道不仅在整体上呈现出良好的扩展性, 而且与左右两个电极的耦合作用也较 LUMO 轨道更为明显. 因此, 图 3(a) 中 HOMO 轨道的隧穿峰比 LUMO 轨道的隧穿峰宽. 当硼原子取代中心碳原子后, 引入的空穴使完全占据的价带变为部分占据, 分子轨道的特性发生变化^[25]. 器件 M2 的 HOMO 轨道和 LUMO 轨道与器件 M1 相比都呈现出不同程度的局域, 所以对应的透射峰相对于器件 M1 的透射峰变得狭窄. 然而, 器件 M3 的 HOMO 轨道与器件 M1 与 M2 的 HOMO 轨道相比, 空间分布结构差别很大, 但是与 M1 与 M2 的 LUMO 轨道十分接近. 这是由于氮原子取代中心碳原子后, 引入的电子使原来全空的导带变为部分占据, 分子轨道相对于费米能级的位置发生变化^[31]. 原来的 LUMO 轨道越过费米能级成为器件 M3 的 HOMO 轨道. 上述的分析表明硼氮原子取代掺杂可以移动三并苯分子的轨道位置从而有效地调控器件的电子传输性质.

硼氮原子掺杂对三并苯分子器件电子输运性质的影响还表现在对负微分电阻效应的调控. 经过硼氮原子取代掺杂后, 器件负微分电阻效应的峰谷比 R_{M2} 和 R_{M3} 分别降为 3.83 和 3.61. 负微分电阻效应的形成机理以及硼氮原子取代掺杂的调控机理可以通过图 4 得到. 由图 4(a) 可知, 在 1.2 V 电压之前, 器件 M1 的 HOMO 轨道与 LUMO 轨道对应的隧穿峰随着电压的增大并没有发生明显的移动. 由于平衡态下器件 M1 的 HOMO 轨道与 LUMO 轨道距离费米能级分别为 0.5 eV 和 0.25 eV, 所以当电压增大至 1.2 V 时, LUMO 轨道对应的隧穿峰才完全进入偏压窗参与电子传输. 尽管此时 HOMO 轨道仍然在偏压窗之外, 但是隧穿峰的尾部已经进入偏压窗参与电子传输. 当电压超过 1.2 V, 隧穿峰随着电压的增大迅速低能方向移动, 使得偏压窗内包含的输运系数总和减小, 因此对应的电流随之减小形成了负微分电阻效应. 图 4(b) 和 (c) 中, 在电压 1.4 V 后, 器件 M2 和 M3 的隧穿峰同样是随着偏压的增大迅速向低能方向移动, 导致电流减小形

成负微分电阻效应.

由于硼原子掺杂取代使器件轨道向高能方向移动, 从图 3(b) 中我们可以看到 HOMO 轨道与 LUMO 轨道之间的透射谷的系数要小于器件 M1 的透射系数. 当电压增大到 1.4 V 时, LUMO 轨道的隧穿峰完全处于偏压窗之外, 偏压窗内只包

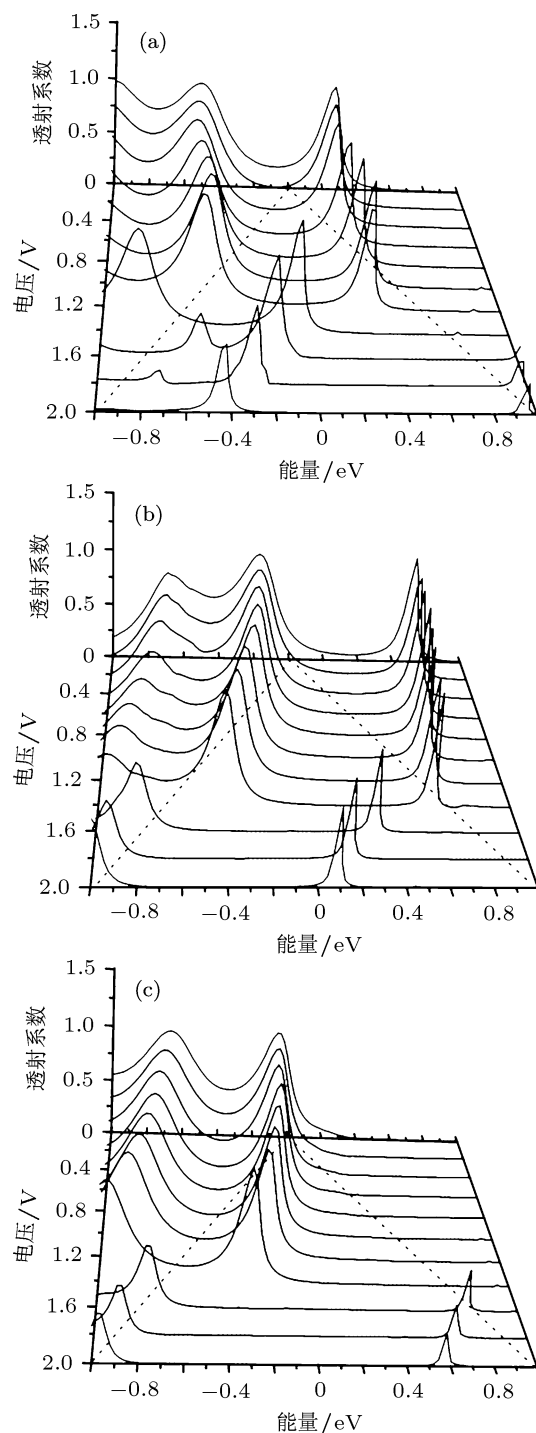


图 4 (a)–(c) 为器件 M1, M2 和 M3 在偏压 [0V, 2V] 范围内的透射谱, 电压间隔为 0.2 V, 虚线为偏压窗

含了 HOMO 轨道隧穿峰的一部分, 见图 4(b). 因此, 器件 M2 在 1.4 的峰值电流要小于器件 M1 在 1.2 V 的峰值电流. 当氮原子取代中心碳原子后, 引入的电子使原来全空的导带变为部分占据, 分子轨道重新排列使 HOMO 轨道几乎与费米能级重合, 导致电流随着偏压的增大迅速增加. 因此, M3 的电流在低偏压范围内是三种器件中最大的. 然而, 当电压增大到 0.8 V, HOMO 轨道隧穿峰完全进入偏压窗. 由于该轨道与 LUMO 轨道和 HOMO-1 轨道距离都很远, 且附近的透射系数非常低, 所以电流在 0.8 V 后增加的非常缓慢. 当电压增大到 1.4 V 时, 偏压窗内仍然只包含 HOMO 轨道对应的隧穿峰, 所以对应的峰值电流小于器件 M2 在 1.4 V 的峰值电流. 由于器件 M1, M2 和 M3 的谷值电流都出现在 1.8 V 且数值相差不大, 所以造成电流峰谷比 $R_{M1} > R_{M2} > R_{M3}$.

4 结论

本文研究了三并苯分子通过硫原子与金电极构成双探针分子器件的电子输运性质, 重点研究了硼氮原子取代掺杂对器件电子输运性质的影响. 研究表明硼原子或者氮原子取代分子的中心原子可以不同程度地增加器件低偏压下的电子传输能力. 与此同时, 研究结果还表明硼原子或者氮原子掺杂取代作用同样可以有效地调控三并苯分子器件的负微分电阻效应. 通过对透射谱、核外电子数和分子投影自洽投影哈密顿量的分析发现, 透射谱在特定偏压下的移动是器件负微分电阻效应的成因, 而核外电子数的差异导致硼氮原子掺杂取代可以使器件轨道及其透射峰分别向高能方向或者低能方向移动从而有效地调控了器件的低偏压下的电子传输能力和负微分电阻效应.

- [1] Andres R P, Bein T, M Dorogi, Feng S, Henderson J I, Kubiak C P Mahoney W, Osifchin R G, Reifengerger R 1996 *Science* **272** 1323
- [2] Zhao P, Fang C F, Xia C J, Wang Y M, Liu D S, Xie S J 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 013113
- [3] Fu Q, Yang J L, Luo Y 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 182103
- [4] Fan Z Q, Zhang Z H, Qiu M, Tang G P 2011 *Phys. Lett. A* **375** 3314
- [5] Zhao J, Zeng C G, Cheng X, Wang K D, Wang G W, Yang J L, Hou J G, Zhu Q S 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 045502
- [6] Pan J B, Zhang Z H, Deng X Q, Qiu M, Guo C 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 203104
- [7] Zeng J, Chen K Q, He J, Fan Z Q, Zhang X J 2011 *J. Appl. Phys.* **109** 124502
- [8] Dai Z X, Zheng X H, Shi X Q, Zeng Z 2005 *Phys. Rev. B* **72** 205408
- [9] Geng H, Hu Y B, Shuai Z, Xia K, Gao H J, Chen K Q 2007 *J. Phys. Chem. C* **111** 19098
- [10] Ren H, Li Q X, Luo Y, Yang J L 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 173110
- [11] Ozaki T, Nishio K, Weng H, Kino H 2010 *Phys. Rev. B* **81** 075422
- [12] Zeng M G, Shen L, Yang M, Zhang C, Feng Y P 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 053101
- [13] Esaki L 1958 *Phys. Rev.* **109** 603
- [14] Chang L L, Esaki L, Tsu R 1974 *Appl. Phys. Lett.* **24** 593
- [15] Sollner T C L G, Goodhue W D, Tannenwald P E, Parker C D, Peck D D 1983 *Appl. Phys. Lett.* **43** 588
- [16] Tang Z K, Wang X R 1996 *Appl. Phys. Lett.* **68** 3449
- [17] Wang X R, Niu Q 1999 *Phys. Rev. B* **59** R12755
- [18] Chen J, Reed M A, Rawlett A M, Tour J M 1999 *Science* **286** 1550
- [19] Pati R, McClain M, Bandyopadhyay A 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 246801
- [20] Zeng C G, Wang H Q, Wang B, Yang J L, Hou J G 2002 *Appl. Phys. Lett.* **77** 3595
- [21] Lin Y M, Jenkins K A, Valdes-Garcia A, Small J P, Farmer D B, Avouris P 2009 *Nano Lett.* **9** 422
- [22] Farajian A A, Esfarjani K, Kawazoe Y 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 5084
- [23] Kaun C C, Larade B, Mehrez H, Taylor J, Guo H 2002 *Phys. Rev. B* **65** 205416
- [24] Masum H K M, Zahid F, Lake R K 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 192112
- [25] Yanyushkina N Y, Belonenko M B, Lebedev N G 2011 *Phys. Scr.* **83** 015603
- [26] Ren Y, Chen K Q, Wan Q, Pan A L, Hu W P 2010 *Phys. Lett. A* **374** 3857
- [27] Zhang G L, Li D, Shang Y, Zhang H, Sun M, Liu B, Li Z S 2011 *J. Phys. Chem. C* **115** 5257
- [28] Kim H, Jang S S, Kiehl R A, Goddard W A 2011 *J. Phys. Chem. C* **115** 3722
- [29] Zhang X J, Long M Q, Chen K Q, Shuai Z, Wan Q, Zou B S, Zhang Y 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 073503
- [30] Zheng X H, Wang X L, Dai Z X, Zeng Z 2011 *J. Chem. Phys.* **134** 044708
- [31] Zheng X H, Dai Z X, Wang X L, Zeng Z 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** S259 (in Chinese) [郑小宏, 戴振翔, 王贤龙, 曾雉 2009 物理学报 **58** S259]
- [32] Zhang L J, Hu H F, Wang Z Y, Wei Y, Jia J F 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 0527 (in Chinese) [张丽娟, 胡慧芳, 王志勇, 魏燕, 贾金凤 2010 物理学报 **59** 0527]
- [33] Büttiker M, Imry Y, Landauer R, Pinhas S 1985 *Phys. Rev. B* **31** 6207
- [34] Taylor J, Guo H, Wang J 2001 *Phys. Rev. B* **63** 245407
- [35] Brandbyge M, Mozos J L, Ordejon P, Taylor J, Stokbro K 2002 *Phys. Rev. B* **65** 165401

Effect of B and N doping on the negative differential resistance in molecular device*

Fan Zhi-Qiang^{1)†} Xie Fang²⁾

1) (*School of Physics and Electronic Science, Changsha University of Science and Technology, Changsha 410004, China*)

2) (*School of Physics Science and Engineering Technology, Yichun University, Yichun 336000, China*)

(Received 28 June 2011; revised manuscript received 19 August 2011)

Abstract

By using nonequilibrium Green's functions in combination with the density-functional theory, we investigate the effects of B and N doping on the transport properties in phenalenyl molecular device. The calculated results show that negative differential resistance behavior can be observed in phenalenyl molecular device where the device current can decrease with the base voltage increasing particularly in a bias voltage region, and the peak-to-valley current ratio reaches up to 5.12. The device current can be increased before 0.8 V when the molecular center atom is replaced by B or N atom. But, the negative differential resistance behavior can be weakened and the peak-to-valley current ratio can decrease to 3.83 and 3.61, respectively. The doping effects of B and N, which are induced by the difference in extranuclear electron number between them, can make the orbitals and corresponding transmission peaks move toward high or low energy to modulate the electronic transport ability and the negative differential resistance behavior of the device.

Keywords: nonequilibrium Green's functions, density-functional theory, electronic transport, negative differential resistance behavior

PACS: 73.63.-b, 85.65.+h

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11147188), the Scientific Research Fund of Hunan Provincial Education Department of China (Grant No. 11c0066), and the Key Discipline in Changsha University of Science and Technology.

† E-mail: zhiqiangfan@yahoo.cn