

Au-Si-Au 结点电子输运性质的第一性原理计算*

柳福提¹⁾²⁾ 程艳¹⁾ 羊富彬¹⁾ 程晓洪²⁾ 陈向荣^{1)†}

1) (四川大学物理科学与技术学院, 成都 610064)

2) (宜宾学院物理与电子工程学院, 宜宾 644000)

(2012年10月20日收到; 2013年1月16日收到修改稿)

采用密度泛函理论和非平衡格林函数相结合的方法对 Au(100)-Si-Au(100) 系统左侧对顶位、右侧对空位的纳米结点的电子输运性质进行了理论模拟计算, 结果得到纳米结点的电导随电极距离 (d_z) 增大而减小. 在 $d_z = 9.72 \text{ \AA}$ 时, 结点的结合能最低, 结构最稳定, 此时电导为 $1.227G_0$ ($G_0 = 2e^2/h$), 其电子输运通道主要是 Si 原子的 p_x , p_y 和 p_z 轨道电子形成的最高占居轨道共振峰; 在外偏压下, 电流 - 电压曲线表现出线性特征; 随着外加正负电压的增大, 电导略有减小, 且表现出不对称性的变化.

关键词: 硅原子, 电子输运, 密度泛函理论, 非平衡格林函数

PACS: 74.55.+v, 05.60.Gg, 81.16.Ta

DOI: 10.7498/aps.62.107401

1 引言

随着分子自组织生长技术、扫描隧道显微镜操纵与测量技术的发展, 人们可以制备尺寸越来越小的各种功能电子器件, 而原子、分子级器件很有可能替代半导体器件成为未来电子产品的逻辑器件与传感器. 所以, 目前原子尺度导体的输运性质引起了人们极大的关注^[1,2]. 从 20 世纪 90 年代中期以来, 人们在实验上利用力学可控劈裂结法、扫描探针显微镜、纳米电极技术等, 对大量分子导体的输运特性进行研究, 发现了电流 - 电压高度非线性、负微分电阻、分子电流开关、整流效应等非常有趣的现象^[3-9], 表明分子导体与传统导体中的电子传输机理有本质的不同. 但是, 在实验上很难准确测量原子尺度结点的几何构型以及分子与电极耦合的具体情况, 重现某个实验结果, 因此从理论上模拟实验情形, 理解分子器件几何构型、电子结构与电子输运性质之间的关系具有重要的意义. 所以, 分析量子器件的工作原理, 预测现象, 解释实验结果, 弄清电子传输机制就成为理论工

作者的重要任务. 许多研究者已经对量子点如 H_2 , O_2 , CO , S_2 , $TaSi_3$, $C_{20}F_{20}$, $C_{20}H_{20}$, $(SiC)_n$, $(Al-N)_n$ 等和金属电极 Au, Ag, Pt, Al 等相连形成的纳米级结点^[10-18]进行了广泛研究, 为理解分子导体的电子传输机理, 促进分子器件的研究与应用提供了非常重要的参考依据.

鉴于硅团簇在未来纳米器件中具有重要应用前景, 研究者们对其电子输运特性产生了很大的兴趣. 如 Roland 等^[19]利用非平衡格林函数第一性原理对 Si_n ($n = 1-10, 13, 20$) 团簇的电子输运进行了计算, 发现硅小团簇具有较大的电导. Dai 等^[20]对 Si_4 与金属 Al 电极相连接时的电子输运特性进行了比较详细的研究, 讨论了结点的几何结构对输运性质的影响, 并发现存在负微分电阻现象. Mozos 等^[21]对 Si 原子链的电子输运进行了研究, 发现 Si 链具有类似金属的导电性, 且电导随着 Si 链原子数的变化表现出量子化特征. 单个 Si 原子作为硅团簇的基本构成单元, 结构最简单, 在理论上比较容易处理. 因此, 为了从理论上模拟扫描隧道显微镜的电子隧穿原理, 理解硅量子点的电子输运机理, 本文以单个 Si 原子作为研究对象, 连接在两个半无

* 国家自然科学基金(批准号: 11174214, 11204192)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: x.r.chen@qq.com

限长金电极 (100) 面之间, 构建了两电极系统模型, 采用密度泛函理论和非平衡格林函数相结合的方法对其电子输运特性进行模拟计算.

2 理论和方法

标准的分子电子器件的模型是把分子夹在两金属电极之间构成了“三明治”结构, 装置一般分为三部分: 左电极 (L)、中心散射区 (EM) 和右电极 (R). 左、右电极可以用半无限的理想晶体结构来进行近似处理, 而散射区是包含有若干电极层的扩展分子, 引入电极层的目的是屏蔽中间分子对左、右电极的电子结构产生影响. 在本工作中, 我们采用密度泛函理论 (DFT)^[22] 与非平衡格林函数 (NEGF)^[23] 相结合的方法计算两极系统的电子结构和输运性质. 在 SIESTA 程序^[24] 的基础上, 以 DFT 获得单粒子 Kohn-Sham^[22] 哈密顿量, 结合 NEGF 方法, 使用第一性原理计算程序 SMEAGOL^[25], 完全自洽地计算连接在两个半无限长 Au 电极之间所构成的 Au-Si-Au 纳米结点的电子性质.

处理无限维非周期性开放系统的哈密顿问题, 可以根据体系的推迟格林函数 G^R 的方程 (1) 求解

$$[\varepsilon^+ \mathbf{S} - \mathbf{H}] G^R(E) = \mathbf{I}, \quad (1)$$

这里 \mathbf{H} 是哈密顿矩阵, \mathbf{S} 是交叠矩阵, \mathbf{I} 是一个无限维单位矩阵, $\varepsilon^+ = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} E + i\delta$, E 为能量. 用哈密顿矩阵和重叠积分矩阵将上式写为分块对角化的形式为

$$\begin{pmatrix} \varepsilon^+ \mathbf{S}_L - \mathbf{H}_L & \varepsilon^+ \mathbf{S}_{LM} - \mathbf{H}_{LM} & 0 \\ \varepsilon^+ \mathbf{S}_{ML} - \mathbf{H}_{ML} & \varepsilon^+ \mathbf{S}_M - \mathbf{H}_M & \varepsilon^+ \mathbf{S}_{MR} - \mathbf{H}_{MR} \\ 0 & \varepsilon^+ \mathbf{S}_{RM} - \mathbf{H}_{RM} & \varepsilon^+ \mathbf{S}_R - \mathbf{H}_R \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} G_L & G_{LM} & G_{LR} \\ G_{ML} & G_M & G_{MR} \\ G_{RL} & G_{RM} & G_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{I}_M & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

在 (2) 式中, 把 G 分为左电极 G_L , 右电极 G_R , 扩展分子 G_M , 电极与扩展分子相互之间的 G_{LM} 和 G_{RM} , 电极相互之间的 G_{LR} 等分块格林函数来描述. 左右电极、扩展分子、电极与扩展分子之间的耦合哈密顿矩阵分别为 \mathbf{H}_L , \mathbf{H}_R , \mathbf{H}_M , \mathbf{H}_{LM} 和 \mathbf{H}_{RM} , 其中 \mathbf{H}_M 为 $M \times M$ 矩阵, \mathbf{I}_M 为 $M \times M$ 的单位矩阵. 电

极的有限矩阵块对角化形式表示为

$$\mathbf{H}_L = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & H_{-1} & H_0 & H_1 & 0 \\ \cdots & 0 & H_{-1} & H_0 & H_1 \\ \cdots & \cdots & 0 & H_{-1} & H_0 \end{pmatrix},$$

\mathbf{H}_R 和 \mathbf{S} 也有相似的表示形式. 电极和扩展分子之间相互作用的矩阵是一个无限维列向量, 并且除了电极最外主层与扩展分子之间有相互作用外, 其余

位置的矩阵元都为零, 即 $\mathbf{H}_{LM} = \begin{pmatrix} \vdots \\ 0 \\ \mathbf{H}_{LM} \end{pmatrix}$. 中心散

射区的格林函数 G_M^R 可以通过 (2) 式右边单位矩阵中间一系列的方程组得到

$$G_M^R(E) = \left[\varepsilon^+ \mathbf{S}_M - \mathbf{H}_M - \sum_L^R(E) - \sum_R^R(E) \right]^{-1}, \quad (3)$$

式中,

$$\sum_L^R(E) = (\varepsilon^+ \mathbf{S}_{ML} - \mathbf{H}_{ML}) G_L^{OR}(E) (\varepsilon^+ \mathbf{S}_{LM} - \mathbf{H}_{LM})$$

为左电极的推迟自能,

$$\sum_R^R(E) = (\varepsilon^+ \mathbf{S}_{MR} - \mathbf{H}_{MR}) G_R^{OR}(E) (\varepsilon^+ \mathbf{S}_{RM} - \mathbf{H}_{RM})$$

为右电极的推迟自能, G_L^{OR} 和 G_R^{OR} 为推迟表面格林函数^[25], 且 $G_L^{OR} = [\varepsilon^+ \mathbf{S}_L - \mathbf{H}_L]^{-1}$, $G_R^{OR} = [\varepsilon^+ \mathbf{S}_R - \mathbf{H}_R]^{-1}$. G_M^R 包含了平衡态下扩展分子与电极相连接的所有电子结构信息, 由它可以通过 Fisher-Lee's 公式^[26] 得到体系的零偏压电导为

$$G = \frac{2e^2}{h} \text{Tr} \left[\Gamma_L G_M^{R+} \Gamma_R G_M^R \right], \quad (4)$$

其中

$$\Gamma_\alpha(E) = i \left[\sum_\alpha^R(E) - \sum_\alpha^R(E)^+ \right].$$

当施加外偏压后, 扩展分子与平衡态时的电荷分布情况是不一样的. 考虑到电极具有局域电中性, 外偏压的影响只是使电极的哈密顿量发生移动, 即

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_L + \mathbf{S}_L \frac{eV}{2} & \mathbf{H}_{LM} + \mathbf{S}_{LM} \frac{eV}{2} & 0 \\ \mathbf{H}_{ML} + \mathbf{S}_{ML} \frac{eV}{2} & \mathbf{H}_M & \mathbf{H}_{MR} - \mathbf{S}_{MR} \frac{eV}{2} \\ 0 & \mathbf{H}_{RM} - \mathbf{S}_{RM} \frac{eV}{2} & \mathbf{H}_R - \mathbf{S}_R \frac{eV}{2} \end{pmatrix}, \quad (5)$$

扩展分子的哈密顿矩阵 $\mathbf{H}_M = \mathbf{H}_M[\rho]$ 依赖于密度矩阵, 而密度矩阵又可以由 $\rho = \frac{1}{2\pi i} \int dE G_M^<(E)$ 计算得到. 因此, 通过一个自洽的过程就可以找出合适的密度矩阵. 在平衡态时, $G_M^<(E) = -2i \text{Im} [G_M^R(E)] f(E - \mu)$, 在非平衡态时, $G_M^<(E) = iG_M^R(E) [\Gamma_L f(E - \mu_L) + \Gamma_R f(E - \mu_R)] G_M^R(E)$, 其中, $\mu_{L/R} = \mu \pm \frac{eV}{2}$, $f(E \pm \mu)$ 为给定温度下体系的费米分布函数, $\Gamma_{L/R} = \Gamma_{L/R} \left(E \mp \frac{eV}{2} \right)$. 总的电流 I 可以通过对偏压窗内电导的积分得到:

$$I = \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\Gamma_L G_M^{R+} \Gamma_R G_M^R \right] \times [f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)]. \quad (6)$$

电子密度为

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dE G_M^<(E) \\ &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dE G_M^R(E) f(E - \mu) \right] \\ &\quad + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE G_M^R(E) [\Gamma_L f(E - \mu_L) \\ &\quad + \Gamma_R f(E - \mu_R)] G_M^{R+}(E), \end{aligned} \quad (7)$$

详细理论方法可以参考 SMEAGOL 程序 [25] 的具体算法.

3 结果与讨论

为了更好地模拟扫描隧道显微镜的实际情况, 构建模型中心散射区时, 在原子与电极的耦合处增加了金字塔形的耦合结构: 在左侧, Si 原子与针尖的 Au 原子顶位相互作用; 在右侧, Si 原子与 Au 原子层的空位相互作用. 同时, 为充分屏蔽 Si 原子对两电极电子结构的影响, 模型中采用结点与左边 7 层、右边 6 层 Au 电极原子相互作用的结构, 如图 1 所示.

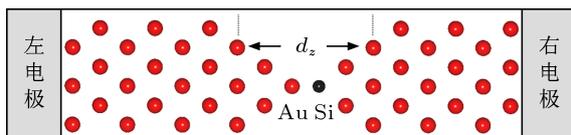


图 1 Au-Si-Au 结点计算模型结构

在结构的几何优化中, 采用局域密度 (LDA) 近似方法, 交换关联泛函是 Perdew-Zunger [27] 所提出的参数化泛函. 为了平衡计算精度与速度, 电极 Au

原子轨道基组采用单 zeta 基组, Si 原子是双 zeta 基组. 采用的赝势为 Troullier-Martins 势 [28], 产生赝势的 Au 原子的电子轨道组态为 $5d^{10}6s^1$, Si 原子的为 $3s^23p^2$. 截断能取 200 Ry, 在实空间积分时, 网格划分为 $2 \times 2 \times 100$, 周期性边界条件应用于 3×3 基平面, 在垂直于输运方向的二维布里渊区内取 4 个不可约点. 电子输运自洽计算中的参数与以上相同, 格林函数积分时的能量点分别为 50 个实点和 50 个复点.

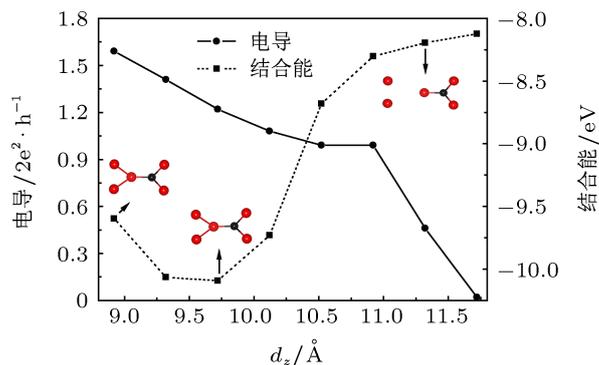


图 2 纳米结点电导 (用圆圈表示, 对应的纵坐标轴为左边轴) 和结合能 (用方块表示, 对应的纵坐标轴为右边轴) 随电极之间距离的变化关系

在 Au-Si-Au 纳米结点两电极系统内, 两电极均为理想 Au(100) 晶体结构, 参数使用实验值. 考虑把 Si 原子放入两电极之间, 由于 Si-Au 原子之间的相互作用, 结点的几何结构要发生变化, 所以我们固定两电极的原子 (两电极之间的距离为 d_z , 如图 1 所示), 让两金字塔底间的所有原子发生弛豫, 运用 SIESTA 程序对其进行几何结构的优化. 优化之后再计算零偏压下的电导, 所得结果如图 2 所示. 当 $d_z = 8.52 \text{ \AA}$ 时, 电导为 $1.74 G_0$ ($G_0 = 2e^2/h$); 随着距离的增大, 电导逐渐减小, 当 $d_z = 10.92 \text{ \AA}$ 时, 电导为 $0.99 G_0$, 距离继续增大时, 电导迅速减小; 当 $d_z = 11.72 \text{ \AA}$ 时, 电导为 $0.02 G_0$, 此时意味着分子结点可能已经断裂. 在 $d_z < 10.92 \text{ \AA}$ 时, Si 原子与电极之间距离较近, 电子云发生重叠, 耦合作用较强, 有利于电子传输. 而当距离较大时, Si 原子与电极的耦合作用较弱, 电子透射几率很小, 电导很小. 电导随距离的变化也可以从透射谱来解释, 不同 d_z 下单个 Si 原子的透射谱如图 3 所示. 从图中容易看出, 结点在不同 d_z 下的输运系数曲线在费米面附近比较平坦, 随着距离的增大, 结点的耦合作用减弱, 输运系数也发生明显的变化, 从各条曲线在费米面 (本文中的费米能都已被设为能量零点) 上的取值

可以看出, 输运系数随着距离的增大而减小, 与图 2 电导随距离的变化是一致的.

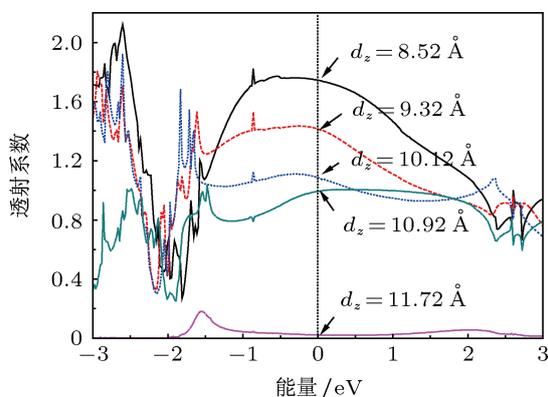


图 3 纳米结点在不同距离下的透射谱

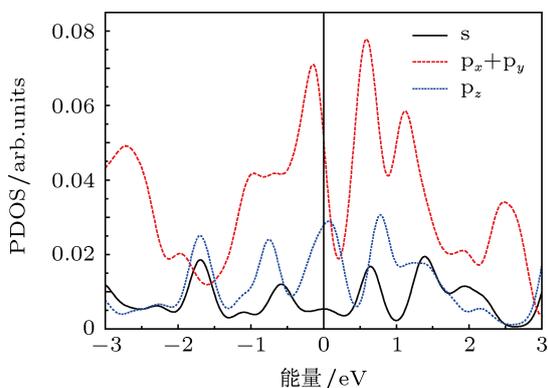


图 4 纳米结点平衡位置时的投影态密度

在计算不同距离下结点电导的同时, 我们计算了中心散射区的结合能. 结合能的定义为: $\Delta E = E(\text{Au 电极} + \text{Si}) - E(\text{Si}) - E(\text{Au 电极})$, 其中 $E(\text{Au 电极} + \text{Si})$ 是散射区 Si 原子与 Au 原子的总能量, $E(\text{Si})$ 是孤立 Si 原子的能量, $E(\text{Au 电极})$ 为孤立 Au 电极的能量. 计算结果如图 3 所示. 从图中可以看出, 在两电极距离 d_z 从 8.52 Å 到 11.72 Å 的范围内, 结点结合能有局域极小值. 当 $d_z = 9.72$ Å 时, 结合能最低, 结构最稳定, 我们称这个位置为平衡位置. 此时, 构型中对顶位和对空位相应的 Si—Au 键长分别为 2.389 Å 和 2.025 Å, 与文献^[29]的结果比较接近. 平衡位置时结点具有较大的电导, 为 $1.227G_0$, 在此位置, Si 原子与金字塔构型 Au 电极耦合, 不是直接与 Au 电极层原子相互作用. 所以, 电导值比文

献 [19] 的结果 $2.04G_0$ 偏小是合理的. 电子传输通道可以进一步从投影电子态密度 (PDOS) 来进行分析, 如图 4 所示. 对电子运输起主要作用的是 Si 原子的 p_x , p_y 和 p_z 轨道电子, 并且 p_x , p_y 的贡献几乎完全一样, 它们共同产生最高占据轨道 (HOMO) 共振峰, 所以电导较大, 而 s 局域轨道电子贡献较小. 另外, 为了证明电子的传输通道主要是通过硅原子与电极耦合形成的, 我们保持左右电极距离不变, 去掉 Si 原子, 计算了电子通过 Au 电极直接隧穿的透射谱, 并与通过 Si 原子传输电子的透射谱进行对比, 结果如图 5 所示. 容易看出, 电子通过 Au 电极直接隧穿的概率是很小的, 相对于通过 Si 原子的透射系数可以忽略, 说明在 Au-Si-Au 纳米结点内的电子输运主要还是通过 Si 原子 p 电子轨道来实现的.

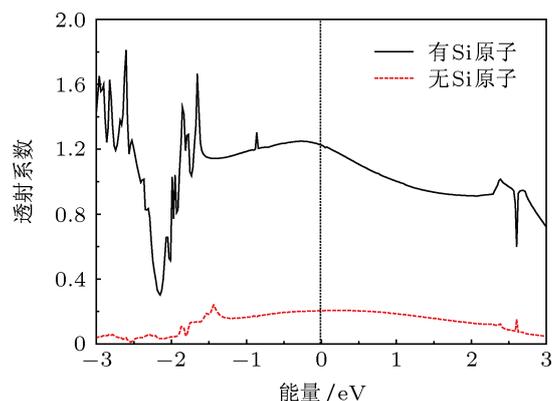


图 5 纳米结点在平衡距离时通过 Si 原子与直接隧穿的透射谱

为了考察平衡位置时 Au-Si-Au 纳米结点的电子输运性质, 我们还计算了纳米结点在外偏压为 $-1.0 \text{ V} \sim 1.0 \text{ V}$ 的电流 - 电压特性, 结果如图 6 所示. 从图 6 可以看出, 电流 - 电压曲线表现出线性特征, 电导比较稳定, 约为 $1.2G_0$, 表现出类似金属特性, 但外压会使电极的哈密顿量发生变化, 也是影响结点电导的一个重要因素. 计算得到电导随外偏压变化的曲线也如图 6 所示. 在距离保持不变的情况下, 随着正负电压的增大, 电导减小. 并且随着正负电压的变化, 电导曲线并不完全对称, 这是因为 Si 原子左侧与 Au 电极层顶位耦合, 右侧与 Au 电极是空位耦合, 结点的几何结构不对称而造成的. 由此得出结点与电极的相互作用对电子输运有重要影响.

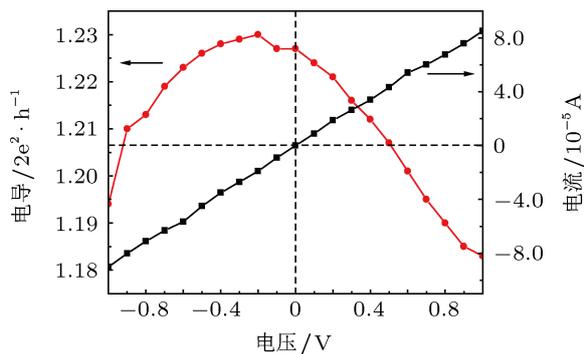


图6 平衡位置时的电流 - 电压曲线 (用方块表示, 对应的纵坐标轴为右边轴线) 和电导随外偏压的变化关系 (用圆圈表示, 对应的纵坐标轴为左边轴线)

4 结论

本文模拟了扫描隧道显微镜的工作原理, 在

Au(100) 两电极之间设计金字塔构型, 构建了左侧对顶位、右侧对空位的 Au-Si-Au 纳米结点模型, 采用密度泛函理论和非平衡格林函数相结合的方法对纳米结点的输运性质进行了理论计算. 结果发现, 在 Au-Si-Au 纳米结点中, 电子从左电极到右电极直接穿透的概率很小, 主要是通过 Si 原子的 p_x , p_y 和 p_z 轨道电子形成的 HOMO 共振峰进行传输. 纳米结点的电导随距离的增大而减小, 在 $d_z = 9.72 \text{ \AA}$ 时, 结构最稳定, 电导为 $1.227G_0$, 此结构在外偏压下, 电流 - 电压曲线表现出线性特征, 且随着外加正负电压的增大, 电导略有减小, 且出现不对称性变化. 所有结果表明结点几何结构、耦合形貌、两极之间的距离及外偏压对结点的电导有重要影响. 这些研究结果对于硅纳米结点的构型设计和实验应用将会有所帮助.

- [1] Venkataraman L, Klare J E, Nuckolls, Hybertsen M S, Steigerwald M L 2006 *Nature* **24** 442
- [2] Heath J R, Ratner M A 2003 *Phys. Today* **56** 43
- [3] Chen J, Reed M A, Rawlett A M, Tour J M 1999 *Science* **286** 1550
- [4] Collier C P, Wong E W, Belohradsky M, Raymo F M, Stoddard J F, Kuekes P J, Williams R S, Heath J R 1999 *Science* **285** 391
- [5] Gittins D I, Bethell D, Schiffrin D J, Nichols R J 2000 *Nature* **408** 67
- [6] Roschier L, Penttila J, Martin M, Hakonen P, Paalanan M 2001 *Appl. Phys. Lett.* **75** 728
- [7] Chen X C, Xu Y, Zeng Z Y 2008 *Physica B* **403** 3185
- [8] Taylor J, Guo H, Wang J 2001 *Phys. Rev. B* **63** 121104
- [9] Chen X C, Yang J, Zhou Y H, Xu Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 3064 (in Chinese) [陈小春, 杨君, 周艳红, 许英 2009 物理学报 **58** 3064]
- [10] Di Ventra M, Pantelides S T, Lang N D 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 979
- [11] Smit R H M, Noat Y, Untiedt C, Lang N D, van Hemert M C, van Ruitenbeek J M 2002 *Nature* **419** 906
- [12] Thijssen W H A, Marjenburgh D, Bremmer R H, van Ruitenbeek J M 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 026808
- [13] Stange M, Thygesen K S, Jacobsen K W 2006 *Phys. Rev. B* **73** 125424
- [14] Yu J X, Chen X R, Sanvito S, Cheng Y 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 013113
- [15] Yin Y Q, Li H, Ma J N, He Z L, Wang X Z 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4162 (in Chinese) [尹永琦, 李华, 马佳宁, 贺泽龙, 王选章 2009 物理学报 **58** 4162]
- [16] Zheng X L, Zhang J M, Ren Z Y, Guo P, Tian J S, Bai J T 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 5709 (in Chinese) [郑新亮, 郑继明, 任兆玉, 郭平, 田进寿, 白晋涛 2009 物理学报 **58** 5709]
- [17] An Y P, Yang C L, Wang M S, Ma X G, Wang D H 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2010 (in Chinese) [安义鹏, 杨传路, 王美山, 马晓光, 王德华 2010 物理学报 **59** 2010]
- [18] Cheng X, Yang C L, Tong X F, Wang M S, Ma X G 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 017302 (in Chinese) [程霞, 杨传路, 童小菲, 王美山, 马晓光 2011 物理学报 **60** 017302]
- [19] Roland C, Meunier V, Larade B, Guo H 2002 *Phys. Rev. B* **66** 035332
- [20] Dai Z X, Zheng X H, Shi X Q, Zeng Z 2005 *Phys. Rev. B* **72** 205408
- [21] Mozos J L, Wan C C, Taraschi G, Wang J, Guo H 1997 *Phys. Rev. B* **56** R4351
- [22] Kohn W, Sham L 1965 *Phys. Rev. B* **140** A1133
- [23] Datta S 1995 *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge: Cambridge University Press) p19
- [24] Soler J M, Artacho E, Gale J D, Garcia A, Junquera J, Ordejon P, Sanchez-Portal D J 2002 *Phys.: Condens. Matter* **14** 2745
- [25] Rocha A R, Garcia-Suarez V M, Bailey S, Lambert C, Ferrer J, Sanvito S 2006 *Phys. Rev. B* **73** 085414
- [26] Fisher D S, Lee P A 1981 *Phys. Rev. B* **23** R6851
- [27] Perdew J P 1986 *Phys. Rev. B* **33** 8822
- [28] Troullier N, Martins J L 1991 *Phys. Rev. B* **43** 1993
- [29] Robinson I K, Bennett P A, Himpel F J 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 096104

First-principles calculations of the electronic transport in Au-Si-Au junctions*

Liu Fu-Ti¹⁾²⁾ Cheng Yan¹⁾ Yang Fu-Bin¹⁾ Cheng Xiao-Hong²⁾
Chen Xiang-Rong^{1)†}

1) (College of Physical Science and Technology, Sichuan University, Chengdu 610064, China)

2) (College of Physics and Electronic Engineering, Yibin University, Yibin 644000, China)

(Received 20 October 2012; revised manuscript received 16 January 2013)

Abstract

The transport property of silicon sandwiched between Au (100) and Au (100) is investigated with a combination of density functional theory and non-equilibrium Green's function method. It is found that the conductance decreases with distance increasing. When $d_z = 9.72 \text{ \AA}$, the structure of junctions is the most stable and the conductance is $1.227G_0$ ($G_0 = 2e^2/h$), which is contributed by the p_x , p_y and p_z electron orbits of silicon atom. The I - V curve of junctions shows linear characteristics under the external bias voltage. With the increase of an external positive and negative voltage, the conductance decreases slightly, and presents the asymmetry change.

Keywords: silicon atom, electronic transport, density functional theory, non-equilibrium Green's function

PACS: 74.55.+v, 05.60.Gg, 81.16.Ta

DOI: 10.7498/aps.62.107401

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11174214, 11204192).

† Corresponding author. E-mail: x.r.chen@qq.com