

## GaAs纳米结点电子输运性质的第一性原理计算\*

柳福提<sup>1)2)3)</sup> 程艳<sup>2)†</sup> 陈向荣<sup>2)</sup> 程晓洪<sup>1)</sup>

1)(宜宾学院物理与电子工程学院, 宜宾 644007)

2)(四川大学物理科学与技术学院, 成都 610064)

3)(宜宾学院计算物理四川省高校重点实验室, 宜宾 644007)

(2014年1月14日收到; 2014年3月18日收到修改稿)

运用密度泛函理论结合非平衡格林函数的方法, 对GaAs团簇与两半无限Au(100)- $3 \times 3$ 电极以顶位对顶位、顶位对空位、空位对顶位、空位对空位四种不同耦合形貌构成的Au-GaAs-Au纳米结点电子输运性质进行了理论计算. 对结点在不同距离下的结构进行了几何优化, 模拟了结点拉伸直至断裂的过程. 计算结果得到四种构型结点在两极距离分别为1.389 nm, 1.145 nm, 1.145 nm, 0.861 nm时, 结构最稳定. 对于各稳定结构, Ga-As键长分别为0.222 nm, 0.235 nm, 0.227 nm, 0.235 nm, 其平衡电导分别为 $2.33 G_0$ ,  $1.20 G_0$ ,  $1.90 G_0$ ,  $1.69 G_0$ , 结点具有很好的电子输运性质. 在-1.2—1.2 V的电压范围内, 所有结点的电流-电压都表现出近线性关系.

关键词: 电子输运, 纳米结点, 砷化镓

PACS: 73.63.Rt, 62.23.Eg, 81.16.Ta

DOI: 10.7498/aps.63.137303

## 1 引言

近年来, 随着分子自组织生长、扫描隧穿显微镜 (STM) 操纵测量等纳米科学技术的发展, 越来越多的各种功能分子器件被制备出来. 把分子连接到加了偏压的两个电极上就组成了一个基本的两端分子器件<sup>[1]</sup>, 由于尺寸效应, 许多有趣的新现象如量子化电导、非线性电流-电压、负微分电阻、电子开关等被观察到<sup>[2-7]</sup>. 这些新物理特性在未来逻辑电路和存储器件中有重要应用价值<sup>[8]</sup>, 因此分子器件的电子输运特性成为现代量子输运研究的热点问题<sup>[9-12]</sup>. 选择合适的分子加以剪裁和组装, 构建不同构型的结点, 就能实现许多崭新的功能<sup>[13]</sup>. 在实验上, 人们可以利用力学可控劈裂结法 (MCBJ), STM、纳米电极技术等对分子导体的电子输运性质进行测量, 但很难确定分子与电极耦合的具体情

况. 从理论上模拟实验情景, 理解分子器件的几何构型、电子结构与电子输运性质之间的关系, 解释实验结果就具有重要的意义. 单分子结是一个开放系统, 分子和电极间的相互作用使得原来分立的分子能级发生移动与展宽, 分子与电极之间的电荷转移改变了空间的电势分布, 电子通过结点的输运是一个复杂的非平衡量子力学过程<sup>[14]</sup>. 理论工作者发展了各种计算方法对许多分子与电极构成的纳米结点进行了广泛地研究<sup>[15-20]</sup>, 为量子输运机理的理解、实验现象的解释提供了重要的参考.

在微电子技术领域有重要应用的GaAs半导体材料, 其团簇的结构与性质吸引了许多研究者的兴趣, 如Senger等<sup>[21]</sup>对GaAs原子链的结构进行了研究, Zhang等<sup>[22]</sup>对 $(\text{GaAs})_n$  ( $n = 2-4$ )的电子输运性质进行了第一性原理计算. 要把它应用于电子器件, 从理论上了解最简单团簇GaAs的电学特性具有重要意义. 课题组前期已经对半导体硅原子

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11174214, 11204192)、四川省教育厅科研基金 (批准号: 13ZB0207) 和宜宾学院重点科研基金 (批准号: 2013YY05) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: ycheng@scu.edu.cn

团簇的电子输运特性进行了理论模拟研究<sup>[23-25]</sup>, 发现小硅团簇表现出类似金属的电子输运特性, 取得了较好的结果, 但缺乏不同耦合形貌结点之间的比较. 因此, 为了进一步理解耦合形貌对结点电子输运性质的影响, 在本工作中我们以 GaAs 团簇与两半无限 Au 电极直接耦合构成的纳米结点为研究对象, 运用密度泛函理论 (DFT)<sup>[26]</sup> 结合非平衡格林函数方法 (NEGF)<sup>[27]</sup> 对其电子输运性质进行理论模拟计算, 为 GaAs 纳米结点的设计与制备提供重要参考.

## 2 模型与方法

对于结点的计算我们采用单分子结点两端器件模型<sup>[28]</sup>, 它是处理介观系统电子输运的有效模型. 整个装置分为三部分: 左电极、中心散射区和右电极. 左右电极可以用半无限的理想金属晶体结构来处理, 而中心散射区是由分子与若干电极层原子构成, 加入电极层原子的目的是为了屏蔽中间分子对左右电极电子结构可能产生的影响. 这个模型体系是个开放的非周期性系统, 它的哈密顿量可以由推迟格林函数  $G^R$  的方程

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

直接反演求出, (1) 式中的  $H$  是哈密顿矩阵,  $S$  是交叠矩阵,  $I$  是一个无限维单位矩阵,  $\varepsilon^+ = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \varepsilon + i\delta$ ,  $E$  是能量. 中心散射区的格林函数  $G_M^R$  为

$$G_M^R(E) = \left[ \varepsilon^+ S_M - H_M - \sum_L^R(E) - \sum_R^R(E) \right]^{-1}, \quad (2)$$

其中,

$$\sum_L^R(E) = (\varepsilon^+ S_{ML} - H_{ML}) G_L^{0R}(E) \times (\varepsilon^+ S_{LM} - H_{LM})$$

为左电极的推迟自能,

$$\sum_R^R(E) = (\varepsilon^+ S_{MR} - H_{MR}) G_R^{0R}(E) \times (\varepsilon^+ S_{RM} - H_{RM})$$

为右电极的推迟自能,  $G_L^{0R}$  和  $G_R^{0R}$  为推迟表面格林函数, 且

$$G_L^{0R} = [\varepsilon^+ S_L - H_L]^{-1},$$

$$G_R^{0R} = [\varepsilon^+ S_R - H_R]^{-1}.$$

$G_M^R$  包含了平衡态下扩展分子与电极相连的所有电子结构信息, 通过 Fisher-Lee's 公式<sup>[29]</sup> 可以求得零偏压下的电导

$$G = \frac{2e^2}{h} \text{Tr} \left[ \Gamma_L G_M^{R+} \Gamma_R G_M^R \right], \quad (3)$$

其中

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

当施加外电压后, 扩展分子的电荷分布情况与平衡态时不同. 由于认为电极是局域电中性, 外电压的效果只是使电极的哈密顿量发生移动. 所以, 总的电流  $I$  可以通过电导在偏压窗内的积分可得

$$I = \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[ \Gamma_L G_M^{R+} \Gamma_R G_M^R \right] \times [f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)]. \quad (4)$$

在密度泛函理论计算中, 我们采用局域密度 (LDA) 近似方法, 交换关联泛函选择为 Perdew 与 Zunger<sup>[30]</sup> 所提出的参数化泛函; 价电子用局域化的数值基组展开, Au 原子价电子轨道选用单 zeta 基组, Ga 和 As 原子都使用双 zeta 基组, 而内壳层电子采用 Troullier-Martins 局域赝势<sup>[31]</sup> 来描述. Au(100) 表面的  $3 \times 3$  超晶胞作为电极, 自洽计算截断能取 200 Ry, 能量收敛标准为  $10^{-4}$ . 电子结构与电子输运性质的计算全部由第一性原理计算软件包 SMEAGOL 完成, 具体计算细节可以参考文献<sup>[32]</sup>.

考虑到模拟 STM 工作时的实际情况, 我们在分子与电极耦合处增加了金字塔结构, 设计了可能存在的四种不同耦合结构, 具体情形如图 1 所示, 图 1(a) 为 GaAs 原子与两电极金字塔尖 Au 原子的顶位相互作用, 即构成顶位对顶位结构; (b) 右侧金字塔尖 Au 原子被去掉, Ga 与左侧塔尖原子的顶位, As 原子与右侧金字塔空位相互作用, 即构成顶位对空位结构; (c) 左侧金字塔尖 Au 原子被去掉, Ga 与左侧电极空位, As 与右侧金字塔尖 Au 原子顶位相互作用, 即构成空位对顶位结构; (d) 两侧电极金字塔尖的 Au 原子都被去掉, Ga, As 原子与左右电极的空位相互作用, 形成空位对空位结构. 在这四种构型中, 电子都沿着  $z$  轴即 GaAs 原子连线方向进行传输. 另外, 为充分屏蔽中间分子对电极电子结构的影响, 让 GaAs 分别与左侧电极 7 层、右侧电极 6 层一起构成中心散射区.

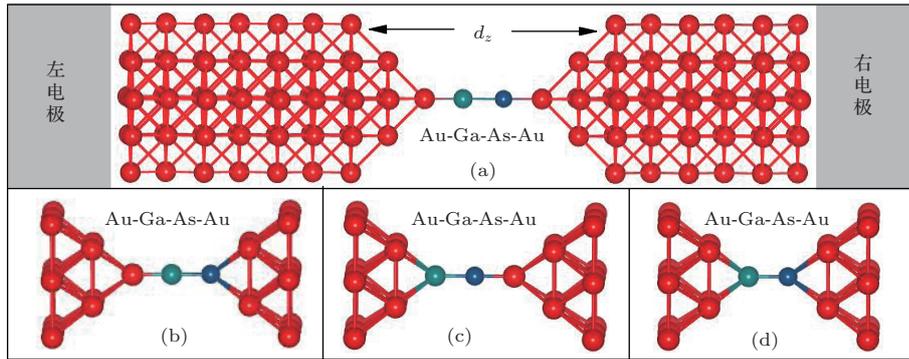


图1 不同耦合形貌 GaAs 纳米结点模型 (a) 顶位对顶位结构; (b) 顶位对空位结构; (c) 空位对顶位结构; (d) 空位对空位结构

### 3 结果与讨论

#### 3.1 结构优化

把 GaAs 团簇与两电极直接相连时, 耦合处的原子排列位置要发生变化, 因此我们先对模型结构进行几何优化. 由于金属电极的静电屏蔽效应, 电极区静电势的改变以及电荷的转移仅涉及到电极界面附近 1—2 个原子层, 所以在优化过程中, 我们固定电极原子, 让两金字塔底之间 (其距离定义为  $d_z$ , 如图 1 所示) 所有原子发生弛豫, 形成该距离下比较稳定的结点结构. 计算 Au-GaAs-Au 结点在不同距离下的结合能, 结合能的定义为  $\Delta E = E(\text{Au}$

电极 + GaAs) -  $E(\text{GaAs}) - E(\text{Au 电极})$ , 其中  $E(\text{Au 电极} + \text{GaAs})$  是散射区 GaAs 团簇与 Au 原子的总能量,  $E(\text{GaAs})$  是孤立 GaAs 团簇的能量,  $E(\text{Au 电极})$  为孤立 Au 电极的能量, 结果如图 2 (用空心方块表示, 纵坐标对应为右侧坐标轴) 所示. 对于 (a) 构型结构, 在距离  $d_z$  从 1.309 nm 到 1.709 nm 的范围内, 随着距离的增大, 结合能先减小后增大. 当  $d_z = 1.389$  nm 时, 结合能最低, 取得局域极小值, 说明此时结点结构最稳定. 对于该稳定结构, Ga-As 键长为 0.220 nm, Au-Ga 键长为 0.229 nm, Au-As 键长为 0.239 nm. 随着距离的增大, Ga-As 处于拉伸状态; 而当  $d_z = 1.669$  nm 时, Au-As 键长

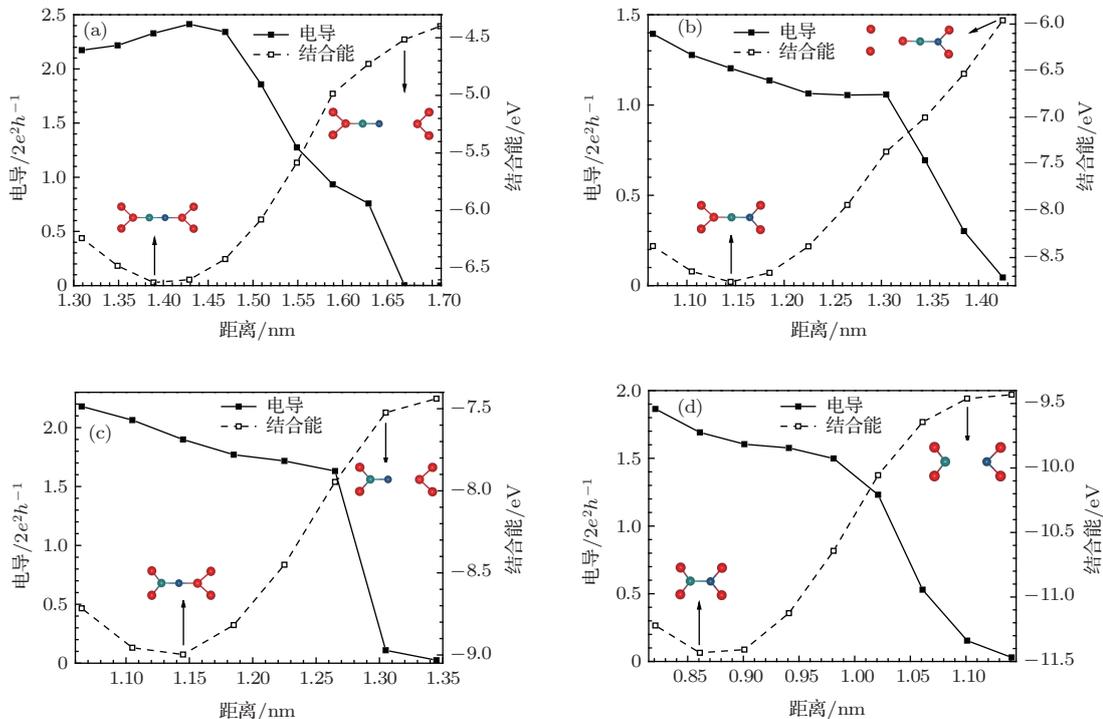


图2 结点结合能 (空心方框表示, 纵坐标为右侧轴) 与电导 (实心方框表示, 纵坐标为左侧轴) 两极随距离的变化关系 (a) 顶位对顶位结构; (b) 顶位对空位结构; (c) 空位对顶位结构; (d) 空位对空位结构

增大到0.513 nm, 说明As原子与右侧电极作用非常弱, 结点可能已经断裂, 其结构如图2(a)中的插图所示. 对于(b)构型结构, 在距离 $d_z$ 从1.065 nm到1.425 nm的范围内, 当 $d_z = 1.145$  nm时, 结合能最低, 也取得局域极小值, 说明该距离下结点结构最稳定. 此时, Ga-As键长为0.235 nm, Au-Ga键长为0.229 nm, Au-As键长为0.263 nm. 当距离增加到1.425 nm时, 左侧塔尖Au原子被Ga原子拉离电极, 结点断裂, 结构如图2(b)中的插图所示. 对于(c)结构, 在距离 $d_z$ 从1.065 nm到1.345 nm的范围内, 当 $d_z = 1.145$  nm时, 结合能最低, 也取得局域极小值, 即存在结点最稳定结构. 此时, Ga-As键长为0.227 nm, Au-Ga键长为0.250 nm, Au-As键长为0.241 nm. 当距离增大到1.305 nm时, As原子与右侧电极距离为0.399 nm, 意味着此时结点断裂, 结构如图2(c)中的插图所示. 对于(d)结构, 在距离 $d_z$ 从0.821 nm到1.141 nm的范围内, 结合能也存在局域极小值. 当 $d_z = 0.861$  nm时, 结合能最低, 结点结构最稳定. 此时Ga-As键长为0.235 nm, Au-Ga键长为0.247 nm, Au-As键长为0.259 nm. 当距离增大到1.101 nm时, Ga-As键长为0.451 nm, 此时结点断裂, 如图2(d)中的插图所示. 所以, 对于四种构型的结点, 当两极距离分别为1.389 nm, 1.145 nm, 1.145 nm, 0.861 nm时, 结构最稳定, Ga-As键长分别为0.222 nm, 0.235 nm, 0.227 nm, 0.235 nm.

### 3.2 平衡电导

对四种构型结点在不同距离下的平衡电导进行了计算, 结果如图2(用实心方框表示, 纵坐标对应为左侧坐标轴)所示. 从图2中容易看出, 随着距离的增大, 结点被拉伸, 电导减小. 在距离变化很小( $<1$  nm)的范围内, 电导却有数量级的变化, 说明两极之间的距离是影响结点电导的一个重要因素, 这也正是STM具有极高分辨本领的物理基础. 在不同的距离下, 经过弛豫后结点中电子云重叠情况不同, 从而直接影响电子传输的性质. 另外, 不同构型结点的电导随距离的变化不完全相同, 具体地说, 对于(a)构型, 当距离 $d_z = 1.309$  nm, 电导为 $2.17G_0$  ( $= 2e^2/h$ ), 随着距离增大到1.429 nm, 电导增大到 $2.41 G_0$ ; 随着距离的继续增大, 电导开始减小, 当 $d_z = 1.669$  nm时, 电导突然减小为 $0.003 G_0$ , 说明此时结点确实已经断裂. 在(b)构

型中, 当距离 $d_z = 1.065$  nm时, 电导为 $1.39 G_0$ , 随着距离增大, 电导减小, 尤其当 $d_z > 1.305$  nm时, 随距离的增大, 电导减小得很快, 当 $d_z = 1.425$  nm时, 结点断裂, 电导减小为 $0.05 G_0$ . 在(c)构型中, 当 $d_z = 1.065$  nm时, 电导为 $2.18G_0$ , 随着距离增大, 电导减小, 在 $d_z = 1.305$  nm时, 结点断裂, 电导突然减小为 $0.11 G_0$ . 在(d)构型中, 当距离 $d_z = 0.821$  nm时, 电导为 $1.86 G_0$ , 随着结点的拉伸, 电导减小, 当 $d_z = 1.141$  nm时, 结点断裂, 电导就减小为 $0.03G_0$ . 计算结果说明耦合形貌、两极距离对结点的电导都有重要影响. 对于四种构型结点的稳定结构, 其平衡电导分别为 $2.33G_0$ ,  $1.20 G_0$ ,  $1.90 G_0$ ,  $1.69 G_0$ , 表明它们都具有很好的电子输运性质.

### 3.3 透射谱

低电压下结点的电学特性主要取决于能量在费米面 $E_F$ 附近的前沿分子轨道与电极表面电子态相互作用的情况. 对于四种构型稳定结构在外电压为零时, 透射系数随入射电子能量的关系即透射谱如图3中的实线所示, 从图3中容易看出, 对于(a), (c)结构, 在费米面(本文中已设置为零)附近存在隧穿共振峰, 对应分子最高占居轨道(HOMO), 说明电子主要是通过HOMO轨道进行的. 而(b), (d)结构, 透射谱曲线在费米面附近比较平坦, 说明GaAs与电极的相互作用比较强, 电子云重叠使得分子能级发生展宽, 态密度变为连续分布, 因而没有明显的峰. 相互作用的强度也可以由散射区的结合能体现, 从图2的结果可以看出, 构型(a)结合能最小, 构型(d)的结合能最大, 与其透射谱有对应关系. 四种构型稳定结构结点在费米面 $E_F$ 处的透射系数分别为2.33, 1.20, 1.90, 1.69.

### 3.4 投影态密度

为进一步理解稳定结构结点的电子传输通道, 对结点的投影态密度(PDOS)进行了计算, 结果如图4所示. 对于(a)构型, 总的态密度(TDOS)曲线与透射谱非常相似, 把它投影到结点各原子的电子轨道上去, 结果发现As原子的 $p_x + p_y$ 与Ga原子的 $p_x + p_y$ 有着重要的贡献, 它们之间形成了扩展性较好的 $\pi$ 键, 有利于电子的传输. 对于(b)构型, 电子主要是通过Ga的 $p_x + p_y$ 和Au的s电子轨道.

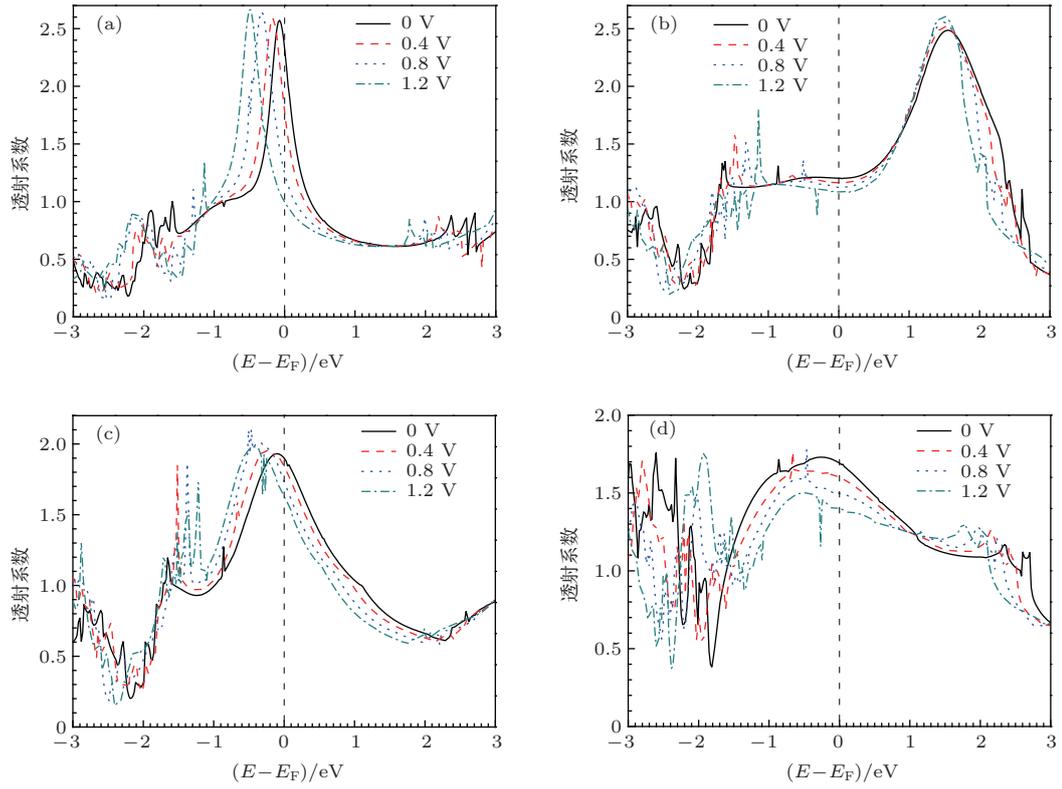


图3 (网刊彩色) 纳米结点在不同电压下的透射谱 (a) 顶位对顶位结构; (b) 顶位对空位结构; (c) 空位对顶位结构; (d) 空位对空位结构

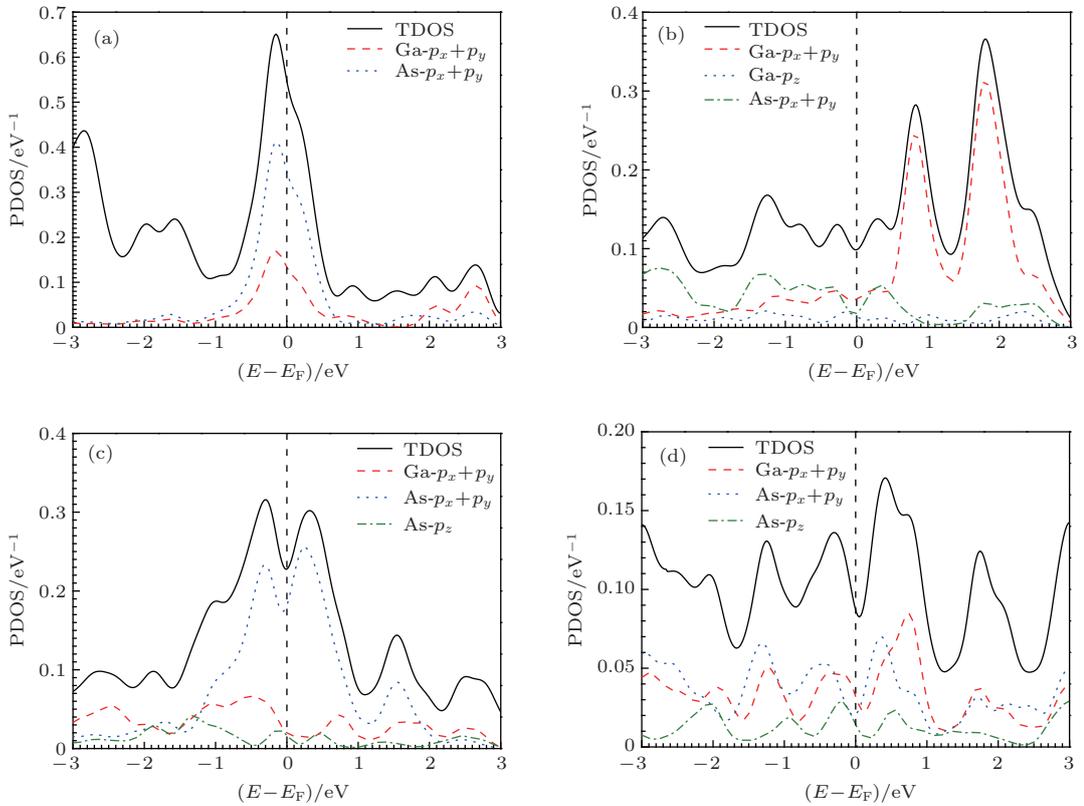


图4 (网刊彩色) 纳米结点的投影态密度 (a) 顶位对顶位结构; (b) 顶位对空位结构; (c) 空位对顶位结构; (d) 空位对空位结构

对于(c)构型,电子主要是通过As的 $p_x + p_y$ 和Au的s电子轨道.而对于(d)构型,GaAs团簇与电极空位相互作用最强,电子云重叠情况比较复杂,各电子轨道中没有那个轨道占绝对优势.结果说明GaAs团簇与电极Au原子顶位相互作用,虽然结合能不是最大的,即结构不是最稳定的,但这种构型有利于电子的传输.因此,稳定结构不一定是电子传输的最佳构型.

### 3.5 电流-电压关系

外偏压会使电极的哈密顿量发生移动,也是影响结点电导的一个重要因素.在 $-1.2\text{--}1.2\text{ V}$ 的外偏压范围内,计算电压对四种构型稳定结点电子传输的影响,即得到电流-电压的关系,结果如图5所示.四种构型的 $I\text{-}V$ 表现出近线性关系,具有类似金属特性.在图3中我们画出了结点在 $0.4\text{ V}$ , $0.8\text{ V}$ 和 $1.2\text{ V}$ 不同电压下的透射谱.在所考察的电压范围内,随着电压的增加,在费米面的透射系数略有下降,且透射峰向低能量方向移动,但都仍然在偏压窗口内,透射谱的形状没有明显变化,所以,其电流-电压表现出近线性关系.另外,随着正负电压的增大,其 $I\text{-}V$ 曲线变化并不完全对称,这是纳米结点的几何结构不对称而决定的.

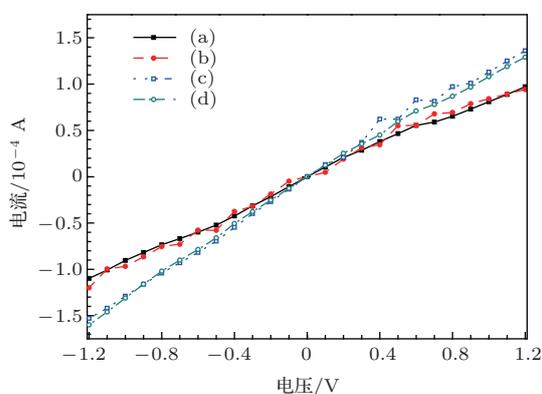


图5 纳米结点的电流-电压曲线 (a) 顶位对顶位结构; (b) 顶位对空位结构; (c) 空位对顶位结构; (d) 空位对空位结构

## 4 结 论

基于密度泛函理论,运用非平衡格林函数方法对GaAs团簇与两半无限Au(100)- $3 \times 3$ 电极以顶位对顶位、顶位对空位、空位对顶位、空位对空位四种不同耦合形貌构成的纳米结点电子输运性质进行了理论计算.对结点在不同距离下的结

构进行了几何优化,模拟了结点拉伸直至断裂的过程,结果得到四种构型结点在两极距离分别为 $1.389\text{ nm}$ , $1.145\text{ nm}$ , $1.145\text{ nm}$ , $0.861\text{ nm}$ 时,结构最稳定.对于稳定结构,其Ga-As键长分别为 $0.222\text{ nm}$ , $0.235\text{ nm}$ , $0.227\text{ nm}$ , $0.235\text{ nm}$ ,平衡电导分别为 $2.33 G_0$ , $1.20 G_0$ , $1.90 G_0$ , $1.69 G_0$ ,具有较好的导电性.在 $-1.2\text{--}1.2\text{ V}$ 的电压范围内,所有稳定结点的电流-电压关系都表现出近似线性,具有类似金属的电子输运性质.本文计算结果得到Au-GaAs-Au纳米结点的两极距离、耦合形貌、外电压对其电子输运性质的影响,能为GaAs团簇在纳米器件的设计与应用中提供重要的理论参考.

### 参考文献

- [1] Xu B, Tao N J 2003 *Science* **301** 1221
- [2] Chen J, Reed M A, Rawlett A M, Tour J M 1999 *Science* **286** 1550
- [3] Gittins D I, Bethell D, Schiffrin D J, Nichols R J 2000 *Nature* **408** 67
- [4] Taylor J, Guo H, Wang J 2001 *Phys. Rev. B* **63** 121104
- [5] Roschier L, Penttila J, Martin M, Hakonen P, Paalanen M, Tapper U, Kauppinen E I, Journet C, Bernier P 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 728
- [6] Chen X C, Xu Y, Zeng Z Y 2008 *Physica B* **403** 3185
- [7] 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]
- [8] Wu Q H, Zhao P, Liu D S 2014 *Acta Phys. Chim. Sin.* **30** 53
- [9] Yao L H, Cao M S, Yang H J, Liu X J, Fang X Y, Yuan J 2014 *Computational Materials Science* **85** 179
- [10] Zou B, Li Z L, Song X N, Wang C K 2008 *Chin. Phys. Lett.* **25** 254
- [11] Li Y X 2006 *Chin. Phys. Lett.* **23** 2560
- [12] Gu C Z, Wang Q, Li J J, Xia K 2013 *Chin. Phys. B* **22** 098107
- [13] Heath J R, Ratner M A 2003 *Physics Today* **56** 43
- [14] Huang B, Zhang J X, Li R, Shen Z Y, Hou S M, Zhao X Y, Xue Z Q, Wu Q D 2006 *Acta Phys.-Chim. Sin.* **22** 161 (in Chinese)[黄飙, 张家兴, 李锐, 申自勇, 侯士敏, 赵兴钰, 薛增泉, 吴全德 2006 物理化学学报 **22** 161]
- [15] Ventra M D, Pantelides S T, Lang N D 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 979
- [16] Smit R H M, Noat Y, Untiedt C, Lang N D, van Hemert M C, van Ruitenbeek J M 2002 *Nature* **419** 906
- [17] Stange M, Thygesen K S, Jacobsen K W 2006 *Phys. Rev. B* **73** 125424
- [18] Yu J X, Chen X R, Sanvito S 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 013113
- [19] 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]

- [20] 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]
- [21] Senger R T, Tongay S, Durgun E, Ciraci S 2005 *Phys. Rev. B* **72** 075419
- [22] Zhang D L, Xu Y L, Zhang J B, Miao X S 2012 *Phys. Lett. A* **376** 3272
- [23] Liu F T, Cheng Y, Yang F B, Cheng X H, Chen X R 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 107401
- [24] Liu F T, Cheng Y, Yang F B, Cheng X H, Chen X R 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 140504
- [25] Liu F T, Cheng Y, Cheng X H, Yang F B, Chen X R 2013 *Chin. Phys. Lett.* **30** 067302
- [26] Kohn W, Sham L 1965 *Phys. Rev. B* **140** A1133
- [27] Datta S 1995 *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [28] Reed M. A, Zhou C, Miller C J, Burgin T P, Tour J M 1997 *Science* **278** 252
- [29] Fisher D S, Lee P A 1981 *Phys. Rev. B* **23** 6851
- [30] Perdew J P 1986 *Phys. Rev. B* **33** 8822
- [31] Troullier N, Martins J L 1991 *Phys. Rev. B* **43** 1993
- [32] Rocha A R, Garcia-Suarez V M, Bailey S, Lambert C, Ferrer J, Sanvito S 2006 *Phys. Rev. B* **73** 085414

## Calculation of electron transport in GaAs nanoscale junctions using first-principles\*

Liu Fu-Ti<sup>1)2)3)</sup> Cheng Yan<sup>2)†</sup> Chen Xiang-Rong<sup>2)</sup> Cheng Xiao-Hong<sup>1)</sup>

1) (College of Physics and Electronic Engineering, Yibin university, Yibin 644007, China)

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

3) (Computational Physics Key Laboratory of Sichuan Province of Yibin university, Yibin 644007, China)

( Received 14 January 2014; revised manuscript received 18 March 2014 )

### Abstract

Electron transport properties of GaAs cluster, which is sandwiched between two semi-infinite Au(100)-3×3 electrodes in four different anchoring configurations (top-top, top-hollow, hollow-top, hollow-hollow), is investigated using the combination of density functional theory and non-equilibrium Green's function method. We optimize the geometry of junctions at different distances, simulate the breaking process of Au-GaAs-Au junctions, calculate the cohesion energy and conductance of the junctions as functions of distance  $d_z$ , and obtain the most stable structure when the distances are set at 1.389 nm, 1.145 nm, 1.145 nm, 0.861 nm, respectively. For stable structures, the Ga-As bond lengths of the junctions is 0.222 nm, 0.235 nm, 0.227 nm, 0.235 nm, respectively. The equilibrium conductances are 2.33  $G_0$ , 1.20  $G_0$ , 1.90  $G_0$ , 1.69  $G_0$ , respectively. All junctions have large conductance. In the range of voltage from -1.2—1.2 V, the  $I$ - $V$  curve of the junctions shows linear characteristics.

**Keywords:** electron transport, nanoscale junctions, gallium arsenide

**PACS:** 73.63.Rt, 62.23.Eg, 81.16.Ta

**DOI:** 10.7498/aps.63.137303

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11174214, 11204192), the Research Project of Education Department of Sichuan Province, China (Grant No. 13ZB0207), and the Scientific Research Project of Yibin University, China (Grant No. 2013YY05).

† Corresponding author. E-mail: [ycheng@scu.edu.cn](mailto:ycheng@scu.edu.cn)