

(GaAs)_n ($n = 1-4$) 原子链电子输运性质的理论计算

柳福提 张淑华 程艳 陈向荣 程晓洪

Theoretical calculation of electron transport properties of atomic chains of (GaAs)_n ($n = 1-4$)

Liu Fu-Ti Zhang Shu-Hua Cheng Yan Chen Xiang-Rong Cheng Xiao-Hong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 106201 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.106201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.106201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I10>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

金纳米线接触构型相关的双重负微分电阻与整流效应

Gold nanowire tip-contact-related negative differential resistance twice and the rectification effects

物理学报.2015, 64(5): 057301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.057301>

Au-Si₆₀-Au 分子结电子输运性质的理论计算

Theoretical calculation of electron transport properties of the Au-Si₆₀-Au molecular junctions

物理学报.2014, 63(17): 177304 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.177304>

GaAs 纳米结点电子输运性质的第一性原理计算

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

物理学报.2014, 63(13): 137303 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.137303>

量子点接触中有关电导 0.7 结构的研究

0.7 structure of conductance quantization in quantum point contact

物理学报.2013, 62(1): 017301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.017301>

(GaAs)_n (n = 1—4) 原子链电子输运性质的理论计算*

柳福提^{1)†} 张淑华²⁾ 程艳^{3)‡} 陈向荣³⁾ 程晓洪¹⁾

1)(宜宾学院物理与电子工程学院, 宜宾 644000)

2)(宜宾学院化学与化工学院, 宜宾 644000)

3)(四川大学物理科学与技术学院, 成都 610064)

(2015年10月29日收到; 2016年3月5日收到修改稿)

本文利用密度泛函理论结合非平衡格林函数的方法, 对 (GaAs)_n (n = 1—4) 直线原子链与 Au(100)-3 × 3 两半无限电极耦合构成 Au-(GaAs)_n-Au 纳米结点的电子输运性质进行了第一性原理计算. 在各结点拉伸过程中, 对其结构进行了优化, 得到各结点稳定平衡结构时 Ga—As 的平均键长分别为 0.220, 0.224, 0.223, 0.223 nm, 平衡电导分别为 2.328G₀, 1.167G₀, 0.639G₀, 1.237G₀; 通过对结点投影态密度的计算, 发现电子传输主要是通过 Ga, As 原子中 p_x 与 p_y 电子轨道相互作用形成的 π 键进行的. 在 0—2 V 的电压范围内, 对于 (GaAs)_n (n = 1—3) 的原子链的电流随电压增大而增大, I-V 曲线呈线性关系, 表现出类似金属导电行为; 对于 (GaAs)₄ 原子链在 0.6—0.7 V, 0.8—0.9 V 的电压范围内却存在负微分电阻现象.

关键词: 砷化镓, 原子链, 电子输运, 非平衡格林函数

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

DOI: 10.7498/aps.65.106201

1 引言

随着纳米科学与技术的进步, 合成与操纵一维极限材料早已成为可能, 连接分子器件的导体势必会向微型化极限方向发展^[1,2]. 由于尺寸效应, 原子链与其块体具有不同的物理性质, 电子输运将表现出新的量子特性, 它对功能纳米器件的设计与开发具有重要的物理意义, 因此, 原子链的量子输运特性及其应用引起了研究者的广泛关注. 20 世纪末, 人们利用扫描隧穿显微镜和机械可控劈裂结已成功构建了 Au 原子链^[3], 并测量出其电导为 1G₀ (G₀ = 2e²/h 为量子化电导单位), 与理论预测结果一致^[4]. 另外, 许多实验与理论研究证明了如 Ir, Pt, Na, K 等金属原子也能

形成单链结构^[5-8]. Tongay 等^[9] 对非金属 C 原子链进行了研究, 发现其导电性比 Au 原子链更好. Senger 等^[10] 对 Si, Ge, Sn, GaAs 等原子链结构与导电性进行了计算, 得到其结构是稳定的, 且表现出金属导电特性. Zhang 等^[11] 对 Au-GaN-Au 不同构型纳米结点的量子输运特性进行了第一性原理计算, 发现它们都具有非线性的 I-V 关系. Liu 等^[12-14] 研究了不同耦合形貌对纳米结点电子输运的影响, 得到不同长度 (原子数目不同) Si 原子链也具有类似于金属的电子传输行为, 随原子数目的变化, 其平衡电导产生奇偶振荡现象. GaAs 作为重要的半导体材料, 它的低维结构在纳米器件的设计中具有重要的应用前景. Zhang 等^[15] 对 (GaAs)_n (n = 2—4) 团簇的电子输运行为进行了理

* 国家自然科学基金 (批准号: 11174214, 11204192)、宜宾学院计算物理四川省高等学校重点实验室开放课题基金 (批准号: JSWL2015KF02) 和宜宾学院重点科研项目 (批准号: 2015QD14) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: futiliu@163.com

‡ 通信作者. E-mail: ycheng@scu.edu.cn

论模拟, 结果发现在 $-2\sim 2$ V 的电压范围内表现出类似于金属的电子输运行为, 而当电压大于 2 V 时, 表现出负微分电阻现象. Dyachkov 等^[16] 运用线性缀加柱面波 (LACW) 法也对 GaAs 原子链进行了计算, 结果表明它是金属. 本课题组前期研究了耦合形貌对 GaAs 电子输运性质的影响, 各种构型结点都具有线性的 I - V 关系^[17]; 另外, 还计算了电子沿 Ga_2As_2 团簇不同对称轴方向的输运性质, 得到了一些十分有意义的结果^[18]. 为了进一步研究纳米结点的电子输运机理, 讨论不同长度 GaAs 原子链的电子输运特性, 本文中利用密度泛函理论 (DFT)^[19] 与非平衡格林函数 (NEGF)^[20] 相结合的第一性原理方法, 对 $(\text{GaAs})_n$ ($n = 1\sim 4$) 直线原子链耦合 Au 电极构成纳米结点的电子输运性质进行理论模拟计算.

2 计算模型与方法

为测量 $(\text{GaAs})_n$ ($n = 1\sim 4$) 原子链的电子输运性质, 利用典型介观系统电子输运的两端器件模型^[21], 把原子链与电极相连以形成纳米结点, 在其两端施加一定的电压, 测量通过结点的电流. 由于原子链和电极间的耦合作用, 原子链原来分立的能级发生移动与展宽, 电荷转移将改变空间的电势分布, 使得电子通过结点成为一个复杂的非平衡量子力学过程^[22]. 为了忽略界面对原子链电子输运性质的影响, 控制原子链与电极耦合形貌, 在耦合处增加了金字塔结构, 让原子链与电极尖端原子的顶位相连, 具体结构如图 1 所示. 整个模型结构可以分为三部分: 左电极、中心散射区和右电极. 电极可以用半无限的理想金属晶体结构来处理. 因 Ke 等^[23] 研究发现在小电压下, 有限界面 Au 电极与周期三维体电极特别是 (100) 方向给出的电子输运特性几乎完全一致. 为了避免镜像分子之间的相互作用, 在垂直方向上采用了 3×3 超晶胞结构^[24], 所以本文选取两半无限 Au(100)- 3×3 晶体作为电极. 为了屏蔽原子链对两端电极的电子结构产生影响, 让 $(\text{GaAs})_n$ ($n = 1\sim 4$) 直线原子链与左侧 7 层、右侧 6 层电极 Au 原子一起构成中心散射区.

这个两端器件模型是一个非周期性的开放系统, 可以根据其哈密顿量求解体系的推迟格林

函数:

$$G^R(E) = \left[\varepsilon^+ \mathbf{S} - \begin{pmatrix} \mathbf{H}_L + \Sigma_L^R & \mathbf{V}_L & 0 \\ \mathbf{V}_L^\dagger & \mathbf{H}_M & \mathbf{V}_R \\ 0 & \mathbf{V}_R^\dagger & \mathbf{H}_R + \Sigma_R^R \end{pmatrix} \right]^{-1}, \quad (1)$$

式中, $\mathbf{H}_{L/M/R}$ 为左电极、散射区、右电极的哈密顿矩阵; $\Sigma_{L/R}^R(E)$ 为左、右电极的自能; $\mathbf{V}_{L/R}$ 为左、右电极与散射区相互作用的哈密顿矩阵; $\varepsilon^+ = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} E + i\delta$, E 为能量; \mathbf{S} 为交叠矩阵. G_M^R 为中央散射区的推迟格林函数, 它包含了平衡态下原子链与电极相连接的所有电子结构信息. 当两端施加一定外电压时, 通过结点的电流可以通过如下 Landauer-Buttiker^[25] 公式求出:

$$I = \frac{2e}{h} \int_{\mu_L}^{\mu_R} T(E, V) [f(E - \mu_L) - f(E - \mu_R)] dE, \quad (2)$$

式中, f 为费米分布函数; $\mu_{L/R}$ 为左、右电极的化学势; $T(E, V)$ 是电压为 V 时能量为 E 的电子从左电极传输到右电极的透射系数, 能量积分区间为 $[\mu_L, \mu_R]$, 即 $[E_F - eV/2, E_F + eV/2]$. 而透射系数又可以通过下式求出:

$$T(E, V) = \text{Tr} [\Gamma_L G_M^{R+} \Gamma_R G_M^R], \quad (3)$$

式中,

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

当外电压 $V = 0$ V 时, 体系的平衡电导就可以由零偏压下平衡态的费米能级 E_F 处的透射值 $T(E_F, V = 0)$ 乘以量子电导 ($G_0 = 2e^2/h$), 即

$$G = \frac{2e^2}{h} T(E_F, V = 0), \quad (4)$$

而 G_M^R 和自能 $\Sigma_{L/R}^R(E)$ 可以给出电子密度谱函数 $\rho_{L/R}$, 从而由它可以计算出体系的密度矩阵为

$$\mathbf{D} = \int [\rho_L f(E - \mu_L) + \rho_R f(E - \mu_R)] dE. \quad (5)$$

由密度矩阵可以进一步计算出非平衡态下的电子密度为

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\mu\nu} \phi_\mu(\mathbf{r}) D_{\mu\nu} \phi_\nu(\mathbf{r}), \quad (6)$$

式中, ϕ 为原子局域基函数, 利用 $n(\mathbf{r})$ 可以计算哈密顿量. 因此, 通过 (1)–(6) 式的不断迭代, 可以自洽计算在一定电压下的电流.

在理论模拟计算中,用Troullier-Martins局域赝势^[26]来描述内壳层电子,而Au原子的价电子用单 ζ 函数局域化数值基组,Ga和As原子的价电子都使用双 ζ 函数基组进行展开.自洽计算的能量收敛标准为 10^{-4} ,截断能为200 Ry ($1 \text{ Ry} = 13.6056923 \text{ eV}$).在垂直于电子输运方向的二维布里渊区, K 点取样为 $2 \times 2 \times 100$.在电荷密度积分计算中,复平面上沿着半圆选择50个积分点,虚轴选择20个能量积分点,费米分布函数选择20个积分点来进行.对连接在两个半无限长Au(100)- 3×3 电极之间 $(\text{GaAs})_n$ 原子链的电子输运性质的计算,是由第一性原理计算软件包SMEAGOL^[27]完成的.

3 结果与讨论

3.1 结构优化

由于把 $(\text{GaAs})_n$ 原子链与两半无限Au电极相连构成结点时,在界面耦合处的原子相互作用情况发生改变,必然导致结点的结构发生变化,因此在计算电子输运之前应先对结点结构进行几何优化.由于静电势的改变以及电荷的转移一般只涉及界面附近1—2个原子层,考虑到电极的静电屏蔽效应,所以在进行结构优化时把电极所有原子固定,让两个金字塔底之间的原子发生充分弛豫,找到各自的平衡位置.定义两个塔底之间的距离为 d_z (如图1所示),结点的结合能为 $\Delta E = E[\text{Au}-(\text{GaAs})_n-\text{Au}] - E(\text{Au电极}) - E[(\text{GaAs})_n \text{原子链}]$.采用Perdew^[28]与Zunger所提出的参数化泛局域密度近似(LDA)方法,计算得到各结点 ΔE 随 d_z 的变化关系如图2所示,图中结合能用空心圆圈实线表示,纵坐标对应右侧坐标轴.计算得到所有结点 ΔE 随 d_z 的变化曲线都呈现出抛物线形状,即说明都对应有最稳定的平衡结构.对于 $n = 1$ 的结点,在 $d_z = 1.389 \text{ nm}$ 时, $\Delta E = -6.623 \text{ eV}$,对应极值位置,说明此时结点为最稳定的平衡结构;对于 $n = 2$ 的结点,在 $d_z = 1.855 \text{ nm}$ 时, $\Delta E = -5.978 \text{ eV}$,能量最低,结构最稳定;对于 $n = 3$ 的结点,当 $d_z = 2.296 \text{ nm}$ 时, $\Delta E = -6.737 \text{ eV}$,结构最稳定;而对于 $n = 4$ 的结点,在 $d_z = 2.816 \text{ nm}$ 时, $\Delta E = -6.501 \text{ eV}$,结构最稳定.在各稳定结构结点中,Ga—As,Au—Ga,Au—As各键长的计算结果如表1所示,

其中Ga—As平均键长分别为0.220, 0.224, 0.223, 0.223 nm,与文献^[10]的结果符合得很好.

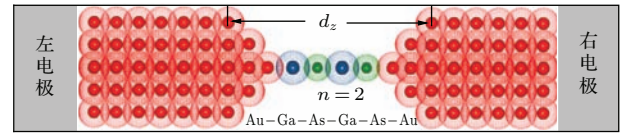


图1 (网刊彩色) Au-(GaAs)_n-Au 纳米结点两端器件模型

Fig. 1. (color online) Two probe device model of the Au-(GaAs)_n-Au nanoscale junctions.

表1 Au-(GaAs)_n-Au 结点中的平均键长

Table. 1 The average bond-lengths in each Au-(GaAs)_n-Au junctions at equilibrium positions.

	$r_{\text{Ga-As}}/\text{nm}$	$r_{\text{Au-Ga}}/\text{nm}$	$r_{\text{Au-As}}/\text{nm}$
$n = 1$	0.220	0.229	0.239
$n = 2$	0.224	0.231	0.239
$n = 3$	0.223	0.231	0.241
$n = 4$	0.231	0.232	0.241
文献 ^[10]	0.230		

3.2 平衡电导

为模拟结点的拉伸过程,在不同距离 d_z 下,对其结构进行优化后,对各结点平衡电导进行了计算,得到电导随距离变化的结果,如图2所示.电导用实心圆圈表示,纵坐标对应为左侧坐标轴.随着距离的增大,尽管各结点电导随距离变化的趋势不完全一致,但 d_z 在很小($< 1 \text{ nm}$)的变化范围,各结点的电导却有显著的变化,即电导随距离变化非常敏感,这说明两电极之间的距离 d_z 是影响结点电导的一个重要因素.这也正是电子扫描隧穿显微镜具有极高分辨本领的物理机理.在不同的距离下,结点弛豫后电荷发生转移,电子云重排,空间电势分布情况发生改变,直接影响结点的能级移动与展宽,从而表现出不同的电子输运特性.对于 $n = 1$ 的结点,电导随距离的具体变化如图2(a)所示,当距离 $d_z = 1.309 \text{ nm}$ 时,电导为 $2.173G_0$,随着距离增大到 1.429 nm ,电导增大到 $2.413G_0$;在 d_z 继续增大时,电导开始减小,当 $d_z = 1.669 \text{ nm}$ 时,电导骤然减小为 $0.003G_0$,此时结点可能已经断裂^[17].对于 $n = 2$ 的结点,当 $d_z = 1.775 \text{ nm}$ 时,电导为 $1.591G_0$,随着距离增大,电导略有减小,在 $d_z = 1.975 \text{ nm}$ 时,电导减小为

0.714 G_0 ; 然后随着继续拉伸, 在 $d_z = 2.095$ nm 时, 电导反而增加到 1.042 G_0 ; 继续增大 d_z , 电导陡然减小到 0.039 G_0 , 具体变化如图 2(b) 所示. 对于 $n = 3$ 的结点, 电导随距离的具体变化如图 2(c) 所示, 当 $d_z = 2.176$ nm 时, 电导为 0.913 G_0 , 随着距离增大, 电导减小后又增大, 但在 $d_z = 2.536$ nm 时, 电导突然减小为 0.049 G_0 . 对于 $n = 4$ 的结点, 当距离 $d_z = 2.656$ nm 时, 电导为 0.526 G_0 , 随着结点的拉伸, 电导先增大后减小, 在 $d_z = 3.016$ nm 时, 电导减小到 0.032 G_0 , 具体变化如图 2(d) 所示. 当 Au-(GaAs) $_n$ -Au 各结点处于稳定平衡结构时, 其平衡电导分别为 2.328 G_0 , 1.167 G_0 , 0.639 G_0 , 1.237 G_0 , 即各结点具有良好的导电性.

为了考虑不同密度泛函近似对结点电子结构的影响, 本文还运用 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 泛函广义梯度近似 (GGA) 对稳定结构结

点的平衡电导进行了比较计算, 结果如表 2 所示. 从表中可以看出, 对于所研究的体系, 并不像 GaAs 块体材料采用 LDA 会低估其带隙, 对其电子结构产生重要影响. 相对于 LDA 泛函, GGA 泛函对于结点的电导的计算并没有本质的提高. 由于本文属于小 GaAs 团簇系统研究, 为了与文献 [17, 18] 的计算结果进行比较, 后面的计算都采用 LDA-PZ 密度泛函近似.

表 2 Au-(GaAs) $_n$ -Au 稳定结构结点的平衡电导
Table. 2 The equilibrium conductance in each Au-(GaAs) $_n$ -Au junctions at stable positions.

	LDA-PZ	GGA-PBE
$n = 1$	2.328 G_0	1.989 G_0
$n = 2$	1.167 G_0	1.363 G_0
$n = 3$	0.639 G_0	0.685 G_0
$n = 4$	1.237 G_0	1.077 G_0

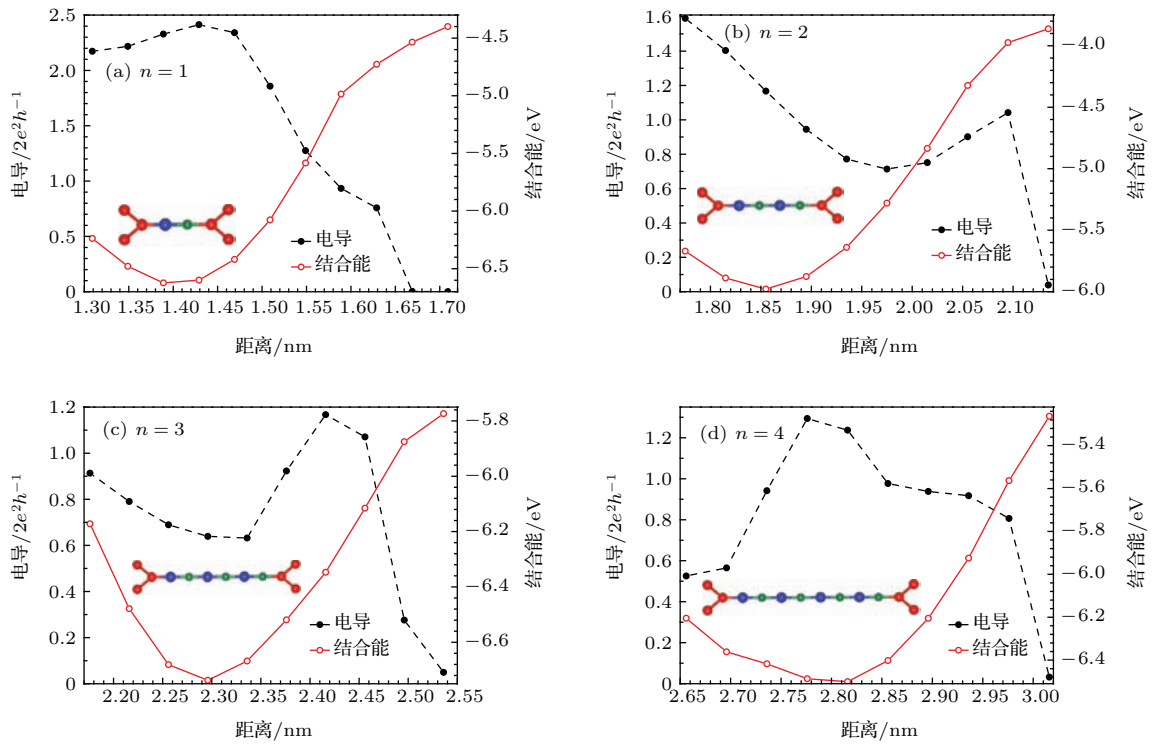


图 2 (网刊彩色) Au-(GaAs) $_n$ -Au 结点的结合能 (用空心圆圈实线表示, 纵坐标为右侧轴) 与电导 (用实心圆圈虚线表示, 纵坐标为左侧轴) 随两极距离的变化关系

Fig. 2. (color online) The cohesion energy (open circles and right-hand side axis) and conductance (solid circles and left-hand side axis) of the Au-(GaAs) $_n$ -Au nanoscale junctions as a function of distance.

3.3 透射谱与投影态密度

为了讨论平衡电导, 本文计算了外电压为零时各结点透射系数随入射电子能量变化的关系, 即透射谱, 结果如图 3 所示. 电子传输特性主要取决于

能量在费米能级 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 [24]. 对于 $n = 1$ 的结点, 在费米能级 E_F (本文中已设置为零) 附近存在隧穿共振峰, 对应最高占据轨道 (HOMO), 说明此时电

子主要是通过HOMO轨道进行传输的. 随着原子数目的增加, 对于 $n = 2$ 的结点, 透射谱曲线在费米面附近出现更多的隧穿共振峰, 其中最低未占据轨道峰(LUMO)非常靠近费米能级, 说明此时电子主要是通过LUMO轨道进行传输的. 对于 $n = 3$ 的结点, LUMO隧穿共振峰离费米能级很近; 而对于

$n = 4$ 的结点, LUMO峰与HOMO峰都很明显, 但HOMO峰离费米能级更近, 对电子输运贡献更大. 各稳定结构结点在费米能级 E_F 处的透射率分别为 2.328, 1.167, 0.639, 1.237, 不像Si^[14], C^[29], Na^[30]等单原子链, 随原子数目增加, 其电导表现出奇偶振荡的现象.

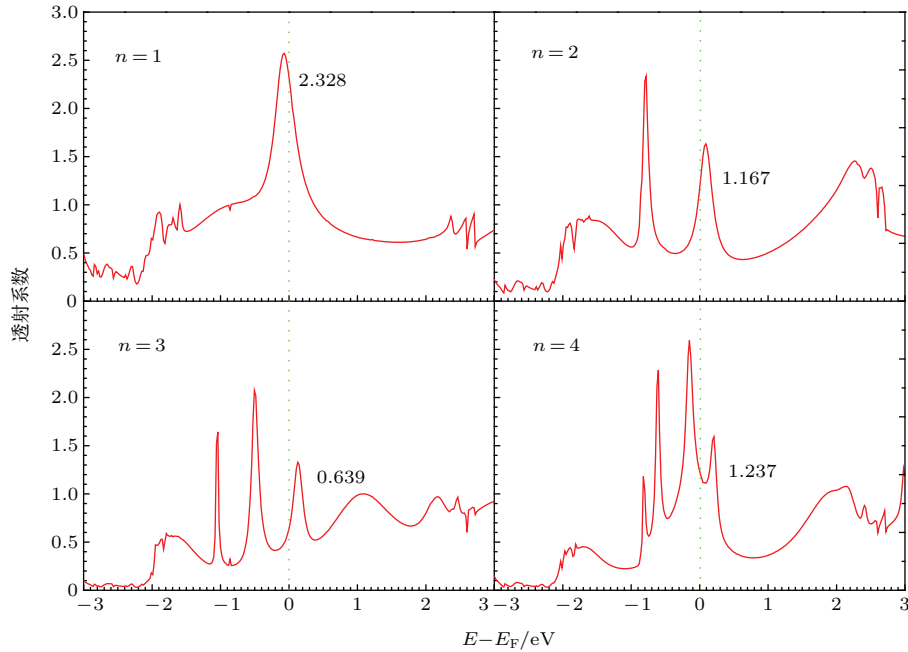


图3 Au-(GaAs)_n-Au 纳米结点零偏压下的透射谱

Fig. 3. Transmission coefficient as a function of energy for the Au-(GaAs)_n-Au nanoscale junctions under zero external bias.

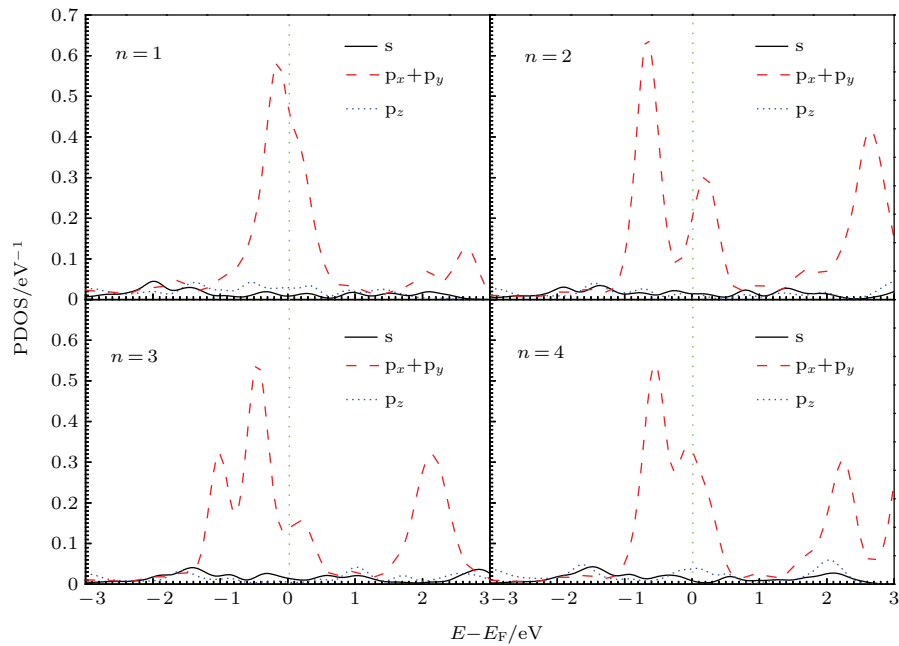


图4 (网刊彩色) Au-(GaAs)_n-Au 纳米结点零偏压下的投影态密度

Fig. 4. (color online) The projected density of states of the Au-(GaAs)_n-Au nanoscale junctions under zero external bias.

为了进一步理解稳定结构结点的电子传输通道,对 Au-(GaAs)_n-Au 各结点的投影态密度 (PDOS) 进行了计算,结果如图 4 所示.从图中容易看出, Ga, As 原子的 p_x+p_y 分态密度曲线与透射谱形状非常类似,有着对应的关系,而 s 电子与 p_z 电子没有类似对应关系,结果表明 Au-(GaAs)_n-Au 结点中 Ga, As 原子中 p_x+p_y 电子轨道相互作用形成了 π 键,扩展性较好,有利于电子的传输,对结点的量子输运起着决定性的作用,而 s 电子与 p_z 比较局域,对电子输运没有多大的贡献.

3.4 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.本文还计算了 Au-(GaAs)_n-Au 各稳定结构结点在外偏压为 0—2.0 V 范围内不同电压下的电流,即得到各结点的 I-V 关系,结果如图 5 所示.从图 5 可以看出,对于 n = 1, 2, 3 结点,其 I-V 近似呈线性关系,说明结点表现出类似金属电子输运特性,与文献 [10] 结果相符.而对于 n = 4 的结点,在 0—0.6 V 电压范围内, I-V 曲线呈近似线性关系;在 0.6—0.7 V, 0.8—0.9 V 的电压范围内,随着电压的增大,电流反而减小,即出现了负微分电阻现象;在 0.9—2.0 V 范围内, I-V 曲线呈近似线性关系.

为了分析 n = 4 的结点在一定电压范围内出现负微分电阻现象,本文计算了该结点在不同电压下的透射谱,图 6 中给出了 0—1.0 V 不同电压下的透射谱.由 (2) 式可知,在某一电压 V 下,通过结点的电流 I 决定于透射系数 T 在能量窗口 [-eV/2, eV/2] 内的积分,偏压窗在图中用垂直点线表示.在电压为 0—0.6 V 的范围内,透射谱的形状没有明显变化,随着外电压的增大,尽管 HOMO, LUMO 峰逐渐向低能级方向移动,但由于在偏压窗口内,费米能级附近的透射率差别不是很大,移进

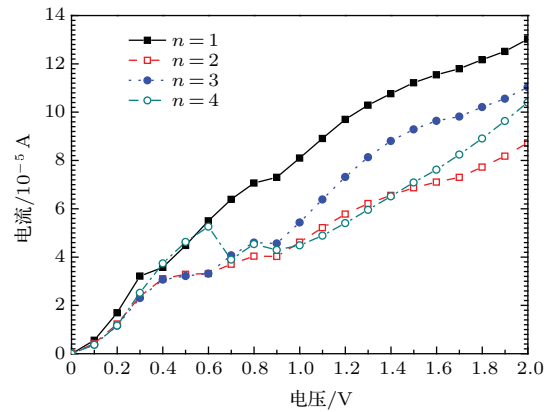


图 5 (网刊彩色) Au-(GaAs)_n-Au 纳米结点在不同电压下的电流

Fig. 5. (color online) The current of Au-(GaAs)_n-Au nanoscale junctions under different external bias.

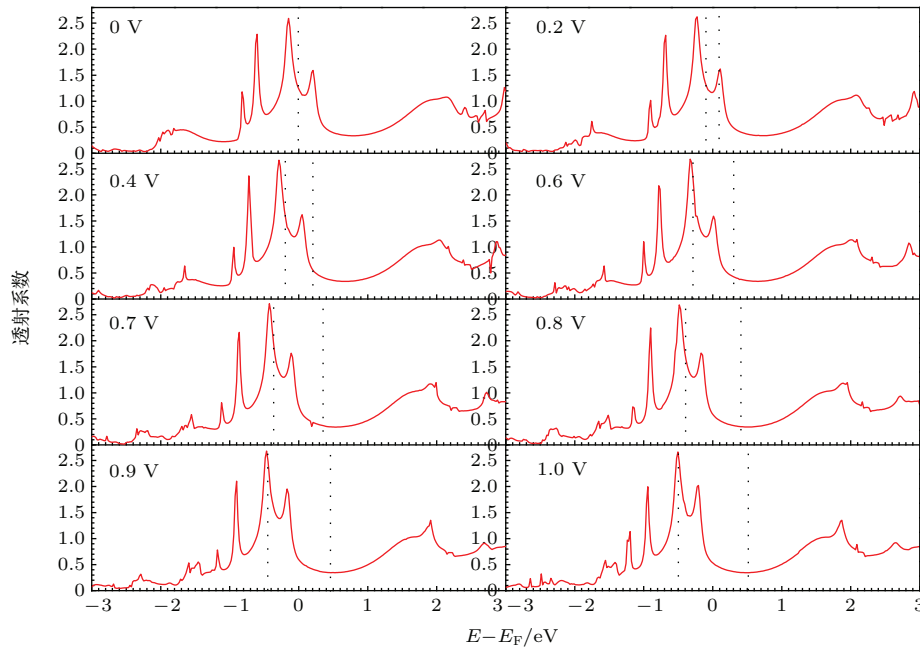


图 6 (网刊彩色) Au-(GaAs)₄-Au 纳米结点在不同电压下的透射谱

Fig. 6. (color online) Transmission coefficient as a function of energy for the Au-(GaAs)₄-Au nanoscale junctions under different external bias.

与移出偏压窗口的透射率几乎相等, 因此, 随着积分区间增大, 电流增大, I - V 呈线性关系. 而当电压从 0.6 增大到 0.7 V 时, 向低能方向移出的透射率比高能量方向移进偏压窗口的透射率要大得多, 导致在偏压窗口内的积分反而减小, 即出现了负微分电阻现象; 在电压为 0.8—0.9 V 的范围内也出现了类似情况, 只是没有 0.6—0.7 V 范围内明显; 当电压继续增大直到 2.0 V 时, 在这个范围内 I - V 又近似呈线性关系.

4 结 论

运用 DFT+NEGF 的第一性原理方法, 对 $(\text{GaAs})_n$ ($n = 1-4$) 直线原子链与 $\text{Au}(100)$ - 3×3 两半无限电极耦合构成的 $\text{Au}-(\text{GaAs})_n$ - Au 纳米结点在拉伸过程中的电子输运行为进行了模拟计算, 采用 LDA 泛函得到各结点处于稳定平衡结构时的 Ga—As 平均键长分别为 0.220, 0.224, 0.223, 0.223 nm, 与其他研究结果符合得很好; 平衡电导分别为 $2.328G_0$, $1.167G_0$, $0.639G_0$, $1.237G_0$, 说明电导较好, 但随原子数目的增加, 电导没有表现出奇偶振荡现象; 通过对原子链投影态密度的计算, 结果得到电子主要是通过 Ga, As 原子中 $p_x + p_y$ 电子轨道相互作用形成的 π 键进行传输的, 而 s 电子与 p_z 比较局域, 对电子输运没有多大的贡献. 在 0—2 V 的电压范围内, 对于 $(\text{GaAs})_n$ ($n = 1, 2, 3$) 原子链, 电流随电压的增大而增大, I - V 曲线呈线性关系, 表现出类似金属导电行为; 对于 $n = 4$ 的原子链, 在 0.6—0.7 V, 0.8—0.9 V 的电压范围内表现出负微分电阻现象. 相对于 LDA 泛函, GGA-PBE 泛函对于结点的电子结构计算并没有本质的提高. 希望本文计算结果能为 GaAs 纳米器件的设计与开发提供重要理论参考.

参考文献

- [1] Ohnishi H, Kondo Y, Takayanagi K 1998 *Nature* **395** 780
- [2] Bowler D R 2004 *J. Phys.: Condens. Matter* **16** R721
- [3] Yanson A I, Rubio-Bollinger G, van der Brom H E, Agrait N, van Ruitenbeek J M 1998 *Nature* **395** 783
- [4] Ferrer J, Martin-Rodero A, Flores F 1988 *Phys. Rev. B* **38** R10113
- [5] Smit R H M, Untiedt C, Yanson A I, van Ruitenbeek J M 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 266102
- [6] Smit R H M, Untiedt C, Rubio-Bollinger G, Segers R C, van Ruitenbeek J M 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 076805
- [7] Bahn S R, Jacobsen K W 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 266101
- [8] Nakamura A, Brandbyge M, Hansen L B, Jacobsen K W 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 1538
- [9] Tongay S, Senger R T, Dag S, Ciraci S 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 136404
- [10] Senger R T, Tongay S, Durgun E, Ciraci S 2005 *Phys. Rev. B* **72** 075419
- [11] Zhang T, Cheng Y, Chen X R 2014 *RSC Advances* **94** 51838
- [12] Liu F T, Cheng Y, Yang F B, Cheng X H, Chen X R 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 107401 (in Chinese) [柳福提, 程艳, 羊富彬, 程晓洪, 陈向荣 2013 物理学报 **62** 107401]
- [13] Liu F T, Cheng Y, Yang F B, Chen X R 2013 *Chin. Phys. Lett.* **30** 107303
- [14] Liu F T, Cheng Y, Yang F B, Chen X R 2014 *Physica E* **56** 96
- [15] Zhang D L, Xu Y L, Zhang J B, Miao X S 2012 *Phys. Lett. A* **376** 3272
- [16] Dyachkov P N, Zaluev V A, Piskunov S N, Zhukovskii Y F 2015 *RSC Adv.* **111** 91751
- [17] Liu F T, Cheng Y, Chen X R, Cheng X H 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 137303 (in Chinese) [柳福提, 程艳, 陈向荣, 程晓洪 2014 物理学报 **63** 137303]
- [18] Liu F T, Cheng Y, Yang F B, Chen X R 2014 *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* **66** 30401
- [19] Kohn W, Sham L 1965 *Phys. Rev. B* **140** A1133
- [20] Datta S 1995 *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [21] Reed M A, Zhou C, Miller C J, Burgin T P, Tour J M 1997 *Science* **278** 252
- [22] 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]
- [23] Ke S H, Baranger H U, Yang W T 2005 *J. Chem. Phys.* **122** 074704
- [24] Liu F T, Cheng Y, Chen X R, Cheng X H, Zeng Z Q 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 177304 (in Chinese) [柳福提, 程艳, 陈向荣, 程晓洪, 曾志强 2014 物理学报 **63** 177304]
- [25] Büttiker M, Imry Y, Landauer R, Pinhas S 1985 *Phys. Rev. B* **31** 6207
- [26] Troullier N, Martins J L 1991 *Phys. Rev. B* **43** 1993
- [27] Rocha A R, Garcia-Suarez V M, Bailey S, Lambert C, Ferrer J, Sanvito S 2006 *Phys. Rev. B* **73** 085414
- [28] Perdew J P 1986 *Phys. Rev. B* **33** 8822
- [29] Lang N D, Avouris Ph 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 3515
- [30] Tsukamoto S, Hirose K 2002 *Phys. Rev. B* **66** 161402

Theoretical calculation of electron transport properties of atomic chains of $(\text{GaAs})_n$ ($n = 1-4$)*

Liu Fu-Ti^{1)†} Zhang Shu-Hua²⁾ Cheng Yan^{3)‡} Chen Xiang-Rong³⁾ Cheng Xiao-Hong¹⁾

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

2) (College of Chemistry and Chemical Engineering, Yibin University, Yibin 644000, China)

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

(Received 29 October 2015; revised manuscript received 5 March 2016)

Abstract

Electron transport properties of the $(\text{GaAs})_n$ ($n = 1-4$) linear atomic chains, which are sandwiched between two infinite $\text{Au}(100)-3 \times 3$ leads, are investigated with a combination of density functional theory and non-equilibrium Green's function method from first principle. We simulate the $\text{Au}-(\text{GaAs})_n-\text{Au}$ nanoscale junctions breaking process, optimize the geometric structures of four kinds of junctions, calculate the cohesion energies and equilibrium conductances of junctions at different distances. The calculation results show that there is a stable structure for each nanoscale junction. The average bond-lengths of Ga-As in each chain at equilibrium positions for stable structure are 0.220 nm, 0.224 nm, 0.223 nm, 0.223 nm, respectively. The corresponding equilibrium conductances are $2.328G_0$, $1.167G_0$, $0.639G_0$, and $1.237G_0$, respectively. It means that each of all the junctions has a good conductivity. We calculate the transmission spectra of the all the chains. With the increase of atomic number in the $(\text{GaAs})_n$ ($n = 1-4$) chains, there appears no oscillation phenomenon for the equilibrium conductance. We calculate the projected densities of states of all nanoscale junctions at equilibrium positions, and the results show that electronic transport channel is mainly contributed by the p_x and p_y orbital electrons of Ga and As atoms. In the voltage range of 0–2 V, we calculate the current-voltage characteristics of junctions at equilibrium positions. With the increase of external bias, the current increases, and the I - V curves of junctions show linear characteristics for the $(\text{GaAs})_n$ ($n = 1-3$) atomic chains. However, there appears a negative differential resistance phenomenon in each of the voltage ranges of 0.6–0.7 V and 0.8–0.9 V for the $(\text{GaAs})_4$ linear atomic chain.

Keywords: Gallium Arsenide, atomic chains, electron transport, non-equilibrium Green's function

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

DOI: 10.7498/aps.65.106201

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11174214, 11204192), the Open Research Fund of Computational Physics Key Laboratory of Sichuan Province, Yibin University, China (Grant No. JSWL2015KF02), and the Scientific Research Key Project of Yibin University, China (Grant No. 2015QD14).

† Corresponding author. E-mail: futiliu@163.com

‡ Corresponding author. E-mail: ycheng@scu.edu.cn