

分子结电学特性的理论研究

李英德[†]

(潍坊学院物理与电子科学系 山东潍坊 261061)
(2005 年 12 月 2 日收到, 2006 年 1 月 15 日收到修改稿)

在第一性原理的基础上, 对共扼分子 2-氨基-5-硝基-1,4-二乙炔基-4'-苯硫醇基苯(2-amino-5-nitro-1,4-diethynyl-4'-benzenethiol-benzene)与金表面形成的分子结的电学特性进行了理论研究. 利用密度泛函理论计算了该分子及扩展分子的电子结构, 讨论了分子与金表面的相互作用, 定量地确定了耦合常数, 求出了电子的迁移强度. 利用弹性散射格林函数法研究了该分子结的伏—安特性. 计算结果表明, 当外加偏压小于 0.9V 时分子结存在电流禁区, 随着偏压升高, 分子结的电导出现平台特征. 分子结的电导特性和其电子结构密切相关, 分子扩展轨道为电荷的迁移提供了主要通道, 而局域轨道对电流贡献很小.

关键词: 化学吸附, 分子结, 分子电子学

PACC: 7340G, 7115A, 3450D, 7200

1. 引言

近年来, 单分子科学在理论和实验上都有了很大的发展, 分子器件的制备成为分子电子学的重要研究领域之一^[1-3]. 人们在实验室里也初步制成了一些分子器件, 并对这些分子器件的电学特性进行了测量. Bumm 等人^[4]利用 STM 作为一个电极测量了一个有机分子的电导. Reed 等人^[5]则采用两电极法在实验上第一次直接测量了一有机分子($C_6H_4S_2$)的电流-电压曲线, 表明了分子电导的独特性质; Chen 等人^[6]设计了分子层次的共振隧穿二极管; Reed 等人^[7]又设计了分子层次的三极管, 利用分子的极化特性来实现电流的增益.

在实验取得重大进展的同时, 理论工作者发展了各种方法来理解分子器件的工作原理, 寻找分子结构和分子电学性质的关系^[8-11]. Ratner 等人^[12]发展了弹性散射格林函数理论用于研究分子结的电子输运特性, 取得了一定的结果^[13,14], Datta 等人^[15]也采用了类似的方法. Hall 等人的工作^[16]表明 Ratner 和 Datta 的理论框架基本是等价的, 只不过 Ratner 的电流公式中没有考虑电子自旋简并度. 然而上述的理论方法给出的理论结果都不能较好地描述实验测

量的结果, 主要原因是这些方法没有准确地描述分子和金属间的相互作用.

若要让一个分子具有电子器件如二极管、三极管等的性质时, 分子中必须有能够在整个分子中自由移动的电子, 如含有苯环结构的分子中具有离域的电子—— π 电子. 此外, 为实现分子器件的功能, 分子应化学吸附于金属表面上, 即分子和金属原子形成化学键. 实验结果表明, 以硫氢官能团为末端的分子当和金属表面接触时, 硫原子上的氢原子容易解离, 从而硫原子和金属原子形成共价键, 这样该类分子就可以化学吸附于金属表面. 我们曾采用发展了的弹性散射格林函数方法^[17,18]对该类分子组成的分子线进行了大量的研究^[19-22]. 在本文中, 我们选择具有负微分电阻特性的共扼分子 2-氨基-5-硝基-1,4-二乙炔基-4'-苯硫醇基苯(2-amino-5-nitro-1,4-diethynyl-4'-benzenethiol-benzene)作为研究对象^[23,24].

在我们以前的讨论方法中, 分子的电子结构从第一性原理出发, 利用从头计算法给出, 分子和金属表面的相互作用利用前线轨道理论和微扰理论研究, 并假设分子和电子源的直接作用仅通过分子的首端和末端, 所取轨道也仅仅局限于最高占据轨道(HOMO)与最低未占据轨道(LUMO)附近的轨道, 由此尽管定量地确定了相互作用能常数, 但存在较大

[†] E-mail: wfilyd@sohu.com

的误差.而本文我们在讨论分子和金属表面的相互作用并计算电子转移强度时,对所有的原子及轨道都进行了考虑,结果将更为合理.

2. 理论模型和步骤

2.1. 分子结的电流

图 1 是一分子结的示意图,其中 M 为一分子, S 和 D 是两个与分子相连的电子源.



图 1 分子结示意图

根据文献 [9, 11], 仅考虑弹性散射过程, 可得电流密度

$$j = \frac{2emk_B T}{\hbar^3} \int_{eV}^{\infty} \left\{ \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_f - E_z + eV}{k_B T} \right) \right] - \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_f - E_z}{k_B T} \right) \right] \right\} |\mathcal{T}(E_z)|^2 \times n_{1d}^S(E_z) n_{1d}^D(E_z) dE_z, \quad (1)$$

其中, V 是外加偏压, E_f 是费米能量, T 是温度, $\mathcal{T}(E_z)$ 为迁移函数, $n_{1d}(E_z) = \rho_{1d} r_{3s}$ 为电子源 z 方向上的态密度, r_{is} ($i = 1, 2, 3$) 是电子的平均半径, ρ_{id} ($i = 1, 2, 3$) 为单位能态密度.

$$\begin{aligned} r_{1s} &= \frac{\pi \hbar}{2\sqrt{2mE_f}}, \quad r_{2s} = \frac{\hbar}{\sqrt{mE_f}}, \\ r_{3s} &= \hbar \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{\sqrt{2mE_f}}, \\ \rho_{1d}(E) &= \frac{1}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}}, \quad \rho_{2d}(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2}, \\ \rho_{3d}(E) &= \frac{mk}{\pi^2 \hbar^2}, \end{aligned} \quad (2)$$

考虑到自旋 (1) 式变为

$$j = \frac{4emk_B T}{\hbar^3} \int_{eV}^{\infty} \left\{ \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_f - E_z + eV}{k_B T} \right) \right] - \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_f - E_z}{k_B T} \right) \right] \right\} |\mathcal{T}(E_z)|^2 \times n_{1d}^S(E_z) n_{1d}^D(E_z) dE_z, \quad (3)$$

从而可得从 S 到 D 的总电流为

$$\begin{aligned} I &= Aj = \pi r_{3s}^2 j \\ &= \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{9ek_B T}{2\hbar E_f^2} \int_{eV}^{\infty} \left\{ \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_f - E_z + eV}{k_B T} \right) \right] - \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_f - E_z}{k_B T} \right) \right] \right\} |\mathcal{T}(E_z)|^2 \frac{dE_z}{E_z}, \quad (4) \end{aligned}$$

其中 A 为电子有效注入面积. 分子的电导即可表示为

$$G = \frac{\partial I}{\partial V}. \quad (5)$$

2.2. 耦合常数与迁移强度

由 (4) 式要求出总电流, 必须先求出输运函数 $\mathcal{T}(E_z)$. 根据弹性散射格林函数理论和文献 [20, 22], 从电子源 S 中的 l 态到电子源 D 中 l' 态的跃迁矩阵元可以表示为

$$T_{l'l} = \langle l' | T | l \rangle = \langle l' | U | l \rangle + \langle l' | U G U | l \rangle \quad (6)$$

若不考虑两电子源的直接耦合, 则

$$\begin{aligned} T_{l'l} &= \langle l' | U G U | l \rangle \\ &= \sum_{n, n'} \langle l' | U | n \rangle \langle n | G | n' \rangle \langle n' | U | l \rangle \\ &= \sum_{n, n'} \langle l' | U | n \rangle \frac{\langle n | n' \rangle}{(E - E_{n'}) + i\Gamma_{n'}} \langle n' | U | l \rangle \\ &= \sum_n \langle l' | U | n \rangle \frac{1}{(E - E_n) + i\Gamma_n} \langle n | U | l \rangle \\ &= \sum_n \sum_{k', k} \langle l' | U | k' \rangle \frac{\langle k' | n \rangle \langle n | k \rangle}{(E - E_n) + i\Gamma_n} \langle k | U | l \rangle, \end{aligned} \quad (7)$$

其中 k 代表不同的原子, n 代表扩展分子, Γ_n 是能级展宽, 可以通过求解自能的虚部得到^[9]. 从而能量为 E 的电子从 S 到 D 的输运函数为

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(E) &= \sum_{l', l} T_{l'l} \\ &= \sum_{l', l} \sum_n \sum_{k', k} \langle l' | U | k' \rangle \times \frac{\langle k' | n \rangle \langle n | k \rangle}{(E - E_n) + i\Gamma_n} \langle k | U | l \rangle \\ &= \sum_n \sum_{k', k} \left(\sum_{l'} \langle l' | U | k' \rangle \right) \times \frac{\langle k' | n \rangle \langle n | k \rangle}{(E - E_n) + i\Gamma_n} \left(\sum_l \langle k | U | l \rangle \right) \\ &= \sum_n \sum_{k', k} D | U | k' \rangle \frac{\langle k' | n \rangle \langle n | k \rangle}{(E - E_n) + i\Gamma_n} \langle k | U | S \rangle \\ &= \sum_n \sum_{k', k} Y_{DK'} \frac{\langle k' | n \rangle \langle n | k \rangle}{(E - E_n) + i\Gamma_n} Y_{kS}, \end{aligned} \quad (8)$$

其中耦合常数

$$\begin{aligned} Y_{ks} &= k|U|S \\ &= \sum_{n,\alpha,i} C_{n\alpha}^k k_\alpha |U|S_i C_{ni}^S \\ &= \sum_{n,\alpha,i} C_{n\alpha}^k k_\alpha |H|S_i C_{ni}^S, \\ Y_{Dk'} &= D|U|k' \\ &= \sum_{n,\beta,j} C_{n\beta}^D D_j |U|k'_\beta C_{n\beta}^{k'}, \\ &= \sum_{n,\beta,j} C_{n\beta}^D D_j |H|k'_\beta C_{n\beta}^{k'}, \end{aligned} \tag{9}$$

耦合常数的值可通过计算原子轨道间相互作用得到,而原子轨道间相互作用的计算可以直接利用基函数进行积分求得,也可利用 Gaussian98 程序的输出结果解矩阵方程获得.

进一步得到迁移强度(跃迁概率):

$$\begin{aligned} |T(E)|^2 &= \left| \sum_{kk'} Y_{Dk'} Y_{ks} \sum_n \frac{k' |n \ n| k}{(E - E_n) + i\Gamma_n} \right|^2 \\ &= \left| \sum_{kk'} Y_{Dk'} Y_{ks} \sum_n \frac{k' |n \ n| k}{(E - E_n) + i\Gamma_n^2} \right. \\ &\quad \left. \times (E - E_n - i\Gamma_n) \right|^2 \\ &= \left| \sum_{kk'} \sum_n Y_{Dk'} Y_{ks} \frac{k' |n \ n| k}{(E - E_n) + i\Gamma_n^2} (E - E_n) \right. \\ &\quad \left. - i \sum_{kk'} \sum_n Y_{Dk'} Y_{ks} \frac{k' |n \ n| k}{(E - E_n) + i\Gamma_n^2} \Gamma_n \right|^2 \\ &= \left(\sum_{kk'} \sum_n Y_{Dk'} Y_{ks} \frac{k' |n \ n| k}{(E - E_n) + i\Gamma_n^2} (E - E_n) \right)^2 \\ &\quad + \left(\sum_{kk'} \sum_n Y_{Dk'} Y_{ks} \frac{k' |n \ n| k}{(E - E_n) + i\Gamma_n^2} \Gamma_n \right)^2. \end{aligned} \tag{10}$$

2.3. 研究步骤

我们采取了以下研究步骤:首先优化自由分子的几何结构,并确定其在金表面上的优化距离,本工

作中取 3 个金原子组成的原子团簇来模拟金(111)面,其次将硫原子固定在优化位置上,重新优化分子和两个金原子团组成的扩展分子的几何结构并利用密度泛函理论计算其电子结构,第三,计算分子与金表面的耦合常数,确定电子转移强度,第四,在扩展分子两端加不同的电压,计算分子线的伏-安特性曲线和电导曲线.几何结构的优化和电子结构的计算在 GAUSSIAN98 程序包上进行,计算方法采用杂化的密度泛函理论(B3LYP),选 LanL2DZ 作为基矢.

3. 计算结果与讨论

3.1. 分子与金表面的相互作用

图 2 为优化后的扩展分子图.优化结果表明^[21]与自由分子相比,由于金平面的影响,扩展分子的相应键长与键角发生了一定的变化,进一步分析扩展分子的轨道,发现 HOMO 和 HOMO-1 两条轨道的扩展性很强,说明分子与金表面形成了很强的共价键,即分子是化学吸附于金表面上的,两者存在很强的相互作用.

按照前面所述的计算方法,我们对分子中各原子与金表面的耦合常数进行了计算,结果见表 1.从表中可以看出,与金表面相连的 S 原子(分子的两端)与金表面的相互作用分别为 $Y_{1S} = 0.096\text{eV}$ 和 $Y_{DN} = 0.094\text{eV}$,而与之相邻的苯环的相互作用同样不可忽视,特别是 C1 和 C27,其相互作用分别为 -0.17eV 和 -0.18eV ,其绝对值甚至要大于 S 原子.在我们以前的计算方法中,我们得到 $Y_{1S} = 0.201\text{eV}$ 和 $Y_{DN} = 0.198\text{eV}$,并且忽略了其他原子的相互作用,这说明我们以前采用的理论方法存在较大的误差.

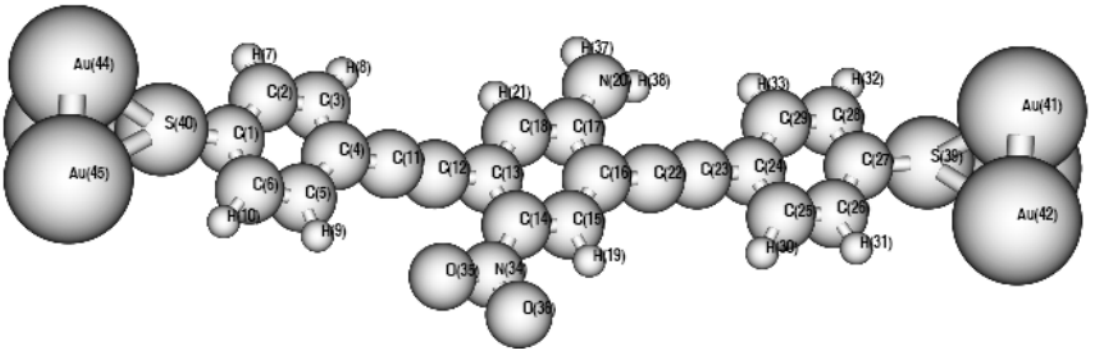


表 1 耦合常数

原子	与 S 极耦合常数/eV	与 D 极耦合常数/eV
C1	$-1.737997600923033 \times 10^{-1}$	$-1.311254092238871 \times 10^{-5}$
C2	$3.072535759530699 \times 10^{-2}$	$-1.246775051953571 \times 10^{-6}$
C3	$9.058241441835245 \times 10^{-3}$	$-1.026294939477313 \times 10^{-5}$
C4	$-2.592314989633719 \times 10^{-3}$	$-2.592489207858626 \times 10^{-7}$
C5	$1.367211290215372 \times 10^{-2}$	$-1.072948254809253 \times 10^{-5}$
C6	$4.428515780625032 \times 10^{-2}$	$-5.583221014338406 \times 10^{-7}$
H7	$-1.581418263935194 \times 10^{-2}$	$-2.955535434042705 \times 10^{-10}$
H8	$-2.572760230248495 \times 10^{-4}$	$-6.181768934230652 \times 10^{-8}$
H9	$-6.509665795782821 \times 10^{-5}$	$3.290901131839558 \times 10^{-8}$
H10	$-2.457201634601661 \times 10^{-2}$	$-6.512062919154545 \times 10^{-8}$
C11	$4.836302248443709 \times 10^{-5}$	$-5.993728199989562 \times 10^{-5}$
C12	$-1.306355381450852 \times 10^{-3}$	$-1.482659278350545 \times 10^{-5}$
C13	$-1.006543298386541 \times 10^{-5}$	$-1.315072649097922 \times 10^{-4}$
C14	$-1.211256016967406 \times 10^{-4}$	$-3.311485040759791 \times 10^{-5}$
C15	$-2.050303231841353 \times 10^{-5}$	$-2.323798909510263 \times 10^{-4}$
C16	$-1.242628982364586 \times 10^{-4}$	$-5.069612890107885 \times 10^{-5}$
C17	$-1.162971332136164 \times 10^{-5}$	$-1.211922470740275 \times 10^{-4}$
C18	$-2.380444086078104 \times 10^{-4}$	$-8.601591175960725 \times 10^{-6}$
H19	$8.019622562422390 \times 10^{-8}$	$-1.262138000508329 \times 10^{-6}$
N20	$-1.561859582499751 \times 10^{-5}$	$-9.514492265934236 \times 10^{-5}$
H21	$-1.350709161823935 \times 10^{-7}$	$-3.827703689270392 \times 10^{-8}$
C22	$-9.765501103412402 \times 10^{-6}$	$-1.378181812591560 \times 10^{-3}$
C23	$-4.380175777033976 \times 10^{-5}$	$-1.682657697659226 \times 10^{-4}$
C24	$4.498571209766077 \times 10^{-6}$	$-2.338120820548209 \times 10^{-3}$
C25	$-9.804737566905219 \times 10^{-6}$	$1.254326312799324 \times 10^{-2}$
C26	$-2.033400806804639 \times 10^{-7}$	$4.411311604435579 \times 10^{-2}$
C27	$-1.205658462243044 \times 10^{-5}$	$-1.780435487666417 \times 10^{-1}$
C28	$-1.377948653377011 \times 10^{-6}$	$3.263248533295337 \times 10^{-2}$
C29	$-9.620524930436219 \times 10^{-6}$	$9.200643937168596 \times 10^{-3}$
H30	$5.059109175214592 \times 10^{-8}$	$-2.421306816069979 \times 10^{-4}$
H31	$-4.496824550880925 \times 10^{-9}$	$-2.340734599843606 \times 10^{-2}$
H32	$2.061491292744441 \times 10^{-8}$	$-1.609413734419054 \times 10^{-2}$
H33	$-3.373332865077893 \times 10^{-7}$	$-2.538527681888608 \times 10^{-4}$
N34	$-2.492108707933830 \times 10^{-5}$	$-9.410264559388006 \times 10^{-6}$
O35	$-5.161950013177119 \times 10^{-5}$	$-1.921496671178971 \times 10^{-5}$
O36	$-5.843997802826748 \times 10^{-5}$	$-1.158314631072255 \times 10^{-5}$
H37	$-1.213477548208560 \times 10^{-7}$	$2.551771740178201 \times 10^{-8}$
H38	$1.031164119521891 \times 10^{-8}$	$-1.990534080682172 \times 10^{-6}$
S39	$-4.364390753952452 \times 10^{-7}$	$9.405674347391980 \times 10^{-2}$
S40	$9.559567576933674 \times 10^{-2}$	$-1.662149576605478 \times 10^{-6}$

根据计算出的耦合常数,我们进一步计算了电子在不同电压下在分子中的跃迁概率,结果见图 3,其中(a)为 0—3V 时的跃迁概率(b)为更清楚起见,给出的 0.9—1.0V 时的跃迁概率.从中可以看出,跃迁概率在不同电压下呈现不同的峰值,由于电子在分子线内的输运,主要是通过未占据轨道实现的,所以可以预见不同的跃迁概率与未占据轨道的特征是紧密相关的.

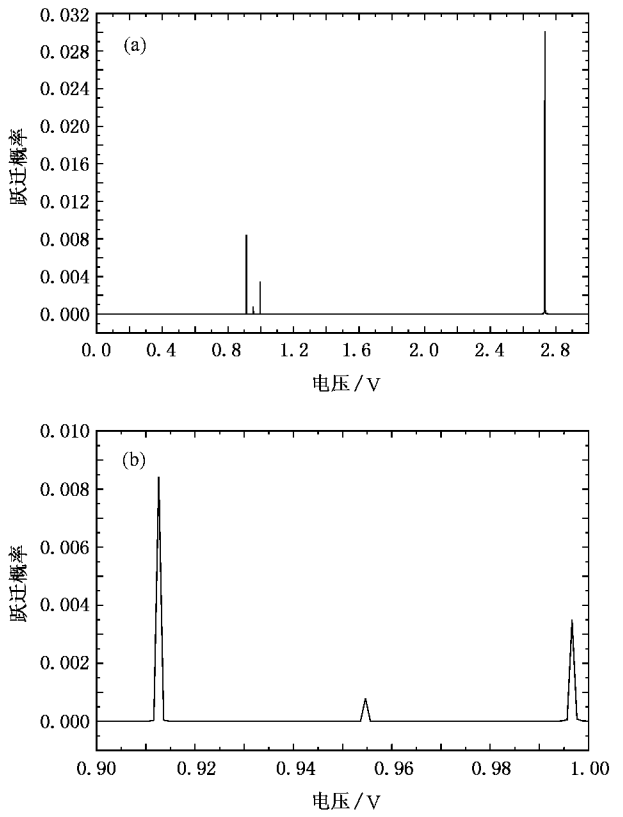


图 3 不同电压下的电子跃迁概率

3.2. 分子线的伏-安特性与电导特性

要计算分子线的电流,根据公式还应确定该金属-分子体系的平衡费米能级.一种合理的近似是设费米能级在禁带的中部,更精确的应按文献[21]中的公式进行计算.经计算可得费米能级, $E_f = -4.89\text{eV}$.

利用前面建立的理论模型及计算出的费米能级和跃迁概率,我们计算了图 2 所示分子器件的电流和电导.图 4 显示了该器件的电流和电导随外加偏压的变化曲线,由图可清晰地看到分子器件的电流呈现出欧姆特性,分子器件的电导呈现出平台特征.分子结电导的平台特征取决于分子的量子化电子结

构,也反映了量子线的一个普遍性质.

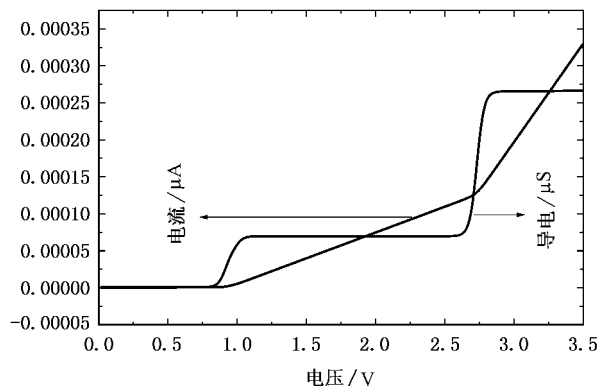


图4 分子线伏-安特性与电导特性曲线

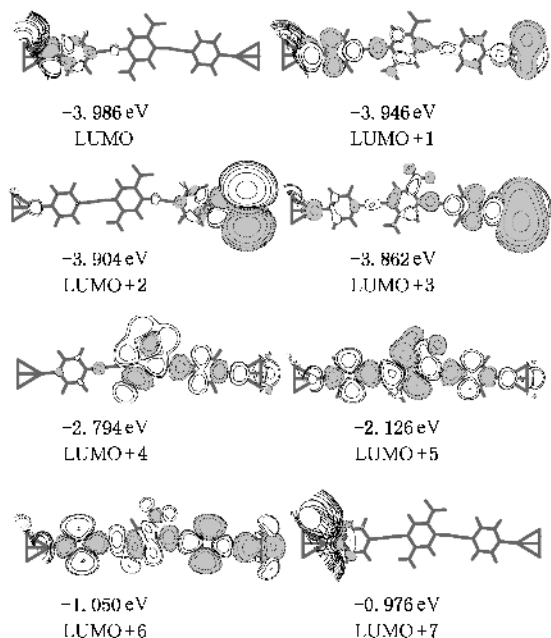


图5 未占据轨道电荷密度分布图

由于电子的输运主要是通过非局域的未占据轨道实现的,所以这些轨道对电子在金表面和分子间的输运具有重要的作用,也就是说,当电子在这些轨道上输运时,我们可以预料分子电导的欧姆特性,而

其他的局域轨道电子只能依靠隧道效应来输运.为了更清楚地研究未占据轨道对电子输运的影响,我们画出了最低未占据轨道 LUMO 附近八条轨道的能级和电荷密度分布情况,见图 5.

由图可见, LUMO 到 LUMO + 3 四条轨道靠得比较近,其中 LUMO + 1 和 LUMO + 3 两条轨道扩展性较好.当偏压小于 0.9V 时,费米能级在 LUMO 以下,无电流流过分子器件,即存在一个电流禁区.偏压达到 0.9V 时 LUMO 导通,但由于该轨道扩展性很差,所以对电流贡献很小,当偏压继续增加至 1V 左右时, LUMO + 1, LUMO + 2, LUMO + 3 相继开通,由于 LUMO + 1 和 LUMO + 3 良好的扩展性,电流迅速增加.此后,随偏压增加直到 2.7V,由于 LUMO + 4 局域性很强,对电流贡献很小,电流近似线性增加,分子器件呈现出欧姆特性.当偏压继续增加至约 2.7V 时,通道 LUMO + 5 开通,由于该轨道扩展性很强,电流迅速增加出现转折点.此后,分子器件又呈现出欧姆特性.根据 LUMO + 6 和 LUMO + 7 轨道的特点,由以上规律我们可以预见当电压达到 3.8V 时电流将出现另一个转折点.

未占据轨道对电子输运的影响,我们可以对照图 3 的电子跃迁概率图,在 0—3V 之间有 4 个明显的概率峰,它们分别对应 LUMO + 1, LUMO + 2, LUMO + 3 和 LUMO + 5,其峰值的大小直接反映了该轨道扩展性的强弱.

本文从第一性原理出发,利用量化计算方法和弹性格林函数方法描述了分子结电子输运性质.目前,该理论模型仅适用于单分子情况,在目前的理论体系中,我们没有考虑到外加电场对分子的电子结构的影响.由于金原子团非常小,因此金原子团的电荷分布和半无限大的金表面的电荷分布是不相同的,如镜像电荷的存在.另外,在本文中我们仅考虑了单分子与表面的相互作用,表面上其他分子将对该作用产生影响.所有这些都是将来需要进一步做的工作.

[1] Cui X D, Primak A, Zarate X, Tomfohr J, Sankey O F, Moore A L, Moore T A, Gust D, Harris G, Lindsay S M 2001 *Science* **294** 571

[2] Mujica V, Kemp M, Ratner M A 1994 *J. Chem. Phys.* **101** 6849
Ventra M D, Pantelides S T, Lang N D 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 979

[4] Bumm L A, Arnold J J, Cygan M T, Dunbar T D, Burgin T P, Jones II L, Allara D L, Tour J M, Weiss P S 1996 *Science* **271** 1705

[5] Reed M A, Zhou C, Muller C J, Burgin T P, Tour J M 1997 *Science* **278** 252

- [6] Chen J , Reed M A , Rawlett A M , Tour J M 1999 *Science* **286** 1550
- [7] Reed M A , Tour J M 2000 *Sci. Am.* **282** 86
- [8] Wang C K , Luo Y 2003 *J. Chem. Phys.* **119** 4923
- [9] Li Z L , Wang C K , Luo Y , Xue Q K 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1490 (in Chinese) 李宗良、王传奎、罗 毅、薛其坤 2004 物理学报 **53** 1490]
- [10] Zou B , Li Z L , Wang C K , Xue Q K 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1341 (in Chinese) 邹 斌、李宗良、王传奎、薛其坤 2005 物理学报 **54** 1341]
- [11] Li Z L , Wang C K , Luo Y , Xue Q K 2005 *Chin. Phys.* **14** 1036
- [12] Mujica V , Kemp M , Ratner M A 1994 *J. Chem. Phys.* **101** 6849
- [13] Yaliraki S N , Kemp M , Ratner M A 1999 *J. Am. Chem. Soc.* **121** 3428
- [14] Mujica V , Roitberg A E , Ratner M A 2000 *J. Chem. Phys.* **112** 6834
- [15] Tian W , Datta S , Hong S , Reifenberger R , Henderson J I , Kubiak C P 1998 *J. Chem. Phys.* **109** 2874
- [16] Hall L , Reimers J R , Hush N S , Silverbrook K 2000 *J. Chem. Phys.* **112** 1510
- [17] Wang C K , Fu Y , Luo Y 2001 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **3** 5017
- [18] Luo Y , Wang C K , Fu Y 2002 *J. Chem. Phys.* **117** 10283
- [19] Li H H , Li Y D , Wang C K 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1239 (in Chinese) 李红海、李英德、王传奎 2002 物理学报 **51** 1239]
- [20] Wang C K , Li H H , Li Y D , Luo Y , Fu Y 2002 *Science in China (A)* **32** 704 (in Chinese) 王传奎、李红海、李英德、罗 毅、付英 2002 中国科学 A 辑 **32** 704]
- [21] Li Y D , Li H H , Wang C K 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2349 (in Chinese) 李英德、李红海、王传奎 2002 物理学报 **51** 2349]
- [22] Li Y D , Wang C K 2003 *Chin. J. Chem. Phys.* **16** 363 (in Chinese) 李英德、王传奎 2003 化学物理学报 **16** 363]
- [23] Seminario J M , Zacarias A G , Tour J M 2000 *J. Am. Chem. Soc.* **122** 3015
- [24] Chen J , Wang W , Reed M A 2000 *Appl. Phys. Lett.* **77** 1224

A theoretical study of electrical properties of molecular junction

Li Ying-De[†]

(Department of Physics , Weifang University , Weifang 261061 , China)

(Received 2 December 2005 ; revised manuscript received 15 January 2006)

Abstract

Basing on first principls , we investigate the electrical properties of a molecular junction consisting of 2-amino-5-nitro-1,4-diethyny-4'-benzenethiol-benzene molecule and gold surface. Density functional theory is employed to obtain the electronic structures of the molecule and the extended molecule. Then we determine the interaction energy between the molecule and the gold surface quantitatively. The elastic Green function method is applied to study its current-voltage properties. Numerical results show that when the external applied bias is lower than 0.9V , there is a current gap. With increasing bias , the conductance of the junction exhibits plateaus. These electrical properties are closely related to the electronic structures of the molecular junction. The extended molecular orbits have great contribution to the charge transport , while localized molecular orbits contributes but little to the current where charge transport takes place by tunneling.

Keywords : chemisorption , molecular junction , molecular electronics

PACC : 7340G , 7115A , 3450D , 7200

[†] E-mail : wfilyd@sohu.com