

电极位置和截面尺寸对分子器件输运性质的调控

樊帅伟 王日高

Effect of electrode position and cross section size on transport properties of molecular devices

Fan Shuai-Wei Wang Ri-Gao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 67, 213101 (2018) DOI: 10.7498/aps.67.20180974

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20180974>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I21>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[导线非共线的分子器件输运性质的第一性原理研究](#)

First-principles study on transport property of molecular device with non-collinear electrodes

物理学报.2018, 67(9): 097301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20172221>

[双酚 A 在氧化石墨烯表面吸附的分子动力学模拟](#)

Molecular dynamics simulations of the adsorption of bisphenol A on graphene oxide

物理学报.2016, 65(13): 133102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.133102>

[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>

电极位置和截面尺寸对分子器件输运性质的调控*

樊帅伟[†] 王日高

(三峡大学理学院物理系, 宜昌 443002)

(2018年5月16日收到; 2018年8月25日收到修改稿)

研究表明分子器件的性能受器件结构搭建精度影响, 分子与电极接触构型的微弱变化可能引起电输运特性较大差异. 本文运用密度泛函理论和非平衡格林函数相结合的方法, 研究了由金纳米线与 benzene-1, 4-dithiol (BDT) 形成的分子结的电输运性质. 通过对不同的 Au-BDT 接触构型输运性质的研究, 发现当两电极处于对位构型时, 有较好的电荷输运行为, 而且比较符合制备工艺要求; 当电极偏离轴线的角度不大于 5° , 且电极散射截面尺寸不小于 4×4 时, 该分子结体系的电导和透射谱均比较稳定. 电极截面尺寸小于 4×4 或者电极偏离轴线的夹角大于 5° 时, 透射谱在费米能级附近出现不连续现象, 导致体系电导降低. 较小电极截面尺寸或者电极以较大角度偏离轴线将导致该分子结体系电导降低和透射谱连续性降低, 主要是组成电极的金原子轨道与苯基分子轨道耦合缺失造成的. 该研究为 Au-BDT-Au 体系设计和制备过程中电极的位置及电极截面尺寸做了科学的界定.

关键词: 接触构型, 透射谱, 轨道耦合缺失

PACS: 31.15.at, 73.63.Rt, 85.65.+h, 85.35.-p

DOI: 10.7498/aps.67.20180974

1 引言

分子电子学是在分子的层面上构筑电路中各种元器件, 并使其能够具有等同于传统晶体管和微电子器件的功能. 自 20 世纪 70 年代 Aviram 和 Ratner^[1] 提出基于 D- σ -A 模型构建分子整流器以来, 分子电子学引起了广泛关注. 随着纳米制备技术的发展和完善, 尤其是扫描隧道显微镜和原子力显微镜等实验设备和实验技术的出现, 分子电子学的研究进入到一个崭新阶段. 1997 年, Reed 等^[2] 首次采用力学可控劈裂结方法测量了“金电极-硫苯分子-金电极”分子结电输运性质, 从此开始了严格意义上的分子电子学实验研究. 实验上, 采用分子自组装、力学可控劈裂结、纳米刻蚀技术和扫描探针显微术等, 将单原子链、烷烃链分子、有机共轭分子、脱氧核糖核酸 (DNA)、富勒烯、碳纳米管以及石墨烯条带等, 有效地与电极形成稳定连接, 搭

建出多种模型分子器件^[3]. 迄今, 纳米量级的分子电子器件中, 负微分电阻效应、磁电阻效应、分子场效应管、分子整流器、分子自旋阀、单分子可逆光电开关和单分子热电输运器件等已被报道^[4-10].

理论研究方面也提出了多种模拟分子器件性质的方案, 包括弹性散射矩阵理论 + Lowdin 分割操作技术^[11]、凝胶模型的散射矩阵方法^[12]、有限元方法 + 非平衡格林函数^[13]、密度泛函理论 + 非平衡格林函数^[14,15] 等, 特别是密度泛函理论 + 非平衡格林函数方法, 因其能完全自洽处理开放体系在外加电场下的非平衡态电子输运问题, 已经得到了理论研究者认可和广泛使用^[16-27].

理论方面的研究对理解输运机制, 发现新的输运现象, 获得新的输运调控方案和指导实验研究起着重要作用. 湖南大学 Fan 和 Chen^[18] 在金原子和三聚苯分子 (phenalenyl) 组成的分子结体系中, 发现当连接位置为相对于中心原子的两个二近邻原子或者一个二近邻和一个三近邻原子时, 器件的

* 湖北省自然科学基金 (批准号: 2017CFB527) 和鸿之微研究生学术研究资助计划 (批准号: hzwtech-PROP) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: phyfsw@ctgu.edu.cn

电流曲线会呈现明显的负微分电阻效应;当连接位置为相对于中心原子的一个二近邻和一个三近邻原子时,该体系表现出整流效应.不同连接位置导致输运行为变化的主要原因在于三聚苯分子分子连接位置对其费米能级附近的前线分子轨道的分布有较大影响.当分子通过两个二近邻原子连接时,费米能级附近的前线分子轨道处于离域态,是导通性很好的电子传导通道,通过器件的电流随偏压的增大明显增大;当连接位置由二近邻位置转移到三近邻位置时,费米能级附近的前线分子轨道被局域化,由导通态变成关闭态,阻碍电子流通,通过器件的电流大幅减小.研究表明,负微分电阻效应的出现是因为传导通道在特定偏压下被抑制,迅速由高导态变为低导态造成的^[19].在金原子和铁卟啉类似的碳纳米管组成的分子结体系中,发现器件的磁电阻率与其磁序列排布有关,在外部磁场的作用下,通过改变器件磁序列分布,器件的磁电阻率从19%增长到1020%,磁序列排布的改变将导致器件的最高占据分子轨道与最低未占据分子轨道的间距以及分子态在器件中各区域的分布发生变化,从而使磁序列排布成为显著调控器件磁电阻效应的手段^[22].近期在非线性的聚卟啉分子中也发现了负微分电阻效应,而且负微分电阻效应与卟啉分子间的夹角密切相关,这种依赖于分子架构的负微分电阻效应主要是偏压调制的电极态和分子轨道共振输运的杂化造成的^[26].在石墨烯电极和齐聚苯乙炔分子构造的器件中,当添加失电子官能团氨基时出现正向整流,添加得电子官能团硝基时出现反向整流,同时添加氨基和硝基官能团时,会出现正反向整流交替现象^[28].有机噻吩二聚物被氨基和硝基取代后会产生明显负微分电阻效应和整流效应^[29],这些研究表明官能团也可有效控制分子器件的输运特性.

苯分子是由六个碳原子构成的一个正六边形环,每个碳原子外接一个氢原子,碳原子最外层电子发生s杂化,碳原子环形成共轭 π 键,自由移动 π 电子具有良好导电性能^[30,31],因此含 π 键有机分子可用来制作分子电子器件,基于苯基结构的芳香族有机化合物也成为分子电子学研究的热点之一.在理论和实验上对含苯环分子输运行为的研究都已有相关报道,di Ventra等^[32]理论研究表明,分子benzene-1,4-dithiol (BDT)和电极连接结构对器件输运特性有较大影响;Xia等^[16]发现

由 benzenedithiol 分子构成器件具有负微分电阻效应.

研究表明分子器件易受器件结构搭建精度的影响,然而在目前的实验条件下,仍难以保证分子与金属电极的界面处在一个理想状态,界面的细微变化(分子末端原子的连接位置、分子的转动以及电极尺寸等)可能引起电输运特性极大不同^[18,24,26,33-35],但对于成夹角的电极所构建的分子器件,以及电极截面尺寸对分子器件的电导和透射谱的影响都鲜有研究,这类研究为理解和预测分子器件的导电特性能够提供理论指导,而且在分子器件制备过程中,需要对器件的产业化设定相关参数的浮动标准,包括电极夹角和电极截面等.因此开展电极间夹角和电极的截面尺寸对电输运性能影响的研究,对分子器件的实际制备和应用起着至关重要的作用.

本文以实验制备的BDT分子为研究对象^[2],运用密度泛函理论和非平衡格林函数相结合的方法^[14,15],研究基于BDT分子构造的分子结的电输运性质,以及影响该分子器件电输运性质的因素.重点关注电极相对位置对基于苯基分子器件的透射谱和电导的影响,以及电极间的夹角和电极截面尺寸对分子器件电导和透射谱的影响.研究发现:当两个电极处于对位时,有较好的电输运性质,而且制备工艺上较易实现;当电极偏离轴线夹角在 5° 范围内及电极散射截面尺寸不小于 4×4 时,该分子器件呈现稳定的电导和透射谱.

2 模型及计算方法

为了研究电极间相对位置对输运性质的影响,利用BDT分子和金纳米线构造不同的双探针系统,如图1所示.该分子结模型由三部分组成,分别为左电极、右电极和中间散射区.其中电极截面尺寸由 4×4 超原胞组成,中间散射区包含BDT分子,左右电极分别由四层金原子作为缓冲层,这样可以保证电极和散射区平缓过渡,优化结果表明这些缓冲层足以屏蔽左右电极对中间散射区的扰动.两个电极之间沿着输运方向与垂直于输运方向区域采用开放的边界环境.为了增加分子与电极之间电子云重叠,采用基于第一性原理的软件VASP^[36]对分子器件模型进行了结构优化,且作用在每个原子上的Hellman-Feynman力都小于 $0.02 \text{ eV}/\text{\AA}$.为

为了确保分子与电极接触良好, 将分子两端与电极接触的氢原子用硫原子取代 [32,35], 结果表明硫原子与金电极间距离为 2.20 Å, 这与 Cui 等 [37] 报道的结果一致. 在计算过程中采用局域密度近似为交换关联势 [38], 实空间积分网格的截断能设置为 50 hartree (1 hartree = 27.2114 eV).

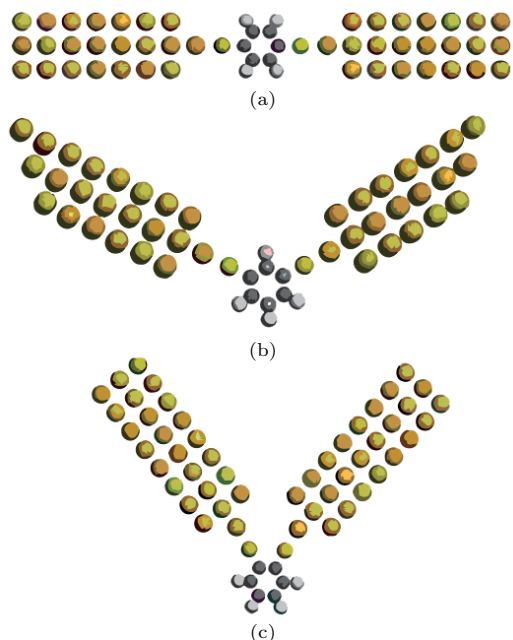


图 1 电极处于对位 (a)、间位 (b) 和邻位 (c) 的模型, 两电极间的夹角分别是 180°, 120° 和 80°

Fig. 1. Counter-position model (a), meta-position model (b) and ortho-position model (c). The angles between two electrodes are 180°, 120°, and 80°, respectively.

3 结果讨论

3.1 金电极连接位置对透射谱的影响

为了研究该分子器件的导电特性, 分别计算了两电极处于对位、间位和邻位时的透射谱. 在计算过程中, 电极温度设为 100 K, 由于电导由 $G = G_0 T(E_F)$ 确定, $T(E_F)$ 是透射概率 [14]. 因此, 仅计算了费米面附近的透射谱, 三种结构的透射谱如图 2 所示.

三种结构的透射谱表明, 当电极处于邻位 (ortho-position) 时, 透射率最好. 由邻位电极结构 (图 1 (c)) 可知, 当电极处于相邻位置时, 由于金原子半径较大, BDT 分子的尺寸相对较小, 导致电子会从一个电极直接跃迁到另外一个电极, 这将形成良好的电荷通过行为, 但电子没有经过散射区, 对实际电路设计和开发是无意义的. 当电极处于间位 (meta-position) 时, 透射率最差, 表明电极处于

间位连接时最不利于电荷的传输. 当两电极处于对位 (counter-position) 连接时, 透射率大于间位的情况, 较利于电荷的输运, 而且电极间距较大、在一直线上, 制备过程比较利于控制. 因此, 当电极处于对位时是研究 BDT 分子器件输运性质最合适的模型, 本文关于电极与轴线间的夹角, 以及电极的截面尺寸对其电导和透射谱影响的研究, 均采用对位连接作为模型. 电极连接位置的变化引起器件透射能力的差异, 主要原因是电极连接位置的变化导致分子与电极之间硫原子电子态的耦合及相互作用发生变化 [35].

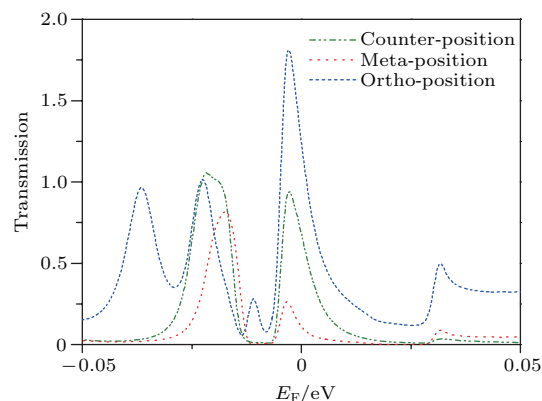


图 2 三类不同电极位置的透射谱 (温度设置为 100 K)

Fig. 2. Transmission spectra based on three kinds of model at 100 K.

3.2 电极间夹角对分子器件的电导和透射谱的影响

在分子电子学器件的制备中, 目前的制备工艺还难以精确控制两个电极之间的夹角, 从而导致理论计算结果与实验结果之间产生一定偏差. 因此, 研究电极间夹角对器件性能的影响, 从而标定电极

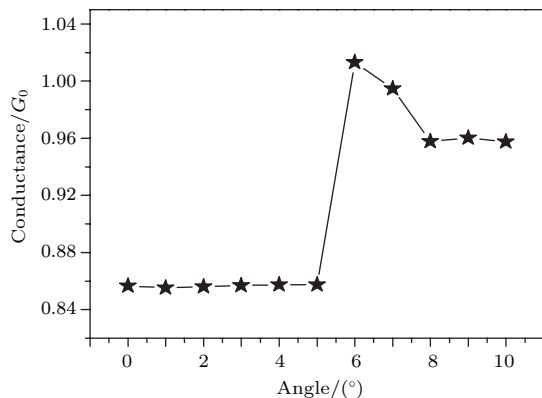


图 3 分子器件电导随两电极之间夹角 (0°—10°) 的变化
Fig. 3. Conductance of molecular device versus the angle (0°—10°) between two electrodes.

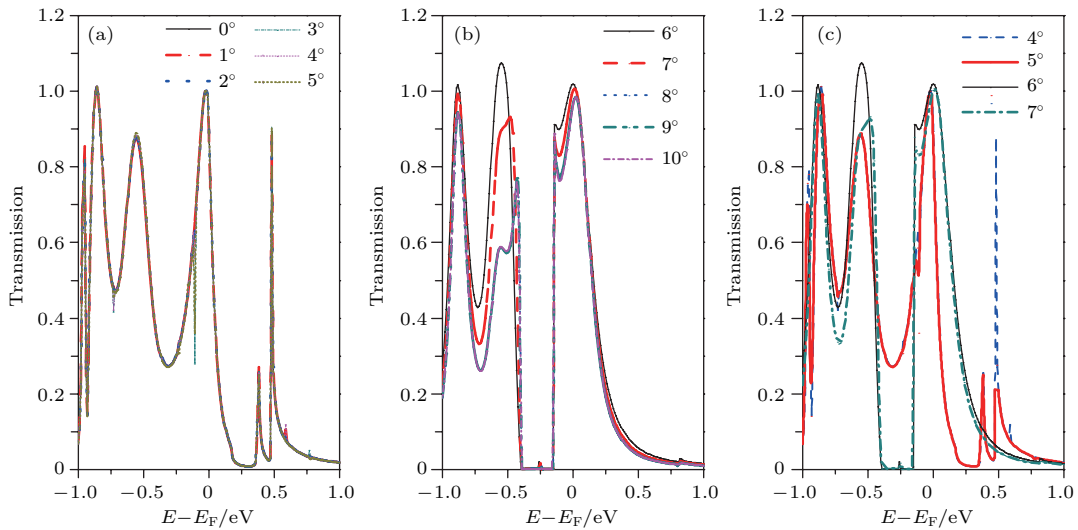


图4 分子器件的透射谱随两电极之间夹角的变化 (a) 0°—5°; (b) 6°—10°; (c) 4°—7°
 Fig. 4. Transmission versus the angle between two electrodes: (a) 0°—5°; (b) 6°—10°; (c) 4°—7°.

间夹角的范围, 对器件的设计和制备具有重要意义. 为了研究电极间夹角对分子器件性能的影响, 计算两电极之间夹角在0°—10°之间变化时, 该分子结的电导和透射谱. 在对位电极结构模型中, 保持一个电极位置不变, 另一电极以硫原子为中心顺时针依次旋转1°, 得到的电导与电极偏离轴线夹角的关系如图3和图4所示. 图3表明当电极间偏角在5°以内时, 电导波动比较平稳, 而且电导的偏差小于3%; 当电极间的偏转角超过5°时, 电导有明显变化. 图4表明当两电极间夹角从5°增大到6°时, 透射谱有明显的变化. 这说明在实验制备时, 电极偏离轴线夹角的最大误差应该限定在5°以内.

3.3 电极截面尺寸对分子器件的电导和透射谱的影响

在分子器件设计和制备过程中, 电极截面的尺寸也是需要考虑的重要因素之一, 为了研究电极截面尺寸对其输运性质的影响, 又构造了截面尺寸分别为3×4和5×4的电极, 如图5所示. 计算得到的电导分别为0.6813G₀和0.8051G₀, 其中G₀ = 2e²/h. 当电极截面尺寸为4×4时, 电导为0.8567G₀. 为了解释电极截面尺寸的差异导致电导变化的原因, 计算了3种电极截面尺寸相对应的透射谱, 如图6所示. 透射谱表明, 当电极截面为3×4时, 透射谱在费米面附近(-0.40—-0.22 eV)不连续, 导致体系电导降低; 当电极截面为4×4和5×4时, 透射谱在费米面附近连续变化, 导致电导增大, 更有利于电荷传输. 根据电极截面大小对电输运行

为的影响, 在设计和制备由金电极和BDT组成的分子结系统时, 电极的最小尺寸不能小于4×4.

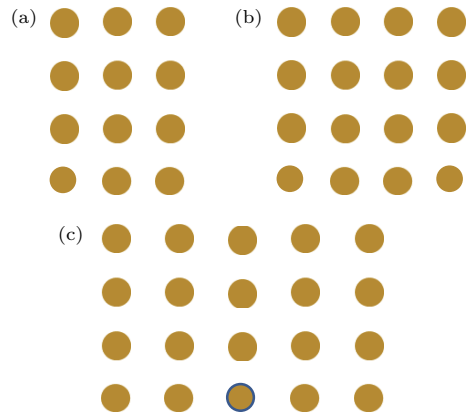


图5 (a), (b)和(c)分别表示截面尺寸为3×4, 4×4和5×4的电极

Fig. 5. Schematics of the electrode cross sections of 3×4 (a), 4×4 (b) and 5×4 (c) supercell.

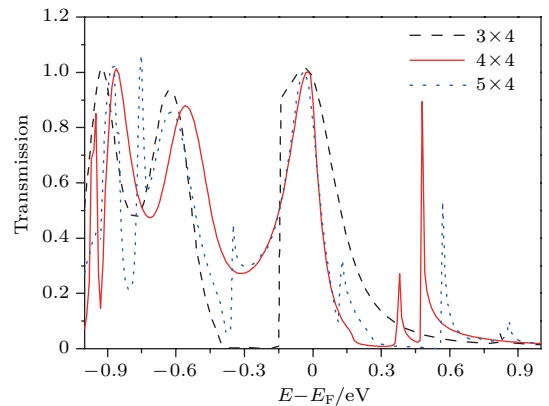


图6 电极截面尺寸为3×4, 4×4和5×4时的透射谱
 Fig. 6. Transmission spectra with the electrode cross sections of 3×4, 4×4 and 5×4 supercell.

4 结 论

利用密度泛函理论和非平衡格林函数相结合的方法,系统研究了由BDT分子和金纳米线作为电极组成的分子结体系的电输运特性,发现电极的相对位置和电极的截面尺寸对体系的输运行为有较大影响.当电极处于对位时,由金纳米线和BDT组成的分子器件符合工艺制备要求,而且具有较好的导电性能;在对位分子器件设计和制备过程中,两电极间夹角的工艺误差应控制在 5° 以内,以保证其对电导值的影响小于3%.当电极截面尺寸小于 4×4 时,透射谱在费米面附近呈现不连续变化,透射谱的不连续性导致分子电导降低;当电极截面尺寸大于或者等于 4×4 ,透射谱在费米面附近呈现连续特征,导致分子电导增大.因此,在设计和制备由金电极和BDT组成的分子结系统时,电极截面的最小尺寸应控制在 4×4 ,同时电极偏离轴线位置应控制在 5° 范围以内.

参考文献

- [1] Aviram A, Ratner M A 1974 *Chem. Phys. Lett.* **29** 277
- [2] Reed M A, Zhou C, Muller C J, Burgin T P, Tour J M 1997 *Science* **278** 252
- [3] Huang J, Li Q X, Yang J L 2016 *Sci. Sin. Chim.* **46** 12 (in Chinese) [黄静, 李群祥, 杨金龙 2016 中国科学: 化学 **46** 12]
- [4] Park J, Pasupathy A N, Goldsmith J I, Chang C, Yaish Y, Petta J R, Rinkoski M, Sethna J P, Abruña H D, McEuen P L, Ralph D C 2002 *Nature* **417** 722
- [5] Nitzan A, Ratner M A 2003 *Science* **300** 1384
- [6] Beebe J M, Kim B, Gadzuk J W, Frisbie C D, Kushm-erick J G 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 026801
- [7] Chen L, Hu Z, Zhao A, Wang B, Luo Y, Yang J, Hou J G 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 146803
- [8] Chen J, Reed M A, Rawlett A M, Tour J M 1999 *Science* **286** 1550
- [9] Dubi Y, di Ventra M 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 131
- [10] Ho G, Heath J R, Kondratenko M, Perepichka D F, Ar-seneault K, Pezolet M, Bryce M R 2006 *Chem. Eur. J.* **11** 2914
- [11] Mujica V, Kemp M, Ratner M A 1994 *J. Chem. Phys.* **101** 6856
- [12] Lang N D 1995 *Phys. Rev. B* **52** 5335
- [13] Havu P, Havu V, Puska M J, Nieminen R M 2004 *Phys. Rev. B* **69** 115325
- [14] Taylor J, Guo H, Wang J 2001 *Phys. Rev. B* **63** 245407
- [15] Mads B, Mozos J L, Ordejón P, Taylor J, Stokbro K 2002 *Phys. Rev. B* **65** 165401
- [16] Xia C J, Fang C F, Hu G C, Zhao P, Wang Y M, Xie S J, Liu D S 2008 *Chin. Phys. Lett.* **25** 1840
- [17] Zhu L, Yao K L, Liu Z L 2009 *J. Chem. Phys.* **131** 204702
- [18] Fan Z Q, Chen K Q 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 053509
- [19] Li X F, Chen K Q, Wang L L, Long M Q, Zou B S, Shuai Z 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 133511
- [20] Ren H, Liang W, Zhao P, Liu D S 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 077301
- [21] Fu X, Zhang L X, Li Z L, Wang C K 2013 *Chin. Phys. B* **22** 028504
- [22] Zeng J, Chen K Q 2014 *Appl. Phys. Lett.* **104** 033104
- [23] Jiang B, Zhou Y H, Chen C Y, Chen K Q 2015 *Org. Electron.* **23** 133
- [24] Li Y H, Yan Q, Zhou L P, Han Q 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 057301 (in Chinese) [李永辉, 闫强, 周丽萍, 韩琴 2015 物理学报 **64** 057301]
- [25] Han J, Feng Y, Yao K, Gao G Y 2017 *Appl. Phys. Lett.* **111** 132402
- [26] Kuang G W, Chen S Z, Yan L H, Chen K Q, Shang X S, Liu P N, Lin N 2018 *J. Am. Chem. Soc.* **140** 570
- [27] Feng Y, Wu X, Han J, Gao G Y 2018 *J. Mater. Chem. C* **6** 4087
- [28] Cui Y, Xia C J, Su Y H, Zhang B Q, Chen A M, Yang A Y, Zhang T T, Liu Y 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 118501 (in Chinese) [崔焱, 夏蔡娟, 苏耀恒, 张博群, 陈爱民, 杨爱云, 张婷婷, 刘洋 2018 物理学报 **67** 118501]
- [29] Zu F X, Zhang P P, Xiong L, Yin Y, Liu M M, Gao G Y 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 098501 (in Chinese) [祖凤霞, 张盼盼, 熊伦, 殷勇, 刘敏敏, 高国营 2017 物理学报 **66** 098501]
- [30] Huang P, Tong G P 2011 *J. Zhejiang Normal Univ. (Nat. Sci.)* **34** 292 (in Chinese) [黄埔, 童国平 2011 浙江师范大学学报(自然科学版) **34** 292]
- [31] Chen H 2007 *Physics* **36** 910 (in Chinese) [陈灏 2007 物理 **36** 910]
- [32] di Ventra M, Pantelides S T, Lang N D 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 979
- [33] 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]
- [34] 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]
- [35] Xia C J, Fang C F, Hu G C, Li D M, Liu D S, Xie S J 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4884 (in Chinese) [夏蔡娟, 房常峰, 胡贵超, 李冬梅, 刘德胜, 解士杰 2007 物理学报 **56** 4884]
- [36] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [37] Cui B, Zhao W, Wang H, Zhao J, Zhao H, Li D, Jiang X, Zhao P, Liu D S 2014 *J. Appl. Phys.* **116** 073701
- [38] Vosko S H, Wilk L, Nusair M 1980 *Can. J. Phys.* **58** 1200

Effect of electrode position and cross section size on transport properties of molecular devices*

Fan Shuai-Wei[†] Wang Ri-Gao

(Department of Physics, College of Science, China Three Gorges University, Yichang 443002, China)

(Received 16 May 2018; revised manuscript received 25 August 2018)

Abstract

Many investigations indicate that molecular electronics opens up possibilities for continually miniaturizing the electronic devices beyond the limits of the standard silicon-based technologies. There have been significant experimental and theoretical efforts to build molecular junctions and to study their transport properties. The electron transport in molecular device shows clearly quantum effect, and the transport property for molecular device would be strongly affected by chemical and structural details, including the contact position and method between molecule and electrodes, the angle between two electrodes connecting to the molecule. Till now, the micro-fabrication technology still does not guarantee metal electrodes contacting the molecules surfaces ideally. During molecular device fabrication, any tiny variations for the contact configuration usually exist in the molecular device, which would change the device transport property. Hence, it is necessary to investigate the effects of electrode position and electrode cross section size on the transport property.

We take Au-benzene-1, 4-dithiol (BDT)-Au (Au-BDT-Au) molecular junctions as example, and systematically calculate its transport properties with various contact positions, and several electrode cross section sizes. The contact face for Au electrode is set to be the (001) face. In the calculations, the density functional theory combined with the Keldysh non-equilibrium Green's function formalism is utilized. The local density approximation is selected as an exchange correlation potential, and atomic core is determined by the standard norm conserving nonlocal pseudo-potential.

Our investigations show that the relative position between the electrodes plays a crucial role in the transport behavior of Au-BDT-Au device. When both electrodes are set to be at the counter-position, the preferable transport behavior could be found. The counter-position indicates that the two electrodes are on the same line, which is beneficial to the fabrication. As the angle, which is defined as the angle of electrode deviating from the axis, is larger than five degrees, the transport behavior deteriorates. Hence, the angle for the electrode deviating from its axis should be less than five degrees. To study the effect of electrode cross section size, we calculate the transport properties for three electrode cross sections, i.e. 3×4 , 4×4 and 5×4 supercell. Our calculations indicate that when electrode cross section is less than 4×4 , the transmission, near the Fermi level, is discontinuous, which would deteriorate the transport performance. Hence, the section size of electrode should not be less than 4×4 . This research will provide a scientific index for the electrode position and its cross section size during the fabrication.

Keywords: contact configuration, transmission spectrum, electron orbit coupling lacking

PACS: 31.15.at, 73.63.Rt, 85.65.+h, 85.35.-p

DOI: 10.7498/aps.67.20180974

* Project supported by the Natural Science Foundation of Hubei Province, China (Grant No. 2017CFB527) and the Post-graduate Research Opportunities Program of Hongzhiwei Technology (Shanghai) Co., Ltd. (Grant No. hzwtech-PROP).

[†] Corresponding author. E-mail: phyfsw@ctgu.edu.cn