



基于石墨烯电极的蒽醌分子器件开关特性

崔焱 夏蔡娟 苏耀恒 张博群 张婷婷 刘洋 胡振洋 唐小洁

Switching characteristics of anthraquinone molecular devices based on graphene electrodes

Cui Yan Xia Cai-Juan Su Yao-Heng Zhang Bo-Qun Zhang Ting-Ting Liu Yang Hu Zhen-Yang Tang Xiao-Jie

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 038501 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20201095

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201095>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于石墨烯电极的齐聚苯乙炔分子器件的整流特性

Rectifying performances of oligo phenylene ethynylene molecular devices based on graphene electrodes

物理学报. 2018, 67(11): 118501 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180088>

以石墨烯为电极的有机噻吩分子整流器的设计及电输运特性研究

Design and electronic transport properties of organic thiophene molecular rectifier with the graphene electrodes

物理学报. 2017, 66(9): 098501 <https://doi.org/10.7498/aps.66.098501>

石墨烯沟道全自旋逻辑器件开关特性

Switching characteristics of all-spin logic devices based on graphene interconnects

物理学报. 2017, 66(20): 208501 <https://doi.org/10.7498/aps.66.208501>

双层石墨烯层间限域CO氧化反应的密度泛函研究

Theoretical study of density functional of confined CO oxidation reaction between bilayer graphene

物理学报. 2019, 68(21): 218101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190447>

三明治结构graphene-2Li-graphene的储氢性能

Hydrogen storage capacity of expanded sandwich structure graphene-2Li-graphene

物理学报. 2019, 68(5): 053601 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181497>

石墨烯射频器件研究进展

Research progress of graphene radio frequency devices

物理学报. 2017, 66(21): 218502 <https://doi.org/10.7498/aps.66.218502>

基于石墨烯电极的蒽醌分子器件开关特性*

崔焱 夏蔡娟[†] 苏耀恒 张博群 张婷婷 刘洋 胡振洋 唐小洁

(西安工程大学理学院, 西安 710048)

(2020年7月10日收到; 2020年9月8日收到修改稿)

研究了基于石墨烯电极的蒽醌分子器件的开关特性. 分别选取了锯齿型和扶手椅型的石墨烯纳米带作为电极, 考虑蒽醌基团在氧化还原反应下的两种构型, 即氢醌 (HQ) 分子和蒽醌 (AQ) 分子, 构建了双电极分子结, 讨论了氧化还原反应和不同的电极结构对蒽醌分子器件开关特性的影响. 研究发现, 无论是锯齿型石墨烯电极还是扶手椅型石墨烯电极, HQ 构型的电流都明显大于 AQ 构型的电流, 即在氧化还原反应下蒽醌分子呈现出显著的开关特性. 同时, 当选用锯齿型石墨烯电极时其开关比最高能达到 3125, 选用扶手椅型石墨烯电极时开关比最高能达到 1538. 此外, 当 HQ 构型以扶手椅型石墨烯为电极时, 在 0.7—0.75 V 之间表现出明显的负微分电阻效应. 因此该系统在未来分子开关器件领域具有潜在的应用价值.

关键词: 分子开关器件, 密度泛函理论, 非平衡格林函数, 石墨烯

PACS: 85.65.+h, 73.63.-b, 73.23.-b

DOI: 10.7498/aps.70.20201095

1 引言

随着微尺度制造技术的飞速发展, 分子电子学近年来受到越来越多的关注. 分子电子学的一个关键任务是在单分子水平上开发新的器件, 利用基于单分子及原子团簇的分子器件来构筑电子线路的各种元器件已经成为人们公认的最可能的发展趋势^[1,2]. 近年来, 实验上通过对分子器件的研究发现, 分子具有分子场效应^[3,4]、负微分电阻效应^[5-8]、开关效应^[9-11]和分子整流效应^[12-15]等一系列重要特征, 这些研究为利用分子来实现电子器件的功能化打下了坚实的基础. 其中, 单分子开关具有很大的潜力, 它对未来分子电子逻辑电路中存储数字信息和信号传输的能力至关重要.

分子开关的基本要求是双稳性, 即两种不同形式的分子, 它们可以选择性地可逆地相互转化, 以响应外部触发器, 如光、电场、氧化还原过程等. 最

近, van Dijk 等^[16]合成了一种以金作为电极的蒽醌基团分子开关, 该分子开关可以通过氧化还原反应在氢醌 (HQ) 和蒽醌 (AQ) 构型之间进行电化学可逆切换, 可以看到 π -共轭延伸到整个 HQ 结构, 而由于 p-苯醌 (p-bq) 单元, π -共轭在 AQ 结构中被切断, 因此, HQ 构型比 AQ 构型表现出更好的导电性. 此外, 特别是这种氧化还原控制的分子开关的优点是, 开关的总长度在和分子-电极结合时的几何形状没有明显变化. Zhao 等^[17]从理论上研究发现基于金电极, 组成开关的分子可以通过氧化还原反应在 HQ 和 AQ 构型之间进行转换, 这两种形式的透射谱存在显著差异, 结果表明, 通过 HQ 的电流明显大于通过 AQ 的电流. Zhao 和 Liu^[18]从理论上研究了基于碳纳米管电极的蒽醌基团分子开关的电子输运特性, 组成开关的分子可以通过氧化还原反应在 HQ 和 AQ 构型之间进行转换, 结果表明, 与金电极相比, 开关比提高了一个数量级, 另外, HQ 状态在低偏压时表现出明显的 NDR 效应.

* 国家自然科学基金 (批准号: 11004156, 11204227)、陕西省自然科学基金 (批准号: 2019JM-083)、陕西省青年科技新星计划 (批准号: 2016KJXX-45) 和西安工程大学研究生创新基金 (批准号: chx2019059, chx2020030) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: caijuanxia@xpu.edu.cn

蒽醌具有易受环境影响的可逆氧化还原特性, 并且其热稳定性和化学稳定性好, 因此其构成的电活性分子线, 是具有电活性“开关”效应的理想分子线. 因此, 本文结合了密度泛函理论和非平衡格林函数方法相结合的第一性原理计算方法, 分别对锯齿型和扶手椅型石墨烯纳米带电极连接下的蒽醌分子进行了研究, 讨论了氧化还原反应和不同的电极结构对蒽醌分子器件开关性能的影响.

2 模型与计算方法

石墨烯纳米带 (GNRs) 根据边缘裁剪形状的不同, 可分为扶手椅型石墨烯纳米带 (aGNRs)^[19–21] 和锯齿型石墨烯纳米带 (zGNRs)^[22–24] 两种类型, 其中 aGNRs 具有半导体性^[25,26], 而 zGNRs 具有金属性^[27]. 因此建立了一个石墨烯纳米带/HQ(AQ) 分子/石墨烯纳米带的三明治结构, 两端的石墨烯纳米带分别以扶椅 (armchair) 型和锯齿 (zigzag) 型石墨烯纳米带作为电极. 左右电极中各 4 层碳原子作为表面层与中间分子一起构成扩展分子. 表面

层的作用是屏蔽中间散射区域对两端电极的影响, 如图 1 所示, 其中, N 表示 zGNR 和 aGNR 的宽度, 4-zGNRs 表示含有 4 条锯齿型链的 zGNRs, 8-aGNRs 表示含有 8 层碳链的 aGNRs^[28]. 总体上划分可知这种器件可划分为左右电极、中心散射区域几部分. 与酰胺基连接相比, 碳-碳键连接方式更为稳定, 因此 HQ/AQ 分子通过碳原子链嵌入到两侧的 4-zGNR 锯齿型石墨烯电极和 8-aGNR 扶手椅型石墨烯电极, 中心散射区域包含部分石墨烯电极以此来阻隔电极与分子之间的相互作用. M1 氢醌分子通过碳原子链嵌入到 4-zGNR 电极中, 采用五元环链接结构; M2 蒽醌分子通过碳原子链嵌入到 4-zGNR 电极中, 采用五元环链接结构; M3 氢醌分子通过碳原子链嵌入到 8-aGNR 电极中; M4 蒽醌分子通过碳原子链嵌入到 8-aGNR 电极中. 在计算模型中, 石墨烯纳米带所有的悬空键都以 H 原子来饱和. 并对图中扩展分子区域的原子进行了全优化, 原子力收敛标准设置为 0.005 eV/nm.

体系的电流可由 Landauer-Buttiker 公式求出^[29]:

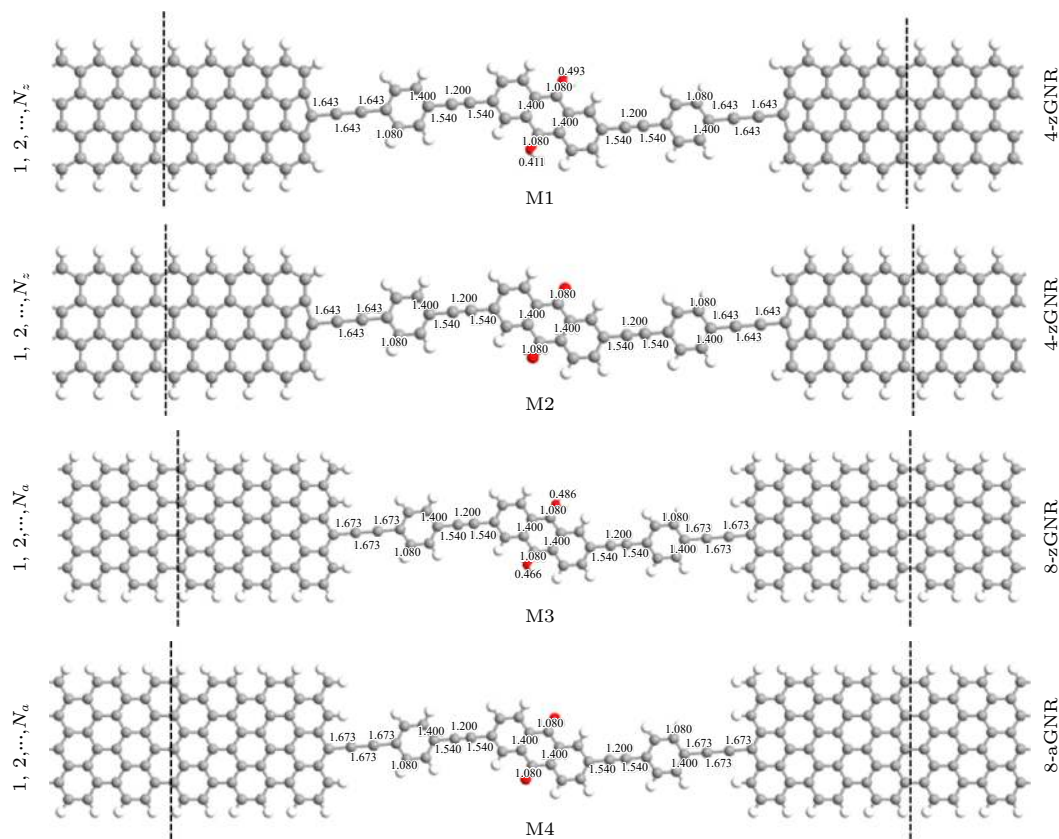


图 1 电极-分子-电极分子器件模型

Fig. 1. Geometrical structures of electrode-molecular-electrode molecular devices.

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T(E, V_b) [f_L(E - \mu_L) - f_R(E - \mu_R)] dE, \quad (1)$$

式中, μ_L 和 μ_R 分别表示左右电极的电化学势; $f_L(E - \mu_L)$ 和 $f_R(E - \mu_R)$ 分别表示左右电极的电子费米分布函数; $T(E, V_b)$ 是外加偏压为 V_b 情况下, 受到能量 E 作用, 则可通过如下的表达式定义出体系的透射系数,

$$T(E, V_b) = \text{Tr} [\Gamma_L(E) G^R(E) \Gamma_R(E) G^A(E)]. \quad (2)$$

其中, $G^R(E)$ 和 $G^A(E)$ 分别为散射区域延迟和提前格林函数; $\Gamma_{L,R} = i [\Sigma_{L,R}^R(E) - \Sigma_{L,R}^A(E)]$ 为线宽函数; $\Sigma_{L,R}^R(E)$ 和 $\Sigma_{L,R}^A(E)$ 为分子对散射区域的自能.

在本文中, 分子结构的几何优化、电子结构以及电输运特性等均是基于 ATK 软件^[30-32] 计算确定. 在输运计算中, 采用 Troullie-Martins 非局域赝势, 电子交换关联势采用广义梯度近似, 选 DZP (double ζ + polarization) 为基矢. 电极计算采用周期性边界条件, 布里渊区取样用 Monkhorst-Pack 方案进行, 选择 k 网格点为 $1 \times 1 \times 100$. 自洽计算中, 能量收敛标准设置为 10^{-5} eV. 另外, 为避免镜像分子之间的相互作用, 在垂直于运输的方向上

设置一个大的超胞尺寸 (2.0 nm).

3 计算结果与讨论

图 2 为模型 M1, M2 在电压区间 [0 V, 1 V] 和模型 M3, M4 在电压区间 [0 V, 0.9 V] 内的电流变化曲线以及模型 M1, M2 和模型 M3, M4 对应的开关比. 从图 2 可以明显看出, 虽然相同电极形式下只是两个氢原子不同, 但是它们的导电性质却截然不同. 不论锯齿型石墨烯电极还是扶手椅型石墨烯电极下, 通过 AQ 构型的电流在整个偏压范围内受到强烈抑制, 而通过 HQ 构型的电流明显大于通过 AQ 构型的电流. 因此, 当 HQ 氧化成 AQ 时, 预计开关将从高导电状态切换至低导电状态, 反之亦然. 葱醌能够可逆地氧化还原主要是由于它具有两对羰基, 分子内有大 π 键, 可以可逆地释放和接收质子, 因此具有重要的氧化还原特性, 质子会影响它们之间转化的电势值而不会影响它们的可逆性, 通过对氧化-还原态中心的状态进行控制, 体系的电子传输性质发生显著改变. 从图 2 可以看出: 模型 M1 电流呈整体上升趋势, 最大电流达到 315.13 nA, 模型 M2 电流极小, 模型 M1, M2 的开关效应明显, 在低偏压下开关比很小, 随着偏压的

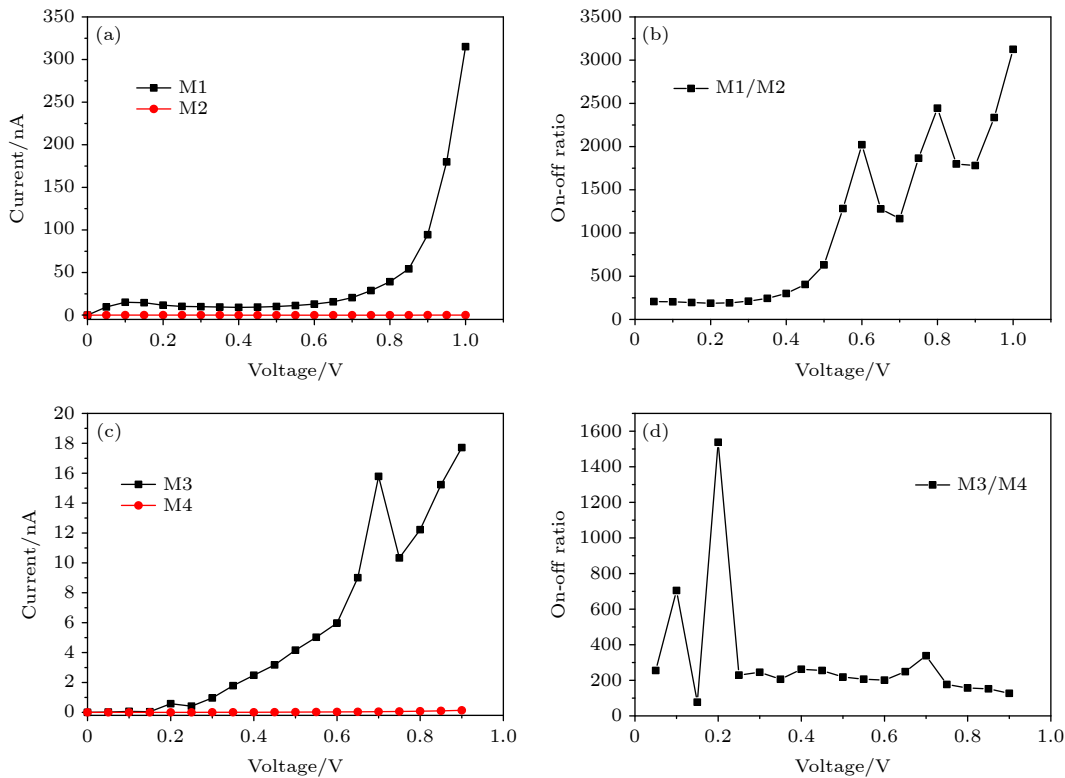


图 2 模型 M1, M2, M3 和 M4 的 I - V 曲线及开关比

Fig. 2. I - V curves and switching ratios of model M1, M2, M3 and M4.

增大, 0.5 V 之后表现出较大的开关比, 整体开关比在整个偏压范围内变化范围在 187—3125 之间. 模型 M3 电流呈整体上升趋势, 最大电流达到 17.71 nA, 在 0.7—0.75 V 之间时表现出明显的负微分电阻效应, 这一效应在高频振荡器、模数转换器和逻辑器件等领域具有广泛的应用前景. 模型 M4 电流极小, 模型 M3, M4 的开关效应明显, 在低偏压下有较高的开关比, 尤其 0.2 V 开关比达到 1538, 当偏压高于 0.25 时整体开关比偏小, 开关比在整个偏压范围内变化范围在 77—1538 之间. 这样显著的开关比可以很容易测量并应用于实际当中.

当分子和电极形成双探针系统时, 其电子结构由于受到耦合作用的影响, 其中的一部分会扩散到电极中, 而有的则会进入到相应的分子中, 具有一定能量的电极电子态可能会穿透相关的电极结进入另一电极, 这样就会产生透射谱. 为了对蒽醌分子在不同石墨烯电极下呈现的开关特性进行分析, 对其相应的透射谱进行了研究. 图 3 给出了零偏压下的透射谱. 从图 3 可以看出, 无论蒽醌分子与锯齿型石墨烯电极还是扶手椅型石墨烯电极连接, 其 HQ 构型的透射峰值始终大于 AQ 构型的透射峰值. 在模型 M1 和 M2 的透射谱中, HQ 构型在 1.20 eV 透射谱值为 1.96, AQ 构型在 0.92 eV 透射谱值为 1.58; 在模型 M3 和 M4 的透射谱中, HQ 构型在低于 E_F 之下的 -0.36 eV 透射谱取值 1.71, AQ 构型在 0.64 eV 透射谱取值 0.45, 因此 HQ 构型的器件比 AQ 构型的器件表现出更好的导电特性, 也就是当蒽醌基团分子构型从 HQ 构型转换为 AQ 构型时, 将呈现出显著的开关特性. 同时, 从图 3 还可以发现, M1 的透射通道远多于

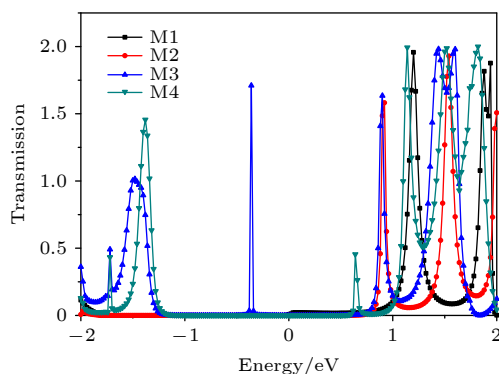


图 3 模型 M1, M2, M3 和 M4 在 0 偏压下的透射谱

Fig. 3. Transmission spectra of model M1, M2, M3 and M4 under zero bias.

M2 的透射通道, 并且其透射峰值远大于 M2 的透射峰值, 因此 M1 表现出优异的导电特性, 其最大值可达 315.13 nA, 开关比可达 3125. 而 M3 与 M1 相比, 其透射通道较少, 且透射峰窄而低, 因此其电流最大值仅 17.71 nA, 开关比仅在小偏压下达 1538, 当偏压增加时其值极速下降变化范围仅在 260—400 之间.

为了进一步对 M3 出现的负微分电阻进行分析, 计算了当外加偏压为 0.7—0.9 V 时的透射率, 如图 4 所示. 从图 4 可以清楚地发现: 当外加偏压为 0.7 V 时, 在费米能级附近有两个显著的透射峰. 当外加偏压为 0.75 V 时, 这两个透射峰的峰值明显降低, 并且透射峰的位置朝着远离费米能级的方向移动. 特别是当外加偏压为 0.8 V 时, 费米能级左边的透射峰完全消失, 右边的透射峰向高能量区域移动. 但是, 随着偏压逐渐增大, 当偏压为 0.85 和 0.9 V 时, 右边的透射峰又逐渐向费米能级靠近. 因此对应应在 I - V 线上, 可以发现, 当外加偏压在 0.7 到 0.8 V 时, 由于透射峰的减小和外移电流有一个显著的下降.

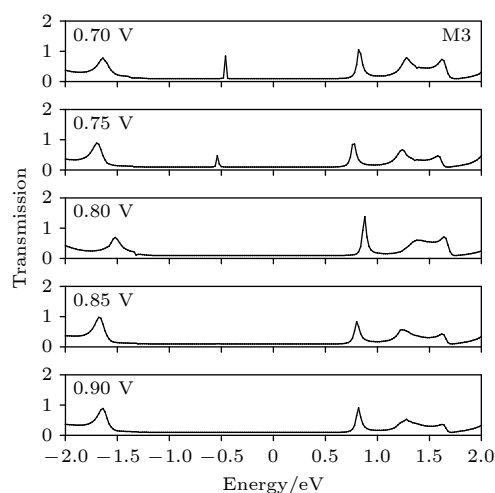


图 4 模型 M3 在偏压 0.7, 0.75, 0.8, 0.85 和 0.9 V 下的透射谱

Fig. 4. Transmission spectra of model M3 under 0.7, 0.75, 0.8, 0.85 and 0.9 V bias.

当外加偏压逐渐增大时, 透射峰逐渐向靠近费米能级方向移动, 其对应的电流逐渐的增大, 因此呈现出一个显著的负微分电阻效应.

分子自身的电子结构和其导电性存在密切关系, 在此研究中为确定出 HQ 和 AQ 构型和其电输运特性的相关性, 而引入数据进行计算得到平衡状态下对应的分子自洽投影哈密顿 (MPSH) 本征

态^[17]. 这种状态下, 这四个模型分子轨道中的最高分子占据轨道 (HOMO) 和最低未占据轨道 (LUMO) 的 MPSH 具体情况见图 5. 对模型 M1 而言, 相应的 HOMO 和 LUMO 轨道主要局域在分子器件左、中、右侧区域, 和模型 M1 相比, 模型 M2 的 MPSH 局域性更强. 对模型 M2 而言, 这两种轨道主要局域于分子器件的左侧区域. 而对模型 M3 而言, HOMO 和 LUMO 轨道集中在其左右和中间区域, 和模型 M3 相比, 模型 M4 的 MPSH 局域性更强. 模型 M4 的 HOMO 轨道大部分集中在左侧区域, 而 LUMO 轨道集中在中间区域. 根据实际的检测结果表明, 分子轨道的局域性强度和其表面电输运性能存在正相关关系. 从图 5 可以看出, 模型 M1 和 M3 的局域性较模型 M2 和 M4 更强, 导电性能更好, 电流更大.

由于 aGNRs 的电学性质随其带宽的不同而展现出不同的性质, aGNRs 的带隙随着纳米带宽度的增加带隙在逐渐减小, 并且带隙与纳米带宽度呈现 $3p, 3p+1, 3p+2$ 不同类型 (p 是整数). 因此, 为了进一步研究石墨烯纳米带宽度的变化对蒽醌分子器件电输运性质的影响, 图 6 为当 $p = 2$ 时, 带宽为 6 和 7 时的蒽醌分子开关特性. 其中 M5 和 M6 分别为蒽醌和氢醌分子通过碳原子链嵌入到

6-aGNR 电极中; M7 和 M8 分别为蒽醌和氢醌分子通过碳原子链嵌入到 7-aGNR 电极中. 从图 6 可知, 通过 HQ 构型的电流明显大于通过 AQ 构型的电流, 其不随电极带宽的变化而变化. 但是其开关比随电极宽度的增加呈现显著的变化, 当分子与 6-aGNR 电极连接时, 其开关比最高可达 386, 当其与 7-aGNR 电极连接时, 其开关比最高仅为 1.18, 而与 8-aGNR 电极连接时, 其开关比可达 1538.

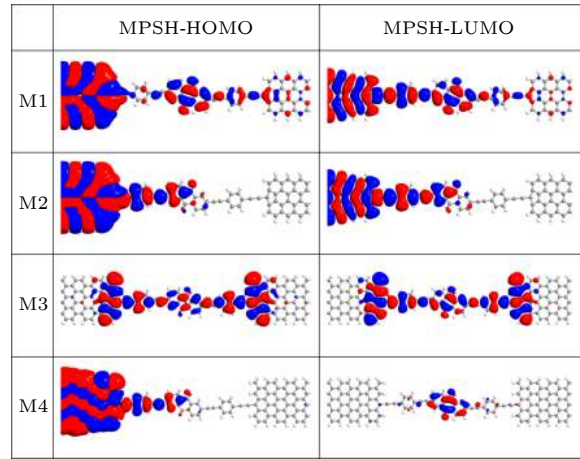


图 5 平衡状态下模型 M1, M2, M3 和 M4 在 HOMO 和 LUMO 轨道上的 MPSH 分布

Fig. 5. MPSH distributions of HOMO and LUMO orbitals of model M1, M2, M3 and M4 at zero bias.

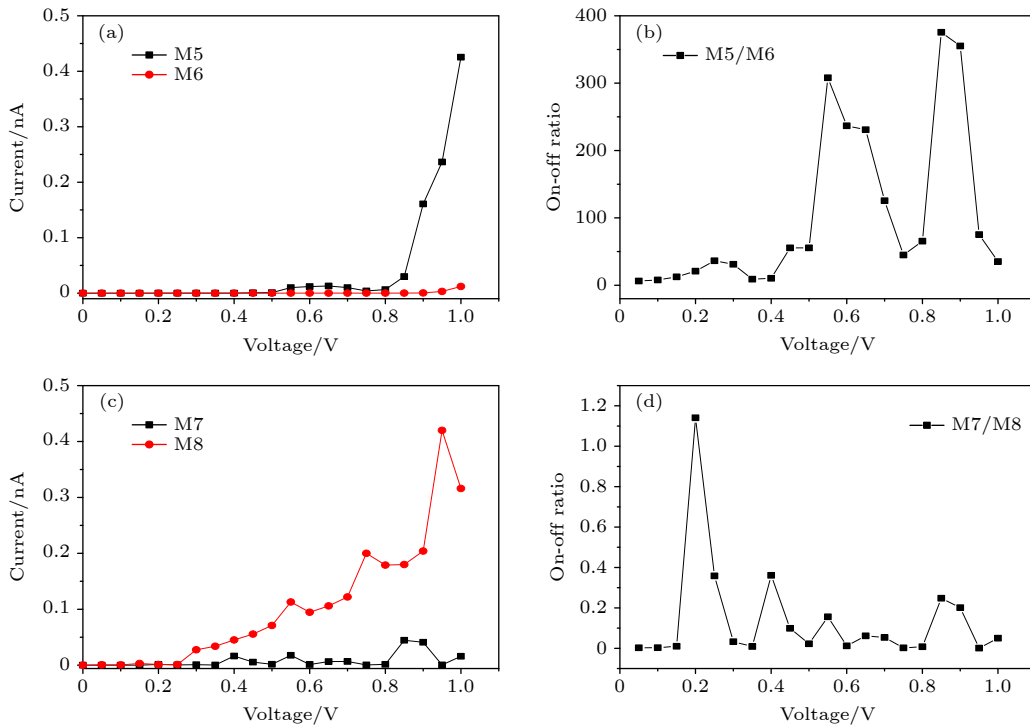


图 6 模型 M5, M6, M7 和 M8 的 I - V 曲线及开关比

Fig. 6. I - V curves and switching ratios of model M5, M6, M7 and M8.

4 结 论

根据基于密度泛函理论和非平衡格林函数的第一性原理方法,对基于锯齿型石墨烯电极和扶手椅型石墨烯电极的蒽醌分子器件的开关特性进行了研究,用透射谱和 MPSH 分布分析了 HQ 和 AQ 构型的导电性差异,结果表明,无论是锯齿型石墨烯电极还是扶手椅型石墨烯电极, HQ 构型产生的电流都明显大于 AQ 构型产生的电流,即在氧化还原反应下蒽醌分子呈现出显著的开关特性.锯齿型石墨烯电极时开关比最高能达到 3125,扶手椅型石墨烯电极时开关比最高能达到 1538.此外, HQ 构型以扶手椅型石墨烯为电极在 0.7—0.75 V 之间时表现出明显的负微分电阻效应.这表明 HQ 和 AQ 构型是通过氧化还原控制分子开关的良好候选分子之一,在分子电路中具有一定的应用前景.

参考文献

- [1] Jalili S, Raffi-Tabar H 2005 *Phys. Rev. B* **71** 165410
- [2] Seminario J M, Zacarias A G, Tour J M 1999 *J. Am. Chem. Soc.* **121** 411
- [3] Ren Y, Chen K Q, Wan Q, Zou B S, Zhang Y 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 183506
- [4] Soudi A, Aivazian G, Shi S F, Xu X D, Gu Y 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 033115
- [5] Guisinger N P, Basu R, Baluch A S, Hersam M C 2004 *Nanotechnology* **15** 452
- [6] Fan Z Q, Chen K Q 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 053509
- [7] Long M Q, Chen K Q, Wang L L 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 233512
- [8] Fan Z Q, Chen K Q, Wan Q, Duan W H, Zou B S, Shuai Z 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 263304
- [9] Reed M A, Zhou C, Muller C J, Burgin T P, Tour J M 1997 *Science* **278** 252
- [10] Wang Z C, Gu T, Tada T, Watanabe S 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 152106
- [11] Donhauser Z J, Mantooth B A, Kelly L A, Monmell J D 2001 *Science* **292** 2303
- [12] Jiang P, Gustavo M, You W 2004 *Angew. Chem. Int. Ed.* **43** 4471
- [13] Oleynik I I, Kozhushner M A, Posvyanskii V S, Yu L 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 096803
- [14] Stephane L, Christophe K, Christophe D, Guy A, Dominique V 2003 *Nano Lett.* **3** 741
- [15] Zeng M, Shen L, Yang M, Zhang C, Feng Y 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 053101
- [16] van Dijk E H, Myles D J T, van der Veen M H, Hummelen J C 2006 *Org. Lett.* **8** 2333
- [17] Zhao P, Liu D S, Wang P J, Zhang Z, Fang C F, Ji G M 2011 *Physica B* **406** 895
- [18] Zhao P, Liu D S 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 047302
- [19] Zheng J M, Guo P, Ren Z, Jiang Z, Bai J, Zhang Z 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 083101
- [20] Zheng H X, Wang Z F, Luo T, Shi Q W, Chen J 2007 *Phys. Rev. B* **75** 165414
- [21] Zhao J, Zeng H, Wei J W, Li B, Xu D H 2014 *Phys. Lett. A* **378** 416
- [22] An Y P, Yang Z Q 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 192102
- [23] Zheng X H, Song L L, Wang R N, Hao H, Guo L J, Zeng Z 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 153129
- [24] Son Y W, Cohen M L, Louie S G 2006 *Nature* **444** 347
- [25] Barone V, Hod O, Scuseria G E 2006 *Nano Lett.* **6** 2748
- [26] Han M Y, Özyilmaz B, Zhang Y, Kim P 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 206805
- [27] Li X L, Wang X R, Zhang L, et al. 2008 *Science* **319** 1229
- [28] Cai Y Q, Zhang A H, Feng Y P, Zhang C 2011 *J. Chem. Phys.* **135** 184703
- [29] Liu H M, Li P, Zhao J W 2008 *J. Chem. Phys.* **129** 224704
- [30] Taylor J, Guo H, Wang J 2001 *Phys. Rev. B* **63** 245407
- [31] Brandbyge M, Mozos J L, Ordejón P, Taylor J, Stokbro K 2002 *Phys. Rev. B* **65** 165401
- [32] Soler J M, Artacho E, Gale J D, García A, Junquera J, Ordejón P, Sánchez-Portal D 2002 *J. Phys. Condens. Matter.* **14** 2745

Switching characteristics of anthraquinone molecular devices based on graphene electrodes*

Cui Yan Xia Cai-Juan[†] Su Yao-Heng Zhang Bo-Qun Zhang Ting-Ting
Liu Yang Hu Zhen-Yang Tang Xiao-Jie

(School of Science, Xi'an Polytechnic University, Xi'an 710048, China)

(Received 10 July 2020; revised manuscript received 8 September 2020)

Abstract

With the development of microelectronics and the miniaturization of electronic devices, the use of molecular materials to construct various components in electronic circuits has become a most likely development trend. Compared with silicon-based semiconductor components, molecular electronic device has the advantages of small size, high integration, low energy consumption and fast response. In recent years, more and more molecules have been used to design molecular devices such as molecular diodes, molecular switches, molecular field effect transistors and molecular memories. In this paper, sandwich structure devices based on graphene nanoribbon electrodes are constructed. The first-principles calculation method combining density functional theory and non-equilibrium Green's function is adopted to design the molecular devices with functional characteristics. The effects of redox reactions on the electrical transport properties of molecular devices are systematically discussed. The main research contents of this paper are as follows. The switching characteristics of an anthraquinone molecular device based on graphene electrode are studied. The zigzag-edge nanoribbons and armchair-edge graphene nanoribbons are selected as electrodes. Considering the two isomers of anthraquinone (HQ) and anthraquinone (AQ) molecules in the redox reaction, the double electrode molecular junction is constructed. The effects of redox reaction and electrode structure on the switching characteristics of anthraquinone molecular devices are discussed. It is found that the current in the HQ configuration is significantly greater than that in the AQ configuration, regardless of the zigzag-edge graphene electrode or the armchair-edge graphene electrode. That is, under the redox reaction, the anthraquinone molecules show significant switching characteristics. The switching ratio of zigzag-edge graphene electrode is selected to reach a maximum of 3125, and that of armchair-edge graphene electrode is selected to maximum of 1538. In addition, when the armchair-edge graphene is used as an electrode in the HQ configuration, the negative differential resistance is obviously between 0.7 and 0.9 V.

Keywords: molecular switching device, density functional theory, nonequilibrium Green's function, graphene

PACS: 85.65.+h, 73.63.-b, 73.23.-b

DOI: 10.7498/aps.70.20201095

* Project supported by the National Nature Science Foundation of China (Grant Nos. 11004156, 11204227), the Natural Science Foundation of Shaanxi Province, China (Grant No. 2019JM-083), the Youth Science and Technology Star Project of Shaanxi Province, China (Grant No. 2016KJXX-45), and the Graduate Innovation Foundation of Xi'an Polytechnic University, China (Grant Nos. chx2019059, chx2020030).

[†] Corresponding author. E-mail: caijuanxia@xpu.edu.cn