

石墨烯纳米带电极同分异构喹啉分子结 电子输运性质*

左敏 廖文虎[†] 吴丹 林丽娥

(吉首大学物理与机电工程学院, 吉首 416000)

(2019年7月27日收到; 2019年9月23日收到修改稿)

基于密度泛函理论与非平衡格林函数相结合的第一性原理计算方法, 系统地研究了通过碳原子 (C) 连接的同分异构喹啉分子 (C_9H_5N) 嵌于石墨烯纳米带电极间的分子电子器件输运性质. 研究结果表明: 器件电流在偏压 $[-0.3\text{ V}, +0.3\text{ V}]$ 范围内呈线性变化, 电流在 $[-0.4\text{ V}, -0.9\text{ V}]$ 和 $[+0.5\text{ V}, +0.8\text{ V}]$ 范围内随着偏压的增大而减小, 呈现显著的负微分电阻效应; 当喹啉分子平面与石墨烯纳米带电极间存在一定夹角时, 器件电流呈现明显的负微分电阻效应且与喹啉分子平面旋转方向无关, 当喹啉分子平面与石墨烯纳米带电极垂直时, 器件电流截止. 以上研究结果得到偏压窗内透射系数积分以及零偏压下实空间电荷密度分布等的有力印证, 可为设计制作基于同分异构喹啉分子电子开关和负微分电阻器件提供理论依据.

关键词: 同分异构喹啉分子, 石墨烯纳米带, 第一性原理, 电子输运性质

PACS: 73.40.-c, 71.15.Mb, 73.23.-b, 73.63.Rt

DOI: 10.7498/aps.68.20191154

1 引言

近年来, 微观表征和操控技术的快速发展极大地丰富和提高了分子器件的研究能力, 使得人们可在纳米尺度上, 从单个原子或分子出发, 构建具有特定功能和新奇特性的分子电子器件^[1,2]. 人们已经观测到分子开关效应^[3-6]、分子整流效应^[7-9]、负微分电阻效应^[10-13]、自旋过滤效应^[14-16]等一系列非线性电流输运特性, 这些有趣的特性在未来分子级别的信息处理、信息存储等诸多领域有着美好的应用前景, 科学家们成功构建出分子开关^[17]、分子导线^[18]、分子整流器^[19]以及分子存储器^[20]等基于以上特性的功能各异的分子电子器件. Chen等^[21]通过分子自组装技术研究了含有硝基胺氧化还原中心的分子器件, 发现负微分电阻效应和超过

1000:1 的开关峰谷比; Joachim等^[22]利用扫描隧道显微镜技术研究了 C_{60} 分子吸附在 $Au(110)$ 上的电流曲线; Wan等^[23]在基于石墨烯纳米带电极的苯环器件中发现了开关、双自旋滤波效应和负微分电阻效应; Danilov等^[24]设计出基于 C_{60} 分子纳米级隧穿导电开关; Bumm等^[25]在高隧道结阻抗下评估正十二烷硫醇自组装单分子层作为分子导线候选物的电气特性. Reed等^[26]将苯-1, 4-二硫醇分子自组装到力学可控劈裂结的两个相对金电极上, 形成静态稳定的金-硫-芳基-硫-金系统, 直接观察通过分子的电荷输运; Chen等^[27]利用含有硝基胺 2'-氨基-4, 4'-二(乙基苯基)-5'-硝基-1-苯乙硫醇或硝基化合物作为活性成分的活性自组装单体分子器件. Venkataraman等^[28]通过实验研究了单分子结电导与分子构型的关系; Quinn等^[29]发现胺代替硫醇或异硝基可提高金属-分子-金属连接中电

* 国家自然科学基金 (批准号: 11664010, 11264013)、湖南省自然科学基金 (批准号: 2017JJ2217, 12JJ4003)、湖南省教育厅重点基金 (批准号: 18A293) 和吉首大学科研项目 (批准号: JGY201851, Jdy1849, Jdy19039) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: whliao@jsu.edu.cn

导测量的可靠性和可重复性; Fu 等^[30]探讨了基于单壁碳纳米管和铁电薄膜的铁电场效应晶体管的固有记忆功能. 如何充分利用分子的电学性质制备分子电子器件, 使分子实现电子器件的功能已经成为分子电子学的研究热点之一.

自 2004 年 Geim 研究组成功获得石墨烯以来, 石墨烯及其相关器件的研究受到了广泛关注^[31-34], 扶手椅型和锯齿型石墨烯纳米带^[35,36]作为基本结构经常被用于石墨烯基分子电子器件设计. 氧化石墨烯/二氧化硅复合材料^[37]被证明在 323—473 K 的温度范围内具有优异的介电常数和电磁干扰屏蔽性能. Cao 等^[38]系统地研究了二维材料的电子输运、偶极弛豫和磁共振等电磁响应起源, 他们还探讨了碳基材料和过渡金属化合物的电子结构、电磁响应和能量转换以及它们之间的关系^[39]. Zhang 等^[40]系统地研究了图案化二维材料先进制造技术及其电子结构和物理特性. Fang 等^[41]基于玻尔兹曼输运方程和二维电子气理论建立了多层石墨烯电导率的计算模型. Cao 等^[42]提出“物质基因测序”方法, 从实验和理论上探讨热驱动的弛豫和电荷输运性质, 他们还发现超薄轻质石墨烯复合材料在高温下具有高效的微波吸收性能以及热稳定性介电常数^[43]. Wen 等^[44]的研究表明, 多壁碳纳米管/二氧化硅复合材料在 100—500 °C 的温度范围内对 8.2—12.4 GHz 范围内的微波辐射具有电磁干扰屏蔽性能. 此外, 喹啉是冶金、染料以及聚合物的重要中间体, 是结构比较简单的有机共轭小分子, 具有来源广泛、结构可设计、易于合成和便于化学结构修饰等特点, 是分子电子器件领域的研究热点之一, 从物理的角度探讨嵌于石墨烯纳米带电极间的同分异构喹啉分子电子器件的输运性质, 可为设计制作性能优良的分子电子器件提供理论依据.

本文基于密度泛函理论 (DFT) 与非平衡格林函数的 (NEGF) 相结合的第一性原理计算方法, 系统地研究了通过碳原子连接的同分异构喹啉分子嵌于石墨烯纳米带电极间的分子电子器件输运性质. 研究表明, 器件电流在偏压 $[-0.3 \text{ V}, +0.3 \text{ V}]$ 范围内呈线性变化, 电流在 $[-0.4 \text{ V}, -0.9 \text{ V}]$ 和 $[+0.5 \text{ V}, +0.8 \text{ V}]$ 范围内随着偏压的增大而减小, 呈现显著的负微分电阻效应. 此外, 当喹啉分子平面与石墨烯纳米带电极间存在一定夹角时, 器件电流呈现明显的负微分电阻效应且与喹啉分子平面旋转方向无关; 当喹啉分子平面与石墨烯纳米

带电极垂直时, 器件电流截止. 以上研究结果得到偏压窗内透射系数积分以及零偏压下实空间电荷密度分布的有力印证, 可为设计制作基于同分异构喹啉分子的分子开关和负微分电阻器件提供理论依据.

2 模型与方法

半无限长锯齿型石墨烯纳米带-喹啉 $\text{C}_9\text{H}_5\text{N}$ 分子-半无限长锯齿型石墨烯纳米带构成的分子电子器件如图 1 所示, 器件分为左电极、中心散射区 (图 1 中的红色虚线框区域所示) 和右电极三个部分, 喹啉 $\text{C}_9\text{H}_5\text{N}$ 分子中氮原子 N 的位置编号如图 1(a) 所示. 喹啉 $\text{C}_9\text{H}_5\text{N}$ 分子中氮原子 N 分别处于编号 2, 3 和 5 处时的模型称为 M1, M2 和 M3, 如图 1(a)—图 1(c) 所示. 将喹啉 $\text{C}_9\text{H}_5\text{N}$ 分子平面垂直纸面向里旋转方向定义为正, 如图 1(d) 和图 1(e) 给出喹啉 $\text{C}_9\text{H}_5\text{N}$ 分子平面与石墨烯纳米带电极平面成 0° 和 90° 时的模型.

我们的计算采用 DFT 与 NEGF 相结合的第一性原理计算方法^[45-48], 研究过程中选择自洽循环哈密顿量, 局部密度近似^[49]LDA_PZ 交换相关势, 费米温度为 100 K, 能量截断半径取为 80 Hartree, 对所有原子选用双极化 DZP 基函数组. x 和 y 方向为真空方向, z 方向为输运方向. 对应 x , y 和 z 方向, 左电极、中心散射区和右电极的 K 点取样分别为 $1 \times 1 \times 100$, $1 \times 1 \times 1$ 和 $1 \times 1 \times 100$. 此外, 我们采用较大的基函数组、较高的能量截断半径以及广义梯度近似^[50,51]下 Perdew-Burke-Ernzerhof 泛函^[52-55]验证了研究结果的准确性.

基于格林函数方法计算得到的透射系数为

$$T(E, V_B) = \text{Tr}[\Gamma_L(E, V_B)G^r(E, V_B)\Gamma_R(E, V_B)G^a(E, V_B)], \quad (1)$$

其中, 线宽函数

$$\Gamma_{L/R}(E, V_B) = i \left[\sum_{L/R}^r(E, V_B) - \sum_{L/R}^a(E, V_B) \right],$$

推迟格林函数

$$G^r(E, V_B) = [G^a(E, V_B)]^\dagger = \left[E - H_{\text{cent}} - \sum_L^r - \sum_R^r \right]^{-1},$$

L/R 代表左/右电极, E 表示从做左电极 L 所有通道并散射到右电极 R 的能量, V_B 是左、右电极间的偏置电压, $eV_B = \mu_L - \mu_R$, $\mu_{L/R}$ 表示左/右电极

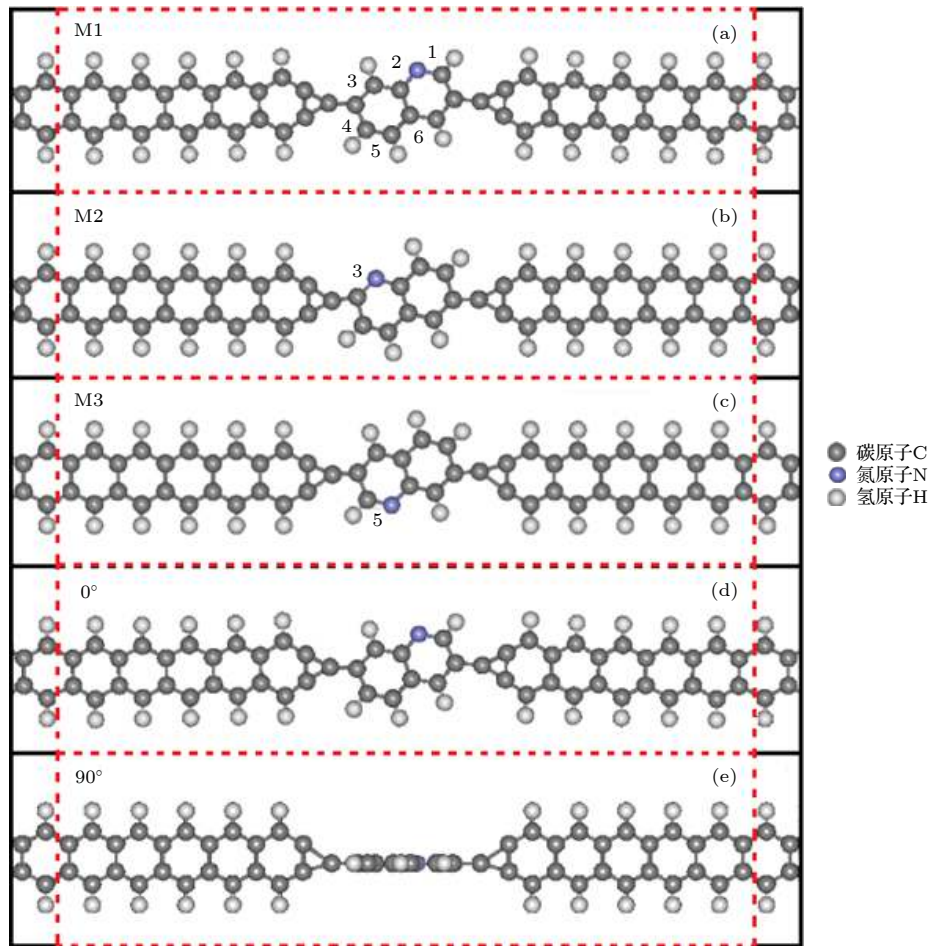


图 1 由半无限长锯齿型石墨烯纳米带左电极/中心散射区/半无限长锯齿型石墨烯纳米带右电极组成的 ZGNR/C₉H₅N/ZGNR 分子电子器件结构示意图, 红色方框区域表示中心散射区 (a)–(c) 分别对应喹啉 C₉H₅N 分子中氮原子 N 处于编号 2, 3 和 5 处; (d) 和 (e) 给出喹啉 C₉H₅N 分子平面与石墨烯纳米带电极平面成 0° 和 90° 时的模型

Fig. 1. ZGNR/C₉H₅N/ZGNR molecular electronic device schematic diagram consisted of a semi-infinite ZGNR left electrode/a central scattering region/a semi-infinite right ZGNR electrode, the red dashed line area represents the central scattering region. (a)–(c) denotes the marked 2nd, 3rd and 5th N atom of the C₉H₅N molecular; (d) and (e) illustrates the model of the 0° and 90° angle between the C₉H₅N molecule and graphene nanoribbon electrodes, respectively.

的化学势, e 为电子电量. 左/右电极的推迟/提前自能 $\sum_{L/R}^{r/a}(E, V_B)$ 可通过数值方法进行计算, H_{cent} 表示中心区域哈密顿量, 可进一步计算体系的电流

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

其中, $f_{L/R}(E - \mu_{L/R}) = 1/[1 + e^{(E - \mu_{L/R})/(k_B T)}]$ 表示左/右电极的费米-狄拉克分布函数, k_B 为玻尔兹曼常数. 此外, 利用 Landauer-Büttiker 公式^[56] 计算系统电导,

$$G = \frac{2e^2}{h} \int \frac{f_L(E - \mu_L) - f_R(E - \mu_R)}{eV_R - eV_L} T(E, V_B) dE. \quad (3)$$

3 研究结果与讨论

首先研究氮原子 N 的位置对同分异构喹啉分子嵌于石墨烯纳米带电极间的分子电子器件输运性质的影响, 其中氮原子 N 分别放置于编号 1, 2, 3, 4, 5, 6 (如图 1(a) 所示). 研究表明, 氮原子 N 处在不同位置时, 器件电流-电压 ($I-V$) 曲线变化规律类似仅存在定量的变化. 因此, 图 2 中给出不同偏压下具有代表性的器件即氮原子 N 处在 2, 3 和 5 号位置时 M1, M2 和 M3 的 $I-V$ 曲线和电导. 从图 2(a) 可以看出, 隧穿电流关于 (0, 0) 点对

称, 电流在 $[-0.3 \text{ V}, +0.3 \text{ V}]$ 范围内呈线性变化, 随着正(负)偏压绝对值的增大, 分子器件的透射谱和相应移动幅度的变化以及偏压窗的增大, 导致 I - V 曲线和电导呈现非线性特性. 电流在 $[-0.4 \text{ V}, -0.9 \text{ V}]$ 和 $[+0.5 \text{ V}, +0.8 \text{ V}]$ 范围内随

着偏压的增大而减小, 呈现显著的负微分电阻效应. 此外, 如图 2(b) 所示, 随着偏压的变化, 电导与电流呈现类似的先增大后减小再增大的变化趋势.

为进一步分析图 2 中电流-电压曲线和电导变

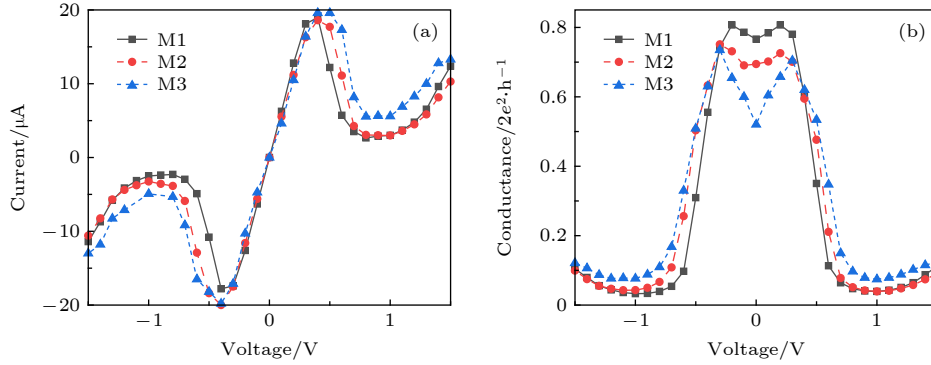


图 2 器件电流-电压 (I - V) 曲线 (a) 和电导 (b)

Fig. 2. The current-voltage (I - V) curve (a) and conductance (b) of the device.

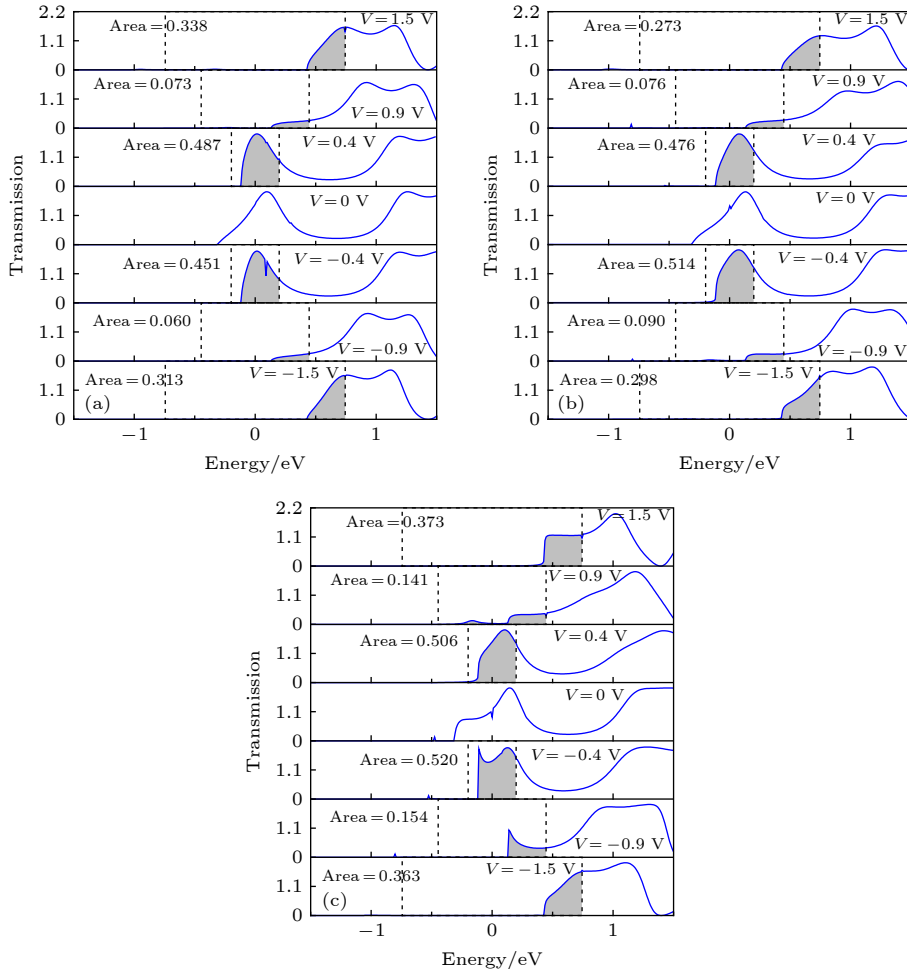


图 3 器件 (a) M1、(b) M2 和 (c) M3 在 $0, \pm 0.4 \text{ V}, \pm 0.9 \text{ V}$ 以及 $\pm 1.5 \text{ V}$ 偏压下的透射谱, 图中的黑色虚线和阴影部分面积分别表示偏压窗和偏压窗内的透射系数积分面积

Fig. 3. The transmission spectrum of the device (a) M1, (b) M2 and (c) M3 under the bias voltage of $0, \pm 0.4 \text{ V}, \pm 0.9 \text{ V}$ and $\pm 1.5 \text{ V}$, where the (black) dashed lines and shaded area denote the bias window and the integrated area of the transmission coefficient in the bias window, respectively.

化规律, 图 3 给出 $0, \pm 0.4 \text{ V}, \pm 0.9 \text{ V}$ 以及 $\pm 1.5 \text{ V}$ 偏压下器件 M1, M2 和 M3 的透射谱, 费米能级取为能量参考点, 偏压窗为 $[-V_B/2, +V_B/2]$ 即图中的黑色虚线之间的区域. Landauer-Büttiker 公式表明, 分子器件的电流可以通过对偏压窗内的透射系数积分得到^[56]. 从图 3(a)—图 3(c)可以看出, 零偏压下费米能级处存在透射峰, 器件是金属性的, 电流在 $0-\pm 0.3 \text{ V}$ 低偏压范围内呈线性变化 (如图 2(a) 所示); 零偏压下费米能级处的透射峰随着偏压的增加逐渐降低. 随着偏压的增加, 低于费米能级的第一隧穿峰逐渐增大并向费米能级方向移动, 导致随着偏压窗的增大, 积分面积呈现先增大后减小再增大的变化, 有力印证了图 2 中电流和电导随偏压的变化.

将喹啉 $\text{C}_9\text{H}_5\text{N}$ 分子平面往垂直纸面向里旋转方向定义为正, 图 1(d) 和 1(e) 给出喹啉 $\text{C}_9\text{H}_5\text{N}$ 分子平面与石墨烯纳米带电极成 0° 和 90° 时的模型. 图 4 中给出 M1 器件喹啉 $\text{C}_9\text{H}_5\text{N}$ 分子平面与石墨烯纳米带电极成 $0^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ, 90^\circ$ 和 -90° 时的 $I-V$ 曲线和电导. 在 $0-\pm 0.3 \text{ V}$ 偏压范围内, 如图 4(a) 中的方块标记的黑色实线、圆点标记的红色长虚线和上三角标记的蓝色短虚线所示, 喹啉 $\text{C}_9\text{H}_5\text{N}$ 分子平面与石墨烯纳米带电极成 $0^\circ, 30^\circ$ 和 45° 时的 $I-V$ 曲线呈线性变化, 但电流在偏压绝对值超过 0.3 V 后随着角度的增大迅速减小; 当喹啉 $\text{C}_9\text{H}_5\text{N}$ 分子平面与石墨烯纳米带电极成 60° 时, 如图 4(a) 中下三角标记的绿色点线所示, 电流在 $\pm 0.3 \text{ V}$ 偏压时大幅减小, 在 $\pm 0.8 \text{ V}-\pm 1.2 \text{ V}$ 范围内趋近于 0; 当喹啉 $\text{C}_9\text{H}_5\text{N}$ 分子平面与石墨烯纳米带电极成 $\pm 90^\circ$ 时, 如图 4(a) 中的菱

形标记的紫色点虚线和左三角标记的黄色点线所示, 电流几乎为 0, 即电流截止, 且喹啉 $\text{C}_9\text{H}_5\text{N}$ 分子平面与石墨烯纳米带电极成 -90° 时呈现与 90° 时同样的变化, 说明电流变化与喹啉分子平面旋转方向无关, 只与旋转的角度有关. 此外, 图 4(b) 中电导在偏压绝对值超过 0.3 V 后, 随着喹啉分子平面与石墨烯纳米带电极间夹角的增大迅速减小, 有力地印证了电流的变化规律.

为进一步解释图 4 中电流和电导变化规律, 图 5 给出 $0, \pm 0.3 \text{ V}, \pm 0.9 \text{ V}$ 以及 $\pm 1.5 \text{ V}$ 偏压下喹啉 $\text{C}_9\text{H}_5\text{N}$ 分子平面与石墨烯纳米带电极成 $0^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$ 和 90° 的透射谱, 其中的黑色虚线和阴影部分面积分别表示偏压窗和偏压窗内透射系数的积分面积. 从图 5(a)—(d) 可以看出, 在 0 偏压下费米能级处存在透射峰, 器件是金属性的, 电流在低偏压范围内呈线性变化 (如图 4(a) 所示), 费米能级处的透射峰随着偏压的增加逐渐降低, 直至最后消失. 随着偏压的增加, 低于费米能级的第一和第二隧穿峰逐渐增强并向费米能级移动, 导致随着偏压窗的增大, 积分面积先增大后减小再增大, 从而解释了图 4 中电流和电导变化的原因以及负微分电阻现象. 当喹啉 $\text{C}_9\text{H}_5\text{N}$ 分子平面与石墨烯纳米带电极成 60° 角时, 积分面积在偏压为 $\pm 0.3 \text{ V}$ 附近大幅度减小, 当偏压增大到 $\pm 1.0 \text{ V}$ 时积分面积接近于 0; 当喹啉 $\text{C}_9\text{H}_5\text{N}$ 分子与石墨烯纳米带电极成 90° 时, 积分面积在所有偏压下趋于零, 即没有电流通过. 我们进一步研究了电极宽度对结果的影响, 发现电极宽度变大时, 所观测到的负微分电阻效应及开关效应仍然存在.

图 6 中给出零偏压下喹啉 $\text{C}_9\text{H}_5\text{N}$ 分子平面与

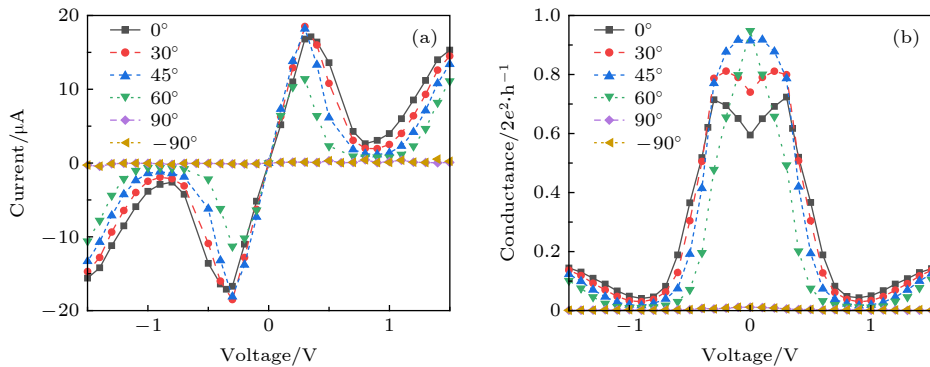


图 4 M1 器件喹啉 $\text{C}_9\text{H}_5\text{N}$ 分子平面与石墨烯纳米带电极成 $0^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ, 90^\circ$ 和 -90° 的 (a) $I-V$ 曲线和 (b) 电导

Fig. 4. The (a) $I-V$ curve and (b) conductance of the M1 device when the angle between the $\text{C}_9\text{H}_5\text{N}$ molecule and graphene nanoribbon electrodes is $0^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ, 90^\circ$ and -90° , respectively.

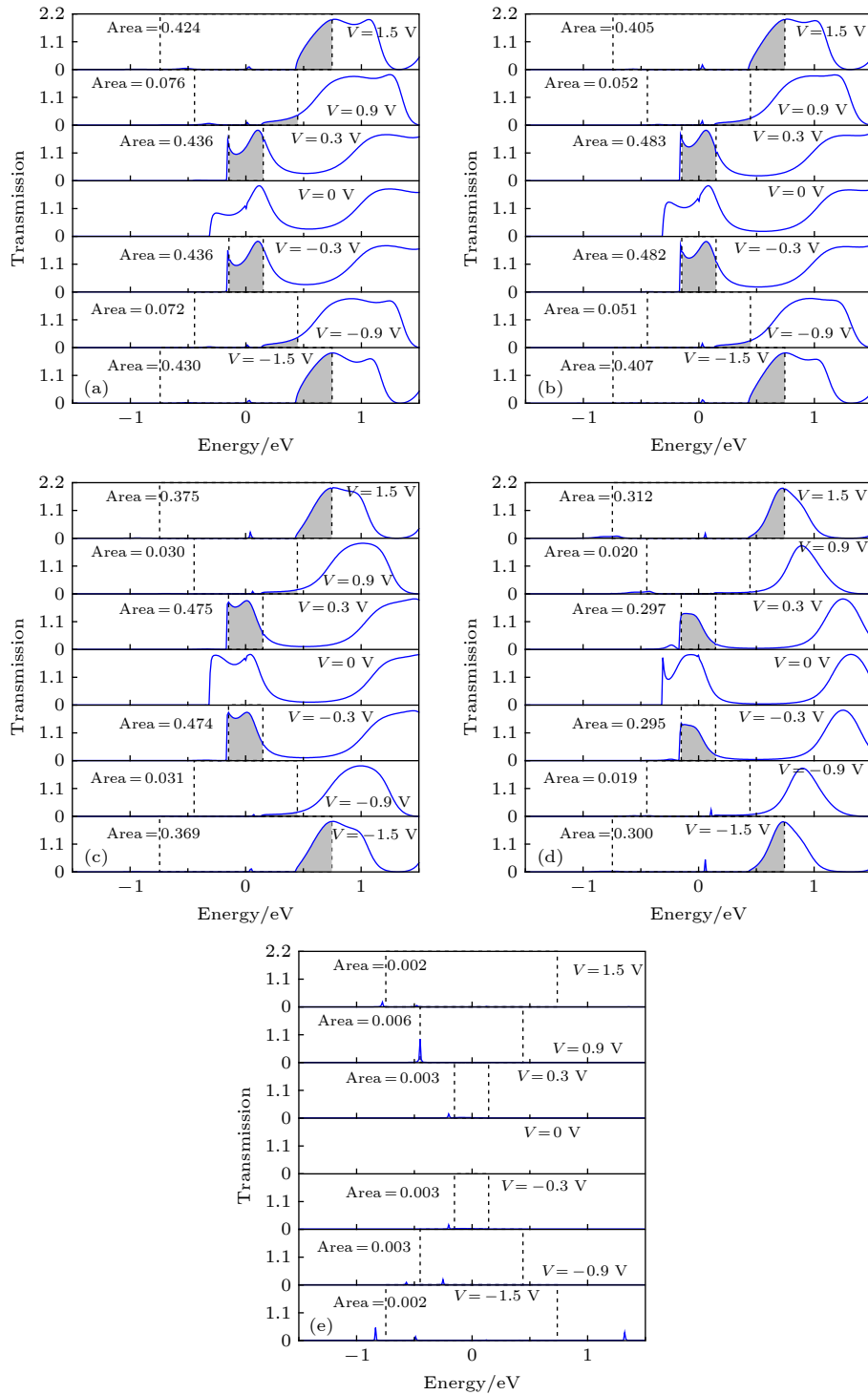


图 5 偏压 0, ± 0.3 V, ± 0.9 V 以及 ± 1.5 V 下喹啉 C_9H_5N 分子平面与石墨烯纳米带电极分别成 (a) 0° , (b) 30° , (c) 45° , (d) 60° 和 (e) 90° 时的透射谱, 图中的黑色虚线和阴影部分面积分别表示偏压窗和偏压窗内透射系数积分面积

Fig. 5. The transmission spectra for the angle between the C_9H_5N molecules and graphene nanoribbon electrodes is (a) 0° , (b) 30° , (c) 45° , (d) 60° and (e) 90° , respectively, under the bias voltage of 0, ± 0.3 V, ± 0.9 V and ± 1.5 V, where the (black) dashed lines and shaded area denote the bias window and the integrated area of the transmission coefficient in the bias window, respectively.

石墨烯纳米带电极成 0° , 30° , 45° , 60° , 90° 和 -90° 时的透射谱. 从图中可以看出, 喹啉 C_9H_5N 分子平面与石墨烯纳米带电极成 0° , 30° , 45° 和 60° 角度时, 费米能级处均呈现尖锐的透射峰; 当喹啉

C_9H_5N 分子平面与石墨烯纳米带电极成 90° 和 -90° 时, 透射谱在非常宽的带隙范围内为 0, 很好地印证了图 4 中的电流-电压曲线以及电导变化规律.

图 7 给出零偏压下喹啉 C_9H_5N 分子平面与石

石墨烯纳米带电极成 0° , 60° , 90° , -90° 时的实空间电荷密度, 直观地展现电荷的分布情况. 从图 7(a) 和图 7(b) 可以看出, 当喹啉 C_9H_5N 分子平面与石

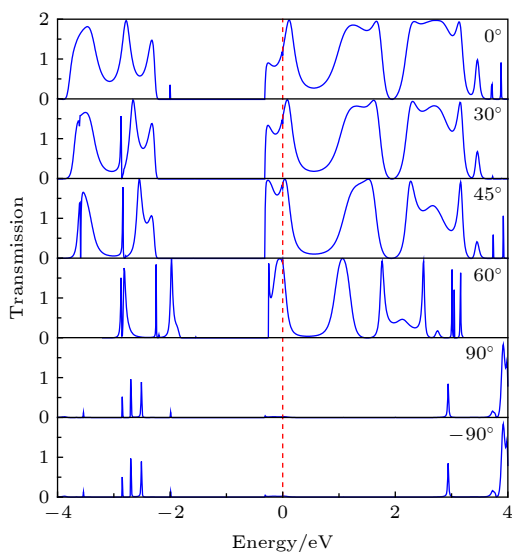


图 6 零偏压下, 喹啉 C_9H_5N 分子平面与石墨烯纳米带电极成 0° , 30° , 45° , 60° , 90° 和 -90° 角度下的透射谱, 其中红色虚线表示费米能级

Fig. 6. The transmission spectrum of the C_9H_5N molecule and the ZGNR electrodes at the angle of 0° , 30° , 45° , 60° , 90° and -90° under the 0 bias, where the (red) dashed line denotes the Fermi level.

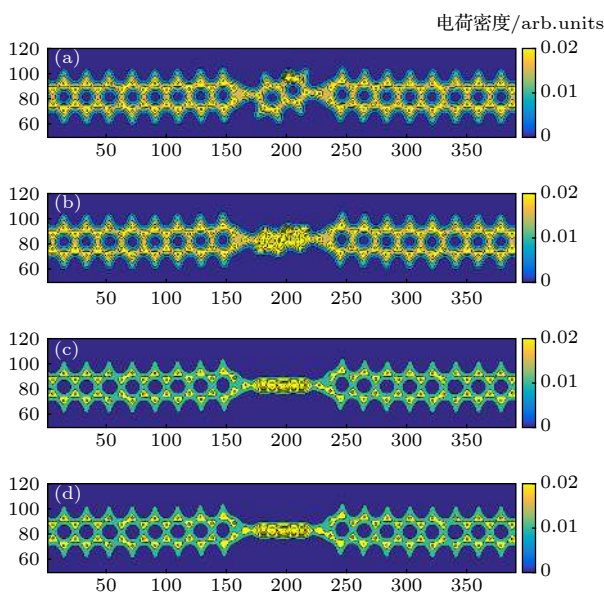


图 7 零偏压下, 喹啉 C_9H_5N 分子平面与石墨烯纳米带电极成 (a) 0° , (b) 60° , (c) 90° 和 (d) -90° 时的实空间电荷密度

Fig. 7. The real space charge density for the angle between the C_9H_5N molecule and graphene nanoribbon electrodes is (a) 0° , (b) 60° , (c) 90° and (d) -90° , respectively under the 0 bias voltage.

墨烯纳米带电极成 60° 时, 中心区喹啉 C_9H_5N 分子电荷分布较多, 但是分子与电极连接处存在电荷缺口, 这就解释了喹啉 C_9H_5N 分子平面与石墨烯纳米带电极成 60° 时, 电导在 0 偏压下较大但随着偏压的增加急剧减小的原因. 比较图 7(c) 和图 7(d) 可以发现, 当喹啉 C_9H_5N 分子平面与石墨烯纳米带电极成 90° 或 -90° 时, 中心区喹啉 C_9H_5N 分子电荷分布较多, 电极上电荷分布较少, 不利于电荷输运, 从另一方面解释了喹啉 C_9H_5N 分子平面与石墨烯纳米带电极成 90° 或 -90° , 电流几乎为 0.

4 结 论

利用密度泛函理论与非平衡格林函数相结合的第一性原理计算方法, 系统地研究了通过碳原子连接的同分异构喹啉分子嵌于石墨烯纳米带电极间的分子电子器件输运性质. 研究表明: 器件电流在 $[-0.3 \text{ V}, +0.3 \text{ V}]$ 范围内呈线性变化, 电流在 $[-0.4 \text{ V}, -0.9 \text{ V}]$ 和 $[+0.5 \text{ V}, +0.8 \text{ V}]$ 范围内随着偏压的增大而减小, 呈现显著的负微分电阻效应; 氮原子的位置对器件输运性质在定量上有一定的影响. 此外, 在 $0 \sim \pm 0.3 \text{ V}$ 偏压范围内, 喹啉 C_9H_5N 分子平面与石墨烯纳米带电极成 0° , 30° 和 45° 时的电流-电压曲线呈线性变化, 电流在偏压绝对值超过 0.3 V 以后随着角度的增大迅速减小; 当喹啉 C_9H_5N 分子平面与石墨烯纳米带电极成 60° 时, 电流在 $\pm 0.3 \text{ V}$ 偏压时大幅减小, 在 $\pm 0.8 \text{ V} \sim \pm 1.2 \text{ V}$ 范围内趋近于 0; 当喹啉 C_9H_5N 分子平面与石墨烯纳米带电极成 $\pm 90^\circ$ 时, 电流截止. 以上研究结果得到偏压窗内透射系数的积分以及零偏压下实空间电荷密度分布等的有力印证和解释, 可为设计制作基于同分异构喹啉分子电子开关和负微分电阻器件提供理论依据.

参考文献

- [1] Gimzewski J K, Joachim C 1999 *Science* **283** 1683
- [2] Aviram A 1989 *Angew. Chem.* **101** 536
- [3] Zhao P, Fang C, Xia C, Wang Y, Liu D, Xie S 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 013113
- [4] Fu Q, Yang J, Luo Y 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 182103
- [5] An Y P, Yang Z, Ratner M A 2011 *J. Chem. Phys.* **135** 044706
- [6] Fan Z Q, Zhang Z H, Deng X Q, Tang G P, Chen K Q 2012 *Org. Electron.* **13** 2954
- [7] Pan J, Zhang Z, Deng X, Qiu M, Guo C 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 203104

- [8] Zeng J, Chen K Q, He J, Fan Z Q, Zhang X J 2011 *J. Appl. Phys.* **109** 124502
- [9] Wu Q H, Zhao P, Liu D S 2014 *Acta Phys. Chim. Sin.* **30** 53
- [10] Ren H, Li Q X, Luo Y, Yang J 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 173110
- [11] Geng H, Hu Y, Shuai Z, Xia K, Gao H, Chen K 2007 *J. Phys. Chem. C* **111** 19098
- [12] Zhang J J, Zhang Z H, Guo C, Li J, Deng X Q 2012 *Acta Phys. Chim. Sin.* **28** 1701
- [13] Zhang X, Chen K, Long M, He J, Gao Y 2015 *Mod. Phys. Lett. B* **29** 1550106
- [14] Ozaki T, Nishio K, Weng H, Kino H 2010 *Phys. Rev. B* **81** 075422
- [15] Zhang D, Long M, Zhang X, Ouyang F, Li M, Xu H 2015 *J. Appl. Phys.* **117** 014311
- [16] Cui L L, Long M Q, Zhang X J, Li X M, Zhang D, Yang B C 2016 *Phys. Lett. A* **380** 730
- [17] Jia C, Migliore A, Xin N, Huang S, Wang J, Yang Q, Wang S, Chen H, Wang D, Feng B 2016 *Science* **352** 1443
- [18] Wen H M, Yang Y, Zhou X S, Liu J Y, Zhang D B, Chen Z B, Wang J Y, Chen Z N, Tian Z Q 2013 *Chem. Sci.* **4** 2471
- [19] Metzger R M 2003 *Chem. Rev.* **103** 3803
- [20] Chung A, Deen J, Lee J S, Meyyappan M 2010 *Nanotechnology* **21** 412001
- [21] Chen J, Reed M, Rawlett A, Tour J 1999 *Science* **286** 1550
- [22] Joachim C, Gimzewski J K, Schlittler R R, Chavy C 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 2102
- [23] Wan H, Zhou B, Chen X, Sun C Q, Zhou G 2012 *J. Phys. Chem. C* **116** 2570
- [24] Danilov A V, Hedegård P, Golubev D S, Bjørnholm T, Kubatkin S E 2008 *Nano Lett.* **8** 2393
- [25] Bumm L, Arnold J, Cygan M, Dumbar T, Burgin T, Jones L, Allara D L, Tour J M, Weiss P 1996 *Science* **271** 1705
- [26] Reed M A, Zhou C, Muller C, Burgin T, Tour J 1997 *Science* **278** 252
- [27] Chen J, Wang W, Reed M, Rawlett A, Price D, Tour J 2000 *Appl. Phys. Lett.* **77** 1224
- [28] Venkataraman L, Klare J E, Nuckolls C, Hybertsen M S, Steigerwald M L 2006 *Nature* **442** 904
- [29] Quinn J R, Foss Jr F W, Venkataraman L, Hybertsen M S, Breslow R 2007 *J. Am. Chem. Soc.* **129** 6714
- [30] Fu W, Xu Z, Bai X, Gu C, Wang E 2009 *Nano Lett.* **9** 921
- [31] Wang J, Zhu M, Outlaw R, Zhao X, Manos D, Holloway B, Mammana V 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 1265
- [32] Lin Z, Jun W 2014 *Chin. Phys. B* **23** 087202
- [33] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [34] Wang X M, Liu H 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 047102 (in Chinese) [王雪梅, 刘红 2011 物理学报 **60** 047102]
- [35] Li X, Wang X, Zhang L, Lee S, Dai H 2008 *Science* **319** 1229
- [36] Son Y W, Cohen M L, Louie S G 2006 *Nature* **444** 347
- [37] Wen B, Cao M S, Lu M M, Cao W Q, Shi H G, Liu J, Wang X X, Jin H B, Fang X Y, Wang W Z 2014 *Adv. Mater.* **26** 3484
- [38] Cao M S, Shu J C, Wang X X, Wang X, Zhang M, Yang H J, Fang X Y, Yuan J 2019 *Annalen Der Physik* **531** 1800390
- [39] Cao M S, Wang X X, Zhang M, Shu J C, Cao W Q, Yang H J, Fang X Y, Yuan J 2019 *Adv. Funct. Mater.* **29** 1807398
- [40] Zhang M, Wang X X, Cao W Q, Yuan J, Cao M S 2019 *Adv. Opt. Mater.* **4** 1900689
- [41] Fang X Y, Yu X X, Zheng H M, Jin H B, Wang L, Cao M S 2015 *Phys. Lett. A* **379** 2245
- [42] Cao M S, Wang X X, Cao W Q, Fang X Y, Wen B, Yuan J 2018 *Small* **14** 1800987
- [43] Cao W Q, Wang X X, Yuan J, Wang W Z, Cao M S 2015 *J. Mater. Chem. C* **3** 10017
- [44] Wen B, Cao M S, Hou Z L, Song W L, Zhang L, Lu M M, Jin H B, Fang X Y, Wang W Z, Yuan J 2013 *Carbon* **65** 124
- [45] Taylor J, Guo H, Wang J 2001 *Phys. Rev. B* **63** 245407
- [46] Taylor J, Guo H, Wang J 2001 *Phys. Rev. B* **63** 121104
- [47] Waldron D, Haney P, Larade B, MacDonald A, Guo H 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 166804
- [48] Waldron D, Timoshevskii V, Hu Y, Xia K, Guo H 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 226802
- [49] Perdew J P, Zunger A 1981 *Phys. Rev. B* **23** 5048
- [50] Copple A, Ralston N, Peng X 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 193108
- [51] Brandbyge M, Mozos J L, Ordejón P, Taylor J, Stokbro K 2002 *Phys. Rev. B* **65** 165401
- [52] Lee C, Yang W, Parr R G 1988 *Phys. Rev. B* **37** 785
- [53] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [54] Hammer B, Hansen L, Nørskov J 1999 *Phys. Rev. B* **59** 7413
- [55] Guo B, Liu Q, Chen E, Zhu H, Fang L, Gong J R 2010 *Nano Lett.* **10** 4975
- [56] Datta S 1997 *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (2nd ed.) (The United Kingdom: Cambridge University Press) pp102–112

Electron transport properties of isomeric quinoline molecule junction sandwiched between graphene nanoribbon electrodes^{*}

Zuo Min Liao Wen-Hu[†] Wu Dan Lin Li-E

(College of Physics, Mechanical and Electrical Engineering, Jishou University, Jishou 416000, China)

(Received 27 July 2019; revised manuscript received 23 September 2019)

Abstract

Since graphene was successfully obtained in the end of 2004, the research on graphene and relevant devices has attracted extensive attention. The armchair- and zigzag-edge graphene nanoribbons, as the building blocks, are often used to design the graphene-based molecular electronic devices. Quinoline, an important intermediate between metallurgical dyes and polymers, is an organic conjugated small molecule which is simple in structure and easy to synthesize and modify the chemical structure, and quinoline has become one of the research focuses in the field of molecular electronic devices in recent years. From the physical point of view, the transport properties of the isomeric quinoline molecular electronic devices connected with graphene nanoribbon electrodes can provide a theoretical basis for designing and manufacturing molecular electronic devices with excellent performance. Based on the first-principles calculation method combining the density functional theory and non-equilibrium Green's function, this paper systematically investigates the transport properties of the carbon-linked isomeric quinoline molecule electronic devices sandwiched between the graphene nanoribbon electrodes. The obtained results show that the device current presents a linear change in a bias voltage range $[-0.3 \text{ V}, +0.3 \text{ V}]$, the current decreases with the increase of the absolute bias voltage, separately, in a range of $[+0.5 \text{ V}, +0.8 \text{ V}]$ and $[-0.4 \text{ V}, -0.9 \text{ V}]$, demonstrating a strong negative differential resistance effect. On the other hand, the interesting negative differential resistance effect is remained when there is an angle between the quinoline molecular plane and the graphene nanoribbon electrode; the current of the device is found to be independent of the rotation direction of quinoline molecule in the central region; the current of the device should be forbidden when the quinoline molecule plane is rotated to a direction vertical to the graphene nanoribbon electrodes. The obtained results can provide a theoretical basis for designing and manufacturing the molecular switches and negative differential resistance devices based on isomeric quinoline molecular electronic devices.

Keywords: isomeric quinoline molecule, graphene nanoribbon, first-principles calculation, electron transport

PACS: 73.40.-c, 71.15.Mb, 73.23.-b, 73.63.Rt

DOI: 10.7498/aps.68.20191154

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11664010, 11264013), the Hunan Provincial Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 2017JJ2217, 12JJ4003), the Scientific Research Fund of Hunan Provincial Education Department of China (Grant No. 18A293), and the Research Program of Jishou University, China (Grant Nos. JGY201851, Jdy1849, Jdy19039).

[†] Corresponding author. E-mail: whliao@jsu.edu.cn