

引用信息: HUANG Biao; ZHANG Jia-xing; LI Rui; SHEN Zi-yong; HOU Shi-min; ZHAO Xingyu; XUE Zeng-quan; WU Quan-de. Acta Phys. -Chim. Sin., 2006, 22(02): 161-166 [黄飙 ;张家兴;李锐;申自勇;侯士敏;赵兴钰;薛增泉;吴全德. 物理化学学报, 2006, 22(02): 161-166]

本期目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

## Al-C<sub>60</sub>-Al分子结电子输运特性的第一性原理计算

黄飙 ; 张家兴; 李锐; 申自勇; 侯士敏; 赵兴钰; 薛增泉; 吴全德

北京大学信息科学技术学院, 北京大学纳米器件物理与化学教育部重点实验室, 北京 100871

### 摘要:

利用基于密度泛函理论的格林函数方法, 计算了Al-C<sub>60</sub>-Al分子结的电子输运特性. 考虑了C<sub>60</sub>分子在铝电极表面的原子结构弛豫, 计算结果表明共振传导是Al-C<sub>60</sub>-Al分子结电子输运的主要特征, 在费米能级附近的电导约为1.14G<sub>0</sub> (G<sub>0</sub>=2e<sup>2</sup>/h). 投影态密度(PDOS)分析表明, Al-C<sub>60</sub>-Al分子结的电子输运主要通过C<sub>60</sub>分子的最低空分子轨道(LUMO)和次低空分子轨道(LUMO+1)进行. 讨论了C<sub>60</sub>分子和铝电极之间距离的变化对其电子输运特性的影响.

关键词: Al-C<sub>60</sub>-Al分子结 电子输运 密度泛函理论 格林函数方法

收稿日期 2005-07-01 修回日期 2005-09-23 网络版发布日期 2006-01-22

通讯作者: 申自勇 Email: szy@ele.pku.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(700KB\)](#)

服务与反馈

[把本文推荐给朋友](#)

[加入我的书架](#)

[加入引用管理器](#)

[引用本文](#)

[Email Alert](#)

[文章反馈](#)

[浏览反馈信息](#)

本文关键词相关文章

▶ [Al-C<sub>60</sub>-Al分子结](#)

▶ [电子输运](#)

▶ [密度泛函理论](#)

▶ [格林函数方法](#)

本文作者相关文章

▶ [黄飙](#)

▶ [张家兴](#)

▶ [李锐](#)

▶ [申自勇](#)

▶ [侯士敏](#)

▶ [赵兴钰](#)

▶ [薛增泉](#)

▶ [吴全德](#)