DOI:10.19789/j.1004-9398.2016.01.005

线缺陷对扶手型石墨烯纳米带能隙的调控*

刘丽丽 龙 文
(首都师范大学物理系,北京 100048)

摘 要

采用单轨道最近邻紧束缚模型,我们研究了线缺陷的位置、类型和强度对扶手型石墨烯纳米带(AGNRs)能隙的调控. 计算结果表明,对于带宽 N 为 3n(n 为整数)的半导体 AGNRs,加一条位于 $N_i \neq 3m-1$ 的两体线缺陷后(N_i为缺陷位置,m 为整数),能隙关闭,纳米带呈金属性;而 $N=3n+1$ 的半导体 AGNRs 关闭能隙的两体线缺陷位置为 $N_i \neq 3m-2$. 对于带宽 $N=3n+2$ 的金属性 AGNRs,可在 $N_i \neq 3m$ 位置处加一条子格线缺陷打开能隙,使纳米带呈半导体性,同时在费米能附近出现一个波速为零的局域态;增加正常原子与缺陷原子之间的交叠积分,可使局域态消失,同时保持半导体性. 利用格林函数方法,我们研究了一个两端口有限尺寸 AGNRs 的电子输运模型,计算了体系在有线缺陷时的透射系数和态密度,结果与能带谱计算结果相一致.

关键词: 扶手型石墨烯纳米带,线缺陷,能隙.
中图分类号: O469

石墨烯是一种单层六角蜂窝状的碳原子晶格,它既是凝聚态物理基础研究的重要平台,也是未来碳基纳米电子和分子器件的潜在候选材料,具有十分广阔的应用前景. 石墨烯的六角蜂窝状晶格由两个不等价的子晶格构成(A 原子和 B 原子),其巡游 π 电子在费米能附近具有独特能带结构,是无质量的狄拉克费米子[1]. 导带和价带在两个不等价的狄拉克点处以锥状汇集,这两个点具有相反的手性,并构成一个时间反演对. 纯净的二维石墨烯无能隙,零能隙使石墨烯用于可控纳米转换器件面临挑战[2,3]. 为了迎接这一挑战,我们需要研究多种打开石墨烯能隙的方法和技术. 近年来,人们在如何使石墨烯能隙打开方面做了大量的理论和实验方面的工作. 2011 年,Naumov 等人引入周期性非均匀张力打开了石墨烯的能隙[2];2012 年,Jesper Goor Pedersen 和 Thomas Garm Pedersen 利用周期性静电栅压也打开了石墨烯的能隙[4];次年,Søren Ulstrup 等人通过改变石墨烯生长衬底打开了其能隙[5]等等.

当把二维完美的石墨烯裁成带状准一维结构时,石墨烯准粒子在低能区的行为强烈地依赖于其边界条件. 前人大量的理论和实验工作表明,石墨烯有两种基本的边条件,扶手型和锯齿型,这两种边条件决定了纯净石墨烯纳米带的基本性质. 扶手型纳米带没有边态,但锯齿型纳米带有局域边态. 以单轨道最近邻紧束缚模型为背景,扶手型纳米带依据其宽度变化,或者是金属性,或者是半导体性,但锯齿型纳米带都是金属性. 上述结论只适用于干净的纳米带,当存在杂质或缺陷时,系统的行为会有所不同. 在这方面前人已经做了大量的工作,但对于线缺陷位置[6]、类型和强度对 AGNRs 能隙的调控研究却并不是很深入. 2013 年 Maiti 等人的工作表明,二体线缺陷能打开金属性石墨烯纳米带的能隙,但不能关闭半导体性纳米带的能隙[6]. 我们的研究表明,二体线缺陷确实能关闭半导体性纳米带的能隙. 对 N=3n 的半导体 AGNRs(N 为纳米带宽度,n 为整数),两体线缺陷在 $N_i \neq 3m-1$ 位置时能隙关闭,纳米带呈金属性;对 $N=3n+1$ 的半导体 AGNRs,线缺陷在 $N_i \neq 3m-2$ 时能隙关闭. 进一步,我们又引入了另一种子格线缺陷,发现位于 $N_i \neq 3m$ 的这种子格线缺陷也能打开金属性纳米带的能隙. 最后,我们利用格林函数方法,研究了通过有限尺寸 AGNRs 的两端电子体系,计算了体系的透射系数和态密度,数值计算结果与能带计算结果相一致.

收稿日期: 2015-03-23
* 国家自然科学基金(11074174)

(C)1994-2019 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

1　模型和方法

图 1 表示一个两端口量子系统模型: 有限区域的扶手型石墨烯纳米带耦合到两个半无限长相同纳米带导线上. 实心和空心圆圈分别代表两种不同子格原子,红色原子排在一条直线上,只占据 A 子格原子,构成一条 A 子格线缺陷. 纳米带的一个单胞由绿色的虚线框表示,内含 2N 个原子格点.

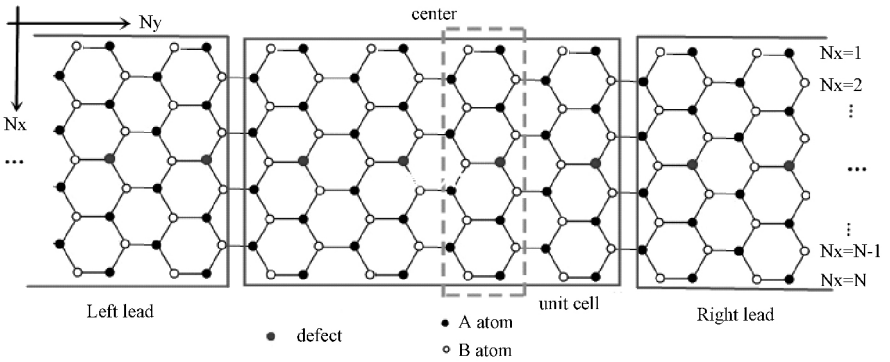


图 1　耦合到左、右两端导线的扶手型石墨烯纳米带结构示意图,红点表示线缺陷,绿框表示单胞,实心和空心圆圈分别代表两种不同的子格原子

不考虑电子间相互作用,系统哈密顿量为:

$$H = H_{AGNR} + H_{lead} + H_{tun} \tag{1}$$

第一项表示中心区石墨烯纳米带的哈密顿量,采用最近邻紧束缚模型,有:

$$H_{AGNR} = \sum_i \varepsilon_i a_i^+ a_i + \left(\sum_{<i,j>} t_{ij} a_i^+ a_j + h.c. \right) \tag{2}$$

这里 ε_i 是占位能,t_{ij} 是最近邻原子间的交叠积分. $t_{ij} = t_1$ 和 $t_{ij} = t_2$ 分别是最近邻正常格点间和最近邻杂质格点间电子的交叠积分,$t_{ij} = t_3$ 是正常格点与杂质格点的交叠积分. 算符 $a_i^+(a_i)$ 表示在 i 位点产生(湮灭) 一个电子. $\sum_{<ij>}$ 表示仅对最近邻格点求和.

公式(1) 中的第二项是半无限长石墨烯纳米带导线(左导线和右导线) 的哈密顿量,在最近邻紧束缚模型下导线的哈密顿量类似于公式(2) ,导线的占位能 ε_0 和交叠积分 t_0 都是常数. 第三项是中心区与导线的耦合哈密顿量,这里我们取中间区与左右导线通过参数 τ_L 与 τ_R 直接耦合.

利用格林函数方法,可以得到扶手型石墨烯纳米带的电子透射系数. 在不考虑库仑相互作用的相干输运中,通过导线 - AGNR - 导线三明治系统的透射系数是[6]:

$$T = Tr\left[\Gamma_L G^r \Gamma_R G^a\right] \tag{3}$$

其中 Γ_L 和 Γ_R 分别是与左、右导线的耦合矩阵,G^r 和 G^a 分别是石墨烯纳米带的延迟和超前格林函数.

$$G = \left[(E + i\eta) I - H_{AGNR} - \Sigma_L - \Sigma_R\right]^{-1} \tag{4}$$

其中 $\eta \to 0^+$,Σ_L 和 Σ_R 分别是中心区与左、右导线的耦合自能.

下面我们介绍求耦合到左导线的自能方法(右导线类似) . 将扶手型石墨烯纳米带分解成一系列由单胞构成的主层,只考虑最近邻间的相互作用,系统被转化为一维线性主层链(如图 2 所示)[7]. H_{00}、H_{11}、H_{22}. …表示主层哈密顿量; H_{01}、H_{10}、H_{12}. …表示主层间耦合哈密顿量. 考虑到纳米带既有周期性又有厄米性,左导线的矩阵哈密顿量为:

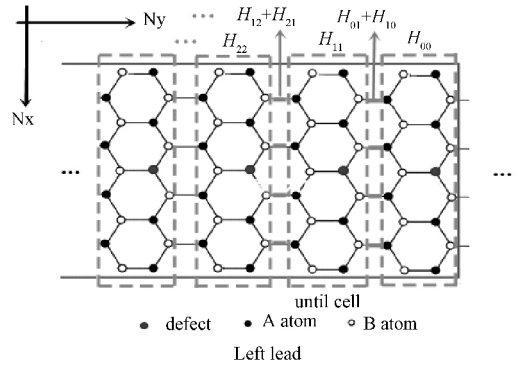


图 2　半无限长扶手型石墨烯纳米带左导线结构示意图,绿色虚线框表示由单胞构成的离散主层

$$H = \begin{pmatrix} H_{00} & H_{01} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ H_{10} & H_{00} & H_{01} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & H_{10} & H_{00} & H_{01} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{5}$$

将上式带入能量表象的推迟格林函数[8]:

$$\left[(E + i\eta) I - H\right] G = I \tag{6}$$

中,有如下分块矩阵形式:

(C)1994-2019 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

$$\begin{pmatrix} (E+i\eta)I-H_{00} & -H_{01} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ -H_{10} & (E+i\eta)-H_{00} & -H_{01} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & -H_{10} & (E+i\eta)I-H_{00} & -H_{01} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{00} & G_{01} & G_{02} & \cdots \\ G_{10} & G_{11} & G_{12} & \cdots \\ G_{20} & G_{21} & G_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & I & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & I & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{7}$$

由上式可得如下系列方程:

$$[(E+i\eta)I-H_{00}]G_{00}-H_{01}G_{10}=I \tag{7a}$$

$$-H_{10}G_{00}+[(E+i\eta)I-H_{00}]G_{10}-H_{01}G_{20}=0 \tag{7b}$$

(7a)式和(7b)式可写成:

$$\begin{cases} H_{01}^{-1}[(E+i\eta)I-H_{00}]G_{00}-H_{01}^{-1}=G_{10} \\ H_{01}^{-1}[(E+i\eta)I-H_{00}]G_{10}-H_{01}^{-1}H_{01}^{+}G_{00}=G_{20} \end{cases} \tag{8}$$

即:

$$\begin{pmatrix} G_{20} \\ G_{10} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{-101}[(E+i\eta)I-H_{00}] & -H_{01}^{-1}H_{01}^{+} \\ I & 0 \end{pmatrix}^{n-1} \cdot \begin{pmatrix} G_{10} \\ G_{00} \end{pmatrix} \tag{9}$$

重复上述过程,可得:

$$\begin{pmatrix} G_{n,0} \\ G_{n-1,0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{-101}[(E+i\eta)I-H_{00}] & -H_{01}^{-1}H_{01}^{+} \\ I & 0 \end{pmatrix}^{n-1} \cdot \begin{pmatrix} G_{10} \\ G_{00} \end{pmatrix} \tag{10}$$

由上式可得转移矩阵 F[7]:

$$F=\begin{pmatrix} H_{01}^{-1}[(E+i\eta)I-H_{00}] & -H_{01}^{-1}H_{01}^{+} \\ I & 0 \end{pmatrix} \tag{11}$$

求这矩阵的本征值和本征矢,并按本征值绝对值从小到大排列本征矢:

$$(\overrightarrow{e_1}\ \overrightarrow{e_2}\ \cdots\ \overrightarrow{e_{4N}})=\begin{pmatrix} S_1 & S_2 \\ S_3 & S_4 \end{pmatrix} \tag{12}$$

由此得到左导线表面格林函数:

$$g_L^r=\{[(E+i\eta)I-H_{00}]-H_{01}S_1S_2^{-1}\}^{-1} \tag{13}$$

其中,$\eta\to 0^+$;I 为单位矩阵. 据此我们得到中心区耦合到左导线的自能:

$$\sum\nolimits_L^r = H_{tun}g_L^rH_{tun}^{+} \tag{14}$$

其中,g_L 为左导线的表面格林函数.

为了求出含线缺陷的无限长扶手型石墨烯纳米带的能量色散关系,我们考虑如图 3 所示的模型结构. 实心和空心圆圈分别表示两种不同的子格原子,排在一条直线上的缺陷原子(红色圆点)构成了一条线缺陷,图 3(a)表示的是两体线缺陷,图 3(b)表示的是子格线缺陷. 绿色虚线矩形框代表一个单胞,每个单胞含有 2N(N 为带宽)个原子. N_i 表示线缺陷位置,这里 $N_i=5$.

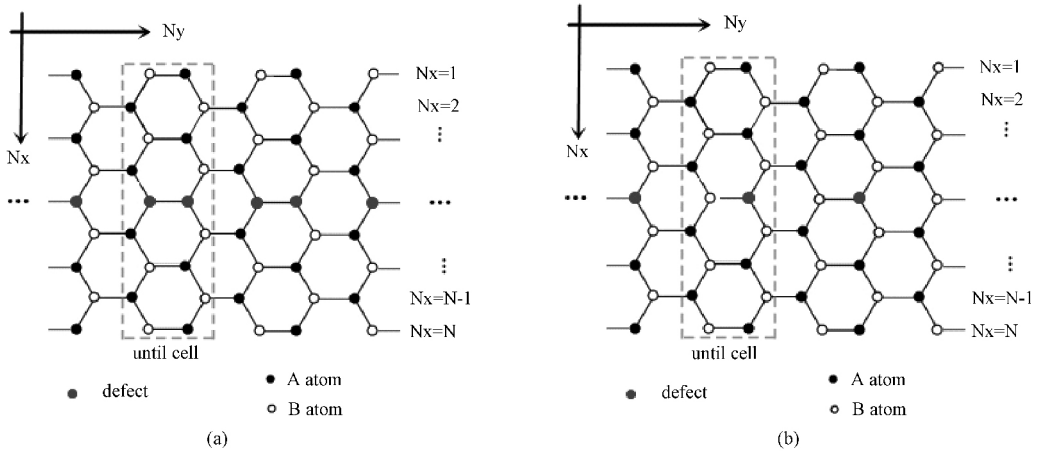


图 3 含一条线缺陷(红色圆点)的扶手型石墨烯纳米带示意图,(a)两体线缺陷,(b)A 子格线缺陷。绿色虚线矩形框定义了一个单胞,实心和空心圆点分别表示 A、B 两种子格原子,线缺陷在 Ni = 5 的位置

沿 y 方向无限伸展的扶手型石墨烯纳米带,类似于一个无限长一维单胞链. 选择一个恰当的单胞(如图 3 绿色矩形框所示),可类比一维格点链,建立一个等效的扶手型石墨烯纳米带有效差分方程[8]:

$$(EI-\varepsilon)\psi_j=\kappa\psi_{j+1}+\kappa^{+}\psi_{j-1}, \tag{15}$$

(C)1994-2019 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

其中

$$\psi_j = \begin{pmatrix} \psi_{j1} \\ \psi_{j2} \\ \vdots \\ \psi_{j2N} \end{pmatrix}. \qquad (16)$$

ε 和 κ 分别对应单胞内占位能矩阵和最近邻格点间交叠积分矩阵,I 是单位矩阵,这三个矩阵都是(2N×2N)的. 因为纳米带沿 y 方向具有平移不变性,所以波函数 ψ_j 具有 Bloch 波形式,(15)式可改写为:

$$(EI - \varepsilon) = \kappa e^{ik_y\Lambda} + \kappa^+ e^{-ik_y\Lambda}, \qquad (17)$$

$\Lambda = 3a$ 是相邻单胞间隔,a 是六角晶格的边长. 求解方程(17),我们得到了扶手型石墨烯纳米带的能量色散关系 E *vs.* k_y.

2　计算结果和讨论

这里我们展示无限长石墨烯纳米带的能带谱和通过有限尺寸纳米带的透射系数与态密度. 参数选取如下: 正常格点的占位能 $\varepsilon_i = 0$,但缺陷位点的占位能 $\varepsilon_t = 1$ eV. 左、右导线的耦合参数为 $\tau_L = \tau_R = 1$ eV. 三个不同交叠积分分别为 $t_1 = 1$ eV,$t_2 = 0.7$ eV,$t_3 = 0.1$ eV[6]. 设平衡态费米能 $E_F = 0$,取 $c = e = h = 1$,以 t_1 为能量尺度的测量标准.

2.1　纯净扶手型石墨烯纳米带的能带图

图 4 给出三种不同带宽的无限长纯净扶手型石墨烯纳米带的能带谱. 带宽 N 为 18,19,20 时,分别对应三种典型带宽 $3n$,$3n+1$,$3n+2$($n=6$). 当 $N = 3n+2$ (20) 时,最低导带底和最高价带顶在 $k_y = 0$ 处重合,此时的纳米带无能隙,是金属性的,如图 4(c)所示. 然而,当 $N = 3n$ (18) 或 $N = 3n+1$ (19) 时,清晰可见在 $k_y = 0$ 处有一个有限的能隙,说明此时的石墨烯纳米带是半导体性的,如图 4(a),4(b)所示.

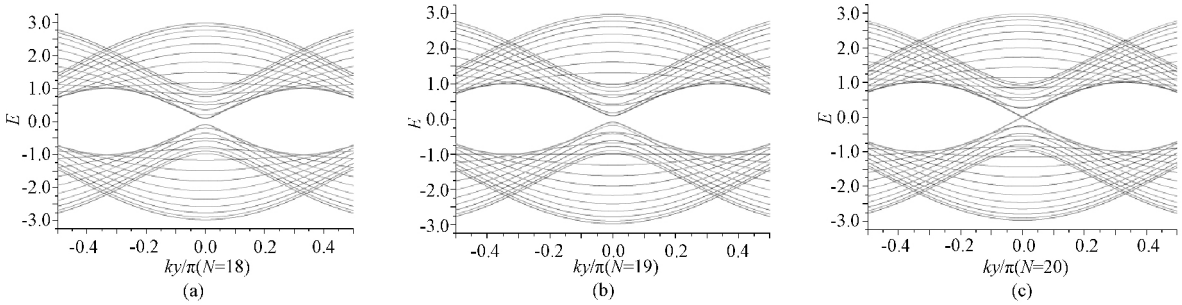


图 4　无限长纯净扶手型石墨烯纳米带能带谱。(a) 带宽为 18,(b) 带宽为 19,(c) 带宽为 20

2.2　两体线缺陷可关闭半导体性扶手型石墨烯纳米带的能隙

上述无缺陷纯净石墨烯纳米带的能带结果已出现在文献中,但在这篇文章中我们要研究的主要问题——线缺陷的位置、类型和耦合强度对纳米带带隙的影响——尚无深入细致的研究.

Maiti 等人在 2013 年的文章不能使半导体纳米带的能隙关闭[6]. 但我们的计算结果表明,选择恰当的交叠积分,在某些特定位置的两体线缺陷能有效地关闭半导体纳米带的能隙(如图 5(a)和图 5(c)所示),而在另一些位置线缺陷不能关闭半导体纳米带的能隙(如图 5(b)和图 5(d)所示). 采用如图 3(a)红色圆点所示的两体线缺陷,即缺陷同时占据一条直线上的 A、B 两种子格原子,取 $t_3 = 0$,其他参数不变,计算表明,对于带宽为 $3n$ 的半导体纳米带,当两体线缺陷位于 $3m-1$ 时,能隙不能关闭,在其他任何位置时能隙都能关闭. 对于带宽为 $3n+1$ 的纳米带,当线缺陷位于 $3m-2$ 时,能隙不能关闭,在其他任何位置时能隙都能关闭,其中 n、m 是整数. 图 5(a)表示带宽为 18($3n$),线缺陷位置为 $N_i = 6$($\neq 3m-1$)时,能隙关闭. 图 5(b)表示带宽为 18($3n$),线缺陷位置为 $N_i = 5$($= 3m-1$)时,能隙不关闭. 图 5(c)表示带宽为 19($3n+1$),线缺陷位置为 $N_i = 6$($\neq 3m-2$)时,能隙关闭. 图 5(d)表示带宽为 19($3n+1$),线缺陷位置为 $N_i = 7$($= 3m-2$)时,能隙不关闭.

2.3　一条子格线缺陷可打开金属性扶手型石墨烯纳米带的能隙

Maiti 等人的工作表明两体线缺陷能够打开金属性扶手型石墨烯纳米带的能隙[6],我们发现另一种如图 3(b)所示的子格线缺陷(缺陷仅占据一条直线上的 A 原子或 B 原子),也能打开金属性纳米带的能隙如图 6(a)所示. 占位能和跃迁项参数与中心区相同,能隙的打开或关闭依赖于子格线缺陷位置. 当 $N_i = 3m$ 时,能隙关闭; 其它位置能隙打开. 图 6(a)纳米带带宽为 20($3n+2$),线缺陷位置为 $N_i = 5$

(C)1994-2019 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

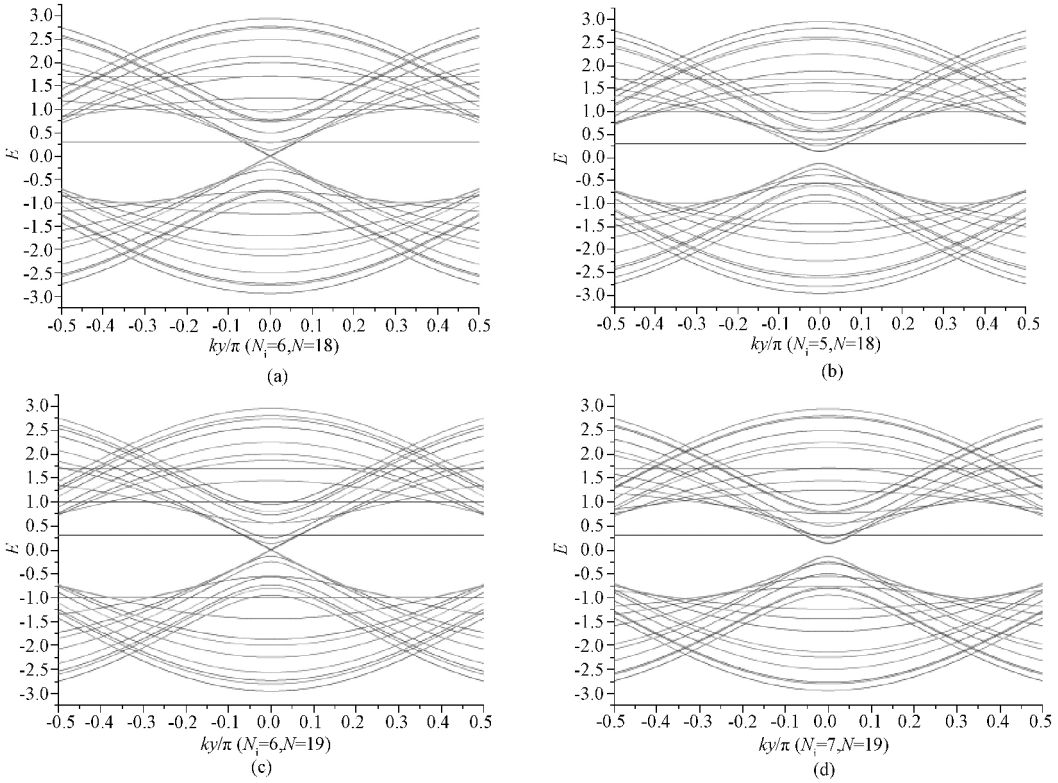


图 5　一条两体线缺陷既能关闭半导体性扶手型石墨烯纳米带的能隙，又能打开能隙，结果依赖于线缺陷的位置. (a) **带宽为** $18(3n)$，**线缺陷位置为** $N_i=6(\neq 3m-1)$，**能隙关闭.** (b) **带宽为** $18(3n)$，**线缺陷位置为** $N_i=5(=3m-1)$，**能隙不关闭.** (c) **带宽为** $19(3n+1)$，**线缺陷位置为** $N_i=6(\neq 3m-2)$，**能隙关闭.** (d) **带宽为** $19(3n+1)$，**线缺陷位置为** $N_i=7(=3m-2)$，**能隙不关闭**

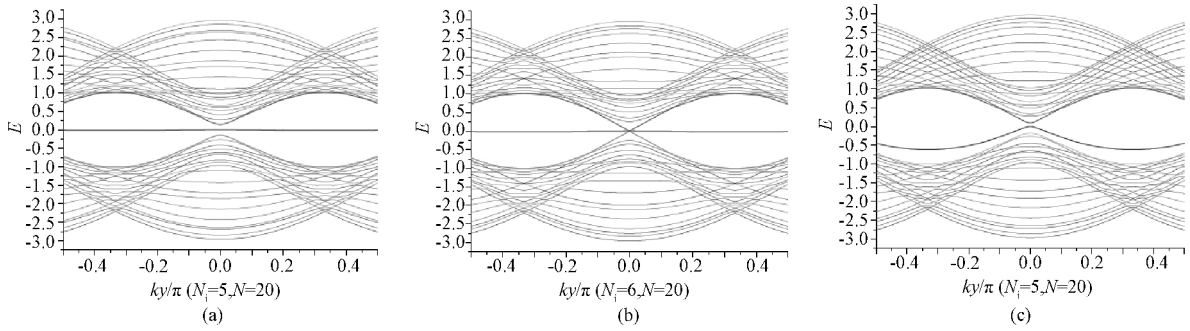


图 6　一条子格线缺陷既能打开扶手型金属性石墨烯纳米带的能隙，又能关闭能隙，结果依赖于线缺陷的位置. (a) **带宽为** $20(3n+2)$，**线缺陷位置为** $N_i=5(\neq 3m)$，**能隙打开.** (b) **带宽为** $20(3n+2)$，**线缺陷位置为** $N_i=6(=3m)$，**能隙关闭.** (c) **除** $t_3=0.7$ eV **外其他参数同** (a)，**波速为零的局域态消失**

$(\neq 3m)$，此时能隙打开. 图 6(b) 带宽为 $20(3n+2)$，线缺陷位置为 $N_i=6(=3m)$，此时能隙关闭. 当正常原子与杂质原子的交叠积分增强时($t_3=0.7$ eV) 波速为零的局域态消失如图 6(c) 所示.

2.4　透射系数和态密度

考虑一个有限尺寸的扶手型石墨烯纳米带，耦合到左、右两端半无限长纳米带导线的两端输运体系(如图 1 所示). 下面我们给出通过有限尺寸纳米带的态密度和两端透射系数的数值计算结果.

图 7 给出了几种典型纯净 AGNRs 的透射系数 T 和态密度 D 随能量的变化曲线. 图 7(a) -7(c) 分别对应带宽为 $3n$，$3n+1$ 和 $3n+2$ 三种类型，这里取 $n=6$，中心散射区长度为 20 个单胞. 数值计算结果和我们前面的解析能谱计算结果相一致. 当带宽为 $3n$ 和 $3n+1$ 时，透射系数和态密度在 E 为零附近的一个有限区间内值为零，说明存在一个有限能隙，如

(C)1994-2019 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

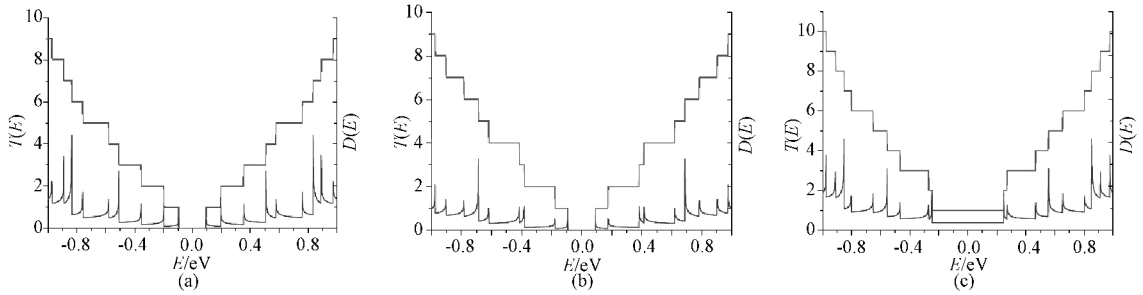


图 7　几种典型扶手型石墨烯纳米带在无缺陷时的透射系数(红线) 和态密度(蓝线) 随能量的变化曲线图
(a) ,(b) 和(c) 分别对应 N = 3n,3n + 1 和 3n + 2,这里取 n = 6,中心区取 20 个单胞.

图 7(a) 和 7(b) 所示. 这与能谱图中费米能附近无能级的结果相一致,如图 4(a) 和图 4(b) 所示. 两种计算结果都说明具有这样典型带宽的 AGNRs 是半导体性的. 另一方面,对于带宽为 $3n+2$ 的纳米带,其透射系数和态密度在 E 为零附近均不为零,都有一个有限值,这说明无能隙,如图 7(c) 所示. 这与能谱图中导带底和价带顶在 E 为零处重合无能隙的结果相一致,如图 4(c) 所示. 这说明具有此类带宽的纳米带是金属性的.

最后,我们给出有线缺陷存在时,几种典型 AGNRs 的透射系数和态密度随能量的变化曲线图. 图(8) 说明 $T(E)$ 和 $D(E)$ 的曲线图显示某些位置的两体线缺陷确实能有效关闭半导体性纳米带的能隙. 图 8(a) 表示,在 E 为零附近,透射系数和态密度均不为零,说明一条位于非 $3m-1$ 位置的两体线缺陷能有效关闭带宽为 $3n$ 半导体纳米带的能隙,使纳米带呈现金属性. 但一条恰好位于$3m-1$位置的同样线缺陷却不能关闭能隙,如图 8(b) 所示,此时 T 和 D 都在 E 附近为零,即加缺陷后能隙依然存在,纳米带依然是半导体性. 同理,对于带宽为 $3n+1$ 的半导体纳米带,一条位于非 $3m-2$ 位置的两体线缺陷能有效关闭能隙,使纳米带呈现金属性,如图 8(c) 所示; 而恰好位于$3m-2$位置的线缺陷不能关闭能隙,纳米带仍呈半导体性,如图(d) 所示. 这与能

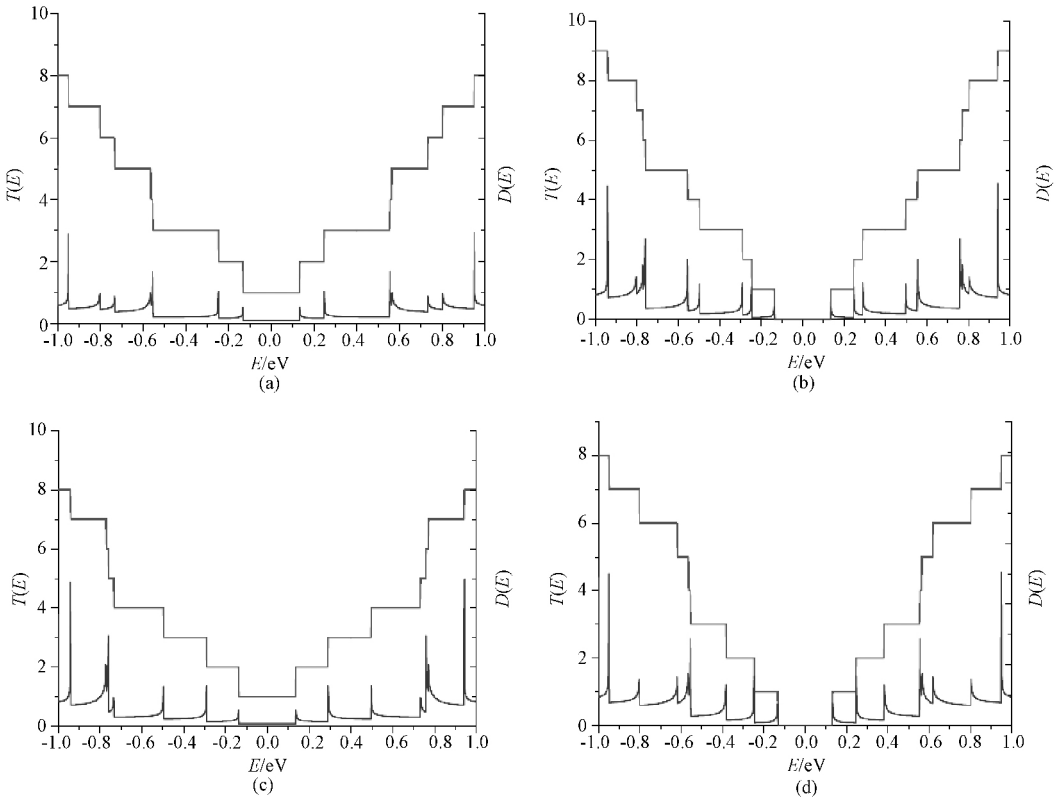


图 8　有一条两体线缺陷时,几种典型扶手型石墨烯纳米带的透射系数(红线) 和态密度(蓝线) 随能量的变化曲线图. 在(a) 和(b) 中,带宽都为 $3n$,线缺陷位置分别为 $N_i=6$ 和 $N_i=5$. 在(c) 和(d) 中,带宽都为 $3n+1$,线缺陷位置分别为 $N_i=6$ 和 $N_i=7$. 这里取 $n=6$,中心区取 20 个单胞

(C)1994-2019 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

谱计算的结果图 5 相一致.

图(9)说明一条子格线缺陷能有效地打开金属性石墨烯纳米带的能隙. 在带宽为 $3n+2$ 的金属性纳米带的非 $3m$ 位置上添加一条子格线缺陷时,在 E 为零附近的透射系数和态密度都为零,说明能隙已打开,纳米带呈半导体性质,如图 9(a)所示,态密度在 E 为零处的单峰对应图 6(a)中波速为零的局域态(紫线所示). 而当正常原子与杂质原子的交叠积分增强时,能隙依然打开,但局域态却消失了,如图 9(c)所示. 如果子格缺陷位置恰好在 $3m$ 位置,能隙不能打开,纳米带还是金属性的,如图 9(b)所示. 这与能谱计算结果图 6 相一致.

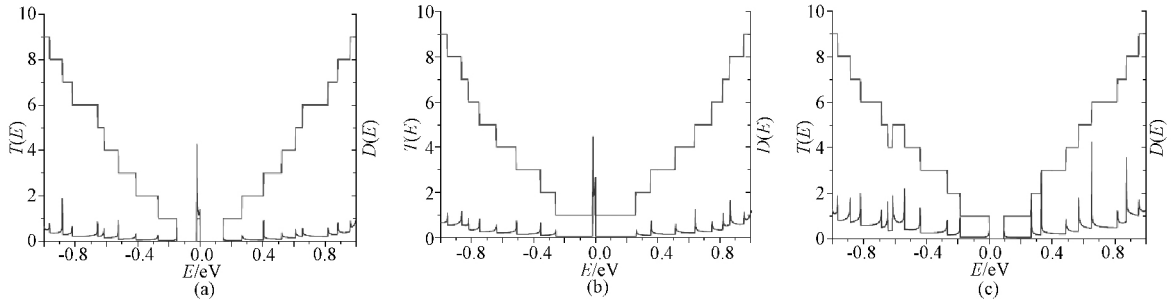


图 9 有一条子格线缺陷时,金属性扶手型石墨烯纳米带的透射系数(红线)和态密度(蓝线)随能量的变化曲线图
(a)、(b)和(c)的参数分别与图 6 的(a)、(b)和(c)参数相同,中心区取 20 个单胞.

3 总 结

基于单电子紧束缚模型,我们详细地研究了在有线缺陷存在的情况下,无限长扶手型石墨烯纳米带的解析能带谱特征,同时利用格林函数方法,计算了每种情况下的透射系数和态密度. 数值计算表明纳米带能隙的调控依赖于线缺陷的位置、类型和强度.

对于半导体性扶手型石墨烯纳米带,通过添加一条两体线缺陷并且将缺陷原子与正常原子间的跃迁项设为零时,通过调节线缺陷的位置,可以打开或关闭能隙. 能隙的调控依赖线缺陷在纳米带中的的位置,具体给出:能隙存在时线缺陷在纳米带中的位置为 $N_i=3m-1$($N=3n$ 时)和 $N_i=3m-2$($N=3n+1$ 时),在其他位置的线缺陷可关闭能隙.

对于金属性扶手型石墨烯纳米带,其能隙的打开和关闭依赖于子格线缺陷的位置和强度. 当 $N_i=3m$ 时,能隙关闭;其它位置能隙打开. 此外,当缺陷原子与正常原子间的跃迁项较强时,波速为零的局域态消失. 不论是 A 子格线缺陷或是 B 子格线缺陷,都得到相似的结果.

最后,为了进一步地证实上述结果,我们给出了相应的透射系数和态密度图. 透射系数和态密度图中显示的结果,与能带谱计算结果相一致.

参 考 文 献

[1] Castro Neto A H, Guinea F, et al. The electronic properties of graphene [J]. Rev Mod Phys, 2009, 81(1): 109.

[2] Naumov I I, Bratkovsky A M. Gap opening in graphene by simple periodic inhomogeneous strain [J]. Phys Rev B, 2011, 84(24): 245444.

[3] Tayo B O. Energy gap and effective mass of H-passivated armchair graphene nanoribbons under uniaxial strain: Tight-binding model [J]. 2014, arXiv: 1404.2499v1.

[4] Pedersen J G, Pedersen T G. Band gaps in graphene via periodic electrostatic gating [J]. Phys Rev B, 2012, 85(23): 235432.

[5] Ulstrup S, Nilsson L, et al. Electronic structure of graphene on a reconstructed Pt(100) surface: Hydrogen adsorption, doping, and band gaps [J]. Phys Rev B, 2013, 88(12): 125425.

[6] Dutta P, Maiti S K, Karmakar S N. Positional dependence of energy gap on line defect in armchair graphene nanoribbons: Two-terminal transport and related issues [J]. J Appl Phys, 2013, 114(3): 034306.

[7] Lee D H, Joannopoulos J D. Simple scheme for surface-band calculations. Ⅱ. The Green's function [J]. Phys Rev B, 1981, 23(10): 4997.

(下转第 29 页)

(C)1994-2019 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

Numerical Demonstration of the Zero-Refraction Properties of Single Negative Superlens

Zhao Yan　Zhao Chen　Zhao Liming　Zhao Qiushuang

(Department of Physics, Capital Normal University, Beijing　100048)

Abstract

To validate the zero-refraction theory of the single negative materials, a simple device is proposed, in which a metal slit is illuminated from one side and a two-dimensional light source can be formed on the other side along the slit as the extraordinary transmission assisted by the surface plasmon polaritons; a single-negative superlens is set before the light source to perform the transmission patterns. The transmission patterns obtained by FDTD(Finite Difference Time Domain) simulation method agree with the expectation of the zero-refraction theory well. This result presents an intuitive demonstration of the zero-refraction theory.

Key words: zero-refraction, single negative material, superlens.

(上接第 26 页)

Tunable Energy Gap Controlled by a Line Defect in Armchair Graphene Nanoribbons

Liu Lili　Long Wen

(Department of Physics, Capital Normal University, Beijing　100048)

Abstract

A single-orbital nearest-neighbor tight-binding model is used to study the role of line defects on the energy gap in armchair graphene nanoribbons. In a metallic ribbon, an energy gap may open up if a sublattice line defect is introduced. Moreover, a new state with zero velocity may emerge when the ordinary-defect hopping term is weaker. In a semiconducting ribbon, the energy gap may disappear if a dimer line defect is located in any position except some definite lines, for the case of $N = 3n$ the definite position is $N_i = 3m - 1$, for the case of $N = 3n + 1$ the definite position is $N_i = 3n - 2$ (n and m are integers, and N is the width of ribbon).

Key words: Armchair graphene nanoribbons, line defect, energy gap.

(C)1994-2019 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net