DOI:10.19789/j.1004-9398.2018.01.005

线缺陷对锯齿型石墨烯带能谱和边态的调控*

刘 爽 龙 文**
(首都师范大学物理系,北京 100048)

摘 要

研究了边界线缺陷对锯齿型石墨烯带能谱和边态的调控. 利用紧束缚模型和格林函数方法,我们计算了石墨烯带的色散关系、局域态密度、电导和格点波函数. 数值计算结果表明边界线缺陷占位能不仅能连续调控费米面附近平带部分的色散关系,而且能将原来的双侧边态调控为单侧边态量子通道. 线缺陷的交叠积分可连续调控导带底弯带部分的色散关系,使电子更集中地占据单侧边态. 导带底在第一布里渊区边界的边态对线缺陷有鲁棒性.

关键词: 锯齿型石墨烯纳米带,线缺陷,紧束缚模型,能谱,边态.
中图分类号: O469

0 引 言

20 世纪 30 年代,Landau 和 Peierls 认为严格的二维晶体因其热力学不稳定性在自然界中不能存在[1-2]. 直到 2004 年,安德烈·海姆与其同事康斯坦丁·诺沃肖洛夫首次成功分离出单层石墨片——石墨烯[3],才用事实证明在常温常压下二维材料可以稳定存在.

石墨烯是一种由碳原子以 sp^2 杂化轨道组成的六角型蜂巢平面晶格,它不仅是凝聚态物理基础研究的一个平台,而且是未来碳基纳米电子器件的一种候选材料[4-5]. 石墨烯在狄拉克点附近具有独特的能带结构,其准粒子具有线性色散关系,遵循类狄拉克方程,具有静质量为零的类相对论行为[6-7]. 它只有一个碳原子厚度,是目前世界上最薄的材料之一. 这种严格的二维晶体材料强度大,柔韧性好,透光性强,导电性高[5]. 马里兰大学的科研人员在 50 K到 500 K 的温度范围内测量石墨烯的电子迁移率,发现无论温度怎样变化,电子迁移率大约都保持在 15 000 $cm^2/s\cdot V$[8]. 石墨烯不仅电子迁移率数值非常高,而且迁移率大小几乎不随温度变化,因此它在多个领域都有广泛应用.

在工业中,中国自主研制的新一代大功率石墨烯超级电容已问世,与活性炭超级电容相比,其电容量更大,寿命更长. 超级电容是物理式储能装置,比传统充电装置具有无可比拟的优势. 通过在石墨烯中加入硼原子,科学家们已开发出一种灵敏度极高的气体传感器,它能探测到浓度极低的有害气体分子,如空气中含量为十亿分之一的氮氧化合物和百万分之一的氨气[9]. 在医学,科学家们已研发出一种新型石墨烯传感器,该传感器可在数分钟之内检测出霍乱病毒,而当前的检测技术则需要几小时甚至几天,它不仅对检测霍乱毒素有很高的灵敏度,还能为癌症和其它传染病提供早期诊断[10]. 在生活中,英国曼彻斯特大学的国家级石墨烯研究所研制出的全新石墨烯灯泡,拥有比 LED 灯泡更坚固的结构和更低廉的价格,可减少百分之十的能耗[11].

石墨烯在纳米电子器件领域也受到广泛关注,一定程度上,随着现代电子工业的快速发展,各种无线通信系统和高频电子器件使用数量急剧增加,芯片密集化程度逐渐提高,要求设备和组件越来越小,在未来微型电子系统的研发中,石墨烯材料的应用也必不可少.

受半导体工业中缺陷、空穴、掺杂的启发,很多研究者们开始研究杂质对石墨烯电子输运性质的影响,研究表明吸附的原子、带电杂质、空穴、或缺陷都会对石墨烯的输运性质造成影响[12-43]. 2012 年,宋俊涛等人的研究表明,引入线缺陷可在带隙中诱导

收稿日期: 2017-01-05
* 国家自然科学基金(11074174)
**通讯作者.

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

出一些特殊状态并能够产生一维量子通道[14]. 2013 年,Maiti 等人的研究表明,引入两体线缺陷可打开扶手型金属性石墨烯纳米带的能隙[15]. 我们发现边界线缺陷可有效地调控锯齿型石墨烯带的低能色散关系和边态的格点占据状况,线缺陷的占位能,可连续调控费米面附近平带部分的低能色散关系,其交叠积分可连续调控导带底弯带部分的色散关系,使电子更集中地占据单侧边态,同时我们发现导带底在第一布里渊区边界的边态不受边界线缺陷影响. 线缺陷格点的占位能可由格点下的电压调控,交叠积分可由对应衬底的弯曲状况调控,该方案可在实验条件下实现,且能对石墨烯基量子器件的设计提供理论支撑.

1 模型和公式

图 1 展示了一个量子输运系统模型的示意图,一个含边界线缺陷的锯齿型石墨烯纳米带构成的中间区,直接耦合到两个半无限长理想锯齿型石墨烯纳米带导线上. 黑实点和空心点分别代表 A 和 B 两种不同的子格原子. 灰色边框表示一个单胞,内含 2 N(N 为纳米带宽度) 个格点. 斜纹阴影圆点代表位于顶层 A 子格原子的线缺陷,它们构成了一条 A 子格边界线缺陷; 灰色阴影圆点代表位于底层 B 子格原子的线缺陷,它们构成了一条 B 子格边界线缺陷.

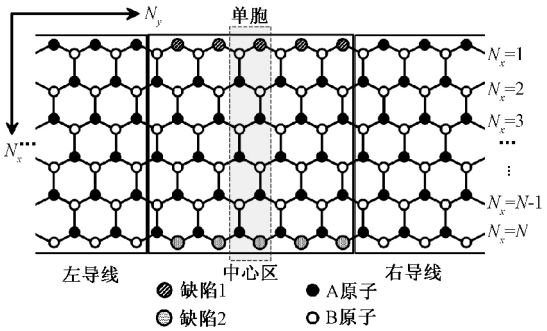


图 1 耦合到左、右导线的含边界线缺陷(阴影圆圈) 锯齿型石墨烯带示意图. 黑实点和空心点分别代表 A 和 B 两种子格原子

根据紧束缚近似模型,不考虑电子间的相互作用,耦合到左右导线的两端口量子输运体系的哈密顿量为[15]:

$$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{H}_{\rm zig} + \boldsymbol{H}_{\rm lead} + \boldsymbol{H}_{\rm couple}. \tag{1}$$

第一项 $\boldsymbol{H}_{zig}$ 表示耦合到两端导线的锯齿型石墨烯纳米带哈密顿量. 当只考虑最近邻跃迁时,中间区单电子哈密顿量为:

$$\boldsymbol{H}_{\rm zig} = \sum\nolimits_i u_i c_i^+ c_i - \sum\nolimits_i (t_{i,i+1} c_i^+ c_{i+1} + \text{h. c.}), \tag{2}$$

这里 u_i 是 i 格点占位能,其中 $u_i = u_0$ 表示正常格点占位能,$u_i = u_1(u_2)$ 表示顶(底) 层缺陷格点占位能. $t_{i,i+1}$ 是最近邻格点交叠积分,其中 $t_{i,i+1} = t_0$ 表示正常格点间的最近邻交叠积分,$t_{i,i+1} = t_1 = \alpha_1 t_0$ 表示正常格点与缺陷格点间的交叠积分. 算符 $c_i(c_i^+)$ 表示在 i 格点湮灭(产生) 一个电子.

公式(1) 中的第二项表示半无限长左右导线的哈密顿量. 在紧束缚模型下,导线的哈密顿量类似于公式(2),只是导线格点的占位能 u_0 和交叠积分 t_0 分别都取常数. 第三项表示中心区与左右导线的耦合哈密顿量,这里我们取中间区的边界格点与左右导线通过耦合强度 $\tau_{\rm L}$ 和 $\tau_{\rm R}$ 直接耦合.

根据 Landauer-Buttiker 公式并结合格林函数理论,在不考虑库仑相互作用的相干输运时,两端量子输运体系的线性电导可由下式给出,

$$G = \lim_{v\to 0} {\rm d}I/{\rm d}V. \tag{3}$$

通过体系的电流为

$$I = \frac{e}{h}\int {\rm d}\varepsilon T_{\rm LR}(\varepsilon)\ [f_{\rm L}(\varepsilon) - f_{\rm R}(\varepsilon)\ ], \tag{4}$$

其中 $f_\xi(\varepsilon) = 1/\{\exp[(\varepsilon - eV_\xi)/k_{\rm B}T] + 1\}$ (ξ = L,R) 是左右导线的费米分布函数,ε 为单电子能量,V_ξ 是左右导线电压. 根据格林函数理论,通过导线 - 中间区 - 导线体系的透射系数 $T_{\rm LR}(\varepsilon)$ 为

$$T_{\rm LR} = {\rm Tr}[\boldsymbol{\Gamma}_{\rm L}\boldsymbol{G}^{\rm r}_{\rm zig}\boldsymbol{\Gamma}_{\rm R}\boldsymbol{G}^{\rm a}_{\rm zig}\ ], \tag{5}$$

这里 $\boldsymbol{\Gamma}_{\rm L}$ 和 $\boldsymbol{\Gamma}_{\rm R}$ 分别表示左右导线的耦合矩阵,$\boldsymbol{G}^{\rm r}_{\rm zig}$ 和 $\boldsymbol{G}^{\rm a}_{\rm zig}$ 分别表示中间区的延迟格林函数和超前格林函数,

$$\boldsymbol{G}^{\rm r}_{\rm zig} = [\boldsymbol{G}^{\rm a}_{\rm zig}\ ]^+ = [(\varepsilon + {\rm i}\eta]\boldsymbol{I} - \boldsymbol{H}_{\rm zig} - \sum\nolimits^{\rm r}_{\rm L} - \sum\nolimits^{\rm r}_{\rm R}\ ]^{-1}, \tag{6}$$

其中 $\eta\to 0^+$,$\sum^{\rm r}_{\rm L}$ 和 $\sum^{\rm r}_{\rm R}$ 是描述中心区与左、右导线耦合的延迟自能. 体系的态密度(*DOS*) 由下式给出

$$DOS = \frac{1}{2\pi}{\rm Tr}[\boldsymbol{G}^{\rm r}_{\rm zig}(\boldsymbol{\Gamma}_{\rm L} + \boldsymbol{\Gamma}_{\rm R})\,\boldsymbol{G}^{\rm a}_{\rm zig}\ ]. \tag{7}$$

为计算无限长含线缺陷锯齿型石墨烯纳米带的色散关系,我们考虑图 1 所示模型中间区,并让其两端向两侧沿 y 方向无限延伸. 选择一个如图 1 阴影框所示的单胞,含边界线缺陷的无限长带就相当于一个无限长一维单胞链,可类比地建立如下等效差分方程[15]:

$$(\varepsilon\boldsymbol{I} - \boldsymbol{H}_{00})\,\psi_j = \boldsymbol{H}_{01}\psi_{j+1} + \boldsymbol{H}^+_{01}\psi_{j-1}, \tag{8}$$

其中

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

$$\psi_j = \begin{pmatrix} \psi_{j1} \\ \psi_{j2} \\ \vdots \\ \psi_{j2N} \end{pmatrix}$$

是单胞格点的波函数, $\boldsymbol{H}_{00}$ 和 $\boldsymbol{H}_{01}$ 分别为单胞占位能矩阵和最近邻交叠积分矩阵, $\boldsymbol{I}$ 是单位矩阵, 这三个矩阵都是($2N \times 2N$) 的. 因为纳米带沿 y 方向具有平移不变性, 所以波函数具有 Bloch 波形式, (8) 式可改写为:

$$(\varepsilon \boldsymbol{I} - \boldsymbol{H}_{00}) = \boldsymbol{H}_{01} e^{ik_y\gamma} + \boldsymbol{H}_{01}^{+} e^{-ik_y\gamma}, \qquad (9)$$

上式中 $\gamma = \sqrt{3}a$ 为相邻单胞间距, a 为六角晶格的边长. 求解方程(9) , 可得到锯齿型石墨烯纳米带的能量色散关系 E *vs.* k_y.

2　数值计算结果与讨论

下面我们将展示图 1 所示体系能谱、电导、局域态密度和格点波函数. 数值计算中, 我们取正常格点间的交叠积分 $t_0 = 2.75$ eV 为能量单位, 正常格点占位能 $u_0 = 0$, 左、右导线耦合强度为 $\tau_L = \tau_R = 1$, 平衡态费米能为零, 且 $c = e = h = 1$, 带宽 $N = 21$. 第一层 A 原子所加缺陷格点占位能为可调参量 u_1, 第二十一层 B 原子所加缺陷格点占位能为 u_2.

首先, 我们研究边界线缺陷占位能对纳米带能谱的调控. 数值计算表明, 上下两条边界线缺陷的占位能严格等于中间两条平带在第一布里渊区边界的能量值, 因此可通过调整上下两条线缺陷占位能的数值, 实现对两条平带的连续严格调控, 且这种调控是相互独立的. 因为费米面附近的平带色散关系源自态密度强烈局域在锯齿边界格点的特殊边态, 因此纳米带边界格点的哈密顿参量对这个特殊的平带有决定作用. 在紧束缚模型下, 边界格点的哈密顿参量仅有两个, 即占位能与交叠积分, 其中占位能决定了边态的色散关系(平带部分) , 交叠积分是连接边态和体态的纽带, 决定了导带底的弯带部分. 当上下两条线缺陷的占位能都取负值, 且大小不同时, 完美锯齿型石墨烯纳米带中间几乎重合的两条平带可被打开. 图 2(a) 显示了完美石墨烯纳米带的能谱结构, 这里可以看到在费米面附近两个 Dirac 点在第一布里渊区边界附近存在两条几乎重合的平带. 图 2(b) —(d) 显示两条边界线缺陷的占位能可分别独立调控两条中间平带, 当占位能不同时, 平带可以分离. 图 2(b) 显示当上边界缺陷占位能 $u_1 = -0.1$, 下边界缺陷占位能 $u_2 = -0.2$ 时, 两条平带可以分开. 图 2(c) 显示当 u_1 保持不变, 而 $u_2 = -0.7$ 时, 上平带的位置不变, 而下平带继续向下弯曲, 且不对上平带有任何影响. 当 $u_2 = -1.0$ 时, 分离达到最大位置, 导带底(黑实线) 略小于费米面, 价带顶(黑虚线) 成双峰结构, 如图 2(d) 所示.

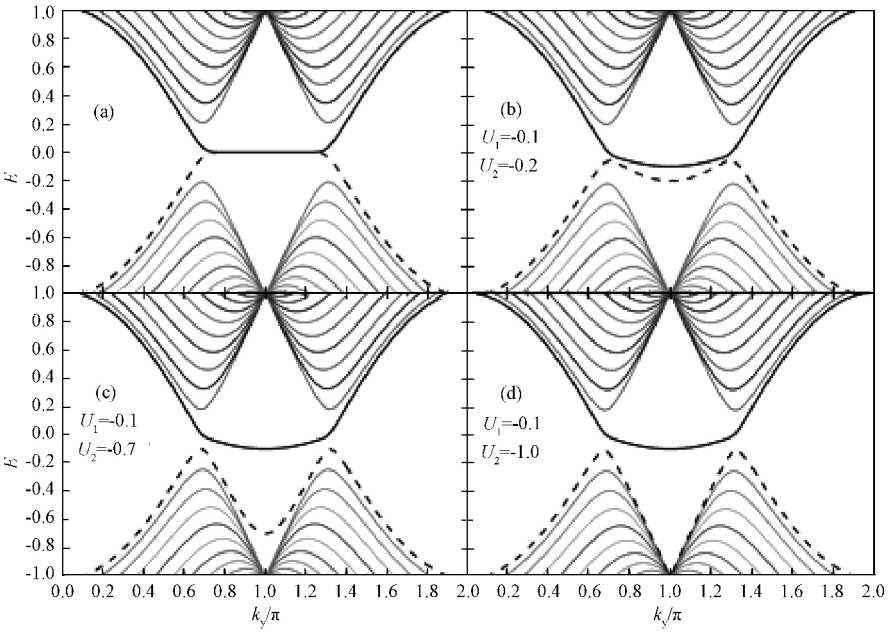


图 2　锯齿型石墨烯纳米带能带结构图. (a) 无缺陷; (b) －(d) 有两条边界线缺陷, $\alpha_1 = 1$

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

图 3 四个小图显示了对应于图 2 四个小图的态密度和电导. 图 3(a) 显示正常锯齿型石墨烯带在费米面附近有一个尖的态密度峰,这正是两条几乎重合的平带贡献; 电导有一个单位的平台,源自纳米带横向受限的子带. 图 3(b) 显示态密度在 $E = -0.1$ 的峰对应向下弯曲的导带底在 $k_y = \pi$ 处的态; 在 $E = -0.2$ 的峰对应价带顶在 $k_y = \pi$ 处的态; 这两个态都对电导有贡献. 图 3(c) 显示此时态密度在 $E = -0.1$ 处有一个很高的尖峰,既有导带底在 $k_y = \pi$ 处态的贡献,又有价带顶在两个 Dirac 点处态的贡献. 图 3(d) 显示此时在 $E = -0.1$ 处打开了一个能隙.

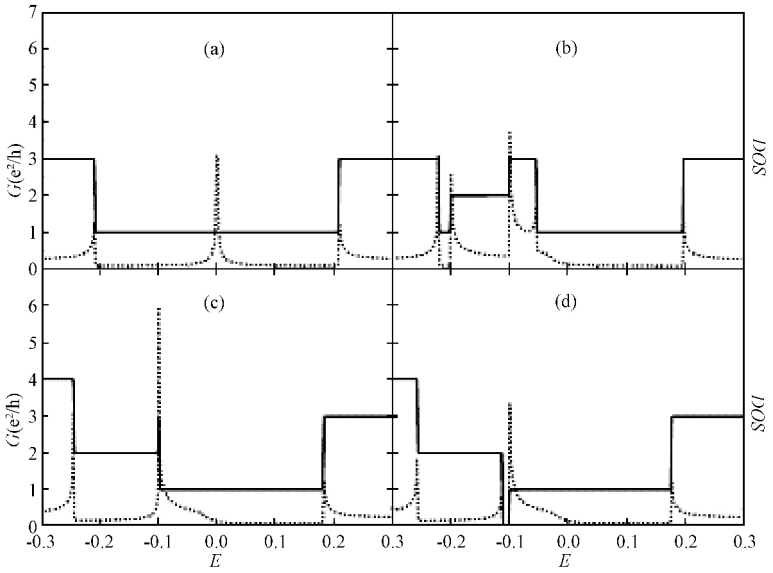


图 3　锯齿型石墨烯纳米带在费米面附近的电导(黑实线) 和局域态密度(灰虚线) ,各小图与图 2 对应小图参数相同

下面讨论线缺陷占位能对纳米带边态的调控. 图 4、图 5 和图 6 分别展示了单胞格点波函数模方随纵向波矢 k_y 的演化,X 轴为单胞格点位置. $k_y = \pi$: 无缺陷时,单胞格点波函数占据最上侧边界格点的概率为 1,占据其他格点的概率为零(图 4(a)) ,形成完全理想边态; 加线缺陷后,无论占位能如何变化,单边态占据状况几乎没有变化(图 4(b)) ,图 2(c) 与图 2(d) 对应的格点波函数图与图 4(b) 相似. 逐渐减小波矢, $k_y = 0.8\pi$: 无缺陷时,波函数呈双边界占据,此时占据上下两侧边界格点的概率最大几乎为 0.3,同时波函数向中间扩展(图 4(c)) ; 加线缺陷后,波函数不再呈双边占据,而全部都呈现单边占据(图 4(d)) ,图 2(c) 与图 2(d) 对应的格点波函数图与图 4(d) 相似. $k_y = 0.7\pi$: 无缺陷时两侧

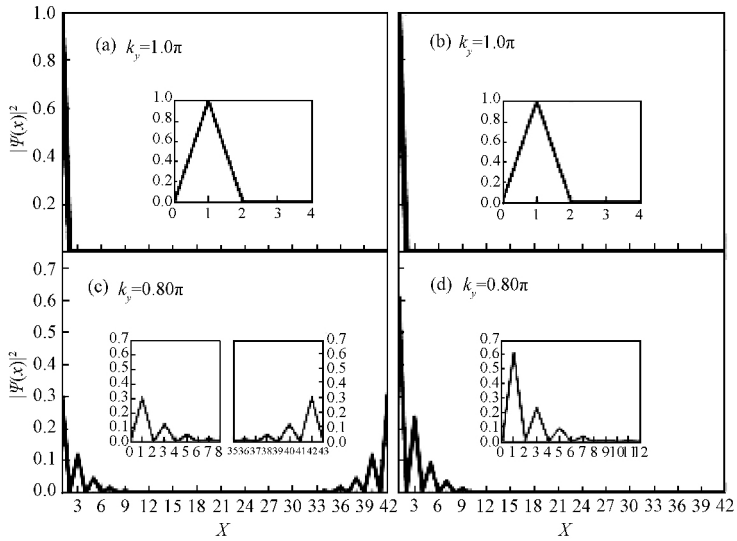


图 4　锯齿型纳米带单胞格点波函数模方随波矢量 k_y 的演化. (a) 、(c) 无缺陷; (b) 、(d) 参数与图 2(b) 相同

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

边态向中间扩展的趋势逐渐增强(图 5(a)) ; 加缺陷后,单边态占据概率随占位能的减小而逐渐增大(图 5(b) 、5(c) 、5(d)) . 当波矢更小时, $k_y = 0.65\pi$ 时,波函数已没有明显的边态占据(图 6) . 特别地,在两个 Dirac 点间位于第一布里渊区边界附近区域里,纳米带的边态有随波矢的减小而逐渐向带中间扩展的趋势,跨过 Dirac 点接近第一布里渊区中心时,边态几乎消失.

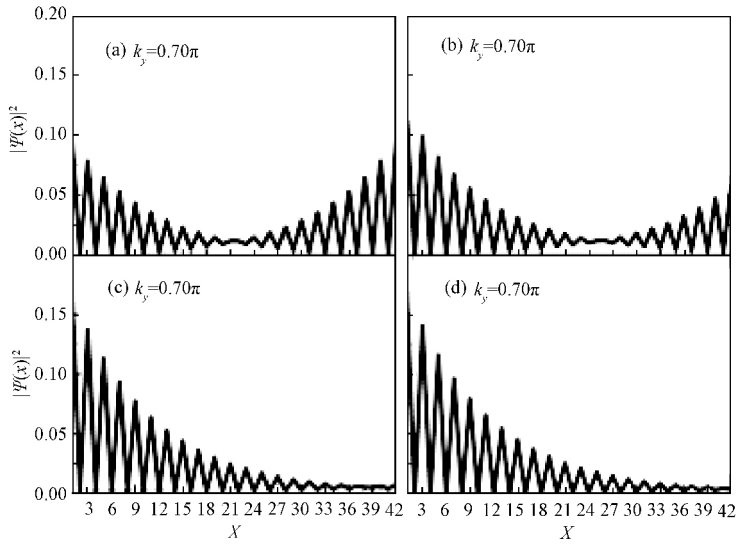


图 5　锯齿型纳米带单胞格点波函数模方随波矢量 k_y 的演化,各小图的参数与图 2 对应各小图的参数相同

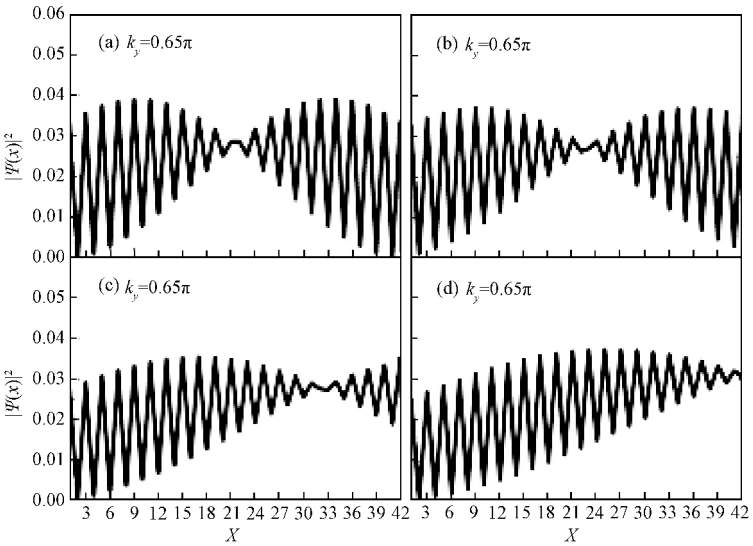


图 6　锯齿型纳米带单胞格点波函数模方随波矢量 k_y 的演化,各小图的参数与图 2 对应各小图的参数相同

这里我们看到,调控两条边界线缺陷的占位能,确实可实现将两个 Dirac 点之间的双边态调控为单边态. 而且上下边界缺陷格点的占位能差越大,单边占据的概率越高,例如图 5(d) ($u_1 = -0.1, u_2 = -1.0$) 的单边占据概率(约为 0. 17) 高于图 5(b) ($u_1 = -0.1, u_2 = -0.2$) 的单边占据概率(约为 0. 12) . 与无缺陷的石墨烯带相似(图 6(a)) ,跨过 Dirac 点后,所有的边态效应都不明显(图 6(b) 、6(c) 和 6(d)) .

其次,我们研究线缺陷交叠积分对纳米带能谱的调控. 数值计算表明,同时减小上下两条边界线缺陷的交叠积分,可使平带部分和价带顶弯带部分基本保持不变,但导带底的弯带将随下缺陷占位能减小而趋向费米面同时变得较平. 在紧束缚模型中,边界格点的交叠积分是连接边态和体态的纽带,因此边界线缺陷的交叠积分只改变导带底弯带部分. 保持图 2 各小图缺陷的占位能不变,但将缺陷的交叠积分都从原来的 1. 0 降到 0. 6,得到图 7 对应的各小图.

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

当线缺陷占位能为正常格点值,仅降低交叠积分时,导带底的弯带在 $k_y = 0$ 的值微微下移,如图 7(a) 所示. 降低缺陷格点的占位能,导带底的弯带继续下移并变平,如图 7(b) 所示. 保持上边界线缺陷的占位能为 -0. 1,继续下调下边界的占位能,发现在价带顶平带下弯的同时,导带底的弯带持续下移并变平,如图 7(c) 所示. 当达到极限位置时,导带底与体能带达到最大分离,如图 7(d) 所示,这是因为交叠积分越小,边态与体态的分离越大. 图 8 四个小图显示了对应于图 7 四个小图的态密度和电导. 将图 8 与图 3 比较,发现图 8(a) 与图 3(a) 基本相同,说明当缺陷格点的占位能为正常值时,交叠积分的减小对费米面附近的态几乎没有影响. 图 8(b) 的图形与图 3(b) 的图形大体相同,但在 $E = -0.1$ 和 $E = -0.2$ 的两个局域态密度峰明显增强,说明当占位能偏离正常值时,减小交叠积分可以使电子更好地集中分布在占位能所确定的能态上. 图 8(c) 在 $E = -0.1$ 处不仅有一个尖的态密度高峰,而且打开了一个不小的能隙,这比图 3(c) 仅在 $E = -0.1$ 处有一个态密度峰但没有能隙要好. 虽然图 3(d) 在 $E = -0.1$ 有一个能隙和一个态密度峰,但图 8(d) 的能隙更大,态密度峰更高,对纳米带的调控也更好. 这说明同时调控边界线缺陷的占位能和交叠积分不仅能打开更大的能隙,而且能最大限度地分离边态和体态.

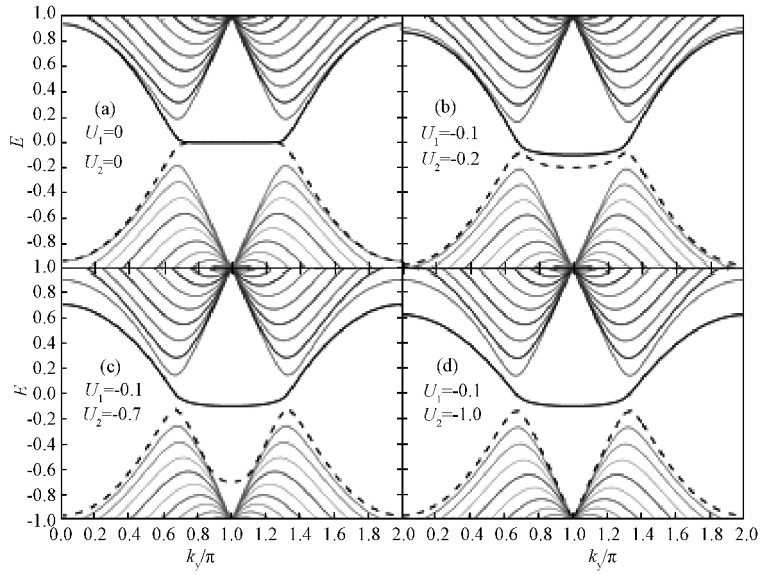


图 7　含两条边界线缺陷锯齿型石墨烯纳米带能带结构图,$\alpha_1 = 0.6$

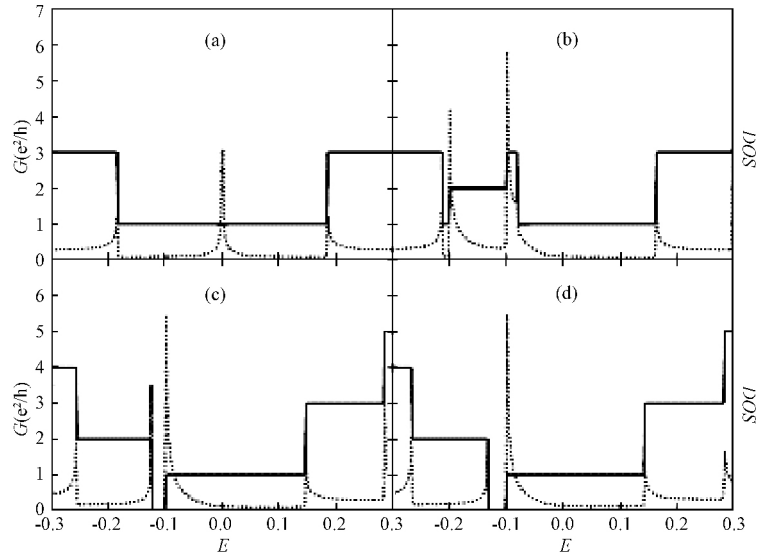


图 8　锯齿型石墨烯带在费米面附近的电导(黑实线) 和局域态密度(灰虚线) ,各小图与图 7 对应小图参数相同

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

下面我们讨论线缺陷的交叠积分对纳米带边态的调控. 图 9、图 10 和图 11 分别展示了格点波函数模方随波矢的演化,X 轴为单胞格点位置. $k_y = \pi$: 格点波函数占据最上侧边界格点的概率为 1,占据其他格点的概率为零(图 9(a) 和图 9(b)) ,图 7(c) 与图 7(d) 对应的格点波函数分布图与图 9(b) 相似. 这证实了锯齿型石墨烯纳米带在波矢为 π 处的边态对边界线缺陷有鲁棒性的事实. 图 9(c) 表示仅降低交叠积分,既不会改变边态在双侧的对称占据,也不会改变边态在单侧的优势占据(图 9(d)) ,但能使电子更集中地占据双边态或单边态,图 9(c) 的小图中电子在格点 1 和格点 42 的概率都在 0. 4 左右,而图 4(c) 的小图中对应格点的占据概率都在 0. 3 左右. 图 9(d) 中电子占据格点 1 的概率都在 0. 8 左右,而图 4(d) 中对应格点的占据概率都在 0. 6 左右. 比较图 10 与图 5 更能清楚地发现交叠积分可增强电子的边态占据,从而使电子更好地集中在边界量子通道上. 图 11 显示纵向波矢越过 Dirac 点后,电子在中间区间的占据明显增强,边态的占据优势逐渐减弱.

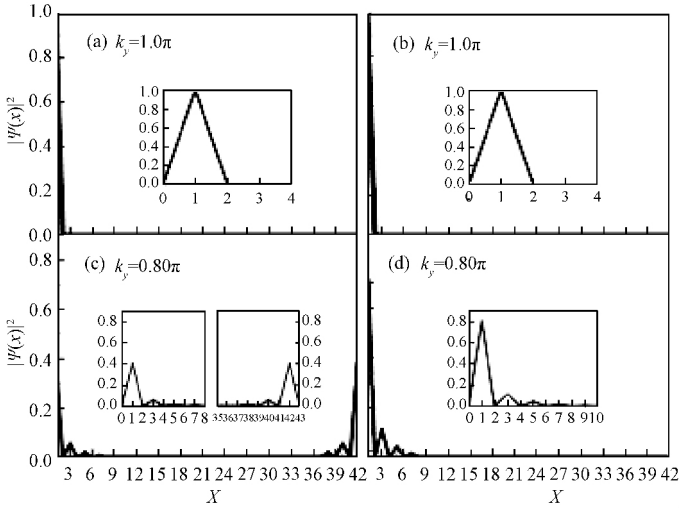


图 9　锯齿型纳米带格点波函数模方随 k_y 的演化. (a) 和(c) 参数与图 7(a) 相同; (b) 和(d) 参数与图 7(b) 相同

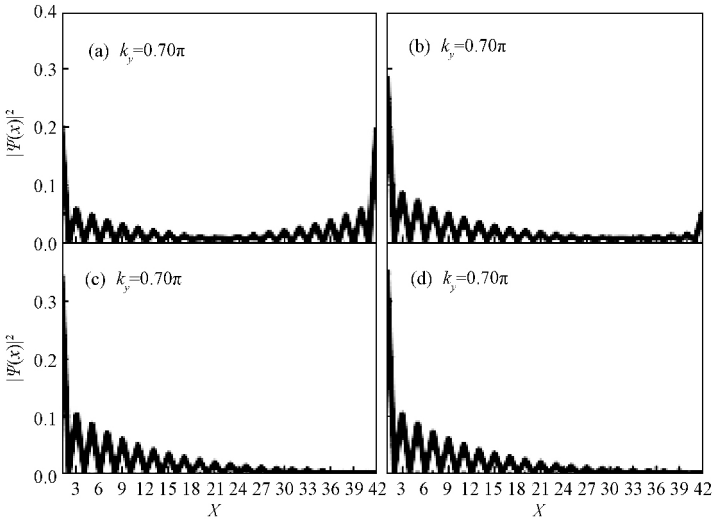


图 10　锯齿型纳米带格点波函数模方随 k_y 的演化. (a) 和(c) 参数与图 7(a) 相同; (b) 和(d) 参数与图 7(b) 相同

3　结　论

根据单电子紧束缚近似模型和非平衡格林函数方法,我们不仅计算了无限长锯齿型石墨烯纳米带的能谱及格点波函数,而且计算了两端口锯齿型石墨烯纳米带的局域态密度和电导,研究了上下两条边界子格线缺陷的占位能和交叠积分对纳米带能谱和边态的影响.

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

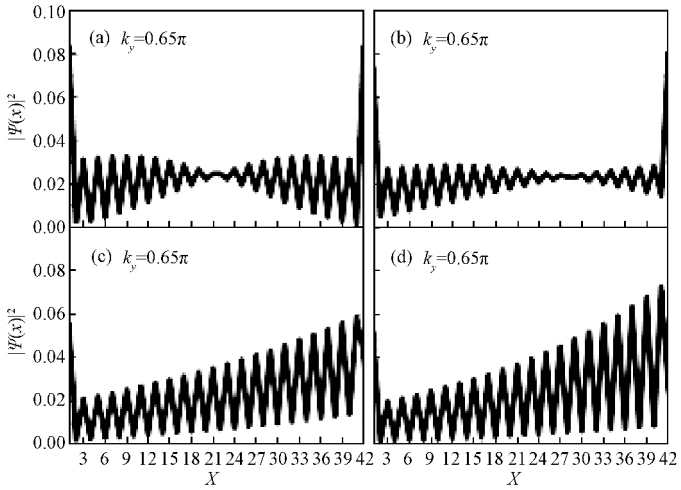


图 11 锯齿型纳米带格点波函数模方随 k_y 的演化. (a) 和(c) 参数与图 7(a) 相同; (b) 和(d) 参数与图 7(b) 相同

数值计算表明边界线缺陷的占位能,可连续调控费米面附近平带部分的色散关系,不仅可打开费米面附近两条几乎重合的平带,而且可将原来的双侧边态调控为单侧边态,形成单边量子通道. 缺陷的交叠积分可调控导带底弯带部分的色散关系,使电子更集中地占据单侧边态. 这是因为费米面附近的平带不是源自二维石墨烯能带在锯齿轴上的投影,而是源自态密度强烈局域在锯齿边界格点的边态,因此纳米带边界格点的哈密顿参量对这个特殊的平带有决定作用. 在紧束缚模型下,边界格点的哈密顿参量仅有占位能与交叠积分,其中占位能决定了边态的色散关系(平带部分) ,交叠积分决定了边态与体态的融合程度(弯带部分) . 导带底在布里渊区边界的边态不受边界线缺陷影响,这是由体态决定的边态拓扑性决定的.

线缺陷格点的占位能可由格点下的电压调控,交叠积分可由对应衬底的弯曲调控,该方案可在实验室实现,且能对石墨烯基量子器件的设计提供理论支撑.

参 考 文 献

[1] Peierls R E. Quelques proprietes typiques des corpses solides [J]. Ann Inst H Poincare,1935,5: 177 – 222 .

[2] Landau L D. Zur Th eorie der phasenumwandlungen II [J]. Phys Z Sowjetunion,1937,11: 26 – 35.

[3] Novoselov K S,Geim A K,Morozov S V,et al. Electric field effect in atomically thin carbon films [J]. Science,2004, 306: 666 – 669.

[4] Castro Neto A H,Guinea F,Peres N M R,et al. The electronic properties of graphene [J]. Rev Mod Phys,2009,81(1) : 109 – 162.

[5] Geim A K,Novoselov K S. The rise of graphene [J]. Nature Materials,2007,6: 183 – 191.

[6] Beenakker C W J. Andreev reflection and Klein tunneling in graphene [J]. Rev Mod Phys,2008,80(4) : 1337 – 1354.

[7] Das Sarma S,Adam S,Hwang E H,et al. Electronic transport in two-dimensional graphene [J]. Rev Mod Phys,2011,83 (2) : 407 – 470.

[8] Eaves L. Semiconductors: An empire of many dimensions [J]. Nature Materials,2006,5: 775 – 776.

[9] Ruitao L,Chen G G,Li Q,et al. Ultrasensitive gas detection of large-area boron-doped graphene [J]. PNAS,2015,112 (47) : 14527 – 14532.

[10] Singh M, Holzinger M,Tabrizian M,et al. Noncovalently functionalized monolayer graphene for sensitivity enhancement of surface plasmon resonance immunosensors [J]. J Am Chem Soc,2015,137(8) : 2800 – 2803.

[11] Zhang S L,Yan Z,Li Y F,et al. Atomically thin arsenene and antimonene: semimetal-semiconductor and indirect-direct band-gap transitions [J]. Angew Chem Int Ed,2015,54(10) : 3112 – 3115.

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

[12] Chan K T, Neaton J B, Cohen M L. First-principles study of metal adatom adsorption on grapheme [J]. Phys Rev B, 2008, 77: 235430.

[13] Peres N M R. Colloquium: the transport properties of graphene: an introduction [J]. Rev Mod Phys, 2010, 82(3): 2673 -2700.

[14] Song J T, Liu H W, Jiang H, et al. One-dimensional quantum channel in a graphene line defect [J]. Phys Rev B, 2012, 86: 085437.

[15] Dutta P, Maiti S K, Karmakar S. 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.

Tunable Energy Spectrum and Edge States by Line Defects in Zigzag Graphene Nanoribbons

Liu Shuang　Long Wen

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

Abstract

The role of line defects on the energy bands and edge states was studied in zigzag graphene nanoribbons. The dispersion relation, the local density of state, the conductance and the wave function were calculated by the tight-binding model and Green's function method. The results indicated that the on-site energy of line defects sites can continuously change the dispersion relation of the flat band near the Fermi level, and edge states located on two-sided boundaries can be tuned into one-sided edge sites. Furthermore, the dispersion relation of the curve part of the bottom conduction band can be controlled by the hopping term of line defects. The edge state of the lowest conduction band at the boundary of the first Brillouin zone was robust at the presence of edge line defects.

Key words: zigzag graphene nanoribbons, line defects, tight-binding model, energy spectrum, edge states.

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