

文章编号:1001-5132 (2010) 03-0099-04

# 石墨烯纳米十字结电子输运性质

孔晓岚, 熊永建\*

(宁波大学 理学院, 浙江 宁波 315211)

**摘要:** 利用紧束缚近似模型研究了直接型和间接型石墨烯纳米十字结的电子输运性质. 扶手椅石墨烯纳米带和锯齿石墨烯纳米带交叉形成直接型结, 而渐变型结相当于在直接型结的直角处增加了三角形石墨烯片. 在低能区, 渐变型结的三角形连接区在其锯齿型边界形成局域态, 导致电导被完全抑制, 并形成电导带隙; 而减小三角形区的相对尺寸, 或在其边界引入无序可以恢复结的金属性电导.

**关键词:** 石墨烯; 纳米十字结; 输运性质; 金属 - 绝缘转变

**中图分类号:** O469

**文献标识码:** A

2004 年, 实验室首次制备出单层碳原子薄膜, 其称为石墨烯(Graphene)<sup>[1]</sup>. 石墨烯具有良好的力学性能和高载流子迁移率, 成为下一代微纳电子学材料的候选者之一<sup>[2-4]</sup>. 目前实验和理论上都在研究将石墨烯裁剪成特定的纳米结构, 使其形成功能性电子器件, 如石墨烯透射结、场效应管等<sup>[5-6]</sup>.

在各种石墨烯纳米结构中, 纳米宽度的石墨烯带(Graphene Nanoribbon)<sup>[7-10]</sup>是最基本的构造部分. 理想的石墨烯纳米带有 2 种边界类型: 扶手椅型(armchair)型和锯齿(zigzag)型边界. 其中, 锯齿型石墨烯纳米带(ZGNR)表现为金属电导性; 扶手椅型石墨烯纳米带(AGNR)的电导性取决于其宽度, 可以为金属性或半导体性<sup>[11]</sup>. 正是由于其奇特的电导性, 石墨烯纳米带既可以作为金属导线, 又可以用于构建如场效应管、量子比特等功能器件. 于是, 人们开始研究起全石墨烯的电路<sup>[2-3,12]</sup>.

在全石墨烯电路中, 会出现各种形式的异质

结结构. 如文献[13-16]中研究了石墨烯纳米 T 型结、L 型结、Z 型结等. Jayasekera 等人<sup>[16]</sup>还研究了由 ZGNR 和 AGNR 构成的十字结的电导性质, 理想的 ZGNR 和 AGNR 直接垂直交叉, 结处形成直角, 称之为直接型结, 如图 1(b)所示. 然而, 实际的结构中要剪裁出这样理想的连接有一定困难. 实验上, 在 2 种不同性质带的结合处容易留下未被刻蚀掉的碳原子, 形成渐变的连接结构. 结的这种细致结构对系统的电导性质可能产生重要影响.

笔者在此主要考虑如图 1(a)所示的十字结. 即在 ZGNR 和 AGNR 连接角部, 有三角形的渐变连接区(虚线三角形内), 称为渐变型十字结. 在考虑渐变连接区有锯齿型的外边界情况下, 通过比较 2 种结的电导, 重点讨论渐变区对系统电导性质的影响, 并应用 Green 函数技术和 Landauer-Büttiker 公式计算系统的电子输运性质. 当独立的 ZGNR 和 AGNR 均具有金属性时, 在形成渐变型结后, 其

收稿日期: 2009-12-23.

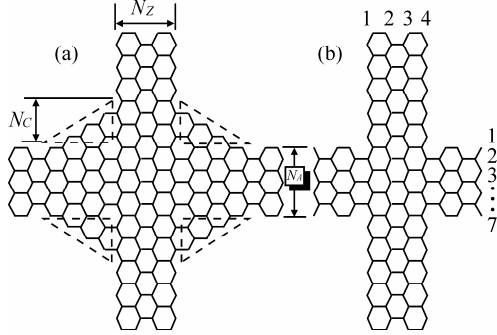
宁波大学学报(理工版)网址: <http://3xb.nbu.edu.cn>

基金项目: 国家自然科学基金(10804058); 宁波市自然科学基金(2009A610017).

第一作者: 孔晓岚(1984-), 女, 陕西宝鸡人, 在读硕士研究生, 主要研究方向: 介观电子输运理论. E-mail: g07c07020508@email.nbu.edu.cn

\*通讯作者: 熊永建(1966-), 男, 河南潢川人, 教授, 主要研究方向: 介观电子输运理论. E-mail: xiongyongjian@nbu.edu.cn

电导却表现出绝缘性. 此外讨论了导致电导绝缘性的原因, 以及恢复其金属性的途径.



(a) 渐变型, (b) 直接型. 渐变型结相当于在直接型结的角部增加三角形的石墨烯片((a)中虚线三角形区). 结的左右端宽度为  $N_A$ , 上下端宽度为  $N_Z$ , (a)中渐变区的尺寸用  $N_C$  表示

图 1 单层石墨烯纳米十字结

### 1 模型和计算方法

讨论的结构如图 1 所示. 系统用六角形晶格上的紧束缚近似(tight-banding)模型描述, 其哈密顿量可以表示为:

$$H = \sum_i \varepsilon_i c_i^\dagger c_i + t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + h.c.), \quad (1)$$

其中,  $c_i^\dagger$  为格点  $i$  上的电子产生算符;  $\varepsilon_i$  为在位能量. 在最近邻近近似下, 求和  $\langle i,j \rangle$  限制在相邻原子间, 相应的跨越积分为  $t$ . 理想晶格可取  $\varepsilon_i = 0$ ,  $t = 2.7 \text{ eV}$ . 本文中以  $t$  为能量单位.

为计算电导, 把体系分为 5 个部分: 中间结区、左右及上下端的半无限长导线. 其中, 左右端导线是理想的 AGNR, 其宽度用横向二聚物型线的数目  $N_A$  表示. 上下端导线是理想的 ZGNR, 其宽度用锯齿型线的数目  $N_Z$  表示. 角部三角形片的尺寸用  $N_C$  表示. 用 Green 函数表示系统电导. 首先用递推 Green 函数技术<sup>[17]</sup>得到导线与结区界面处的表面 Green 函数  $g_\alpha$  ( $\alpha = L, R, U, D$  分别表示左、右、上和下端). 然后可得到结区的 Green 函数:

$$G_C(E) = [E - H_C - \Sigma_L - \Sigma_R - \Sigma_U - \Sigma_D]^{-1}. \quad (2)$$

其中,  $H_C$  为结区的哈密顿量;  $\Sigma_\alpha = V_{C\alpha} g_\alpha V_{C\alpha}^\dagger$  为导线  $\alpha$  贡献的自能;  $V_{C\alpha}$  表示导线  $\alpha$  与结区的相互作用

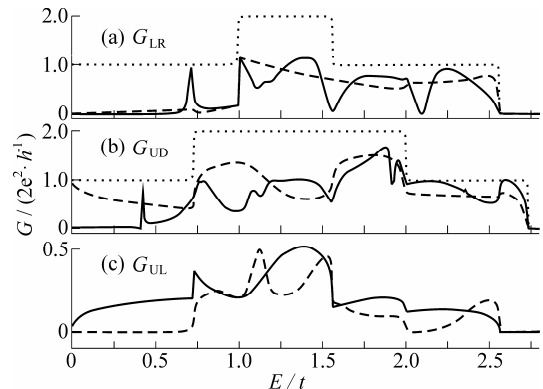
用矩阵. 利用 Green 函数及  $\alpha$  与  $\beta$  端的电导可以由 Landauer-Büttiker 公式<sup>[18]</sup>计算:

$$G_{\alpha\beta} = \frac{2e^2}{h} \text{Tr}(\Gamma_\alpha G_c^\dagger \Gamma_\beta G_c), \quad (3)$$

其中,  $\Gamma_\alpha = i[\Sigma_\alpha - \Sigma_\alpha^\dagger]$  是结区与导线  $\alpha$  间的耦合矩阵.

### 2 结果和讨论

首先比较渐变型和直接型石墨烯纳米十字结的电导性质. 图 2 为 2 种结的电导随费米能的变化情况, 2 种结有相同的几何尺寸  $N_A = 5, N_Z = 4$ . 由于电子-空穴对称性, 电导在正、负能区对称, 所以只显示正能区. 根据实验和应用情况主要讨论低能区, 即在各端导线的单通道区. 图 2(a)和(b)还以点线分别画出相应宽度的理想 AGNR 和 ZGNR 的电导, 它们的电导显示出量子台阶对应着不同数目的量子通道. 可见, 此宽度的左右端导线和上下端导线都显示为金属性, 它们在低能区的电导都为电导量子  $2e^2/h$ . 从图 2 还可以看出, 形成结构后, 各端间的电导都受到不同程度的抑制, 破坏了导线中的电导台阶. 相比与直接型结, 在低能区的渐变型结的电导受到更强烈抑制, 在 Dirac 点附近形成电导带隙. 渐变型结产生电导带隙的原因



(a) 左右端电导, (b) 上下端电导, (c) 左上端电导. 结的几何参数:  $N_A=5, N_Z=4, N_C=2$ . (a)中点线为宽度  $N_A=5$  的理想 AGNR 的电导, (b)中点线表示宽度  $N_Z=4$  的理想 ZGNR 的电导

图 2 渐变型(实线)和直接型(虚线)单层石墨烯纳米结的电导随能量的变化关系

是其结区的锯齿型边界. 在低能区内, 锯齿型边界可以形成强烈局域化的态<sup>[19]</sup>. 由于受这些局域态的散射影响, 电子的传输被抑制. 在低能区, 渐变型结区的锯齿型边界不再有局域态, 其影响减弱, 所以2种结的电导受到相同程度的抑制.

为更细致了解渐变型结的锯齿型边界效应, 以下讨论系统尺寸对电导的影响. 图3为不同尺寸渐变型结的左右端和上下端电导变化情况. 保持 $N_C = 2$ 不变, 即保持结区中锯齿型边界的长度不变(局域态的影响与锯齿型边界长度有关), 而分别改变左右端导线和上下端导线的宽度. 作为比较, 用点线表示 $N_A = 5, N_Z = 4$ 的情况. 首先保持 $N_Z$ 不变, 而把左右端导线变宽为 $N_A = 11$ (仍为金属性). 从图3实线可以看出, 当 $N_A$ 增加后, 在低能区左右端电导增加而恢复了金属性, 同时上下端的电导受到进一步抑制. 此结果的原因在于, 当左右端导线变宽而保持锯齿型边界长度不变时, 在锯齿型边界处的局域态对水平方向电子运输的影响减弱; 而左右端导线变宽使得结区的上下方向的尺寸增加, 因而进一步减弱了上下端的电导. 由于同样原因, 当单独增加上下端导线宽度时(图3虚线), 上下端电导增加, 而同时左右端电导减弱. 由此可以得出, 要恢复渐变型结的金属性, 应减小渐变区的尺寸 $N_C$ , 同时使得各端的宽度 $N_A$ 和 $N_Z$ 尽可能接近.

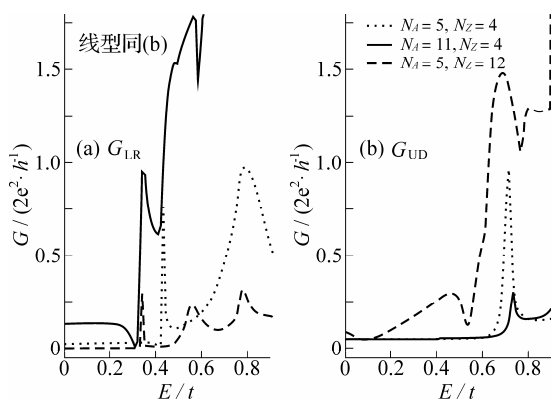


图3 不同尺寸的渐变型单层石墨烯结的电导

最后讨论渐变区的锯齿型边界无序效应. 实际石墨烯带的边界处容易产生多种无序, 考虑到对角类无序, 即在数值计算中, 让结区锯齿型边界处的格点在位能 $\varepsilon_i$ 随机取在 $\pm|V_d|$ 范围内( $V_d$ 表示无序度). 图4为在不同无序程度下, 渐变型结的电导情况. 随着无序增强, 低能区的电导显著增加, 结各端电导都恢复了金属性. 同时, 电导的共振、反共振峰减弱. 前面的讨论已指出, 结区的锯齿型边界处的局域态抑制了低能区结电导. 此处, 锯齿型边界无序破坏了局域态, 因而部分恢复了低能区电导.

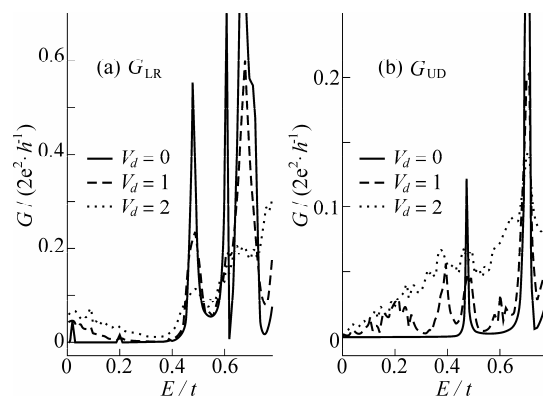


图4 不同强度的边界无序下渐变型石墨烯纳米结的电导

### 3 结论

研究了单层石墨烯纳米十字结的电导性质. 通过比较渐变型和直接型2种结构的电导, 重点讨论了在结区的带有锯齿型边界的连接区对低能区电导的影响. 结果表明, 在低能区沿结的锯齿型边界的局域态抑制结各端的电导, 产生了电导带隙. 而要恢复结的金属性, 一种途径是尽量减小渐变连接区相对于导线的尺寸, 这可以通过控制工艺实现; 另一种途径是避免在连接区形成理想的锯齿型边界. 而实际的石墨烯结的电导性质还同时受多种因素的影响, 需要更细致的模型和计算.

#### 参考文献:

- [1] 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.
- [2] Geim A K, Novoselov K S. The rise of graphene[J]. *Nature Materials*, 2007, 6:183-191.
- [3] Avouris P, Chen Z H, Perebeinos V. Carbon-based electronics[J]. *Nature Nanotech*, 2007, 2:605-615.
- [4] Castro Neto A H, Guinea F, Peres N M R, et al. The electronic properties of graphene[J]. *Rev Mod Phys*, 2009, 81:109-111.
- [5] Xu Zhiping, Zheng Quanshui, Chen Guanhua. Elementary building blocks of graphene-nanoribbon-based electronic devices[J]. *Appl Phys Lett*, 2007, 90:223115-223117.
- [6] Yan Qimin, Huang Bing, Yu Jie, et al. Intrinsic current-voltage characteristics of graphene nanoribbon transistors and effect of edge doping[J]. *Nano Lett*, 2007, 7(6):1469-1473.
- [7] Zhang Yuanbo, Tan Yanwen, Stormer H L, et al. Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene[J]. *Nature*, 2005, 438:201-204.
- [8] Han M Y, Ozyilmaz B, Zhang Yuanbo, et al. Energy band-gap engineering of graphene nanoribbons[J]. *Phys Rev Lett*, 2007, 98:206805-206808.
- [9] Molitor F, Jacobsen A, Stampfer C, et al. Transport gap in side-gated graphene constrictions[J]. *Phys Rev B*, 2009, 79:75426-75430.
- [10] Stampfer C, Guttinger J, Hellmuller S, et al. Energy gaps in etched graphene nanoribbons[J]. *Phys Rev Lett*, 2009, 102:56403-56406.
- [11] Son Y W, Cohen M L, Louie S G. Half-metallic graphene nanoribbons[J]. *Nature*, 2006, 444:347-349.
- [12] Areshkin D A, Gunlycke D, White C T. Building blocks for integrated graphene circuits[J]. *Nano Lett*, 2007, 7(11):3253-3259.
- [13] Chen Yuanping, Yan Xiaohan, Xie Yuee. Transport through T-shaped quantum wires under potential modulation: Lattice Green's function approach[J]. *Phys Rev B*, 2005, 71:245335-245341.
- [14] Chen Yuanping, Xie Yuee, Yan Xiaohan. Electron transport of L-shaped graphene nanoribbons[J]. *J Appl Phys*, 2008, 103:63711-63714.
- [15] Wang Z F, Shi Q W, Li X Q, et al. Z-shaped graphene nanoribbon quantum dot device[J]. *Appl Phys Lett*, 2007, 91:53109-53111.
- [16] Jayasekera T, Mintmire J W. Transport in multiterminal graphene nanodevices[J]. *Nanotechnology*, 2007, 18:424033-424037.
- [17] Li T C, Lu Shaoping. Quantum conductance of graphene nanoribbons with edge defects[J]. *Phys Rev B*, 2008, 77(8):85408-85415.
- [18] Datta S. *Electronic transport in mesoscopic systems*[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1997.
- [19] Hong S, Yoon Y, Guo Jin. Metal-semiconductor junction of graphene nanoribbons[J]. *Appl Phys Lett*, 2008, 92:83107-83109.

## Transport Properties of Cross-junctions in Graphene Nanoribbons

KONG Xiao-lan, XIONG Yong-jian\*

(Faculty of Science, Ningbo University, Ningbo 315211, China)

**Abstract:** Transport properties of two types of cross-junctions in graphene nanoribbons are investigated by using the tight-binding model. A simple junction is formed by an armchair graphene nanoribbon crossing with a zigzag graphene nanoribbon. A deformed junction is constructed by adding graphene triangle flakes to the corners of the simple one. Within the low-energy range, localized states exist in the zigzag edges of the triangle flakes and suppress the junction conductance, thus a conductance gap is formed. The metallic conductance can be recovered by reducing the sizes of the triangle flakes or introducing disorder in the zigzag edges.

**Key words:** graphene; cross nano-junction; transport properties; metal-insulation transition

**CLC number:** O469

**Document code:** A

(责任编辑 章践立)