

非近邻跳跃对扶手椅型石墨烯纳米带电子结构的影响^{*}

金子飞 童国平[†] 蒋永进

(浙江师范大学数理与信息工程学院, 金华 321004)

(2009 年 3 月 30 日收到, 2009 年 5 月 5 日收到修改稿)

根据 π 电子的紧束缚模型, 将电子的次近邻和第三近邻跳跃能考虑在内, 得到扶手椅型石墨烯纳米带 (AGNRs) 能带结构的解析解. 讨论了由次近邻和第三近邻电子跳跃引起的能带和能隙变化, 发现次近邻和第三近邻跳跃分别对带隙产生增大和减小的影响. 比较了边界弛豫与非近邻跳跃之间的互相竞争关系. 当纳米带的宽度 n 为奇数时, 二维石墨面的紧束缚模型中所固有的 van Hove 奇异性表现为 AGNRs 中的无色散带. 当 AGNRs 宽度增加时, 能谱趋向于二维石墨烯时的能谱结构.

关键词: 扶手椅型石墨烯纳米带, 非近邻跳跃, 边界弛豫, 电子结构

PACC: 7115, 7115F

1. 引言

在过去几十年间, 人们对以 C 原子为基础构成的众多材料进行了广泛研究, 并在如碳纳米管的研究中取得了丰富的成果^[1]. 近几年来一种新型碳纳米材料——石墨烯的成功制备^[2]吸引了国际众多研究者的兴趣. 由于特殊的晶格结构, 石墨烯的低能能谱是由两个线性的 Dirac 圆锥来描述的. 基于这种特殊的线性能谱结构, 它具有半整数量子 Hall 效应^[3-5]、Klein 隧穿^[6]等一系列独特的物理性质. 在考虑可能的实际应用(如微纳电路)时, 人们期望了解几何受限的石墨烯, 如碳纳米带 (GNRs) 等石墨烯系统的物理性质. 在 GNRs 中, 几何结构是决定电子结构的重要因素^[7]. 文献 [7] 对 GNRs 进行了分类, 并由紧束缚模型得到它们的电子结构. 依据边界形状不同, 最常见的 GNRs 有扶手椅型石墨烯纳米带 (AGNRs) 和锯齿型石墨烯纳米带 (ZGNRs) 两种. ZGNRs 的波函数和能谱的解析式由文献 [8, 9] 给出, 结果显示 ZGNRs 都为金属性; 而对于 AGNRs, 根据它的带宽有金属和绝缘体两种类型^[8, 10-14], 文献 [10] 给出了 AGNRs 的波函数和能带能隙解析式. 值

得注意的是, 以上的理论工作都是针对只含最近邻跳跃能的紧束缚模型的 GNRs.

在对无限大单层石墨系统的讨论中, 文献 [15, 16] 考虑了次近邻和第三近邻跳跃. 结果表明, 在紧束缚近似的框架下, 如果考虑次近邻和第三近邻跳跃, 则有可能得到在整个 Brillouin 区内与第一性原理计算结果更加符合的能谱结构^[15]. 为此, 本文将从包括次近邻和第三近邻的电子跳跃能在内的紧束缚模型出发, 采用文献 [10] 中的横向平面波组合的方法, 给出 AGNRs 的能带结构的解析解. 进而, 我们讨论了由次近邻和第三近邻跳跃引起的能带结构的变化, 指出了次近邻和第三近邻对带隙产生的影响, 计算结果与第一性原理所得的结果相近^[17]. 本文给出的结果是解析的, 而且当纳米带的宽度很大时, 自然回到文献 [15, 16] 的结果. 最近, 有很多关于 GNRs 带隙的研究工作. 除了本文在紧束缚模型框架下所考虑的非近邻跳跃, 影响带隙的物理因素还包括边界形变^[10, 13, 18, 19]. 理论研究^[20, 21]表明, 考虑边界形变时, 会对纳米带电子结构产生影响, 即边界 C—C 键长的变化对纳米带电子结构有重要的影响. 此外, 掺杂^[22]、空位缺陷^[23]、外场作用^[17, 24]和外力作用^[25]等, 其中有一些带隙的调控方法(如加外电场)

^{*} 浙江省自然科学基金(批准号: Y7080383, Y6090575)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: tgp6463@zjnu.cn

可以用于所谓 GNRs 在介观电子器件方面的应用.

2. 理论模型

单层 AGRNs 结构如图 1 所示. 在图 1 中, 对 C 原子进行从上到下标记, $i = 0$ 和 n 对应 AGRNs 中两个边界, y 方向上的纳米尺度为 AGRNs 宽度, x 方向为无限长带, 虚线框内的元胞在 x 方向上具有平移不变性. 本文对单层 AGRNs 的原子波函数采用简单的平面波基组形式^[10] 根据紧束缚方法^[1, 15], 分别对 AGRNs 的最近邻、次近邻和第三近邻跳跃进行计算, 给出三种情况下能带和能隙的解析式.

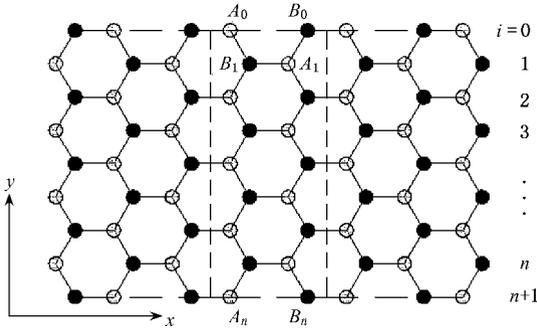


图 1 AGRNs 中的两个子晶格 A 和 B, 中间虚线框为由 A, B 组成的元胞

AGRNs 两个子晶格 A 和 B 的波函数如下:

$$|\psi_A\rangle = \frac{2}{\sqrt{N(n+1)}} \sum_{i=1}^n \sum_{x_{A_i}} e^{ik_x x_{A_i}} \phi_A(i) |A_i\rangle, \quad (1)$$

$$|\psi_B\rangle = \frac{2}{\sqrt{N(n+1)}} \sum_{i=1}^n \sum_{x_{B_i}} e^{ik_x x_{B_i}} \phi_B(i) |B_i\rangle,$$

其中 N 是 x 方向上的元胞数, $|A_i\rangle$ 和 $|B_i\rangle$ 分别是 A 和 B 处 C 原子 $2p_z$ 轨道波函数, $\phi_A(i)$ 和 $\phi_B(i)$ 分别是 A 和 B 在 y 方向上的分量, 满足正交归一化条件. 本文采用固定性边界条件, 即

$$\phi_A(0) = \phi_B(0) = 0,$$

$$\phi_A(n+1) = \phi_B(n+1) = 0.$$

设 $\phi_A(i) = \phi_B(i) = \sin\left(\frac{i\sqrt{3}k_y a}{2}\right)$, 其中 a 为 C—C 键长, 由边界条件得到

$$k_y = 2p\pi[\sqrt{3}a(n+1)] \quad (p = 1, 2, \dots, n).$$

总的波函数由 $|\psi_A\rangle$ 和 $|\psi_B\rangle$ 线性组合而成. 根据紧束缚近似, 可得到 GNRs 的久期方程为

$$\begin{vmatrix} H_{AA}(k) - E(k)S_{AA}(k) & H_{AB}(k) - E(k)S_{AB}(k) \\ H_{AB}^*(k) - E(k)S_{AB}^*(k) & H_{AA}(k) - E(k)S_{AA}(k) \end{vmatrix} = 0. \quad (2)$$

解此方程得 AGRNs 的能谱为

$$E(k)^\pm = \frac{2E_0 - E_1 \pm \sqrt{(2E_0 - E_1)^2 - 4E_2E_3}}{2E_3}. \quad (3)$$

其中取正号表示能带的价带, 取负号表示导带. 这里 H_{AA} , H_{AB} 和 H_{AB}^* 为 Hamilton 矩阵元, S_{AA} , S_{AB} 和 S_{AB}^* 为交叠矩阵元. (3) 式中的 E_0 , E_1 , E_2 和 E_3 由以下公式给出:

$$\begin{aligned} E_0 &= H_{AA}S_{AA}, \\ E_1 &= S_{AB}H_{AB}^* + H_{AB}S_{AB}^*, \\ E_2 &= H_{AA}^2 - H_{AB}H_{AB}^*, \\ E_3 &= S_{AA}^2 - S_{AB}S_{AB}^*. \end{aligned}$$

当只考虑最近邻时, 根据 Hamilton 和交叠矩阵分别得到 E_0 , E_1 , E_2 和 E_3 为

$$\begin{aligned} E_0 &= \epsilon, \\ E_1 &= 2s_0r_0f, \\ E_2 &= \epsilon^2 - r_0^2f, \\ E_3 &= 1 - s_0^2f. \end{aligned} \quad (4)$$

当考虑次近邻时 (包括最近邻) 则

$$\begin{aligned} E_0 &= (\epsilon + r_1(f-3))(1 + s_1(f-3)), \\ E_1 &= 2s_0r_0f, \\ E_2 &= (\epsilon + r_1(f-3))^2 - r_0^2f, \\ E_3 &= (1 + r_1(f-3))^2 - s_0^2f. \end{aligned} \quad (5)$$

当考虑第三近邻时 (包括最近邻和次近邻) 则

$$\begin{aligned} E_0 &= (\epsilon + r_1(f-3))(1 + s_1(f-3)), \\ E_1 &= 2s_0r_0f + (s_0r_2 + s_2r_0)g + 2s_2r_2h, \\ E_2 &= (\epsilon + r_1(f-3))^2 - r_0^2f - r_0r_2g - r_2^2h, \\ E_3 &= (1 + s_1(f-3))^2 - s_0^2f - s_0s_2g - s_2^2h. \end{aligned} \quad (6)$$

这里

$$f(k_x, p) = 1 + 4\cos\left(\frac{p\pi}{n+1}\right)\cos\left(\frac{3k_x a}{2}\right) + 4\cos^2\left(\frac{p\pi}{n+1}\right),$$

$$h(k_x, p) = 1 + 4\cos\left(\frac{2p\pi}{n+1}\right)\cos(3k_x a) + 4\cos^2\left(\frac{2p\pi}{n+1}\right),$$

$$\begin{aligned} g(k_x, p) &= 2f + 2\cos\left(\frac{3k_x a}{2} + \frac{3p\pi}{n+1}\right) \\ &\quad + 2\cos\left(\frac{3k_x a}{2} - \frac{3p\pi}{n+1}\right) + 2\cos(3k_x a) - 6. \end{aligned}$$

(4)–(6)式中的 $\epsilon, r_0, r_1, r_2, s_0, s_1, s_2$ 是可调制参数,一般由实验或第一性原理计算给出^[15],本文能谱和能隙图均根据文献 15 给出的参数得到。

3. 计算结果与讨论

根据上述模型计算结果,AGRN_s 能谱随 AGRN_s 的宽度 n 可分为三类,分别是 $n = 3m, n = 3m + 1$ 和 $n = 3m + 2$,其中 m 为正整数.由此可得到,AGRN_s 电子结构的性质强烈依赖于几何结构.当

$$E^0 = \frac{2\epsilon - 2s_0 r_0 f \pm \sqrt{4\epsilon^2 - 8\epsilon s_0 r_0 f + 4s_0^2 r_0^2 f^2 - 4(\epsilon^2 - r_0^2 f)(1 - s_0^2 f)}}{2(1 - s_0^2 f)},$$

$$E^1 = \frac{1}{2(u_1^2 - s_0^2 f)}(2u_1 u_2 - 2s_0 r_0 f \pm [4u_1^2 u_2^2 - 8u_1 u_2 s_0 r_0 f + 4s_0^2 r_0^2 f - 4(u_2^2 - r_0^2 f)(u_1^2 - s_0^2 f)]^{\frac{1}{2}}), \quad (7)$$

$$E^2 = \frac{1}{2(u_2^2 - u_3^2)}(2u_1 u_2 - u_5 \pm [4u_1^2 u_2^2 - 4u_1 u_2 u_5 + u_5 - 4(u_1^2 - r_0^2 f - r_0 r_2 g - r_2^2 h)(u_2^2 - u_3^2)]^{\frac{1}{2}}),$$

其中

$$u_1 = \epsilon + r_1(f - 3),$$

$$u_2 = 1 + s_1(f - 3),$$

$$u_3 = s_0^2 f + s_0 s_2 g + s_2^2 h,$$

$$u_4 = (s_0 r_2 + s_2 r_0)g,$$

$$u_5 = 2s_0 r_0 f + u_4 + 2s_2 r_2 h.$$

p 从 1 到 n 取值,以 $n = 3m, n = 3m + 1$ 和 $n = 3m + 2$ (m 为正整数)分别代入(7)式,通过计算可得到如图 2 所示的 AGRN_s 三个系列的电子能谱.图 2 中从左到右的编号(1)(2)和(3)分别表示最近邻、次近邻和第三近邻.图 2(a)(b)和(c)分别表示 $n = 6, 7, 8$ 时的情况.

文中出现的计算参数均采用文献 15 给出的参

$n = 3m, n = 3m + 1$ 时,AGRN_s 为绝缘体;当 $n = 3m + 2$ 时,AGRN_s 为金属性.三种情况下能带和能隙的解析结果表明:次近邻和第三近邻对能带和能隙值产生较大的影响.当 n 趋向无限大(足够大)时,AGRN_s 能谱和石墨烯能谱一致.

3.1. 能带的变化

我们用 E^0, E^1 和 E^2 表示三种近邻情况的能谱,其中上标 0, 1, 2 分别表示最近邻、次近邻和第三近邻.

数.若只考虑最近邻电子跳跃,取 $\epsilon = 0, s_0 = 0$ (取 $\epsilon = 0$ 即为零位点, $s_0 = 0$ 即忽略交叠积分),则能带的导带和价带上下对称.考虑参数不为零时,会导致能谱导带和价带上下不对称.当 n 为奇数,发现在最近邻和次近邻时,均存在一条水平的导带和价带,即在 AGRN_s 中出现 van Hove 奇异性.其能带标记为 $p = (n + 1)/2$.图 2(b)中水平能带为 $n = 7, p = 4$ 时的取值.只考虑最近邻跳跃时,上支水平能带为

$$E_{\text{up}}^0 = -\frac{\epsilon - s_0 r_0 - r_0 + \epsilon s_0}{1 - \epsilon^2}, \quad (8)$$

下支水平能带为

$$E_{\text{down}}^0 = \frac{-\epsilon + s_0 r_0 - r_0 + \epsilon s_0}{1 - \epsilon^2}. \quad (9)$$

考虑次近邻跳跃时,上支水平能带为

$$E_{\text{up}}^1 = -\frac{\epsilon - 2\epsilon s_1 - 2r_1 + 4r_1 s_1 - s_0 r_0 - r_0 + \epsilon s_0 - 2s_0 r_1 + 2r_0 s_1}{-1 + 4s_1 - 4s_1^2 + s_0^2}, \quad (10)$$

下支水平能带为

$$E_{\text{down}}^1 = \frac{-\epsilon + 2\epsilon s_1 + 2r_1 - 4r_1 s_1 + s_0 r_0 - r_0 + \epsilon s_0 - 2s_0 r_1 + 2r_0 s_1}{-1 + 4s_1 - 4s_1^2 + s_0^2}. \quad (11)$$

由(8)–(11)式可知,水平导带和价带值不随 k_x 和 n 而变化,但考虑次近邻时,发现水平的导带和价带发生偏移.计算还发现,若考虑第三近邻时,

原来水平的导带和价带就会发生弯曲(公式略),其值随 k_x 而变化,但却不随 n 变化,即与 AGRN_s 宽度无关.当 AGRN_s 为金属性时,导带和价带接触点值

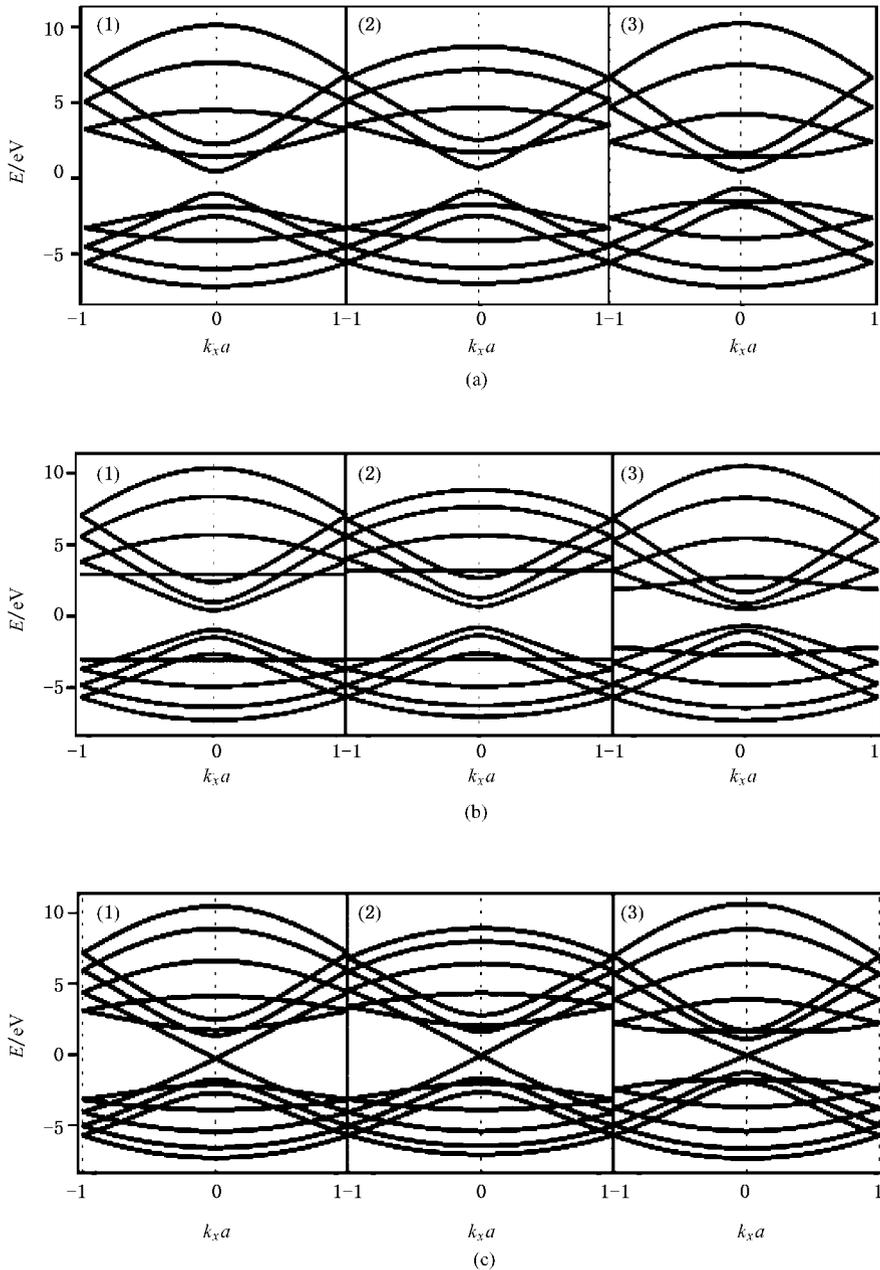


图2 三种 AGRNs 能谱 (a) $n=6$ (b) $n=7$ (c) $n=8$

在零位能以下,即为负值。

3.2. 能隙的变化

计算结果显示,当 $n=3m$ 和 $n=3m+1$ 时,

AGRNs 存在两种不同的带隙,这两种不同的情况在考虑次近邻、第三近邻之后,带隙会出现变化。当 $n=3m$, $m=3m+1$ 时,以 Δ^0 , Δ^1 和 Δ^2 分别表示最近邻、次近邻和第三近邻带隙。 Δ^0 和 Δ^1 的表达式为

$$\Delta^0 = -\frac{2\sqrt{\mathcal{K} - r_0 + \epsilon s_0 \mathcal{Y}}}{-1 + s_0^2 f}, \quad (12)$$

$$\Delta^1 = -\frac{2\sqrt{\mathcal{K} (r_0 f s_1 + 3r_1 s_0 - \epsilon s_0 - f r_1 s_0 - 3r_0 s_1 + r_0) \mathcal{Y}}}{f^2 s_1^2 - 6f s_1^2 + 2s_1 f + 9s_1^2 - 6s_1 + 1 - s_0^2 f}. \quad (13)$$

第三近邻带隙 Δ^2 因表达式过长略去不写。

由表达式可知,三种情况带隙随 m 值而变化,并且次近邻和第三近邻对带隙产生不同的影响。当 $n = 3m$ 时,给出能隙 Δ_{3m}^0 、 Δ_{3m}^1 和 Δ_{3m}^2 如图 3(a) 所示。次近邻和第三近邻与最近邻能隙的差值如图 3(b) 所示,其中 $\Delta^1 - \Delta^0$ 、 $\Delta^2 - \Delta^0$ 分别表示次近邻、第三近邻与最近邻的能隙差值。结果显示,当考虑次近邻跳跃时,使得能隙加大,而考虑三近邻跳跃时,情况刚好相反,使得能隙减小。两者相比,第三近邻对能隙产生的影响更大一些,即在碳带中电子在两种子晶格 A 和 B 之间跳跃和电子在同种子晶格间跳跃对带隙产生的影响,前者的影响更大。当 $n = 3m + 1$ 时的带隙与 $n = 3m$ 时接近,当考虑次近邻、第三近邻时,对带隙有同样的影响。当碳带考虑不同的边界条件时,也会对带隙产生重要的影响^[26]。当 $n = 3m + 2$ 时,带隙为零,即为金属性 GNRs,考虑次近邻、第三近邻时对带隙不产生影响。

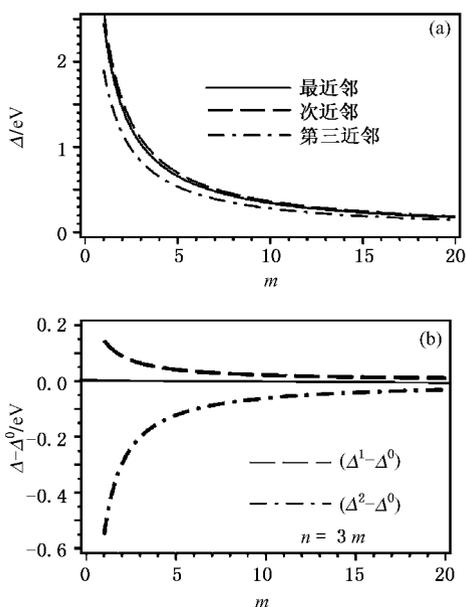


图 3 $n = 3m$ 时的能隙和能隙差 (a)最近邻、次近邻和第三近邻三种带隙曲线 (b)次近邻、第三近邻与最近邻带隙差值曲线

3.3. 边界弛豫和第三近邻电子跳跃两者的竞争

以上讨论了不考虑边界形变条件下的 AGRNs 能谱和能隙,但在 AGRNs 的两边发生形变时,会对电子结构产生影响^[10,13,18,19]。我们选取典型的边界形变情况^[17],假定形变局限于边界两边的 C 原子,设 δr 为边界跳跃积分的改变量, $\delta r = 0.12r_0$ 。当

$n = 3m$ 、 $3m + 1$ 和 $m + 2$ 三种情况时,边界形变对 AGRNs 的能隙改变量 Δ_{e3m} 、 Δ_{e3m+1} 和 Δ_{e3m+2} 分别为^[10]

$$\begin{aligned} \Delta_{e3m} &= \Delta_{3m} - \Delta_{3m}^0 = -\frac{8\delta r}{3m+1} \sin^2\left(\frac{m\pi}{3m+1}\right), \\ \Delta_{e3m+1} &= \Delta_{3m+1} - \Delta_{3m+1}^0 = \frac{8\delta r}{3m+2} \sin^2\left(\frac{(m+1)\pi}{3m+2}\right), \\ \Delta_{e3m+2} &= \Delta_{3m+2} - \Delta_{3m+2}^0 = \frac{2\delta r}{m+1}. \end{aligned} \quad (14)$$

图 4 给出了考虑边界条件时的能隙差值曲线。由图 4 可知:当 $n = 3m$ 时,边界弛豫使能隙减小,随着 m 的增加,其能隙值渐渐接近于最近邻的能隙值;当 $n = 3m + 1$ 时,边界弛豫促使能隙增大;当 $n = 3m + 2$ 时,使 AGRNs 由原来零能隙变成非零能隙,即由金属性变为非金属性。当 $n = 3m$ 时,第三近邻电子跳跃使 AGRNs 的能隙减小,这与边界弛豫产生相同效应。当 $n = 3m + 1$ 时,第三近邻电子跳跃使 AGRNs 的能隙减小,而边界弛豫使其能隙增加,两者作用正好相反。当 $n = 3m + 2$ 时,第三近邻电子跳跃不能使 AGRNs 打开能隙,而边界弛豫却能打开能隙。由此可知,对 $n = 3m$ 而言,边界弛豫与第三近邻电子跳跃两者的竞争结果是促使能隙变得更小;对 $n = 3m + 1$ 而言,两者的作用似乎要保持原状,而对 $n = 3m + 2$,只表现了边界弛豫一面的作用,显得没有竞争性。

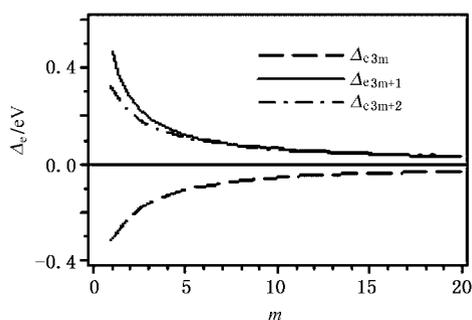
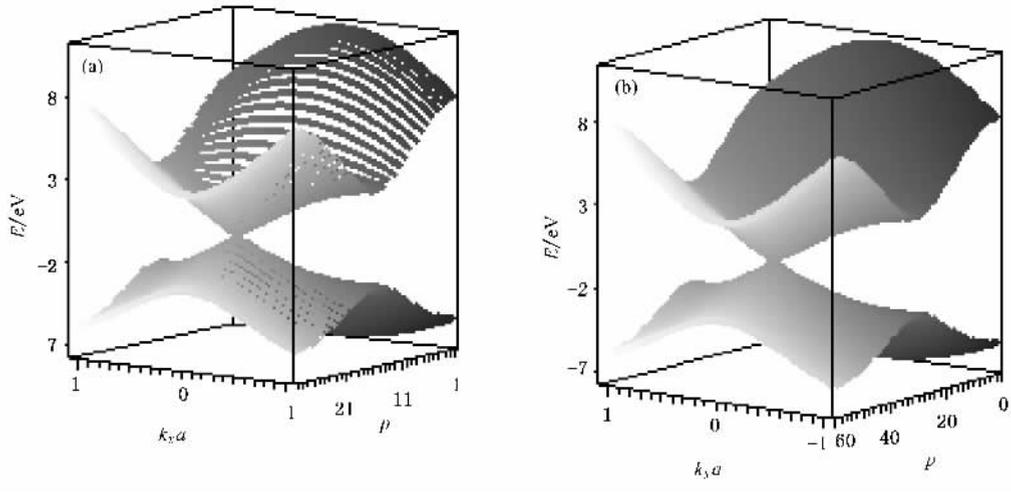


图 4 考虑边界弛豫时的能隙差值图

最后,对解析式进行分析可知,当 n 趋于无穷大(足够大)时,AGRNs 均为金属性,即与单层大石墨片的情况一致,这表明我们的结果具有一般性。为了更好地展示能谱结构,图 5(a)和(b)分别给出了 $n = 30$ 和 60 时的三维电子能谱图。由图 5(b)可见, $n = 60$ 的情况已与大石墨烯平面的电子能谱相一致。

图 5 三维电子能谱 (a) $n = 30$ (b) $n = 60$

4. 结 论

根据平面波基组和紧束缚方法,分别计算了 AGRNs 在最近邻、次近邻和第三近邻相互作用下的电子能谱,分别给出了 $n = 3m$, $n = 3m + 1$ 和 $n = 3m + 2$ 三种情况的能带和能隙的解析关系.对 AGRNs 的三种情况的能谱和能隙比较后发现:考虑

第三近邻作用时, n 为奇数时的水平能带线消失;当 $n = 3m$ 和 $n = 3m + 1$ 时,次近邻和第三近邻作用分别使 GNRs 能隙增大和减小.对 $n = 3m$ 而言,边界弛豫与第三近邻相互作用的竞争结果是两者产生相同效应,都使能隙减小;对 $n = 3m + 1$ 而言,两者产生相反的效应,力图保持原有能隙不变;对 $n = 3m + 2$ 的情况,两者显得无竞争性.

- [1] Saito R, Gdresselhaus G, Gdresselhaus M S 2003 *Physical Properties of Carbon Nanotubes* (London : Imperial College Press) p17
- [2] Novoselove K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsove A A 2004 *Science* **306** 666
- [3] Zhang Y B, Tan Y W, Stormer H L, Kim P 2005 *Nature* **438** 201
- [4] Nomura K, MacDonald A H 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 256602
- [5] Brey L, Fertig H A 2006 *Phys. Rev. B* **73** 195408
- [6] Katsnelson M I, Novoselov K S, Geim A K 2006 *Nat. Phys.* **2** 620
- [7] Ezawa M 2006 *Phys. Rev. B* **73** 045432
- [8] Sasaki K, Murakami S, Saito R 2006 *J. Phys. Soc. Jpn.* **75** 074713
- [9] Sasaki K, Murakami S, Saito R 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 113110
- [10] Zheng H X, Wang Z F, Luo T, Shi Q W, Chen J 2007 *Phys. Rev. B* **75** 165414
- [11] Fujita M, Wakabayashi K, Nakada K, Kusakabe K 1996 *J. Phys. Soc. Jpn.* **65** 1920
- [12] Brey L, Fertig H A 2006 *Phys. Rev. B* **73** 235411
- [13] Nakada K, Fujita M, Dresselhaus G, Dresselhaus M S 1996 *Phys. Rev. B* **54** 17954
- [14] Wakabayashi K, Fujita M, Ajiki H, Sigrist M 1999 *Phys. Rev. B* **59** 8271
- [15] Reich S, Maultzsch J, Thomsen C 2002 *Phys. Rev. B* **66** 035412
- [16] Wallace P R 1947 *Phys. Rev.* **71** 622
- [17] Son Y W, Cohen M L, Louie S G 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 216803
- [18] Miyamoto Y, Nakada K, Fujita M 1999 *Phys. Rev. B* **59** 9858
- [19] Ouyang F P, Xu H, Wei C 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1073(in Chinese) [欧阳方平、徐 慧、魏 辰 2008 物理学报 **57** 1073]
- [20] Neaton J B, Hybertsen M S, Louie S G 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 216405
- [21] Wang Z F, Li Q X, Zheng H X, Ren H, Su H B, Shi Q W, Chen J 2007 *Phys. Rev. B* **75** 113406
- [22] Costa Filho R N, Farias G A, Peeters F M 2007 *Phys. Rev. B* **76** 193409
- [23] Ouyang F P, Wang H Y, Li M J, Xiao J, Xu H 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 7132(in Chinese) [欧阳方平、王焕友、李明君、肖金、徐 慧 2008 物理学报 **57** 7132]
- [24] Chiu Y H, Lai Y H, Ho J H, Chuu D S, Lin M F 2008 *Phys. Rev. B* **77** 045407
- [25] Wei Y, Tong G P 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1931(in Chinese) [韦 勇、童国平 2009 物理学报 **58** 1931]
- [26] Gunlycke D, White C T 2008 *Phys. Rev. B* **77** 115116

Effect of the non-nearest-neighbor hopping on the electronic structure of armchair graphene nanoribbons^{*}

Jin Zi-Fei Tong Guo-Ping[†] Jiang Yong-Jin

(College of Mathematics , Physics and Information Engineering , Zhejiang Normal University , Jinhua 321004 , China)

(Received 30 March 2009 ; revised manuscript received 5 May 2009)

Abstract

Based on the tight-binding model , the non-nearest-neighbor hopping terms of electrons are taken into account and the energy spectra of the armchair graphene nanoribbons (AGRNs) are given analytically . The changes of the energy band and the gap with the non-nearest-neighbor terms are discussed . The results show that the next-nearest-neighbor term can increase the gap and the third-nearest-neighbor term can narrow the gap . The competition relationship between the edge relaxation and the non-neighbor term is compared . When the width n is odd , the van Hove singularity from graphene sheets leads to the dispersion-less band . When the width of AGRNs goes to infinity , the spectrum of AGRNs tends to that of graphene sheets .

Keywords : armchair graphene nanoribbon , non-nearest-neighbor hopping , edge relaxation , electronic structure

PACC : 7115 , 7115F

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation of Zhejiang Province , China (Grant Nos. Y7080383 , Y6090575).

[†] Corresponding author. E-mail : tgp6463@zjnu.cn