

# 单层正三角锯齿型石墨烯量子点的 电子结构和磁性\*

潘洪哲<sup>1)2)</sup> 徐明<sup>2)†</sup> 陈丽<sup>1)</sup> 孙媛媛<sup>1)</sup> 王永龙<sup>1)</sup>

1) (临沂师范学院理学院, 临沂 276005)

2) (四川师范大学物理与电子工程学院和固体物理研究所, 成都 610068)

(2010 年 1 月 5 日收到; 2010 年 1 月 18 日收到修改稿)

采用基于密度泛函理论的广义梯度近似(GGA),对不同尺寸( $N=2-11$ )的单层正三角锯齿型石墨烯量子点( $Z_N$ -GNDs)的结构进行优化,得到与实验数据较好符合的晶格常数,进一步计算得到不同尺寸下体系的自旋多重度、磁矩、电子态密度以及自旋电子密度.结果表明:所有体系都呈现金属性,在尺寸较小的体系中量子尺寸效应对电子结构的影响比较明显;与单层石墨烯片一样, $sp^2$ 杂化作用和非键态电子在量子点中仍起到非常重要的作用;费米能级上有自旋向上的电子分布,体系的自旋多重度和总磁矩随着体系尺寸的增大而增大,分析认为总磁矩主要来自锯齿形边界上碳原子的 $2p$ 轨道上非键态电子的贡献.本工作对基于三角锯齿型石墨烯量子点的器件设计具有指导意义.

**关键词:** 石墨烯, 量子点, 电子结构, 磁性

**PACC:** 7115, 7115M

## 1. 引言

石墨烯片(graphene)是一层被剥离的石墨片层,具有理想的二维周期结构和独特的物理特性.自从2004年二维石墨烯片被用机械剥离方法制备并且成功观测到以来<sup>[1]</sup>,石墨烯已引起了人们广泛的研究<sup>[1-8]</sup>.最近的研究表明,经过精细的加工可以将石墨烯片切割成多种特殊形状的低维石墨烯纳米材料<sup>[9]</sup>,最具有代表性的纳米结构包括一维的石墨烯纳米带以及零维的石墨烯量子点.理论计算表明<sup>[10-12]</sup>,锯齿型石墨烯纳米带呈现金属性,而扶手椅型石墨烯纳米带根据宽度的不同可以呈现金属性或半导体性.当石墨烯片具有有限的面积时,便形成了零维的石墨烯量子点,这种量子点可以具有不同的几何形状.较引人关注的是具有矩形、三角形和六边形等形状的量子点<sup>[13-17]</sup>,这几种量子点的边界可以完全是锯齿型或扶手椅型.对于某些特殊形状,量子点内电子的总自旋不为零,预示着这类材料同样具有重要的潜在应用,如用作自旋存储

器、纳米晶体管等<sup>[17-21]</sup>.进一步研究还发现<sup>[11,16,21,22]</sup>,石墨烯量子点的电子结构和磁性受到许多因素的共同影响,如量子点的尺寸、形状以及边界碳原子的形貌等,特别是磁性性质,迄今仍停留在理论计算阶段,而且缺乏合理的理论解释.本文将采用基于密度泛函理论的广义梯度近似方法对单层正三角锯齿型石墨烯量子点的电子结构和磁性性质进行计算分析,特别关注体系尺寸对电子结构和磁性的影响,计算结果对三角锯齿型石墨烯量子点的实际应用具有指导意义.

## 2. 计算模型和计算方法

### 2.1. 模型的选取和建构

正三角锯齿型石墨烯量子点的结构如图1所示.为了使模型结构更加稳定,我们采用吸附氢的方法将边缘碳原子的悬键进行饱和,这样做可以大大减少计算时间.图1中小球代表氢原子,大球代表碳原子,由于石墨烯中碳原子具有 $A, B$ 两类不同的

\* 国家自然科学基金(批准号: 10974076)和山东省自然科学基金(批准号: Y2008A14)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: hsuming\_2001@yahoo.com.cn

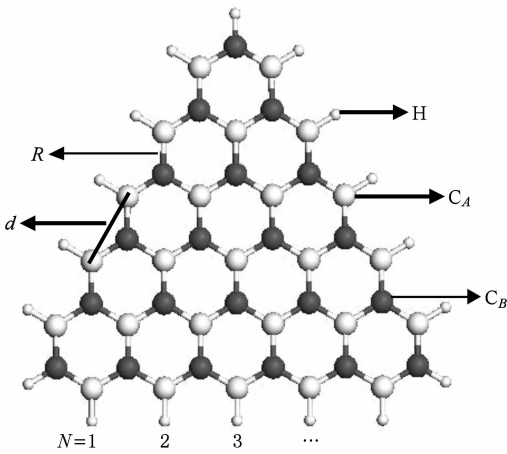


图1 具有氢饱和锯齿形边界的单层正三角形石墨烯量子点 ( $Z_N$ -GNDs) 结构示意图

亚点阵位置,因此在图1中用白色和黑色做了区分,白色球代表占据A位置的碳原子 $C_A$ ,黑色球代表占据B位置的碳原子 $C_B$ ;R表示相邻两个碳原子的键长, $d$ 表示两个近邻的占据同类亚点阵位置碳原子之间的距离,即为石墨烯的晶格常数,且有 $d = \sqrt{3}R$ .建构初始模型过程中根据文献[23]确定C—C键键长 $R = 1.420 \text{ \AA}$ ,则 $d = 2.460 \text{ \AA}$ .可以看出,在该结构中,占据A位置和B位置的碳原子数 $N_A$ 和 $N_B$ 是不同的.为了分析尺寸对正三角锯齿型石墨烯量子点电子结构和磁性的影响,我们构建了10种形状完全相同但尺寸不同的模型进行计算过程,为了进行区分,我们将模型中沿着三角形一条边的碳原子个数进行编号(如图1, $N = 1, 2, 3, \dots$ ), $N$ 称之为尺寸参数.我们选取了 $N$ 从2到11共10个模型进

行计算,各种模型对应的边长尺寸 $a$ 见表1.模型中氢原子的数目为 $N_H = 3N + 3$ ,碳原子数目为 $N_C = N^2 + 4N + 1$ ,占据A位置和B位置的碳原子数之差 $N_A - N_B = N - 1$ .

## 2.2. 计算方法和参数

对所有具有氢饱和锯齿形边界的正三角形石墨烯量子点模型的几何优化和电子结构计算均是采用基于密度泛函理论(DFT)的广义梯度近似(GGA)方法<sup>[24]</sup>,采用PW91进行关联梯度修正<sup>[25]</sup>.为了正确描述石墨烯纳米结构中锯齿形边界所产生的电子自旋特性以及自旋多重度对体系能量的影响,在计算中采用自旋非限制方法对所有可能的自旋多重度进行优化,选定能量最低的作为基态进行分析.用密立根(Mulliken)电荷分析来得到原子轨道的电荷占据和自旋布居数.计算中,使用数值原子轨道基矢来展开体系的全电子Kohn-Sham波函数.在所选用的双数值极化基矢(DNP)中,使用两个波函数来描述碳的2s和2p轨道中的每个电子,并使用一个类3d的轨道波函数来描述轨道极化.在计算中使用的原子轨道截止半径是 $3.7 \text{ \AA}$ ,截止半径的选择都经过了收敛性测试,即使更高精度的截止半径也不会影响我们的计算结果.

在几何优化过程中,力的收敛标准是 $0.002 \text{ Ha/\AA}$ ( $1 \text{ Ha} = 27.21 \text{ eV}$ ),位移收敛标准为 $0.005 \text{ \AA}$ ,能量收敛标准为 $10^{-5} \text{ Ha}$ ,自洽过程是在能量的收敛标准为 $10^{-6} \text{ Ha}$ 下完成的.所有的计算均采用Dmol<sup>3</sup>软件包<sup>[26, 27]</sup>完成.

表1 优化后 $Z_N$ -GNDs( $N = 2-11$ )的边长尺寸( $a$ ),自旋多重度( $S$ ),结合能( $E_b$ ),C—C键键长范围( $R$ ),晶格常数( $d$ ),费米能级附近的自旋劈裂宽度( $\delta E$ ),总磁矩( $\mu_T$ ),碳原子总磁矩( $\mu_C$ )

$N$	$a/\text{\AA}$	$S$	$E_b/\text{eV}$	$R/\text{\AA}$	$d/\text{\AA}$	$\delta E/\text{eV}$	$\mu_T/\mu_B$	$\mu_C/\mu_B$
2	4.888	2	-4.590	1.392-1.430	2.411-2.477	0.694	1.002	1.065
3	7.355	3	-7.471	1.392-1.433	2.411-2.482	0.828	1.999	2.113
4	9.822	4	-10.941	1.392-1.438	2.411-2.491	0.688	3.006	3.164
5	12.287	5	-14.999	1.392-1.439	2.411-2.492	0.616	4.002	4.209
6	14.752	6	-19.645	1.392-1.440	2.411-2.494	0.751	4.996	5.251
7	17.216	7	-24.879	1.392-1.439	2.411-2.492	0.682	6.007	6.301
8	19.680	8	-30.700	1.392-1.440	2.411-2.494	0.681	7.004	7.343
9	22.144	9	-37.110	1.392-1.440	2.411-2.494	0.681	7.998	8.382
10	24.608	10	-44.107	1.392-1.440	2.411-2.494	0.680	8.997	9.426
11	27.072	11	-51.693	1.392-1.440	2.411-2.494	0.680	10.000	10.471

### 3. 计算结果与讨论

#### 3.1. 不同尺寸量子点的结构

对于每种尺寸的模型, 我们均计算了各个自旋多重度下其体系的能量, 选择体系能量最低的自旋多重度对应的性质参数在表 1 中列出. 结果表明,  $Z_N$ -GNDs ( $N = 2-11$ ) 量子点的自旋多重度随着其尺寸变大而增大. 这是因为在我们所建的三角形石墨烯片中位于  $A, B$  位置的碳原子数目是不同的, 导致了体系内的一些电子无法与近邻碳原子的电子成键, 并最终演化成了体系中的非键态电子, 因而自旋多重度  $S = N_A - N_B + 1 = N$ . C—C 键长随着体系尺寸的增加变化不大, 而且由于体系边缘原子的弛豫, 体系中的 C—C 键长并不是均匀分布的, 不同体系的 C—C 键最小键长均为  $1.392 \text{ \AA}$ , 它是由位于三角形三个顶端位置的碳原子与邻近的碳原子所成的键; 最大键长从  $N = 2$  到  $N = 4$  有所增大,  $N = 4$  以后基本稳定在  $1.440 \text{ \AA}$ , 最大键长均是由外层锯齿形边界上处于  $B$  位置的碳原子与相邻的内层  $A$  位置碳原子所成键的键长. 对应的晶格常数范围为  $2.411-2.494 \text{ \AA}$ , 与文献[28]给出的石墨烯片边缘的实验数据  $2.5 \pm 0.2 \text{ \AA}$  比较符合. 此外, 对于各种尺寸, 位于三角形内部的碳原子之间的键长基本维持在  $1.420 \text{ \AA}$  左右, 与石墨烯片中的 C—C 键长<sup>[23]</sup>一致, 说明边缘原子的弛豫对内部原子影响很小; C—H 键长均为  $1.090 \text{ \AA}$ , 与文献[29]采用平面波赝势法得到的有关氢吸附的结果完全一致. 可见, 吸附氢原子对提高体系的稳定性起到了很大作用.

#### 3.2. 不同尺寸量子点的电子态密度

为了观察不同尺寸量子点的电子分布及磁性情况, 我们计算了各个尺寸量子点的电子态密度, 通过分析发现各个尺寸量子点的电子态密度的构成情况都是一致的. 为了便于分析, 我们以  $Z_{10}$ -GNDs 的总电子态密度和分波电子态密度图为例进行分析说明, 图 2 中显示了  $Z_{10}$ -GNDs 的  $2s$  轨道、 $2p$  轨道和总的态密度分布. 需要说明的是, 计算结果表明在计算过程中虽然引入了类  $3d$  轨道波函数, 但其对体系的电子结构以及磁矩影响非常小. 如图 2 所示, 以  $0 \text{ eV}$  作为费米能级, 在费米能级附近有电

子分布, 导带和价带连通, 说明三角形石墨烯呈现金属性. 在较低能量范围内,  $2s$  轨道电子对态密度贡献比  $2p$  轨道电子大; 在  $-15 \text{ eV}$  至  $-7 \text{ eV}$  的能量范围内, 能量越高,  $2p$  轨道的电子对态密度贡献比  $2s$  轨道越大. 可以认为在此范围之内,  $2s$  轨道和  $2p$  轨道的电子产生了轨道杂化作用. 通过其贡献大小可以看出, 轨道杂化属于  $sp^2$  杂化. 在此作用下, 碳原子与近邻碳原子之间形成很强的  $\sigma$  键, 使得体系能够稳定存在, 这与文献[30]报道的单层石墨烯片的结论一致. 在  $-7 \text{ eV}$  至  $-3 \text{ eV}$  的能量范围之内,  $2p$  轨道的电子对态密度的贡献明显大于  $2s$  轨道的电子.  $sp^2$  杂化以后, 剩下的  $2p$  轨道电子成为非键态电子, 在费米能级附近以及费米能级以上的导带上, 态密度来源于  $2p$  轨道非键态电子的贡献, 正是由于这种非键态轨道的存在, 使得电子可在体系中自由移动, 这与文献[1]所报道的对石墨烯片的结论一致. 量子点中出现的这些非键态与紧束缚以及平均场近似方法得到的结果一致<sup>[13-15]</sup>, 同时, 也验证了我们计算方法的可靠性.

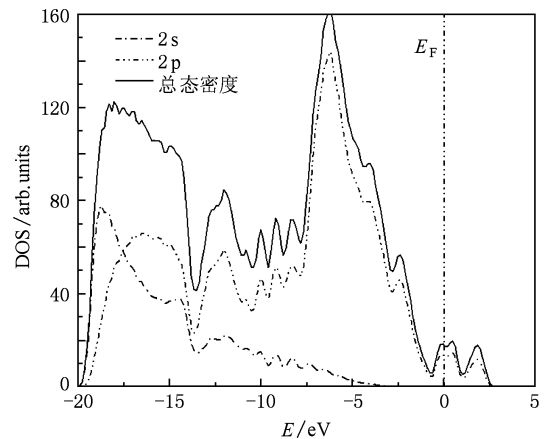


图 2  $Z_{10}$ -GNDs 的总电子态密度和分波电子态密度图

各个尺寸量子点的自旋向上和自旋向下电子态密度图如图 3 所示, 可以看出, 在尺寸较小的模型中 (例如  $N = 2-4$ ), 其对应的态密度呈现许多分离的峰, 说明在较小尺寸的模型中, 量子尺寸效应的影响很大, 随着模型尺寸的增大, 量子尺寸效应的影响逐渐减小. 由于费米面附近的态密度分布决定着物质的磁性质, 因此主要讨论费米面附近的态密度. 通过图 3 可以看出, 在费米面附近, 明显出现自旋向上的电子态密度和自旋向下的态密度分布的劈裂, 这表明体系中的电子通过交换相互作用出现

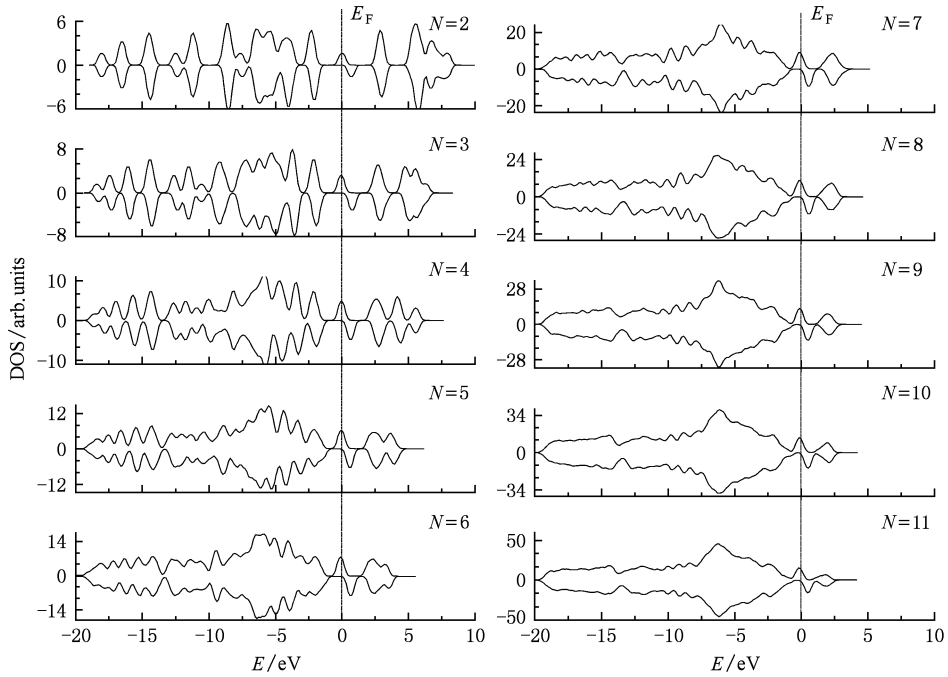


图3  $Z_n$ -GNDs( $N=2-11$ )的自旋向上和自旋向下电子态密度图

了自旋有序排列. 不同尺寸模型在费米能级附近的自旋劈裂宽度见表1所示,  $N=7$ 以后, 基本稳定在0.680 eV.

### 3.3. 不同尺寸量子点的磁性

由于有关石墨烯量子点的磁性仍停留在理论计算阶段, 缺乏实验数据, 因此我们只能将计算结果与其他理论计算结果相对照. 表1给出了不同尺寸量子点总磁矩( $\mu_T$ ), 碳原子总磁矩( $\mu_C$ )等参数, 这里是利用Mulliken布居分析得到轨道的电子占据数, 自旋向上态与自旋向下态的电子占据数相减求得的磁矩<sup>[31]</sup>, 单位为玻尔磁子( $\mu_B$ ). 可以看出, 随着模型尺寸的增大, 其总磁矩随之增大, 而且主要由碳原子提供. 为了便于表述, 我们根据碳原子在体系中的位置和对磁矩的贡献不同将体系中的碳原子分成三类, 占据锯齿形边界A位置的碳原子我们记为 $A_1$ 类碳原子, 其数量为 $N_{A_1} = 3N$ ; 占据其他A位置的碳原子我们记为 $A_2$ 类碳原子, 其数量为 $N_{A_2} = (N^2 - N)/2$ ; 占据B位置的碳原子记为B类碳原子, 其数量为 $N_B = (N^2 + 3N + 2)/2$ . 表2给出了不同类型碳原子的平均轨道电子占据数和每个轨道上电子所提供的平均磁矩,  $A_1$ 类和B类的每个碳原子的轨道电子占据数和每个轨道上电子所提供的磁矩与平均值基本相等, 而 $A_2$ 类碳原子的组

成比较复杂, 又可细分为靠近边缘的碳原子和靠近中心的碳原子, 由于其位置的不同而导致每个碳原子的轨道电子占据数和每个轨道上电子所提供的磁矩与平均值有一定差距, 但总体来看其对体系总的磁矩影响较小, 在这里只作为参考, 不予具体讨论. 显然, 各类碳原子磁矩主要来自于2p轨道电子的贡献,  $A_1$ 类碳原子2p轨道电子对碳原子总磁矩的贡献最大, 而且随着体系尺寸的增大, 单个碳原子2p轨道电子对磁矩的贡献稍有增强, 尺寸达到 $N=7$ 以后基本稳定.  $A_1$ 类碳原子的磁矩 $0.321 \mu_B$ 比锯齿型石墨烯纳米带锯齿形边界上的碳原子的磁矩 $0.3 \mu_B$ <sup>[32]</sup>稍大, 说明三角锯齿型石墨烯量子点中碳原子的自旋极化程度要比锯齿型石墨烯纳米带强烈. 通过对轨道电子占据数分析发现, 各类碳原子的2s轨道失去电子, 2p轨道得到电子, 说明碳原子中存在s轨道与p轨道的杂化作用, 转移的电荷越多, 说明杂化作用越强, 更有利于成键, 体系也更加稳定. 通过表2可以看出, 随着体系尺寸的增大,  $A_1$ 类和B类碳原子在2s和2p轨道间转移的电荷稍有减少, 说明尺寸增大, 使体系的稳定性有所降低.

我们进一步计算了各种尺寸下体系的自旋电子密度图. 通过分析发现, 不同尺寸体系的自旋电子密度均呈现同一规律. 以 $Z_5$ -GNDs的自旋电子密度切片图(图4)为例进行分析, 图中用黑色表示自

旋向下的电子的密度, 颜色越深表示电荷密度越大, 白色表示自旋向上的电子的密度, 颜色越浅表示电子密度越大, 通过图 4 可以看出, 自旋向上的电子完全分布在  $A$  位置上, 并且主要分布在三角形的锯齿形边界上 (即  $A_1$  类碳原子). 对比图 3 可以看出, 费米能级上分布的电子就是  $2p$  轨道上自旋向上的非键态电子, 因此可知, 锯齿形边界上碳原子的

$2p$  轨道上的非键态电子对量子点的磁性起着决定性作用. 同时, 一部分自旋向下的电子位于  $B$  位置, 这与由交换作用<sup>[13]</sup>得到的结果一致, 正是由于模型中  $A, B$  两个亚点阵位置的对称性缺失, 从而导致自旋向上和自旋向下的电子数不同, 因此, 体系的总磁矩随体系的增大而增大, 这与 Lieb 定理<sup>[33]</sup>的预测一致.

表 2  $Z_N$ -GNDs ( $N=2-11$ ) 中不同类型碳原子  $2s$  和  $2p$  轨道的平均电子占据数以及平均磁矩 (括号中的数字, 单位为  $\mu_B$ )

$N$	$A_1$		$A_2$		$B$	
	$2s$	$2p$	$2s$	$2p$	$2s$	$2p$
2	1.256 (0.018)	2.782 (0.233)	1.280 (0.003)	2.655 (0.023)	1.236 (-0.010)	2.709 (-0.072)
3	1.264 (0.021)	2.779 (0.277)	1.284 (0.010)	2.660 (0.108)	1.242 (-0.012)	2.681 (-0.084)
4	1.268 (0.023)	2.777 (0.291)	1.285 (0.011)	2.661 (0.125)	1.247 (-0.013)	2.668 (-0.085)
5	1.270 (0.023)	2.776 (0.295)	1.285 (0.011)	2.661 (0.124)	1.251 (-0.012)	2.661 (-0.083)
6	1.272 (0.023)	2.775 (0.297)	1.284 (0.010)	2.660 (0.119)	1.254 (-0.012)	2.657 (-0.079)
7	1.274 (0.023)	2.775 (0.298)	1.284 (0.010)	2.660 (0.112)	1.257 (-0.012)	2.654 (-0.076)
8	1.274 (0.023)	2.774 (0.298)	1.284 (0.009)	2.659 (0.105)	1.259 (-0.011)	2.652 (-0.072)
9	1.275 (0.023)	2.774 (0.298)	1.284 (0.009)	2.662 (0.104)	1.261 (-0.010)	2.651 (-0.068)
10	1.275 (0.023)	2.774 (0.298)	1.283 (0.009)	2.663 (0.101)	1.262 (-0.010)	2.651 (-0.065)
11	1.276 (0.023)	2.773 (0.298)	1.283 (0.008)	2.658 (0.086)	1.264 (-0.009)	2.650 (-0.062)

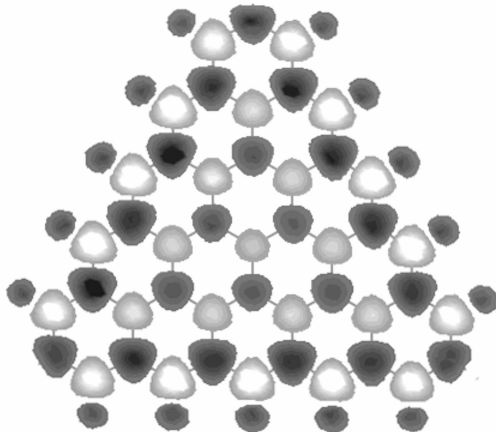


图 4  $Z_5$ -GNDs 的自旋电子密度切片图

## 4. 结 论

本文利用密度泛函理论中的广义梯度近似对单层正三角锯齿型石墨烯量子点的电子结构和磁性性质进行了计算分析. 结果表明: 电子态密度显示, 体系呈现金属性, 而且在尺寸较小的体系中可以明显看到量子尺寸效应的影响; 与单层石墨烯片一样,  $sp^2$  杂化作用和非键态电子在该体系中起到非常重要的作用; 由于体系中两种亚点阵位置的数目不同, 使得体系的自旋多重度和总磁矩随着体系尺寸的增大而增大, 而且体系的总磁矩主要来自于锯齿形边界上碳原子的  $2p$  轨道上非键态电子的贡献; 其自旋极化程度要强于锯齿型石墨烯纳米带.

这些计算结果将有助于理解三角锯齿型石墨烯量子点的电子结构和磁性随尺寸的变化规律,对基于

三角锯齿型石墨烯量子点的器件设计具有指导意义.

- 
- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [2] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Katsnelson M I, Grigorieva I V, Dubonos S V, Firsov A A 2005 *Nature* **438** 197
- [3] Zhang Y B, Tan Y W, Stormer H L, Kim P 2005 *Nature* **438** 201
- [4] Tan C L, Tan Z B, Ma L, Chen J, Yang F, Qu F M, Liu G T, Yang H F, Yang C L, Lü L 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 5726 (in Chinese) [谭长玲、谭振兵、马丽、陈军、杨帆、屈凡明、刘广同、杨海方、杨昌黎、吕力 2009 物理学报 **58** 5726]
- [5] Hu H X, Zhang Z H, Liu X H, Qiu M, Ding K H 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7165 (in Chinese) [胡海鑫、张振华、刘新海、邱明、丁开和 2009 物理学报 **58** 7165]
- [6] Tombros N, Jozsa C, Popinciuc M, Jonkman H T, Wees B J 2007 *Nature* **448** 571
- [7] Ouyang F P, Xu Hui, Wei Chen 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1073 (in Chinese) [欧阳方平、徐慧、魏辰 2008 物理学报 **57** 1073]
- [8] Novoselov K S, Jiang Z, Zhang Y, Morozov S V, Stormer H L, Zeitler U, Maan J C, Boebinger G S, Kim P, Geim A K 2007 *Science* **315** 1379
- [9] Ci L, Xu Z, Wang L, Gao W, Ding F, Kelly K F, Yakobson B I, Ajayan P M 2008 *Nano Res.* **1** 116
- [10] Ezawa M 2006 *Phys. Rev. B* **73** 045432
- [11] Son Y W, Cohen M L, Louie S G 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 216803
- [12] Cervantes S F, Csányi G, Piscanec S, Ferrari A C 2008 *Phys. Rev. B* **77** 165427
- [13] Ezawa M 2008 *Phys. Rev. B* **77** 155411
- [14] Wang W L, Meng S, Kaxiras E 2008 *Nano Lett.* **8** 241
- [15] Fernández R J, Palacios J J 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 177204
- [16] Ezawa M 2007 *Phys. Rev. B* **76** 245415
- [17] Di C A, Wei D C, Yu G, Liu Y Q, Guo Y L, Zhu D B 2008 *Adv. Mater.* **20** 3289
- [18] Wei D C, Liu Y Q, Zhang H L, Huang L P, Wu B, Chen J Y, Yu G 2009 *J. Am. Chem. Soc.* **131** 11147
- [19] Geim A K 2009 *Science* **324** 530
- [20] Westervelt R M 2008 *Science* **320** 324
- [21] Son Y, Cohen M L, Louie S G 2006 *Nature* **444** 347
- [22] Kobayashi Y, Fukui K, Enoki T, Kusakabe K, Kaburagi Y 2005 *Phys. Rev. B* **71** 193406
- [23] Elias D C, Nair R R, Mohiuddin T M G, Morozov S V, Blake P, Halsall M P, Ferrari A C, Boukhvalov D W, Katsnelson M I, Geim A K, Novoselov K S 2009 *Science* **323** 610
- [24] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [25] Perdew J P, Wang Y 1992 *Phys. Rev. B* **45** 13244
- [26] Delley B 1990 *J. Chem. Phys.* **92** 508
- [27] Delley B 2000 *J. Chem. Phys.* **113** 7756
- [28] Girit Ç Ö, Meyer J C, Erni R, Rossell M D, Kisielowski C, Yang L, Park C H, Crommie M F, Cohen M L, Louie S G, Zettl A 2009 *Science* **323** 1705
- [29] Huang L F, Li Y L, Ni M Y, Wang X L, Zhang G R, Zeng Z 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** S306 (in Chinese) [黄良锋、李延龄、倪美燕、王贤龙、张国仁、曾雉 2009 物理学报 **58** S306]
- [30] Lee C G, Wei X D, Kysar J W, Hone J 2008 *Science* **321** 385
- [31] Yang Z, Yan Y L, Zhao W J, Lei X L, Ge G X, Luo Y H 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 2590 (in Chinese) [杨致、闫玉丽、赵文杰、雷雪玲、葛桂贤、罗有华 2007 物理学报 **56** 2590]
- [32] Zheng X H, Dai Z X, Wang X L, Zeng Z 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** S259 (in Chinese) [郑小宏、戴振翔、王贤龙、曾熊 2009 物理学报 **58** S259]
- [33] Lieb E H 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 1201

# Electronic structure and magnetism of single-layer trigonal graphene quantum dots with zigzag edges \*

Pan Hong-Zhe<sup>1)2)</sup> Xu Ming<sup>2)†</sup> Chen Li<sup>1)</sup> Sun Yuan-Yuan<sup>1)</sup> Wang Yong-Long<sup>1)</sup>

1) (*School of Sciences, Linyi Normal University, Linyi 276005, China*)

2) (*Institute of Solid State Physics & School of Physics and Electronic Engineering, Sichuan Normal University, Chengdu 610068, China*)

(Received 5 January 2010; revised manuscript received 18 January 2010)

## Abstract

The geometry, spin multiplicity, magnetic moment, electronic density of states and the spin density of single-layer trigonal graphene quantum dots with zigzag edges have been systematically investigated using density functional theory with the generalized gradient approximation under different sizes. The calculated results such as lattice constants are in good agreement with experimental data and indicate that the system behaves like metal, while the electrons with up spins occupy the Fermi energy. The influence of quantum size effect is remarkable in the system of small size. It is also found that the  $sp^2$  hybridization and nonbonding electrons play an important part in the single-layer trigonal graphene quantum dots, just like in graphene. The spin multiplicity and magnetic moment of the system increase with the increase of the system size. Based on our calculation, the total magnetic moment of the system mainly comes from the nonbonding electrons on the  $2p$  orbital of the zigzag boundary. Our calculation may be helpful in designing devices based on trigonal graphene quantum dots.

**Keywords:** graphene, quantum dot, electronic structure, magnetism

**PACC:** 7115, 7115M

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10974076) and the Natural Science Foundation of Shandong, China (Grant No. Y2008A14).

† Corresponding author. E-mail: hsuming\_2001@yahoo.com.cn