

堆叠石墨片对锯齿型石墨纳米带电子输运的影响*

张 迷 陈元平[†] 张再兰 欧阳滔 钟建新

(湘潭大学量子工程与微纳能源技术研究所,湘潭 411105)

(2011年2月17日收到;2011年5月20日收到修改稿)

采用格林函数方法研究了堆叠石墨片对锯齿型石墨纳米带电子输运性质的影响,计算了两种不同堆叠方式下锯齿型石墨纳米带的电导. 研究发现,由于堆叠石墨片与石墨纳米带的耦合作用,锯齿型石墨纳米带的电导谱出现了电导谷. 在远离费米能处,两种堆叠方式下的电导谷位置相近甚至重合;而在费米能附近,两种堆叠方式下的电导谷存在差异. 此外,讨论了堆叠石墨片的几何尺寸对锯齿型石墨纳米带电子输运的影响. 结果显示,随石墨片几何尺寸的增大,锯齿型石墨纳米带在两种堆叠方式下远离费米能处的电导谷逐渐向费米能方向移动,同时其费米能附近的电导谷在两种堆叠方式下的差异随石墨片尺寸的增大变得更为明显. 研究结果表明,堆叠石墨片能够有效地调制锯齿型石墨纳米带的电子输运性质.

关键词: 锯齿型石墨纳米带, 石墨片, 电子输运, 格林函数

PACS: 72. 80. Vp, 73. 23. - b, 72. 10. Bg

1. 引言

自从2004年Novoselov等^[1]发现单层石墨烯以来,一些基于石墨烯的低维碳纳米结构相继被制备出来^[2-7],如准一维石墨纳米带与石墨片. 这些低维碳纳米材料由于其特殊的六角形晶格结构而展现出奇特的电子性质^[8-13]. 对于石墨纳米带,它的电子性质与边界形状及条带的宽度密切相关^[14-19]. 在紧束缚近似下,锯齿型石墨纳米带在任何宽度下都呈现金属性;而扶手椅型石墨纳米带随其宽度的变化表现出金属性或半导体性质. 对于石墨片,由于边缘效应及量子尺寸效应,其随边缘特征和尺寸的不同而呈现出新奇的电子性质和磁性^[20-26]. 这些新奇的性质使得它在纳米电子学中具有广泛的应用.

最近有人采用堆叠石墨片的方式来调制石墨烯或扶手椅型石墨纳米带的电子性质^[27,28]. Nilsson等^[27]讨论了堆叠石墨片的石墨烯的电子性质,发现在偏压下堆叠石墨片的石墨烯在费米能处出现带隙,同时其电子透射振幅随能量的变化出现了显著的振荡. González等^[28]研究了堆叠石墨片的扶手椅

型石墨纳米带的电子输运性质,研究表明扶手椅型石墨纳米带的电导谱在石墨片的影响下出现了电导谷,甚至出现了零透射. 这说明石墨片的堆叠可以有效调制石墨烯或扶手椅型石墨纳米带的电子性质. 锯齿型石墨纳米带和扶手椅型石墨纳米带都具有优异的电子输运性质. 然而,边界结构的不同导致了它们具有不同的电子性质,如锯齿型石墨纳米带在费米能处存在独特的边缘态,而扶手椅型石墨纳米带却没有. 因此,相对于扶手椅型石墨纳米带,堆叠石墨片对锯齿型石墨纳米带的电子输运性质的调制将会有一些奇特的现象出现,特别是在费米能附近.

本文主要研究堆叠矩形石墨片对锯齿型石墨纳米带电子输运的影响. 采用格林函数方法,我们计算了堆叠石墨片的锯齿型石墨纳米带在两种堆叠方式下的电导. 结果显示,两种堆叠方式的电导谱在远离费米能处和费米能附近都出现了电导谷. 对于远离费米能处的电导谷,它们在两种堆叠方式下的位置很接近甚至重合,而对于费米能附近的电导谷,它们在两种堆叠方式下的位置存在差异. 通过计算体系的态密度、分态密度以及局域态密度,我们发现两种堆叠方式在远离费米能处的电导谷

* 国家自然科学基金(批准号: 51006086, 11074213, 10774127)和教育部科技创新工程重大项目培育基金(批准号: 708068)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: chenyp@xtu.edu.cn

位置很接近甚至重合是因为这些电导谷源于石墨片与堆叠方式无关,而费米能附近的电导谷在两种堆叠方式下的位置不同是因为该范围的电导谷源于石墨纳米带边缘态与石墨片的相互作用,而该相互作用依赖于石墨片的堆叠方式.此外,我们讨论了堆叠石墨片的尺寸对锯齿型石墨纳米带电子输运性质的影响.结果发现,随着石墨片尺寸的增大,两种堆叠方式下远离费米能处的电导谷逐渐向费米能方向移动,同时两种堆叠方式下费米能附近的电导谷的差异变得更明显.这些结果表明,与扶手椅型石墨纳米带类似,石墨片的堆叠能有效地调制锯齿型石墨纳米带的电子输运性质.

2. 模型与方法

图 1(a), (b) 所示为用两种不同方式堆叠石墨片的锯齿型石墨纳米带,其中图 1(a) 为 α 堆叠方式,图 1(b) 为 β 堆叠方式.在 α 堆叠方式下,石墨片与石墨纳米带的边缘没有原子正对;而在 β 堆叠方式下,石墨片与石墨纳米带的边缘存在原子正对.石墨纳米带的宽用 W_Z 表示,石墨片的宽和长分别用 W_Z 和 L_Z 表示.为了研究堆叠石墨片锯齿型石墨纳米带的电子输运性质,我们将体系分为以下三个部分:由半无限长石墨纳米带组成的左电极和右电极以及由堆叠着石墨片的有限长石墨纳米带组成的中间散射区.体系的哈密顿量表示为

$$H = H_L + H_R + H_C + V_{LC} + V_{RC}, \quad (1)$$

其中 H_L, H_R 和 H_C 分别为左电极、右电极和中间散射区的哈密顿量, $V_{LC} = (V_{CL})^T$ 和 $V_{RC} = (V_{CR})^T$ 分别为左电极和右电极与中间散射区相互作用的矩阵.对于中间散射区,它由有限长石墨纳米带和石墨片两部分构成,因此其哈密顿量可以表示为

$$H_C = H_{ZGNR} + H_{GF} + H', \quad (2)$$

其中 H_{ZGNR} 和 H_{GF} 分别为有限长石墨纳米带和石墨片的哈密顿量, H' 为两者的相互作用能.采用紧束缚哈密顿量模型^[29], H_{ZGNR} 和 H_{GF} 可以表示为

$$H_{ZGNR} = \varepsilon \sum_i a_i^\dagger a_i + \gamma_0 \sum_{i \neq j} (a_i^\dagger a_j + \text{H. c.}), \quad (3)$$

$$H_{GF} = \varepsilon \sum_i b_i^\dagger b_i + \gamma_0 \sum_{i \neq j} (b_i^\dagger b_j + \text{H. c.}), \quad (4)$$

其中 a_i^\dagger 和 b_i^\dagger 分别为石墨纳米带和石墨片中第 i 个原子上的电子产生算符; H. c. 为厄米共轭算符; ε 为格点能,通过拟合第一性原理结果得到 $\varepsilon = 0$ ^[30]; γ_0 为石墨纳米带或石墨片中最近邻原子间的跃迁能.由于本文主要考虑石墨片与石墨纳米带的层间耦合作用对纳米带电子输运的影响,而忽略了边缘效应的影响,因此取 γ_0 值都相同 ($\gamma_0 = -2.9 \text{ eV}$)^[31].对于纳米带与石墨片的相互作用,我们只考虑层间最近邻和次近邻原子间的相互作用,因此 H' 可以表示为

$$H' = \gamma_\zeta \sum_{i \neq j} (a_i^\dagger b_j + \text{H. c.}) \quad (\zeta = 1, 2, 3), \quad (5)$$

其中 γ_ζ ($\zeta = 1, 2, 3$) 表示纳米带与石墨片之间原子的相互作用能,如图 1(c) 所示.图 1(c) 中 A' 和 B' 表示上层的两套晶格原子, A 和 B 表示下层的两套

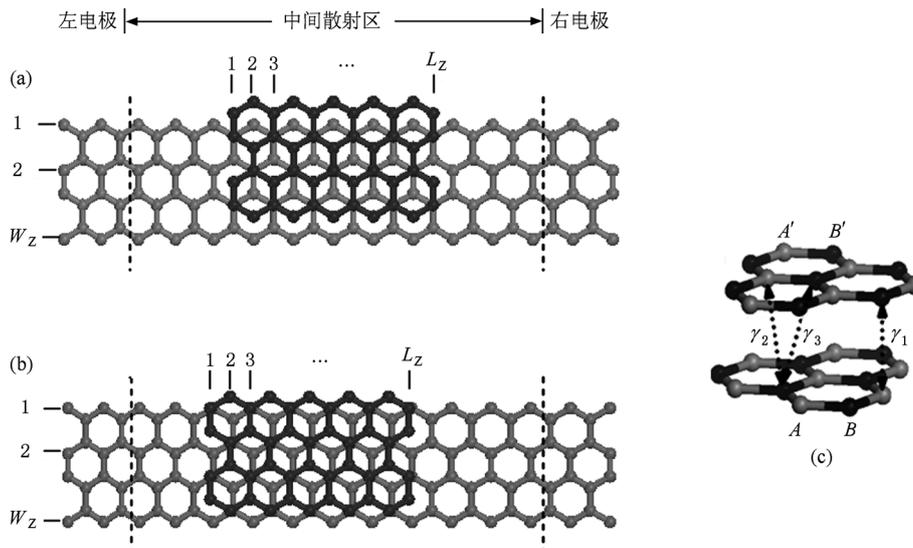


图 1 以两种不同方式堆叠石墨片的锯齿型石墨纳米带 (a) α 堆叠方式, (b) β 堆叠方式, (c) 石墨片与石墨纳米带相互作用示意图

晶格原子,其中原子 A 和 B' 正对,原子 $A'(B)$ 处于下(上)层碳六角环的中心线上. γ_1 表示层间最近邻原子即正对原子 B' 和 A 的相互作用能; γ_2 表示层间次近邻原子 A' 和 B 的相互作用能; γ_3 表示层间次近邻原子 B' 和 B (或者 A' 和 A) 的相互作用能. γ_2 和 γ_3 不同是因为原子 $B'(A)$ 在另一层存在正对原子,而 A' 和 B 没有. 对于 γ_ζ ($\zeta = 1, 2, 3$), 我们采用双层石墨片间的相互作用值. Malard 等^[31] 根据实验数据拟合得到 $\gamma_1 = -0.3$ eV, $\gamma_2 = -0.1$ eV, $\gamma_3 = -0.12$ eV.

基于紧束缚哈密顿量,体系的推迟格林函数可以表示为^[32,33]

$$G^r = (E - H_C - \Sigma_L^r - \Sigma_R^r)^{-1}, \quad (6)$$

其中 H_C 为中间散射区的哈密顿量, $\Sigma_{L(R)}^r = V_{CL(R)} g_{L(R)}^r V_{L(R)C}$ 为左电极或右电极的自能项, $g_{L(R)}^r$ 为左电极或右电极的表面格林函数,它可以通过递归格林函数方法获得^[34]. 一旦获得体系的推迟格林函数,我们可以计算体系的电导以及局域态密度(即某个原子上的电子态密度)

$$\sigma = \frac{2e^2}{h} \text{tr}(\Gamma_R G^r \Gamma_L G^a), \quad (7)$$

$$\rho_{el} = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(G_{ii}^r(E)), \quad (8)$$

其中 $G^a = (G^r)^\dagger$ 为超前格林函数, $\Gamma_{L(R)} = 2\text{Im}\Sigma_{L(R)}^r = i(\Sigma_{L(R)}^r - \Sigma_{L(R)}^a)$ 为左电极或右电极的谱函数. 将

所有原子上的电子局域态密度求和就可以得到电子态密度

$$\rho_e = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \text{tr}(G^r). \quad (9)$$

3. 结果及讨论

图 2(a) 所示为堆叠石墨片锯齿型石墨纳米带在 α 和 β 两种堆叠方式下的电导谱. 从图 2(a) 可以看到,与堆叠石墨片的扶手椅型石墨纳米带的电导谱相似,堆叠石墨片的锯齿型石墨纳米带的电导谱也出现了电导谷. 在远离费米能处 ($|E| > 0.25$ eV), α 和 β 两种堆叠方式下的电导谷位置很接近甚至重合,分别标记为 D_1, D_2, D_3, D_4 和 D'_1, D'_2, D'_3, D'_4 ; 而在费米能附近 ($|E| \leq 0.25$ eV), 两种堆叠方式下的电导谷位置出现了差异. 为了分析这种现象产生的原因,我们计算了体系的态密度、石墨纳米带的分态密度 ρ_{er} 以及石墨片的分态密度 ρ_{ef} , 如图 2(b)–(d) 所示. 从图 2(b) 可以看到, α 和 β 两种堆叠方式下的每一个电导谷都分别与一个态密度峰对应. 对于远离费米能的态密度峰,通过对比石墨片的分态密度(图 2(c))与石墨纳米带的分态密度(图 2(d))可知,这些态密度峰均是源于石墨片. 计算这些态密度峰的局域态密度发现,电导谷 D_1, D_4, D'_1 和 D'_4 对应的态密度峰的局域态密度相

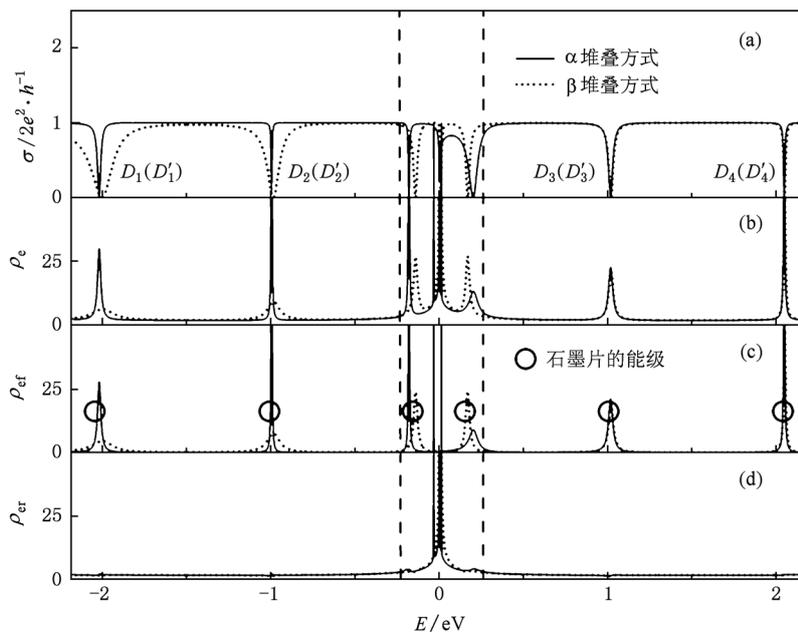


图 2 堆叠石墨片锯齿型石墨纳米带的电导谱、态密度和分态密度 结构参数 $W_z = 4$, $L_z = 11$. (a) 电导谱, (b) 态密度, (c) 石墨片的分态密度, (d) 石墨纳米带的分态密度

似,电导谷 D_2, D_3, D'_2 和 D'_3 对应的态密度峰的局域态密度相似. 图 3 给出了电导谷 D_1 和 D_2 对应的态密度峰的局域态密度. 由图 3 可见,这两个态密度峰对应的是局域在石墨片上的准束缚态. 这表明远离费米能的态密度峰对应的都是局域在石墨片上的准束缚态. 此外,通过计算石墨片的本征能级和本征态发现,两种堆叠方式在远离费米能处的态密度

峰的能量值与石墨片的本征能级一一对应,并且它们对应的准束缚态与石墨片的本征态类似. 这些结果表明,不管是 α 堆叠方式还是 β 堆叠方式,堆叠石墨片的锯齿边界石墨纳米带在远离费米能处的电导谷都是由石墨片本征态对应的准束缚态引起的,与堆叠方式无关. 因此,在两种堆叠方式下远离费米能的电导谷位置很接近甚至重合.

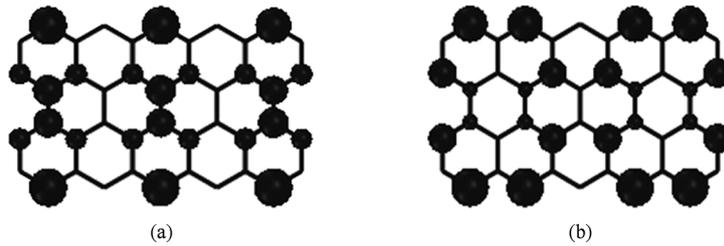


图 3 不同态密度峰的局域态密度 (a) 电导谷 D_1 对应的态密度峰的局域态密度, (b) 电导谷 D_2 对应的态密度峰的局域态密度

为了更清晰显示两种堆叠方式下锯齿型石墨纳米带在费米能附近的电子输运情况,图 4 给出了图 2 在费米能附近的电导谱、态密度以及分态密度. 相对于远离费米能的电导谷, α 和 β 两种堆叠方式下的费米能附近电导谷出现在不同的能量位置上. 在能量 $|E| > 0.05$ eV 范围内, α 和 β 两种堆叠方式下的电导谱都出现了两个电导谷,分别标记为 D_5, D_6 和 D'_5, D'_6 (图 4(a)). 与远离费米能的电导谷

一样,这些电导谷也是由石墨片本征态对应的准束缚态引起. 但是,由于本征态对应的能级很靠近费米能,本征态将受到纳米带边缘态的影响,因此它所导致的电导谷相对于本征能级发生了偏离. 从图 4 可以看到,在两种堆叠方式下,电导谷的偏离程度不相同. 这说明在费米能附近的电子输运受到堆叠方式的影响,而且这种影响在更靠近费米能的能量范围内更加明显. 在 $|E| \leq 0.05$ eV 范围内, α 堆叠

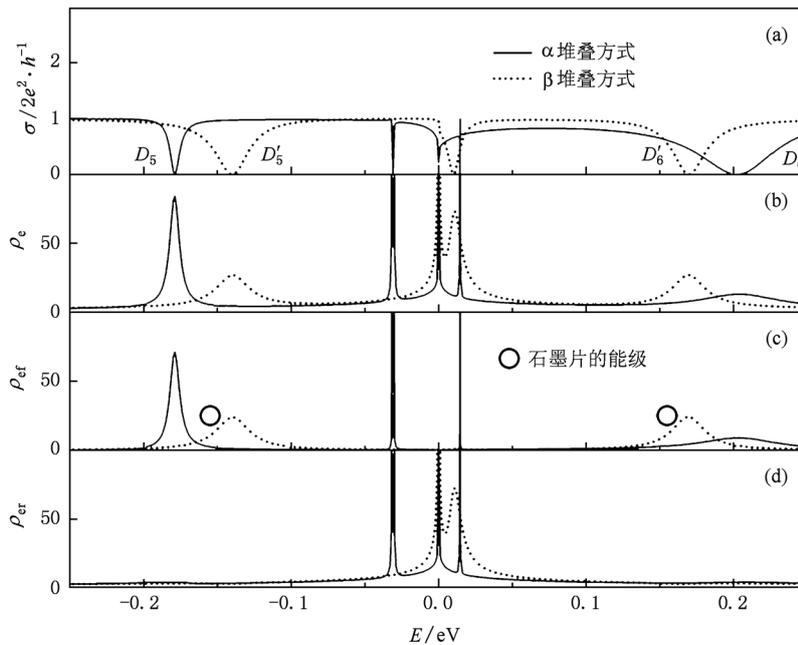


图 4 堆叠石墨片锯齿型石墨纳米带在 $|E| \leq 0.25$ eV 范围内的电导谱、态密度和分态密度 (a) 电导谱, (b) 态密度, (c) 石墨片的分态密度, (d) 石墨纳米带的分态密度

方式下的电导谱出现了三个电导谷,其中处在费米能外的两个电导谷是由局域在石墨片和石墨纳米带的准束缚态共同引起的;而在 β 堆叠方式下,电导谱在 $|E| \leq 0.05$ eV内只出现了一个电导谷,这个电导谷是由局域在石墨纳米带上的准束缚态引起的.另外,两种堆叠方式下费米能处的电子输运存在显著的差别.虽然在费米能处两种堆叠方式的态密度图都对应一个来源于锯齿型石墨纳米带边缘态的态密度峰,但是 α 堆叠方式的电导谱出现了电导谷,而 β 堆叠方式的电导谱没有出现电导谷.图5(a)和(b)给出了 α 和 β 两种堆叠方式下石墨纳米带在费米能处的局域态密度,图5(c)给出了没有堆叠石墨片的石墨纳米带在费米能处的局域态密度.从图5可知, α 堆叠方式下的电导谱在费米能处出现电导谷是因为石墨纳米带边缘态被完全破坏,而 β 堆叠方式下的电导谱在费米能处没有电导谷出现是因为石墨纳米带上边界的边缘态没有被完全破坏.由此可见, α 和 β 两种堆叠方式下的费米能附近电导谷是石墨纳米带边缘态和石墨片相互作用产生的,而这种相互作用在 α 堆叠方式下比在 β 堆叠方式下更强.

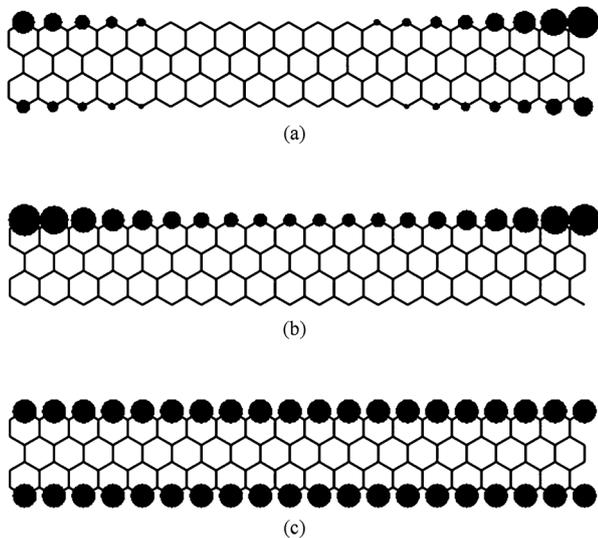


图5 不同情况下的锯齿型石墨纳米带在费米能处的局域态密度 (a) α 堆叠方式,(b) β 堆叠方式,(c)没有堆叠石墨片

图6(a)给出了堆叠不同长度(L_z)石墨片的锯齿型石墨纳米带的电导谱.从图6的电导谱可以看出,两种堆叠方式下远离费米能处的电导谷随 L_z 的增大明显向费米能移动.由图2的分析可知,远离费米能的电导谷源于石墨片,它们的位置与石墨片的本征能级相对应.因此,为了分析远离费米能的电

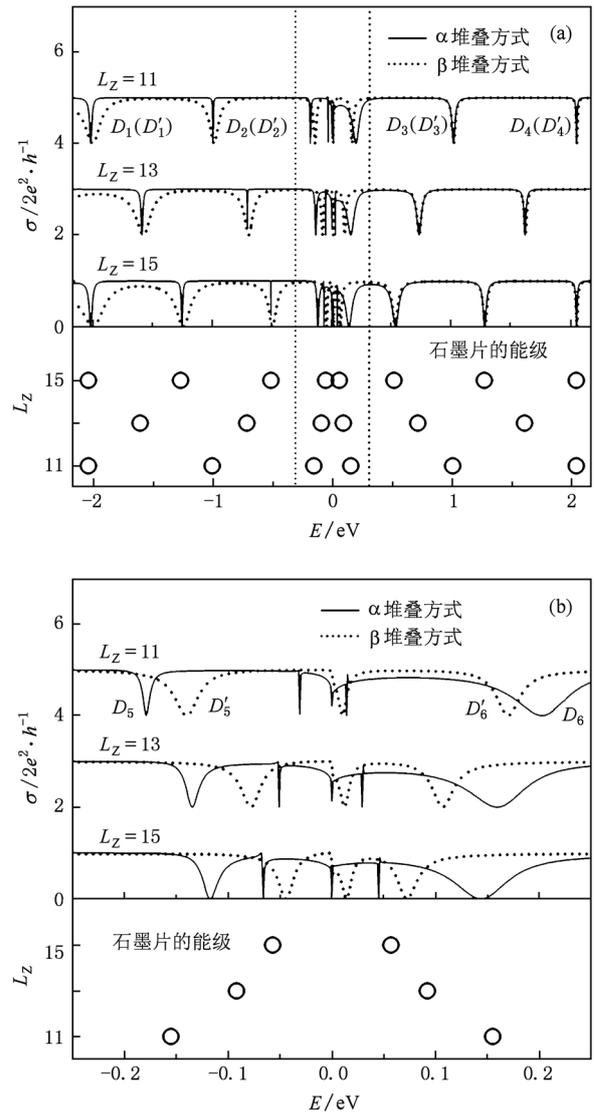


图6 堆叠不同长度石墨片的锯齿型石墨纳米带的电导谱和不同长度石墨片的本征能级 为了便于观察,将堆叠不同长度石墨片的石墨纳米带的电导谱进行了平移.(a) $|E| \leq 2.2$ eV,(b) $|E| \leq 0.25$ eV

导谷的变化原因,我们计算了不同长度石墨片的本征能级,结果如图6(a)所示.由此可知,两种堆叠方式下远离费米能处的电导谷随 L_z 的增大向费米能移动是因为它们对应的石墨片本征能级随 L_z 的增大向费米能靠近.而对于两种堆叠方式下费米能附近的电导谷,在图6(a)中不能清晰地看到它们随 L_z 的变化趋势,我们在图6(b)中给出了两种堆叠方式下堆叠不同长度石墨片的锯齿型石墨纳米带在费米能附近的电导谱,同时还给出了不同长度石墨片在费米能附近的能级.由于石墨片对石墨纳米带的影响在 β 堆叠方式下小于在 α 堆叠方式下的影响.

因此,在 β 堆叠方式下,随着 L_z 的增大,电导谷 D'_5 和 D'_6 偏离石墨片的本征能级的程度较小,与本征能级一起向费米能移动,另外比电导谷 D'_5 和 D'_6 更靠近费米能的电导谷的位置随 L_z 的变化也不明显.在 α 堆叠方式下,随着 L_z 的增大,电导谷 D_5 和 D_6 与石墨片本征能级的偏离程度增加而不再一一对应,而比电导谷 D_5 和 D_6 更靠近费米能的电导谷随 L_z 的增大向偏离费米能的方向移动.这表明在两种堆叠方式下,锯齿型石墨纳米带在费米能附近的电子输运差异会随着 L_z 的增大而增大.

图7(a)给出了不同宽度的锯齿型石墨纳米带在堆叠石墨片情况下的电导谱,同时还给出了不同

宽度石墨片的本征能级.对于两种堆叠方式下远离费米能处的电导谷,由于石墨片的本征能级随其宽度的增大向费米能移动,因此与增大石墨片的长度对远离费米能电导谷的影响类似,两种堆叠方式下远离费米能的电导谷随石墨片宽度的增大向费米能靠近,如图7(a)所示.而对于两种堆叠方式下费米能附近的电导谷,它们位置的差异随石墨片宽度的增大也逐渐增大,如图7(b)所示.在 W_z 为6和8时, α 堆叠方式下的电导谷 D_5 和 D_6 偏离石墨片的本征能级的程度较大,同时其他费米能附近的电导谷会出现在离费米能更远的能量值上,因此 α 堆叠方式下在费米能附近的电导谷主要出现在离费米能稍远的位置,而 β 堆叠方式下的电导谷 D'_5 和 D'_6 及其他费米能附近的电导谷则比较靠近费米能.但是,我们可以看到电导谷 D'_5 和 D'_6 的位置也不再与本征能级对应,同时 β 堆叠方式下费米能附近的电导谷数量增多了.由此可预见,在 α 和 β 两种堆叠方式下,随着石墨片几何尺寸的增大,堆叠石墨片锯齿型石墨纳米带在费米能附近的电子输运情况将会更复杂.

4. 结 论

本文利用格林函数方法研究了堆叠石墨片对锯齿型石墨纳米带电子输运的影响.计算了堆叠石墨片锯齿型石墨纳米带在两种堆叠方式下的电导,结果显示两种堆叠方式下的电导谱都产生了电导谷.在远离费米能处,两种堆叠方式下的电导谷位置相接近甚至重合,而在费米能附近,两种堆叠方式下的电导谷位置存在差异.通过计算体系的态密度、分态密度以及局域态密度发现,两种堆叠方式下远离费米能的电导谷位置相接近甚至重合是由于这些电导谷源于石墨片与堆叠方式无关,而两种堆叠方式下费米能附近的电导谷位置不同是因为该范围内的电导谷源于石墨纳米带边缘态与石墨片的相互作用,这种相互作用取决于堆叠方式.此外,还讨论了在两种堆叠方式下石墨片的几何尺寸对锯齿型石墨纳米带电子输运的影响.结果发现,随着石墨片尺寸的增大,两种堆叠方式下远离费米能的电导谷逐渐向费米能方向移动,同时两种堆叠方式下费米能附近的电导谷的差异随石墨片尺寸的增大变得更加明显.

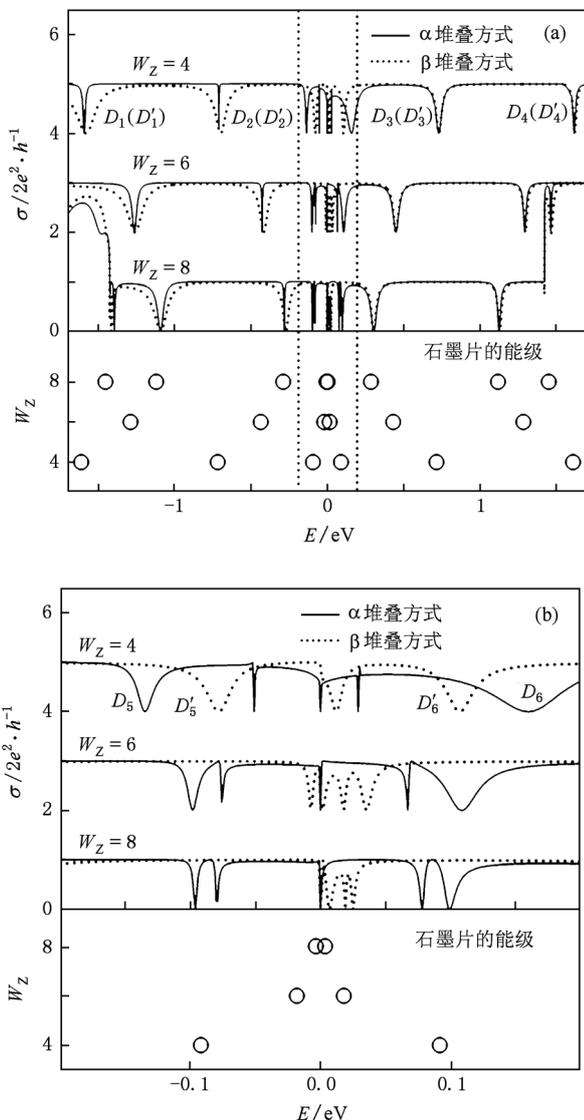


图7 不同宽度的锯齿型石墨纳米带在堆叠石墨片情况下的电导谱和不同宽度石墨片的本征能级 为了便于观察,将不同宽度的石墨纳米带在堆叠石墨片后的电导谱进行了平移.(a) $|E| \leq 1.8 \text{ eV}$, (b) $|E| \leq 0.2 \text{ eV}$

- [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] Berger C, Song Z M, Li X B, Wu X S, Brown N, Naud C, Mayou D, Li T B, Hass J, Marchenkov A N, Conrad E H, Firsov P N, de Heer W A 2006 *Science* **312** 1191
- [3] Li X L, Wang X R, Zhang L, Lee S, Dai H J 2008 *Science* **319** 1229
- [4] Bai J W, Duan X F, Huang Y 2009 *Nano Lett.* **9** 2083
- [5] Wang X R, Dai H J 2010 *Nat. Chem.* **2** 661
- [6] Reina A, Jia X T, Ho J, Nezich D, Son H, Bulovic V, Dresselhaus M S, Kong J 2009 *Nano Lett.* **9** 30
- [7] Liu S P, Zhou F, Jin A Z, Yang H F, Ma Y J, Li H, Gu C Z, Lü L, Jiang B, Zheng Q S, Wang S, Peng L M 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4251 (in Chinese) [刘首鹏、周锋、金爱子、杨海方、马拥军、李辉、顾长志、吕力、姜博、郑泉水、王胜、彭练矛 2005 物理学报 **54** 4251]
- [8] 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
- [9] Wakabayashi K, Fujita M, Ajiki H, Sigrist M 1999 *Phys. Rev. B* **59** 8271
- [10] Sahu B, Min H, MacDonald A H, Banerjee S K 2008 *Phys. Rev. B* **78** 045404
- [11] Ouyang T, Chen Y P, Xie Y E, Yang K K, Zhong J X 2010 *Solid State Commun.* **150** 2366
- [12] Yang K K, Chen Y P, Xie Y E, Ouyang T, Zhong J X 2010 *Europhys. Lett.* **91** 46006
- [13] Hu H, Cai J M, Zhang C D, Gao M, Pan Y, Du S X, Sun Q F, Niu Q, Xie X C, Gao H J 2010 *Chin. Phys. B* **19** 037202
- [14] Nakada K, Fujita M 1996 *Phys. Rev. B* **54** 17954
- [15] Ezawa M 2006 *Phys. Rev. B* **73** 045432
- [16] Zhang X W, Yang G W 2009 *J. Phys. Chem. C* **113** 4662
- [17] Zhou B H, Duan Z G, Zhou B L, Zhou G H 2010 *Chin. Phys. B* **19** 037204
- [18] Ouyang F P, Xu H, Wei C 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1073 (in Chinese) [欧阳方平、徐惠、魏辰 2008 物理学报 **57** 1073]
- [19] Hu H X, Zhang Z H, Liu X H, Qiu M, Ding K H 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7156 (in Chinese) [胡海鑫、张振华、刘新海、邱明、丁开和 2009 物理学报 **58** 7156]
- [20] Jiang D, Sumpter B G, Dai S 2007 *J. Chem. Phys.* **127** 124703
- [21] Wang W L, Meng S, Kaxiras E 2008 *Nano Lett.* **8** 241
- [22] Hod O, Peralta J E, Scuseria G E 2007 *Phys. Rev. B* **76** 233401
- [23] Hod O, Barone V, Scuseria G E 2008 *Phys. Rev. B* **77** 035411
- [24] Kuc A, Heine T 2010 *Phys. Rev. B* **81** 085430
- [25] Chen Y P, Xie Y E, Wei X L, Sun L Z, Zhong J X 2010 *Solid State Commun.* **150** 675
- [26] Pan H Z, Xu M, Chen L, Sun Y Y, Wang Y L 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 6443 (in Chinese) [潘洪哲、徐明、陈丽、孙媛媛、王永龙 2010 物理学报 **59** 6443]
- [27] Nilsson J, Neto A H C, Guinea F, Peres N M R 2007 *Phys. Rev. B* **76** 165416
- [28] González J W, Santos H, Pacheco M, Chico L, Brey L 2010 *Phys. Rev. B* **81** 195406
- [29] Chen Y P, Xie Y E, Yan X H 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 063711
- [30] Reich S, Maultzsch J, Thomsen C 2002 *Phys. Rev. B* **66** 035412
- [31] Malard L M, Nilsson J, Elias D C, Brant J C, Plentz F, Alves E S, Neto A H C, Pimenta M A 2007 *Phys. Rev. B* **76** 201401
- [32] Datta S 1997 *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge: Cambridge University Press) p132
- [33] Jódar E, Pérez-Garrido A, Díaz-Sánchez A 2006 *Phys. Rev. B* **73** 205403
- [34] Sols F, Macucci M, Ravaioli U, Hess K 1989 *J. Appl. Phys.* **66** 3892

The effect of stacked graphene flakes on the electronic transport of zigzag-edged graphene nanoribbons*

Zhang Mi Chen Yuan-Ping[†] Zhang Zai-Lan Ouyang Tao Zhong Jian-Xin

(Institute for Quantum Engineering and Micro-Nano Energy Technology, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China)

(Received 17 February 2011; revised manuscript received 20 May 2011)

Abstract

The effect of stacked graphene flakes (GFs) on the electronic transport property of zigzag-edged graphene nanoribbon (ZGNR) is investigated. By using the Green's function method, we calculate the conductances of ZGNRs with two different stacked-type GFs. It is found that the coupling effect between ZGNRs and GFs can induce dips at the conductance profiles in two different stacked-types. For both stacked-types, the dips far away from the Fermi level are nearly overlapped. However, the position of conductance dip near the Fermi level depends on the stacked-type. In addition, we discuss the effect of geometric size of GF on the electronic transport property. The results show that with the increase of the size of GF, the dips far away the Fermi level in two stacked-types gradually move toward the Fermi level, while the discrepancy of the dips near the Fermi level is much evident. Our results indicate that the stacked GFs can effectively tune the electronic transport of ZGNR.

Keywords: zigzag-edged graphene nanoribbon, graphene flakes, electronic transport, Green's function

PACS: 72.80.Vp, 73.23.-b, 72.10.Bg

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51006086, 11074213, 10774127) and the Cultivation Foundation of the Key Program of Science and Technology Innovation of Ministry of Education, China (Grant No. 708068).

[†] Corresponding author. E-mail: chenyp@xtu.edu.cn