

锯齿型石墨纳米带叠层复合结的电子输运*

胡飞¹⁾ 段玲¹⁾ 丁建文^{1)2)†}

1) (湘潭大学物理系, 纳米物理与稀土发光研究所, 湘潭 411105)

2) (湘潭大学低维材料及其应用技术教育部重点实验室, 湘潭 411105)

(2011年5月26日收到; 2011年7月28日收到修改稿)

基于紧束缚格林函数方法, 研究了两半无限长锯齿型石墨纳米带叠层复合结的电子输运性质. 结果表明, 层间次近邻相互作用、叠层区长度及门电压对复合结的电子透射谱有重要调制作用. 层间次近邻相互作用导致复合结的透射谱关于费米能呈现非对称性, 与实验结果很好相符. 低于费米能第一子能区内周期性出现透射系数为 0 和 1 的台阶, 呈现全反射与透射现象. 随散射结长度增加, 透射系数在 1 内周期性振荡, 呈现明显的量子干涉效应. 在门电压调控下, 低于费米能的透射系数出现了从 1 到 0 的转变, 类似于开关效应. 相关结果对基于石墨烯器件的设计与应用有指导意义.

关键词: 石墨纳米带, 复合结, 门电压, 电子输运

PACS: 72.80.Vp, 73.40.-c

1 引言

2004年 Geim 等人在实验上发现石墨烯^[1], 这是人工制备的二维单层碳原子晶体. 由于其特殊的蜂窝状六角晶格结构, 石墨烯具有很多奇异的物理性质^[2]. 石墨烯中的电子具有很高的电子迁移率^[3], 它能够承载很高的电流密度^[4]. 由于其良好的机械性能、弹道输运性质, 以及很高的热导率^[5], 可作为良好的电极材料^[6]与连接线^[7]. 当两层石墨烯堆叠在一起时能形成双层石墨烯, 通过电场可调节其带隙^[8]从而实现场效应晶体管^[9]. 并且, 其特殊的电子结构及双层构型还能够抑制电噪声^[10]及无序的影响^[11]. 因此, 石墨烯的众多优异性质使基于碳材料的微纳电路成为可能^[12], 成为大家关注的热点.

在相关研究中, 人们主要集中于理想的单层或多层石墨烯. 实际上, 通过微机械剥离法及外延生长制备的石墨烯, 一般为复合多层结构^[1,13]. 一种最简单的情况是单层石墨烯的重叠, 这可能形成一些特殊的异质结^[14,15]. 研究其电子输运性质是一个非常有趣的课题, 对实现石墨烯电路集成与应用

有重要帮助. 最近, 实验上研究了单双层石墨烯在电磁场下的电子输运性质^[14], 发现在界面两侧的费米能不同, 磁场下出现反常的量子振荡行为. 在理论上, 对单双层石墨烯复合结构的电子结构及界面间电子输运性质的研究也有相关报道^[15-18], 结果表明石墨烯界面附近存在局域的朗道能级, 经过界面可产生谷间极化电流. 为简化模型得到解析结果, 在上述相关工作中仅考虑了双层石墨烯层间最近邻原子间相互作用. 基于紧束缚模型的理论计算结果表明, 其电子结构关于费米能是对称的^[19,20]. 不过, 实验上发现双层石墨烯电子结构的电子空穴是非对称^[21]的, 与理论计算结果并不相符. 此外, 相关理论研究表明, 层间次近邻相互作用对双层石墨烯的光性质^[22]及石墨纳米带的边缘态^[23,24]有重要影响. 因此, 在研究石墨烯多层复合结构的电子输运性质时, 需要进一步考虑层间次近邻原子间相互作用的影响.

基于实验上石墨烯是多层复合结构及石墨烯微纳电路应用, 我们提出石墨烯叠层复合结模型装置, 采用紧束缚格林函数方法, 研究了其电子输运性质. 结果表明, 层间次近邻相互作用导致复合结

* 国家自然科学基金(批准号: 10674113 和 11074212) 和全国优秀博士学位论文作者专项基金(批准号: 200726) 资助的课题.

† E-mail: jwding@xtu.edu.cn

的电子透射谱关于费米能是非对称的. 由于叠层区双通道中波函数的量子干涉作用, 透射系数随叠层区长度变化出现振荡现象. 在门电压调控下, 低于费米能的透射系数出现了由全透射到全反射的转变, 显示出很好的开关效应. 相关结果对于石墨烯分子器件的设计与实际应用有指导意义.

2 模型与方法

我们研究的叠层复合结模型装置如图 1(a) 所示, 两段等宽的半无限长锯齿型石墨烯纳米带通过 AB 堆集方式连接在一起. 在单 π 轨道紧束缚近似下, 所有锯齿型石墨烯纳米带都表现为金属性^[25]. 因而两端的石墨烯纳米带可看作理想导线, 中间叠层部分的双层石墨烯纳米带为散射区. 锯齿型石墨烯纳米带宽度以横向上一列碳原子数 W 表示. 叠层散射区长度以纵向上双层石墨烯纳米带的单胞数 L 表示, 这样一个单胞包括上、下层各两列相邻碳原子, 其单胞长度 $L_0 = 2.46 \text{ \AA}$, 每个单胞所含原子数为 $4W$.

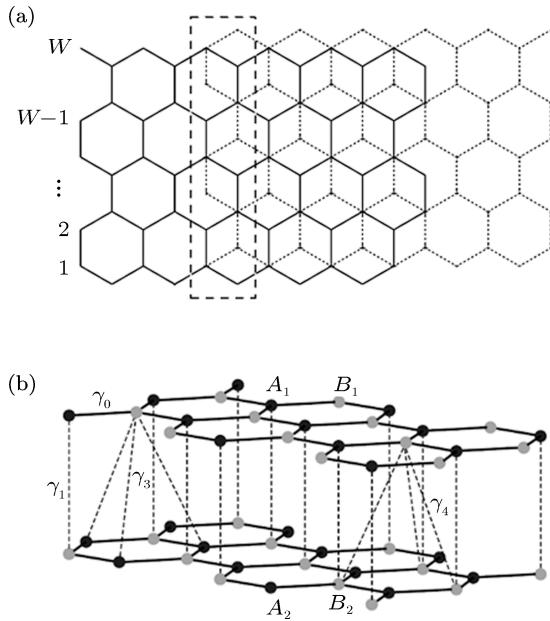


图 1 (a) 锯齿型石墨烯纳米带叠层复合结模型 (其 $W = 5$, $L = 4$, 实线表示上层左半无限长石墨烯纳米带, 点线表示下层右半无限长石墨烯纳米带, 虚线方框中为双层区一个单胞, 含有 $4W$ 个原子); (b) 双层石墨烯原子间相互作用示意图 (A 与 B 分别表示单层石墨烯的两种点阵, 1 与 2 分别表示双层石墨烯的上层与下层)

在我们的计算中, 层内考虑最近邻原子间相互作用, 层间考虑最近邻及次近邻相互作用. 基于实验上由红外光谱拟合得到的 Slonczewski-Weiss-McClure 模型紧束缚参数^[26], 原子间相互作用与

它们的距离和位置有关, 如图 1(b) 所示. 理想的单层石墨烯由交错的 A 与 B 两种等价的三角点阵构成. 当两单层石墨烯以 AB 堆集的方式形成双层石墨烯时, 上层 A_1 原子的下方总是下层的 B_2 原子, 而 A_2 及 B_1 位于另一层六角环中心对应的位置. 由于层间相互作用, 层内 A 与 B 点阵原子不再等价. 层间最近邻 A_1-B_2 原子间距离 3.35 \AA , 相互作用 $\gamma_1 = 0.381 \text{ eV}$. 层间次近邻如 A_2-B_1 原子间距离为 3.64 \AA , 相互作用为 $\gamma_3 = 0.38 \text{ eV}$; 而 A_1-A_2 及 B_1-B_2 间相互作用为 $\gamma_4 = 0.14 \text{ eV}$. 层内最近邻如 A_1-B_1 , A_2-B_2 原子间距离为 1.42 \AA , 相互作用 $\gamma_0 = 3.16 \text{ eV}$. 各原子的格点能设定为与费米能相同. 在实际应用时, 电极两端通常加有偏压, 或者在复合结构双层区的上、下层可能加有门电压^[8]或掺杂电荷杂质^[27], 此时散射区上、下层原子的格点能将发生变化. 为研究门电压的影响, 双层区上、下层原子格点能分别简单取为 $V/2$ 和 $-V/2$, V 为所加门电压大小.

系统整体的哈密顿量表示为

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

其中 H_C, H_L, H_R 分别表示中间散射区部分及左、右半无限长导线部分的哈密顿量. V_{LC}, V_{RC} 为左、右导线部分与中间散射区的耦合矩阵. 基于格林函数方法^[28,29], 可方便研究石墨烯叠层复合结的电子输运性质. 散射区的格林函数可表示为

$$g_C = (E - H_C - \Sigma_L - \Sigma_R)^{-1}, \quad (2)$$

其中 $\Sigma_{L(R)} = V_{CL(R)}g_{L(R)}V_{L(R)C}$, 是由左(右)半无限长导线引起的自能, 表示导线对中间散射区的影响. $g_{L(R)} = (E - H_{L(R)})^{-1}$ 是左(右)导线的格林函数. 在线性响应范围内及零温近似下, 通过 Landauer-Büttiker 公式^[30], 可得到整个体系的透射系数

$$T(E) = \frac{2e^2}{h} \text{Tr}[\Gamma_L g_C \Gamma_R g_C +], \quad (3)$$

其中 $\Gamma_{L(R)} = i[\Sigma_{L(R)} - \Sigma_{L(R)}^+]$ 代表左(右)导线与散射区耦合作用的线宽函数.

3 结果与讨论

作为一般例子, 我们在图 2(a) 中示出了宽度 $W = 7$, 长度 $L = 49$ 的复合结透射系数随能量变化情况. 为便于比较, 同时给出了 $W = 7$ 时完美单层锯齿型石墨烯纳米带的透射系数. 显然, 完美

单层石墨纳米带的透射系数呈理想的量子化台阶, 与以前的理论一致^[31,32]. 对于叠层复合结, 在不考虑层间次近邻相互作用的情况下, 由于结散射作用, 复合结的透射系数比完美单层石墨纳米带的低, 随能量 E 变化出现振荡现象, 并在费米能附近出现很宽的谷, 透射系数关于费米能是对称的. 进一步考虑层间次近邻相互作用, 透射系数有明显增加, 在低于费米能的第一子能区内, 透射系数仍保持量子化台阶, 类似完美单层石墨纳米带的情况. 这表明, 尽管存在结散射, 电子仍然可能完全透射, 揭示其在微纳电子技术中可能具有潜在的应用. 特别是, 在高于费米能区域, 透射系数呈现快振荡行为, 叠加在慢振荡的背景上. 显然, 透射系数随费米能变化呈现非对称行为. 由于层间次近邻相互作用导致双层石墨纳米带的电子空穴带的非对称性, 因而透射谱关于费米能也呈现非对称性变化, 这与实验观测的结果对应一致^[21,33]. 因此, 复合结的层间次近邻相互作用对其电子输运性质有重要影响, 不应该被忽略. 在没有特别说明时, 后文中所示结果都考虑了层间次近邻相互作用.

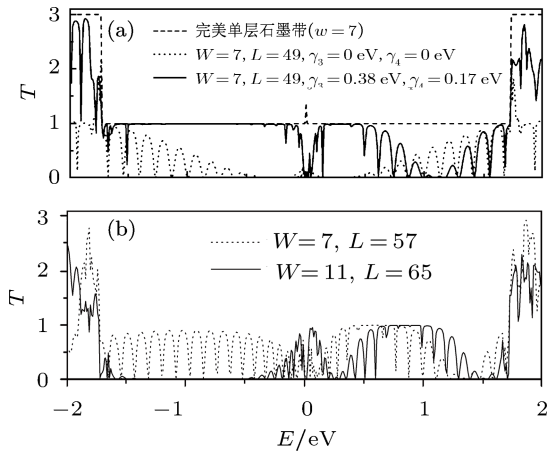


图2 叠层复合结的透射系数随电子入射能量变化关系 (a) $W = 7, L = 49$ 的复合结在考虑与不考虑层间次近邻相互作用的透射系数以及 $W = 7$ 完美单层石墨纳米带的透射系数; (b) 宽度 $W = 7$, 不同长度 $L = 57, 65$ 下复合结透射系数

在图 2(b) 中进一步给出了石墨纳米带叠层复合结在宽度 $W = 7$, 不同长度下透射系数随能量变化的情况. 当长度 $L = 57$ 时, 低于费米能部分的透射系数低于 1, 呈现强烈的振荡行为, 在不同能量处出现了大小为 0 的谷. 如两平行碳纳米管间的电子透射谱, 这些谷是由于双层区的准局域态使电子发生共振背散射而造成的^[34-36]. 当 $L = 65$ 时, 低于费米能第一子能区内的透射系数几乎为 0, 其宽度约 1.3 eV, 远大于实验上双层石墨烯通过电场调控

得到的带隙^[15] (约 0.25 eV). 说明两金属性石墨纳米带通过改变叠层区长度可形成较宽的运输带隙, 电子在该区域几乎完全反射. 这进一步揭示石墨烯复合结构在未来的纳米电子学中可能具有潜在的应用价值.

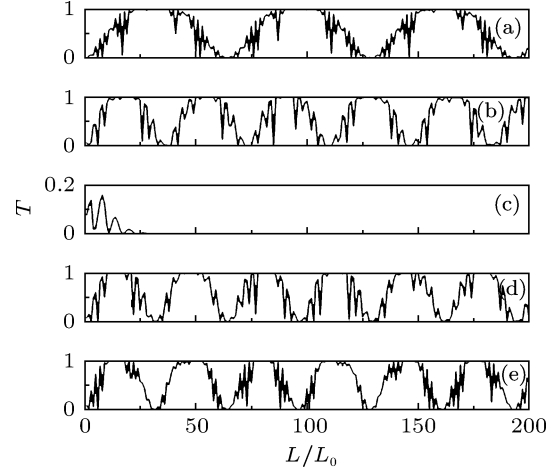


图3 不同入射能量下宽度 $W = 7$ 的叠层复合结透射系数随散射区长度的变化关系 (a) $E = 1.5$ eV; (b) $E = 0.5$ eV; (c) $E = 0$; (d) $E = -0.5$ eV; (e) $E = -1.5$ eV

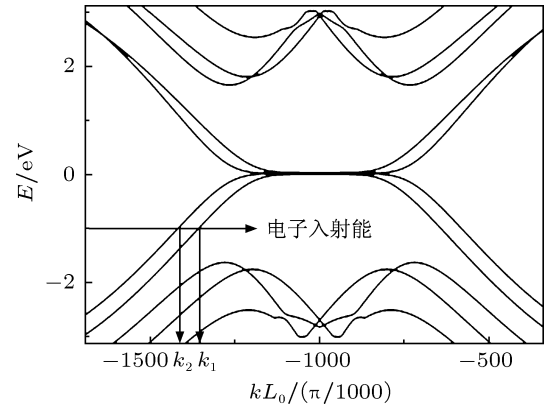


图4 宽度 $W = 7$ 的完美双层锯齿型石墨纳米带低能区的能级结构图

为探索复合结体系的导电机理, 我们进一步研究了透射系数随散射区长度的变化. 图 3 示出了不同电子入射能量下宽度 $W = 7$ 的复合结透射系数随长度的变化. 考虑的散射区长度达到了 200 个单胞, 其实际长度约为 50 nm, 与实验上测量样品的长度相当^[37]. 考虑电子空穴带的非对称性, 电子入射能量分别取为 $E = 1.5$ eV, 0.5 eV, 0, -0.5 eV 及 -1.5 eV. 显然, 由于复合结两端界面的散射, 随散射区长度增加, 远离费米能电子的透射系数在 0 与 1 之间周期性振荡, 呈现明显的量子干涉现象. 费米能处电子的透射系数在散射区长度较小时呈现振荡现象, 并随长度的增加而减小. 当散射区

长度超过 30 个单胞时, 费米能处的透射系数几乎为 0. 当电子入射能量 $E = 1.5 \text{ eV}$, 0.5 eV 时, 透射系数振荡的周期 $\frac{\Delta L}{L_0}$ 分别为 64.5, 37, 并且在高于费米能区域其振荡周期随能量增加而增加. 而当电子入射能量为 $E = -0.5 \text{ eV}$, -1.5 eV 时, 透射系数振荡周期均为 32.2, 且低于费米能区域内的透射系数振荡周期几乎不随能量变化. 这些特征与散射区双层石墨纳米带特殊的能带结构有关系.

基于紧束缚哈密顿量, 我们计算得到了完美双层石墨纳米带的能带结构, 如图 4 所示. 在我们的结果中, 层间次近邻相互作用导致费米能级处原相交的能带分离, 产生了一个约 0.0314 eV 的微小带隙. 对于费米能处入射的电子, 当双层的散射区长度较小时, 费米能与散射区量子化能级匹配, 电子发生类似共振透射的现象. 而当散射区长度较大时, 其能级结构与完美双层石墨带的情况接近, 结果费米能 ($E = 0$) 处于电导隙中, 其透射系数急剧减小, 并趋近为 0. 同时双层石墨纳米带的能带与碳纳米管相似, 在费米能附近有两个通道. 在我们所考虑的复合结模型中, 单层石墨纳米带在低能区是单通道的, 由其传播来的一系列电子波经界面散射进入双层区的两个通道模式中传播. 这两通道中传播的两列波具有不同的波矢, 分别由 k_1 与 k_2 表示. 类似于碳纳米管的情形^[34], 两通道内波的干涉叠加会导致透射系数的振荡现象. 由于在低能区的导线中只开启了一个通道, 所以整个体系的透射系数最大值仍为 1. 两波叠加发生反共振所应满足的相位条件^[34]为

$$(k_1 - k_2)L = (2m + 1)\pi, (m \text{ 为任意整数}). \quad (4)$$

因此透射系数随长度的振荡周期

$$\frac{\Delta L}{L_0} = \frac{2\pi}{(k_1 - k_2)L_0}, \quad (5)$$

即透射系数振荡周期与两波矢之差成反比. 从图 4 中完美双层石墨纳米带的能带结构可知, 高于费米能第一子能区内的两条能带近似为两直线, 相交点在高能区, 因此第一子能区内两波矢之差 $\Delta k = k_1 - k_2$ 随着能量的增加而减小, 透射系数振荡周期随能量的增加而增加. 当电子入射能量为 $E = 1.5 \text{ eV}$ 和 0.5 eV 时, 由完美双层石墨纳米带能带结构得到的周期 $\frac{\Delta L}{L_0}$ 分别为 64.5 与 36.8, 与前述的振荡周期基本一致. 费米能以下第一子能区内的两条能带几乎是平行的, 不同能量下的两波矢差几乎不变, 因此透射系数周期不随能量变化. 当

电子入射能量是 $E = -1.5 \text{ eV}$ 时, 由上式得到的振荡周期 $\frac{\Delta L}{L_0}$ 是 32.3, 同样与前面的结果一致. 同时, 透射系数随长度变化的最小值与最大值分别为 0 与 1. 这不仅表明在低于费米能部分的透射系数振荡周期相同, 也表明图 2 中的量子化台阶是周期性出现的. 因此, 通过改变交叠的双层区长度能有效控制石墨纳米带叠层复合结的电子输运性质. 此外, 我们也计算了不同宽度下透射系数随长度变化的情况, 发现透射系数周期振荡的特征及其量子化台阶现象相似. 不过, 在相同能量下, 石墨纳米带越宽, 振荡周期越大. 这是因为不同宽度的双层石墨纳米带能级结构与图 4 相似, 但低能区双通道中两波矢之差随宽度增加而减小, 导致透射系数随长度变化振荡的周期也增加.

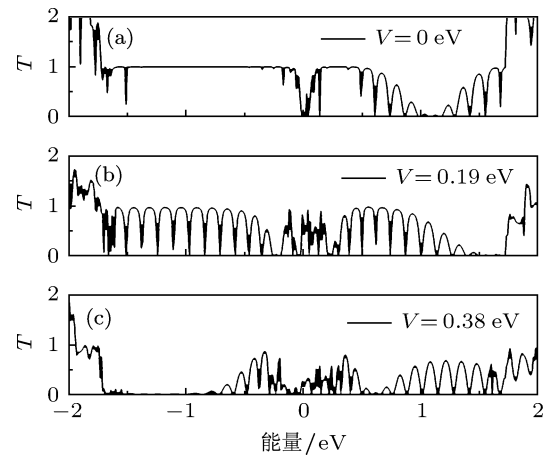


图 5 宽度 $W = 7$, 长度 $L = 49$ 的叠层复合结透射系数随上下层间门电压大小变化关系 (a) $V = 0$; (b) $V = 0.19 \text{ eV}$; (c) $V = 0.38 \text{ eV}$

双层石墨烯的电子结构及带隙可通过上下门电压^[8]或电荷掺杂^[27]所产生的电场来调节. 因此, 我们进一步考虑了散射区双层石墨纳米带在不同门电压调制下的电子输运性质. 图 5 是石墨纳米带宽度 $W = 7$, 散射区长度 $L = 49$ 时, 复合结的透射系数随门电压的变化情况. 当 $V = 0$ 时, 在低于费米能部分, 出现透射系数为 1 的量子化台阶. 随着门电压增加, 当 $V = 0.19 \text{ eV}$ 时, 低于费米能部分的透射系数小于 1, 并且出现很多大小为 0 的谷, 这是由于入射电子发生共振背散射而造成的. 当 $V = 0.38 \text{ eV}$ 时, 低于费米能区域的透射系数为 0, 说明从这个能量区域入射的电子将完全反射. 此外, 我们也计算了不同门电压下完美双层石墨纳米带的能带结构, 其带结构与图 4 相似, 低于费米能部分低能区的两条能带几乎是平行的. 我们发现随着门电压 V 增加, 此能量范围内两通

道中的波矢之差也增加, 因此改变了两列波干涉叠加的相位. 例如当电子入射能量 $E = -1.0 \text{ eV}$, $V = 0$ 时, $L_0 \Delta k = 0.0607\pi$; 而当 $V = 0.38 \text{ eV}$ 时, $L_0 k' = 0.0811\pi$. 在双层区长度 $L = 49$ 的情况下, 这两种门电压下波函数叠加相位的改变量为 $(\Delta k' - \Delta k) \times L_0 \times 49 \approx \pi$. 因此门电压增大使两波矢差增加, 在散射区长度不变的情况下, 双通道中电子波函数的干涉逐渐由完全相长转变为完全相消的状态, 导致低于费米能部分的透射系数由大小为 1 的台阶转变为 0 的台阶. 因此, 随门电压的增加, 低于费米能部分的电子由透射系数为 1 的导通状态转变为 0 的截止状态. 呈现出开关效应. 结果表明通过双层区上下门电压可调节石墨烯叠层复合结的导电状态.

4 结论

利用紧束缚格林函数方法, 研究了锯齿型石墨

纳米带叠层复合结的电子运输性质. 考虑了层间次近邻原子间相互作用、叠层区长度及门电压对其电子透射谱的影响. 发现在有层间次近邻相互作用的情况下, 复合结的透射系数关于费米能是非对称的, 与没有考虑层间次近邻相互作用的情况相比较, 透射系数有明显的提高. 由于双层石墨纳米带在低能区有两个通道, 随着散射区长度增加, 双通道中的电子波函数发生量子干涉效应, 导致透射系数在 1 内周期性振荡. 同时由于双层石墨纳米带特殊的能带结构, 低于费米能部分周期性的出现大小为 0 和 1 的量子化台阶, 并获得了较宽的输运带隙 ($T = 0$). 在交叠的双层区上下层加门电压的情况下, 随门电压增加, 由于两波叠加相位的改变, 大小为 1 的透射系数台阶转变为大小为 0 的台阶, 具有开关效应. 相关结果对石墨烯器件的设计与应用有指导作用, 所预期的性能在未来的石墨烯微纳电子器件中可能具有潜在的应用.

- [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] Castro Neto A H, Guinea F, Peres N M R, Novoselov K S, Geim A K 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 109
- [3] Chen J H, Jang C, Xiao S, Ishigami M, Fuhrer M S 2008 *Nat. Nano* **3** 206
- [4] Moser J, Barreiro A, Bachtold A 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 163513
- [5] Balandin A A, Ghosh S, Bao W, Calizo I, Teweldebrhan D, Miao F, Lau C N 2008 *Nano Lett.* **8** 902
- [6] Kim K S, Zhao Y, Jang H, Lee S Y, Kim J M, Kim K S, Ahn J-H, Kim P, Choi J-Y, Hong B H 2009 *Nature* **457** 706
- [7] Murali R, Brenner K, Yang Y, Beck T, Meindl J 2009 *IEEE Electron Dev. Lett.* **30** 611
- [8] Oostinga J B, Heersche H B, Liu X, Morpurgo A F, Vandersypen L M K 2008 *Nat. Mater.* **7** 151
- [9] Schwierz F 2010 *Nat. Nano* **5** 487
- [10] Lin Y M, Avouris P 2008 *Nano Lett.* **8** 2119
- [11] Xu H, Heinzl T, Zozoulenko I V 2009 *Phys. Rev. B* **80** 045308
- [12] Areshkin D A, White C T 2007 *Nano Lett.* **7** 3253
- [13] Rotenberg E, Bostwick A, Ohta T, McChesney J L, Seyller T, Horn K 2008 *Nat. Mater.* **7** 258
- [14] Puls C P, Staley N E, Liu Y 2009 *Phys. Rev. B* **79** 235415
- [15] Nilsson J, Castro Neto A H, Guinea F, Peres N M R 2007 *Phys. Rev. B* **76** 165416
- [16] Nakanishi T, Koshino M, Ando T 2010 *Phys. Rev. B* **82** 125428
- [17] Koshino M, Nakanishi T, Ando T 2010 *Phys. Rev. B* **82** 205436
- [18] González J W, Santos H, Pacheco M, Chico L, Brey L 2010 *Phys. Rev. B* **81** 195406
- [19] Mucha-Kruczyński M, McCann E, Fal'ko V I 2010 *Semicond. Sci. Technol.* **25** 033001
- [20] Castro E, Novoselov K, Morozov S, Peres N, Santos J, Nilsson J, Guinea F, Geim A, Neto A 2010 *J. Phys. Condens. Matter* **22** 175503
- [21] Li Z Q, Henriksen E A, Jiang Z, Hao Z, Martin M C, Kim P, Stormer H L, Basov D N 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 037403
- [22] Wright A, Liu F, Zhang C 2009 *Nanotechnology* **20** 405203
- [23] Cortijo A, Oroszlány L, Schomerus H 2010 *Phys. Rev. B* **81** 235422
- [24] Rhim J-W, Moon K 2008 *J. Phys. Condens. Matter* **20** 365202
- [25] Wang X M, Liu H 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 047102 (in Chinese) [王雪梅, 刘红 2011 物理学报 **60** 047102]
- [26] Kuzmenko A B, Crassee I, van der Marel D, Blake P, Novoselov K S 2009 *Phys. Rev. B* **80** 165406
- [27] Ohta T, Bostwick A, Seyller T, Horn K, Rotenberg E 2006 *Science* **313** 951
- [28] Xu H, Heinzl T, Ewaldsson M, Zozoulenko I V 2008 *Phys. Rev. B* **77** 245401
- [29] Xu N, Ding J W, Xing D Y 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 083710
- [30] Büttiker M, Imry Y, Landauer R, Pinhas S 1985 *Phys. Rev. B* **31** 6207
- [31] Jin Z F, Tong G P, Jiang Y J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 8537 (in Chinese) [金子飞, 童国平, 蒋永进 2009 物理学报 **58** 8537]
- [32] 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]
- [33] Kuzmenko A B, van Heumen E, van der Marel D, Lerch P, Blake P, Novoselov K S, Geim A K 2009 *Phys. Rev. B* **79** 115441
- [34] Buia C, Buldum A, Lu J P 2003 *Phys. Rev. B* **67** 113409
- [35] Liu Q, Luo G, Qin R, Li H, Yan X, Xu C, Lai L, Zhou J, Hou S,

Wang E 2011 *Phys. Rev. B* **83** 155442
[36] Liu Q, Yu L, Li H, Qin R, Jing Z, Zheng J, Gao Z, Lu J 2011 *J. Phys. Chem. C* **115** 6933

[37] Liao L, Bai J, Cheng R, Lin Y C, Jiang S, Qu Y, Huang Y, Duan X 2010 *Nano Lett.* **10** 3952

Electronic transport in hybrid contact of doubly-stacked zigzag graphene nanoribbons*

Hu Fei¹⁾ Duan Ling¹⁾ Ding Jian-Wen^{1)2)†}

1) (*Department of Physics & Institute of Nanophysics and Rare-earth Luminescence, Xiangtan 411105, China*)

2) (*Key Laboratory of Low Dimensional Materials & Application Technology, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China*)

(Received 26 May 2011; revised manuscript received 28 July 2011)

Abstract

According to a tight-binding model and the Green's function formalism, we investigate the electronic transport in hybrid contact of doubly stacked zigzag graphene nanoribbons. Our study shows that the next nearest neighbor interlayer coupling, the hybrid contact length and gate voltage each have a significant modulation effect on the electron transmission spectrum. Due to the next nearest neighbor interlayer coupling, the transmission spectrum of the hybrid contact exhibits an electron-hole asymmetry, which is consistent with the experimental result. There exist some transmission gap ($T = 0$) and quantum step ($T = 1$) within the first subband below the Fermi energy, meaning that electrons can reflect and/or transmit completely. It is also observed that the transmission coefficient oscillates within 1 as the contact length increases, showing a quantum interference effect. Under a gate voltage in the bilayer regime, the transmission coefficient can be changed from 1 to 0, showing that a switching effect exists here. The results is useful for the design and the application of the graphene-based device.

Keywords: graphene nanoribbons, hybrid contact, gate voltage, electronic transport

PACS: 72.80.Vp, 73.40.-c

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10674113 and 11074212), and the Foundation for the Author of National Excellent Doctoral Dissertation of China (Grant No. 200726).

† E-mail: jwding@xtu.edu.cn