

石墨烯纳米带卷曲效应对其电子特性的影响*

李骏 张振华[†] 王成志 邓小清 范志强

(长沙理工大学物理与电子科学学院, 长沙 410114)

(2012年9月27日收到; 2012年10月23日收到修改稿)

石墨烯纳米带 (GNRs) 是一种重要的纳米材料, 碳纳米管可看作是 GNRs 卷曲而成的无缝圆筒. 利用基于密度泛函理论的第一性原理方法, 系统研究了 GNRs 卷曲变形到不同几何构型时, 其电子特性, 包括能带结构 (特别是带隙)、态密度、透射谱的变化规律. 结果表明: 无论是锯齿型 GNRs (ZGNRs) 或扶手椅型 GNRs (AGNRs), 在其卷曲成管之前, 其电子特性对卷曲形变均不敏感, 这意味着 GNRs 的电子结构及运输特性有较强地抵抗卷曲变形的能力. 当 GNRs 卷曲成管后, ZGNRs 和 AGNRs 表现出完全不同的性质, ZGNRs 几乎保持金属性不变或变为准金属; 但 AGNRs 的电子特性有较大的变化, 出现不同带隙半导体、准金属之间的转变, 这也许密切关系到碳纳米管管口周方向上的周期性边界条件及量子禁锢的改变. 这些研究对于了解 GNRs 电子特性的卷曲效应、以及 GNRs 与碳纳米管电子特性的关系 (结构与特性的关系) 有重要意义.

关键词: 石墨烯纳米带, 卷曲效应, 电子特性, 密度泛函理论

PACS: 61.48.Gh, 64.70.Nd, 73.20.At, 71.15.Mb

DOI: 10.7498/aps.62.056103

1 引言

石墨烯是单层石墨片, 仅有一个原子尺寸厚度 (约为 0.35 nm), 且由碳原子紧密排列成的蜂窝状晶体结构. 是目前发现的最稳定、电子迁移率最高的纳米材料. 它也是理想的二维量子体系, 具有许多独特的物理性质: 如无质量的相对论准粒子性, Klein 隧穿, 狄拉克颤动, 半整数霍尔效应等, 因而引起人们的广泛关注^[1-14].

目前, 人们研究最多的是石墨烯纳米带 (GNRs), 它可由石墨烯沿某一特定方向切割、刻蚀得到. GNRs 可分为扶手椅型 GNRs (AGNRs) 和锯齿型 GNRs (ZGNRs) 两种最基本的类型, 它们的电学性质存在很大的差异^[3-5]. 为了使 GNRs 在纳米电子学上获得更多更好的应用, 人们常常将 GNRs 进一步功能化, 即通过适当的方式产生 GNRs 的衍生物, 从而获得我们所需要的各种特性. GNRs 固有的边缘悬挂键构成了 Fermi 能级附近的本征态, 它决定 GNRs 的性质, 因此 GNRs 边缘的化

学修饰能极大地调节电磁特性^[17,18]. 通过表面修饰而成的石墨烯氢化物、氧化物、硫化物、氯化物等是目前研究最多的主题, 如改变 H 原子在 GNRs 表面的覆盖面积能有效调节带隙的大小^[19] 及产生室温铁磁性^[20]. GNRs 体内掺杂产生局域态也是调节 GNRs 电子特性的重要方法, 目前研究最多的是 B, N 替代性掺杂^[19]. 物理方法也是 GNRs 进一步功能化的重要手段, 典型的方法包括外力拉拽、外场作用, 等. 此外, 就 GNRs 本身而言, 很容易发生各种变形^[22], 如表面波纹, 弯曲, 折叠, 扭曲, 等. 特别对一个自由直立或已存在表面波纹的 GNRs, 弯曲是很容易发生的^[23]. 这些将对 GNRs 电子特性产生重大影响. 碳纳米管是重要的纳米材料, 可以看做是 GNRs 在特定条件下卷曲而成的. 因此, 对 GNRs 弯曲效应进行研究, 了解其电子特性的变化规律及与碳纳米管电子特性的关系是十分必要的.

从原子轨道杂化的角度来看, 石墨烯碳原子所具有的 sp^2 杂化状态是由一个 2s 函数 (ψ_{2s}) 和两个 2p 函数 (ψ_{2p_x}) 及 (ψ_{2p_y}) 混合而成, 三种状态的

* 国家自然科学基金 (批准号: 61071015, 61101009, 61201080)、湖南省教育厅重点科研项目 (批准号: 12A001)、湖南省重点学科建设项目和湖南省高校科技创新团队支持计划资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: lgzhang@sohu.com

概率分布完全等价, 形成 σ 键. 没有参加 sp^2 杂化的第四个价电子波函数为 (ψ_{2p_z}), 在垂直于 XOY 平面的 Z 轴上呈“8”字形, 可形成并不固定于某一价键的 π 键. 当 GNRs 面卷曲 (直至碳纳米管) 时, π 轨道不再互相平行, 导致 $\sigma-\pi$ 轨道的再杂化, 如图 1 所示, 使得不同方向上的键长不再相等. 这是卷曲效应导致电子性质改变的关键.

本文, 我们利用基于密度泛函理论的第一性原理方法, 对卷曲 ZGNRs 及 AGNRs 的电子特性进行系统研究. 这些研究对于整体了解 GNRs 电子特性的卷曲效应及设计石墨烯基电子器件有重要意义.

2 计算模型与理论方法

图 2 所示为我们计算的 GNRs 模型. 为了避免

悬挂键的存在, GNRs 边缘用氢原子饱和, 同时也能保持边缘碳原子的 sp^2 杂化的特性不变. 为了表述的方便, 我们用指标 m 来量度 GNRs 宽度, m 为沿宽度方向碳原子链排数. 对于 ZGNRs, 如图 2(a) 所示, m 为锯齿型碳原子链排数; 而对于 AGNRs, 如图 2(b) 所示, m 为二聚型 (dimer) 直线碳原子链排数. 分别记为 m -ZGNR 和 m -AGNR. 图 2(a) 及 (b) 中的方框表示 GNRs 的最小周期性重复单元 (单胞) 的大小. 对于 GNRs 卷曲的程度, 我们用卷曲角 θ 来表征, 即卷曲中心与石墨烯纳米带边缘碳原子连接得到的弧形所对应的角度, 如图 2(c) 所示. 计算时, 取一个单胞进行, 且真空胞足够大, 完全可以避免 GNR 与它相邻“像”之间的波函数重叠及剩余静电作用.

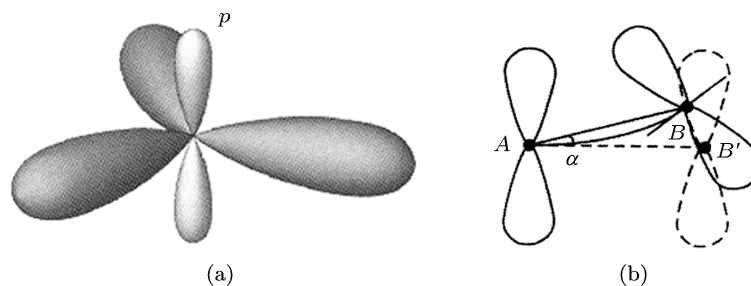


图 1 sp^2 杂化 (a) 及 GNRs 卷曲导致碳原子 $\sigma-\pi$ 轨道再杂化 (b)

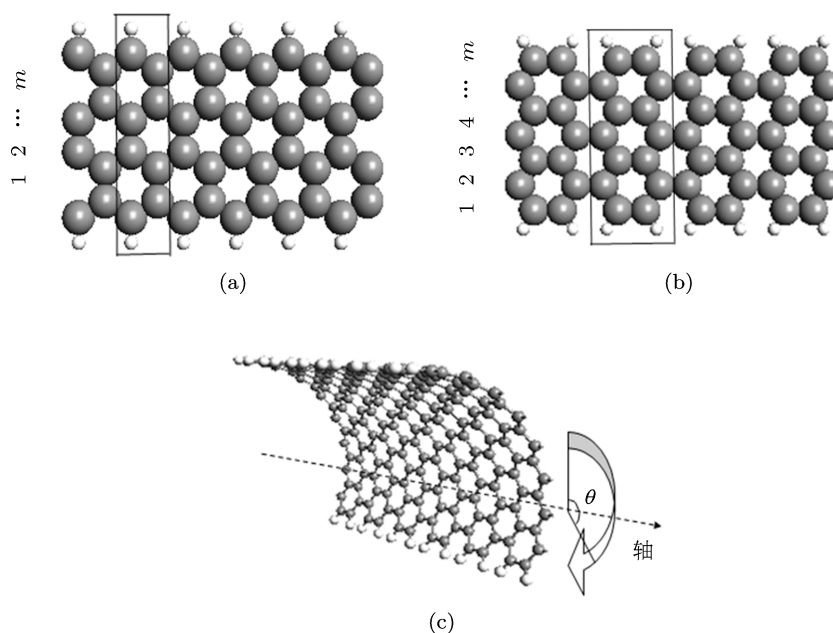


图 2 (a) ZGNR 模型示意图; (b) AGNR 模型示意图; (c) GNR 卷曲 θ 角时示意图 ((a) 及 (b) 中的方框表示 GNRs 最小周期性重复单元 (单胞) 的大小. 数字 $1, 2, 3, \dots, m$ 表述碳原子链的排数, 即 GNRs 的宽度 w)

我们运用基于密度泛函理论第一性原理方法的 Atomistix ToolKit 软件包^[24-26], 对卷曲 GNRs 的电子特性进行计算. 为了求解 Kohn-Sham 方程, 交换关联势选用广义梯度近似 (GGA). 考虑到局域轨道和原子极化的影响, 我们的基函数组选用 DZP (double ζ + polarization). 原子实采用 Troliar Martins 赝势. 在简约布里渊区采用 $5 \times 5 \times 100$ 的 k 点抽样, 能量截断半径 (Mesh cut-off) 的取值为 150 Ry, 主要控制实空间积分网络划分的大小以及泊松方程的求解, 并达到计算效率和精度的平衡.

3 计算结果与讨论

研究表明^[5]: ZGNRs 在不考虑电子自旋的情况下, 无论宽度 w 为多少, 一般均为金属; 而宽度 W 满足 $3p-1$, $3p$ 或 $3p+1$ (p 为非零正整数) 的不同 AGNRs, 其电子结构相距甚远, $3p$ 和 $3p+1$ 型 AGNRs 分别具有中等和宽带隙的半导体性质, 但 $3p-1$ 型 AGNRs 为窄带隙半导体. 下面我们将对 GNRs 的这四种几何结构的卷曲效应进行研究. 其卷曲角分别取为 $\theta = 0^\circ$ (无卷曲), 120° , 240° , 330° (或 335°) 及 360° . 这里的 330° (或 335°) 对应带 H 时 GNRs 卷曲成的纳米管, 此时 GNRs 两对边的 H 原子间距约为 H—H 键长; 而 360° 对应 GNRs 继续

卷曲, 由于 C—C 结合能大于 C—H 结合能, 使 H 原子被释放, 形成我们通常意义上的碳纳米管. 按照碳纳米管的理论模型^[27], 仅当 GNRs 的碳原子链的总排数 m 满足 $(m-1)/2$ 等于整数时, GNRs 才能卷曲成碳纳米管, 即 ZGNRs 卷曲成为 $((m-1)/2, (m-1)/2)$ 扶手椅型碳纳米管, 而 AGNRs 卷曲成 $((m-1)/2, 0)$ 锯齿型碳纳米管.

3.1 锯齿型石墨烯纳米带的卷曲效应

对于锯齿型石墨烯纳米带, 我们选取 7-ZGNR 作为代表进行计算. 图 3 给出其卷曲角分别为 $\theta = 0^\circ$ (无卷曲), 120° , 240° , 330° 及 360° 时的能带结构, 其中黑色虚线表示费米能级, 设为 0. 7-ZGNR 的碳原子链的总排数 m 满足 $(m-1)/2$ 等于整数, 故能最终卷曲成为 (3, 3) 型扶手椅型碳纳米管. 从图 3 可以看出, 无卷曲 ($\theta = 0^\circ$) 及卷曲角为 120° , 240° 及 330° 时, 都有能带穿越费米能级, 无带隙, 对应金属. 卷曲角为 360° 成为 (3, 3) 型扶手椅型碳纳米管时, 有一个非常小的带隙, 对应准金属. 但按照紧束缚模型^[27]: (3, 3) 扶手椅型碳纳米管应该是金属性的. 至所以为准金属, 这是典型的 $\sigma-\pi$ 轨道再杂化对电子态的影响, 特别对小管口碳管的影响尤为明显. 这一结论与以前的研究结果相符合^[28].

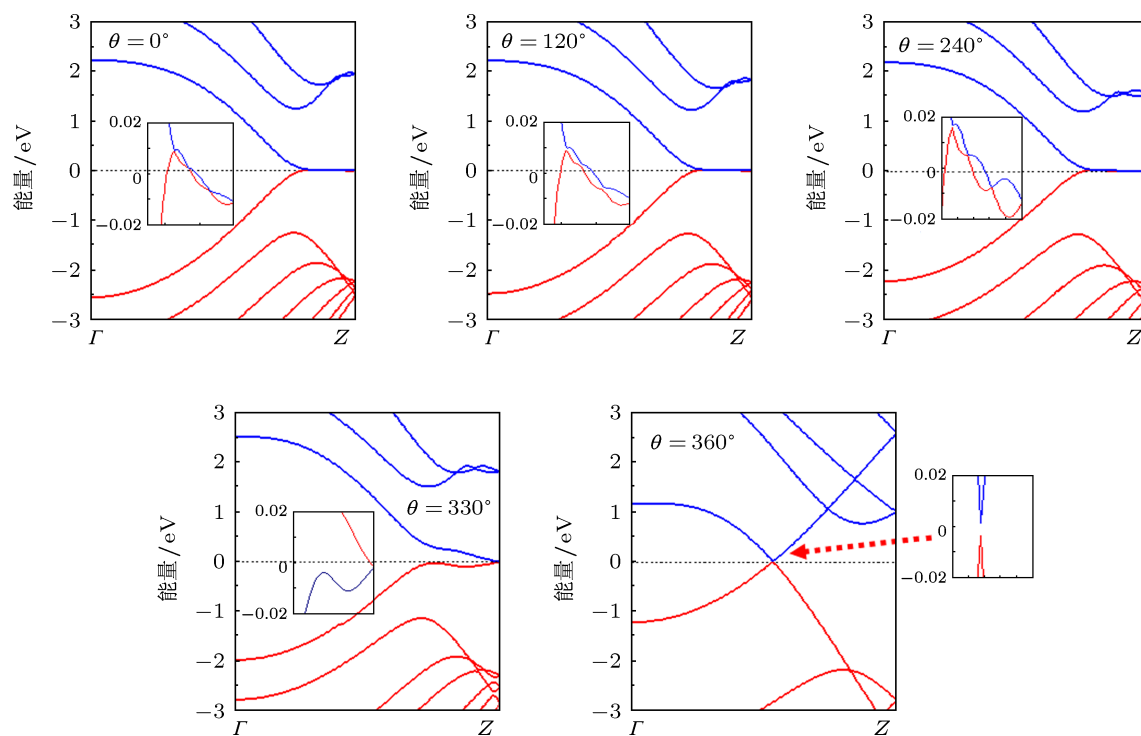


图3 卷曲角分别为 $\theta = 0^\circ$ (无卷曲), 120° , 240° , 330° 及 360° 时, 7-ZGNR 的能带结构. 小插图为 Fermi 能级附近的能带细节

图 4 所示为 7-ZGNR 在不同卷曲角时的态密度, 可明显地看出: 无卷曲 ($\theta = 0^\circ$) 及卷曲角为 120° 和 240° 时, 态密度几乎没有变化. 特别是在费米能级上的态密度为峰值, 这充分反映 7-ZGNR 的金属属性; 卷曲角为 330° 时, 费米能级上的态密度下降; 而卷曲角为 360° 成为 (3, 3) 扶手椅型碳纳米管时, 在费米能级上的态密度几乎为零, 反映它的准金属性. 图 5 所示为各种卷曲角时, 7-ZGNR 的透射谱 $T(E)$, 可以看出, 无卷曲 ($\theta = 0^\circ$) 及卷曲角为 120° 和 240° 时, 在费米能级上的透射系数为一尖而窄的峰, 其值可达 3, 这意味着在费米能级附近电子更容易透射. 卷曲角为 330° 时, 费米能级上的透射系数减小, 约为 1.3. 当卷至 360° 时, 费米能级处的透射系数有一大的下降.

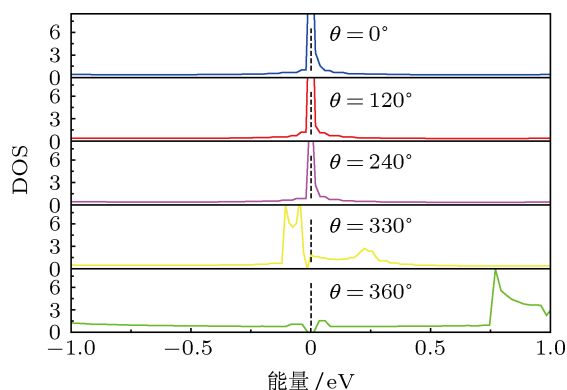


图 4 卷曲角分别为 $\theta = 0^\circ$ (无卷曲), 120° , 240° , 330° 及 360° 时, ZGNR(7) 的态密度 (DOS)

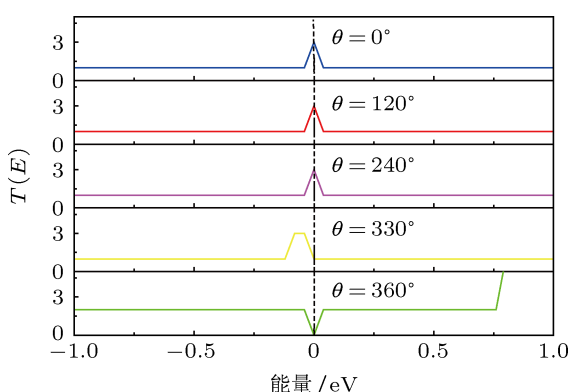


图 5 卷曲角分别为 $\theta = 0^\circ$ (无卷曲), 120° , 240° , 330° 及 360° 时, 7-ZGNR 的透射谱 $T(E)$

总之, 7-ZGNR 的带隙对卷曲形变不敏感, 即使有改变也是很小的, 所以其金属性没有改变. 但当卷成扶手椅型碳纳米管时, 费米能级附近的能带结

构、态密度及电子的透射特性有一定的变化, 出现金属到准金属的过渡.

3.2 扶手椅型石墨烯纳米带的卷曲效应

3.2.1 $W = 3p - 1$ 扶手椅型石墨烯纳米带的卷曲效应

对于该类 GNRs 我们选择 17-AGNR 作为例子进行计算. 显然, 17-AGNR 的碳原子链的总排数 m 满足 $(m-1)/2$ 等于整数, 故能最终卷曲成为 (8, 0) 锯齿型碳纳米管. 图 6 给出其卷曲角分别为 $\theta = 0^\circ$ (无卷曲), 120° , 240° , 335° 及 360° 时的能带结构. 17-AGNR 从平面 ($\theta = 0^\circ$) 卷曲到 240° 时, 带隙随着卷曲角度增加而呈现减小的趋势, 卷曲到 335° 时, 带隙稍有增大, 但它们都是小带隙, 始终对应小带隙半导体. 当它卷曲成 (8, 0) 锯齿型碳纳米管时, 变为宽带隙半导体, 这与已有的紧束缚研究结论相一致^[27]. 对于一个 (N, M) 碳纳米管 (N 及 M 称为碳纳米管指数), 如果 $2N + M = 3I$ (I 为非零整数), 则碳纳米管则为金属, 否则为半导体.

图 7 和图 8 分别表示卷曲角为 $\theta = 0^\circ$ (无卷曲), 120° , 240° , 335° 及 360° 时, 17-AGNR 的态密度 (DOS) 及透射谱 $T(E)$. 显然, 与图 6 中的能带结构完全对应. 当 $\theta = 360^\circ$ 时, 态密度 (DOS) 及透射谱 $T(E)$ 均有大的转变.

综上所述, 对于 $W = 3p - 1$ 的 AGNRs, 只当能卷成锯齿型碳纳米管时, 它的带隙、费米能级附近的能带结构、态密度及电子的透射特性才有较大的变化. 出现小带隙半导体到宽带隙半导体的变化.

3.2.2 $W = 3p$ 扶手椅型石墨烯纳米带的卷曲效应

对此我们选择 18-AGNR 作为例子进行计算. 显然, 18-AGNR 的碳原子链的总排数 m 不满足 $(m-1)/2$ 等于整数, 故不能卷成为锯齿型碳纳米管. 图 9 给出其卷曲角分别为 $\theta = 0^\circ$ (无卷曲), 120° , 240° 及 335° 时的能带结构. 18-AGNR 从平面 ($\theta = 0^\circ$) 卷曲到 335° 时, 带隙随着卷曲角度增大几乎没有变化, 都是中等带隙, 始终对应中等带隙半导体. 但 $\theta = 335^\circ$, 其导带结构略有变化.

图 10 和图 11 分别表述卷曲角分别为 $\theta = 0^\circ$ (无卷曲), 120° , 240° 及 335° 时, 18-AGNR 的态密度 (DOS) 及透射谱 $T(E)$. 显然, 与图 9 中的能带结构完全对应.

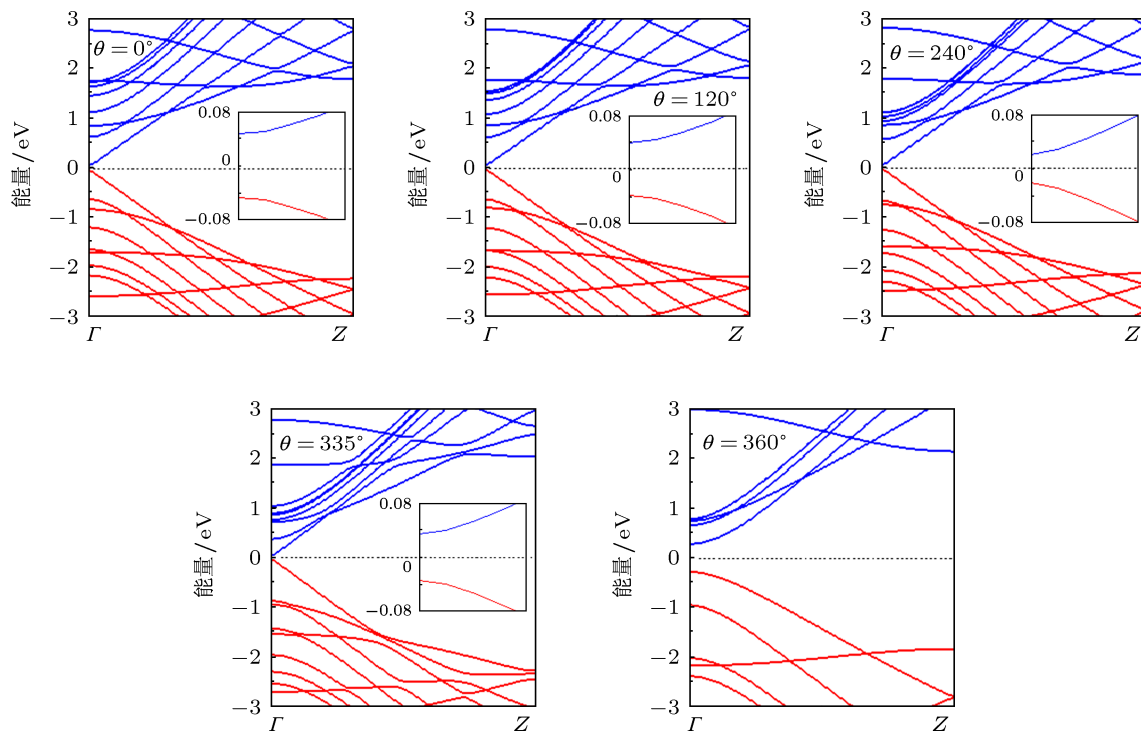


图6 卷曲角分别为 $\theta = 0^\circ$ (无卷曲), 120° , 240° , 335° 及 360° 时, 17-AGNR 的能带结构 (小插图为 Fermi 能级附近的能带细节)

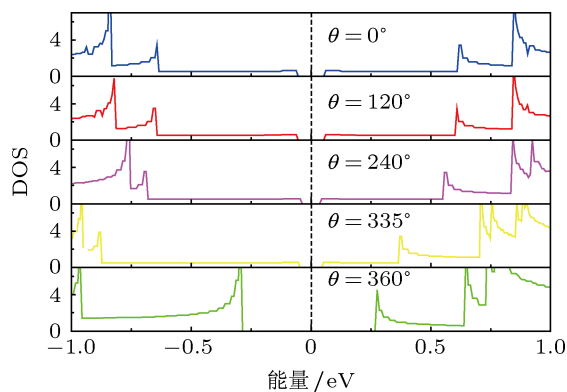


图7 卷曲角分别为 $\theta = 0^\circ$ (无卷曲), 120° , 240° , 335° 及 360° 时, 17-AGNR 的态密度 (DOS)

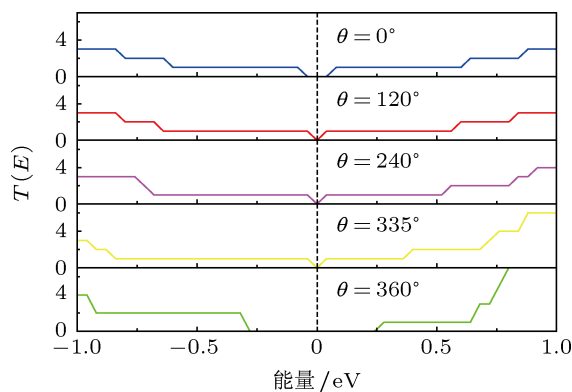


图8 卷曲角分别为 $\theta = 0^\circ$ (无卷曲), 120° , 240° , 335° 及 360° 时, 17-AGNR 的透射谱 $T(E)$

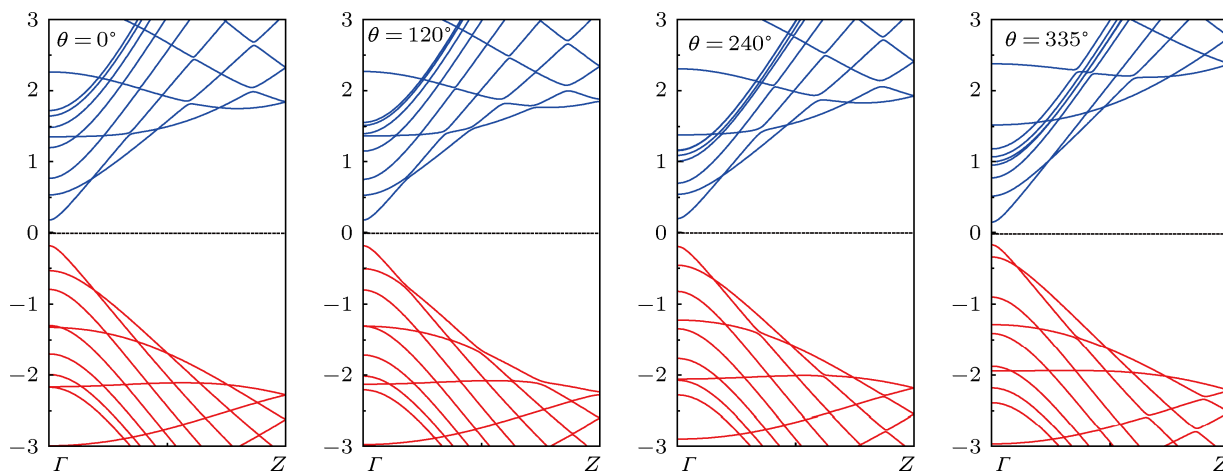


图9 卷曲角分别为 $\theta = 0^\circ$ (无卷曲), 120° , 240° 及 335° 时, 18-AGNR 的能带结构

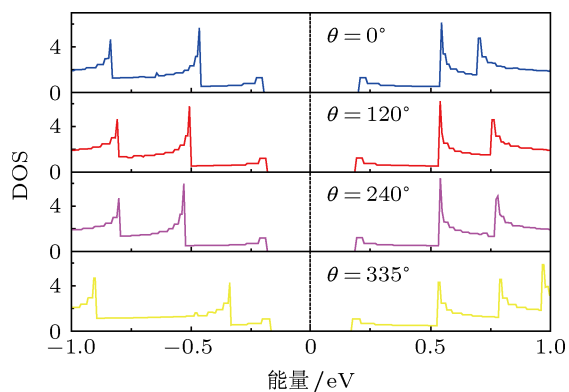


图 10 卷曲角分别为 $\theta = 0^\circ$ (无卷曲), 120° , 240° 及 335° 时, 18-AGNR 的态密度 (DOS)

3.2.3 $W = 3p + 1$ 扶手椅型石墨烯纳米带的卷曲效应

对于该类 GNRs, 我们选择 19AGNR 作为例子进行计算. 显然, 19-AGNR 的碳原子链的总排数 m 满足 $(m - 1)/2$ 等于整数, 故能最终卷曲成为 $(9, 0)$ 锯齿型碳纳米管. 图 12 给出其卷曲角分别为 $\theta = 0^\circ$ (无卷曲), 120° , 240° , 335° , 及 360° 时的能带结构. 19-AGNR 从平面 ($\theta = 0^\circ$) 卷曲到 335° 时, 带隙及整个带结构几乎没有变化, 都是宽带隙, 始终对应宽带隙半导体. 但当它卷曲到 360° 成为 $(9, 0)$ 锯齿

型碳纳米管时, 其管指数 (N, M) , 满足 $2N + M = 3I$ (I 为非零整数), 所以碳纳米管则为金属型. 值得注意的是, 所以满足 $2N + M = 3I$ 的锯齿型碳纳米管都是准金属的, 我们从它的带结构可以清楚地看出这一点. 这一结论与从以前的研究结果^[28] 相一致.

图 13 和图 14 分别表示卷曲角为 $\theta = 0^\circ$ (无卷曲), 120° , 240° , 335° , 360° 时, 19-AGNR 的态密度 (DOS) 及透射谱 $T(E)$. 显然, 与图 12 中的能带结构完全对应.

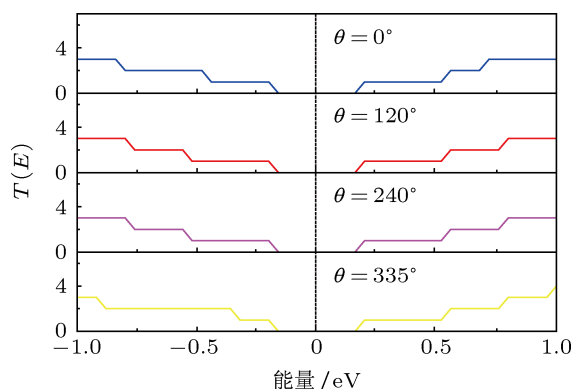


图 11 卷曲角分别为 $\theta = 0^\circ$ (无卷曲), 120° , 240° 及 335° 时, 18-AGNR 的透射谱 $T(E)$

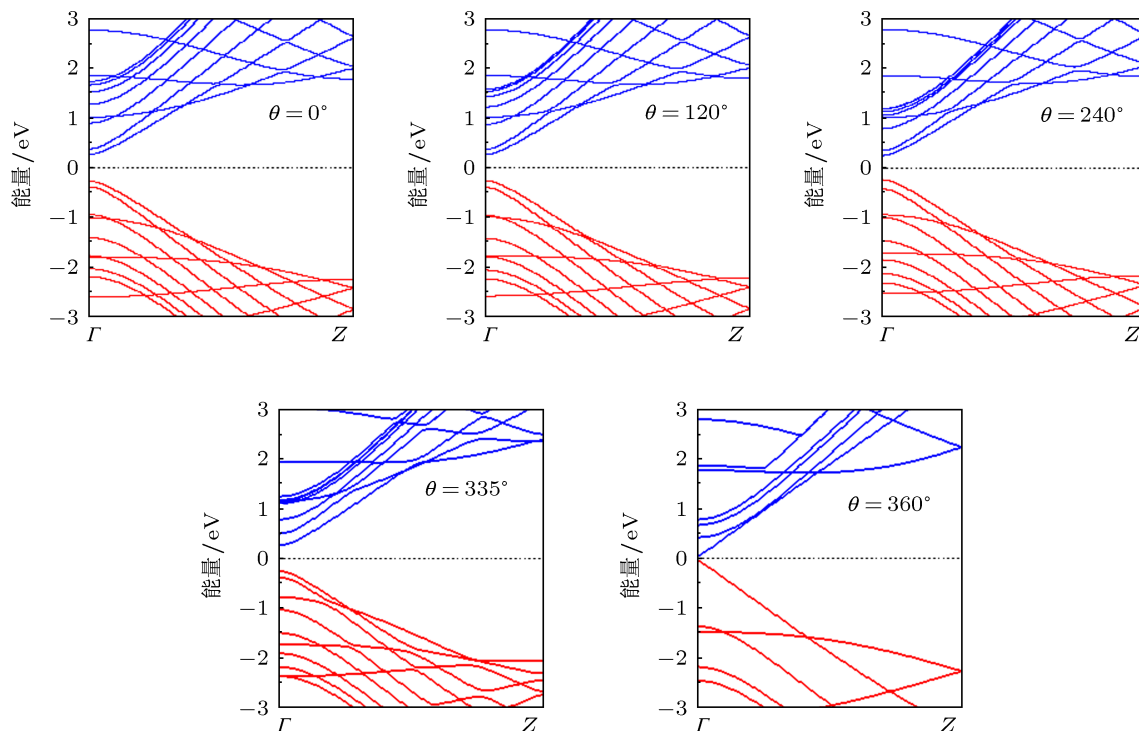


图 12 卷曲角分别为 $\theta = 0^\circ$ (无卷曲), 120° , 240° , 335° , 360° 时, 19-AGNR 的能带结构

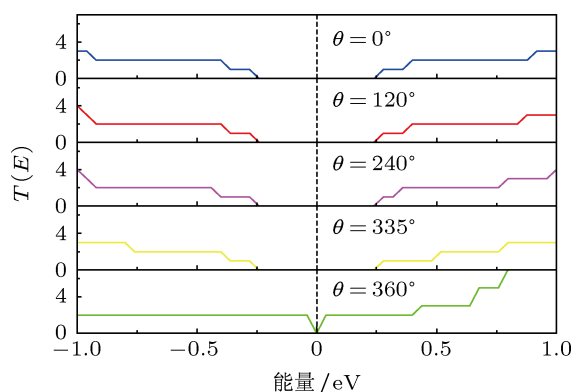


图 13 卷曲角分别为 $\theta = 0^\circ$ (无卷曲), 120° , 240° , 335° , 360° 时, 19-AGNR 的态密度 (DOS)

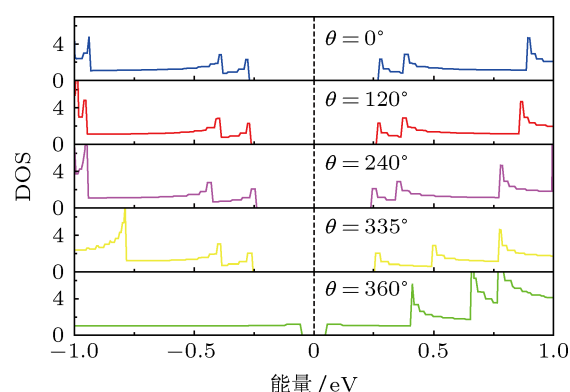


图 14 卷曲角分别为 $\theta = 0^\circ$ (无卷曲), 120° , 240° , 335° , 360° 时, 19-AGNR 的透射谱 $T(E)$

当 $\theta = 360^\circ$ 时, 态密度 (DOS) 及透射谱 $T(E)$ 均有大的变化, 对应准金属锯齿型碳纳米管的情形.

综上所述, 对于 $W = 3p + 1$ 的 AGNRs, 只当能卷成锯齿型碳纳米管时, 它的带隙、费米能级附近的能带结构、态密度及电子的透射特性才有较大的变化, 出现中等带隙半导体到准金属的变化. 这恰恰与 $W = 3p - 1$ 的 AGNRs 的变化趋势相反.

4 结论

利用基于密度泛函理论的第一性原理方法, 研究了锯齿型石墨烯纳米带 (ZGNRs) 及宽度 W 分别为 $3p - 1$, $3p$ 及 $3p + 1$ 的扶手椅型石墨烯纳米带 (AGNRs) 电子特性的卷曲效应. 结果表明: 无论是 ZGNRs 或 AGNRs, 在其卷曲成碳纳米管之前, 其电子特性——能带结构 (包括带隙)、态密度、透射谱对卷曲变形均不敏感, 这意味着 GNRs 的电子结构及输运特性有较强地抵抗卷曲变形的能力. 当 ZGNRs 卷曲成碳纳米管时, 几乎保持金属性不变或变为准金属; 但 AGNRs 卷曲成碳纳米管后, 其电子特性有较大的变化, 出现不同带隙半导体、准金属之间的转变, 明显的转变规律是: 窄带隙的 $W = 3p - 1$ 的 AGNRs 变为宽带隙的半导体型碳纳米管; 而宽带隙的 $W = 3p + 1$ 的 AGNRs 变为准金属型碳纳米管. 这也许与碳纳米管管口周长方向上的周期性边界条件及量子禁锢的改变密切相关. 这些研究对于了解 GNRs 电子特性的卷曲效应、以及 GNRs 与碳纳米管电子特性的关系有重要意义.

- [1] Zeng J, Chen K Q, He J, Zhang X J, Hu W P 2011 *Organic Electronics* **12** 1606
- [2] Zeng J, Chen K Q, He J, Fan Z Q, Zhang X J 2011 *J. Appl. Phys.* **109** 124502
- [3] Yao Y X, Wang C Z, Zhang G P, Ji M, Ho K M 2009 *J. Phys.: Condens. Matter* **21** 235501
- [4] Son Y, Cohen M L, Louie S G 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 216803
- [5] Li Z, Qian H, Wu J, Gu B, Duan W 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 206802
- [6] Ouyang F P, Xu H, Lin F 2009 *Acta phys. Sin.* **58** 4132 (in Chinese) [欧阳方平, 徐慧, 林峰 2009 物理学报 **58** 4132]
- [7] Zheng X H, Song L L, Wang R N, Hao H, Guo L J, Zeng Z 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 153129
- [8] Yuan J M, Mao Y L 2011 *Acta phys. Sin.* **60** 103103 (in Chinese) [袁健美, 毛宇亮 2011 物理学报 **60** 103103]
- [9] 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]
- [10] Yan Q M, Huang B, Yu J, Zheng F W, Zang J, Wu J, Gu B L, Liu F, Duan W H 2007 *Nano Lett.* **7** 1469
- [11] Wang J J, Zhu M Y, Outlaw R A, Zhao X, Manos D M, Holloway B C, Mammana V P 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 1265
- [12] Sun L, Li Q X, Ren H, Su H B, Shi Q W, Yang J L 2008 *J. Chem. Phys.* **129** 074704
- [13] Sadrzadeh A, Hua M, Boris I Y 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 013102
- [14] Zhu L Y, Wang J L, Zhang T T, Ma L, Lim C W, Ding F, Zeng X C 2010 *Nano Lett.* **10** 494
- [15] Ong Z, Fischetti M V 2012 *Phys. Rev. B* **86** 165422
- [16] Tani S, Blanchard F, Tanaka K 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 166603
- [17] Hod O, Barone V, Peralta J E, Scuseria G E 2007 *Nano Lett.* **7** 2295
- [18] Lee G, Cho K 2009 *Phys. Rev. B* **79** 165440
- [19] Balog R, Jørgensen B, Nilsson L 2010 *Nat. Mater.* **9** 315
- [20] Zhou J, Wang Q, Sun Q X S, Chen X S, Kawazoe Y, Jena P 2009 *Nano Lett.* **9** 3867
- [21] Panchakarla L S, Subrahmanyam K S, Saha S K 2009 *Adv. Mater.* **21** 4726
- [22] Xu Z, Buehler M J 2010 *ACS Nano* **4** 3869
- [23] Shenoy V B, Reddy C D, Ramasubramaniam A, Zhang Y W 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 245501
- [24] Taylor J, Guo H, Wang 2001 *J. Phys. Rev. B* **63** 245407
- [25] Brandbyge M, Mozos J L, Ordejon P, Taylor J, Stokbro K 2002 *Phys. Rev. B* **65** 165401

Rolling effects on electronic characteristics for graphene nanoribbons*

Li Jun Zhang Zhen-Hua[†] Wang Chen-Zhi Deng Xiao-Qing Fan Zhi-Qiang

(School of Physics and Electronic Science, Changsha University of Science and Technology, Changsha 410114, China)

(Received 27 September 2012; revised manuscript received 23 October 2012)

Abstract

Graphene nanoribbons (GNRs) are important nanomaterials. A carbon nanotube can be viewed as a GNR rolled into a seamless cylinder. By using the first-principles method based on the density-functional theory, the rolling deformation-dependent electronic characteristics of GNRs, including the band structure (particularly the bandgap), density of states (DOS), and transmission spectrum, are studied systematically. It is found that before all types of GNRs are rolled into carbon nanotubes, they are not sensitive to the rolling deformations, which means that for electronic structures and transport properties, GNRs have a very strong ability to resist the rolling deformations. After GNRs are rolled into nanotubes, zigzag-edge GNRs (ZGNRs) and armchair-edge GNRs (AGNRs) present distinct differences in property, ZGNRs almost maintain unchanged metallic behaviors or become quasi-metallic. But for AGNRs, their electronic characteristics experience large variations, and transformations occur between the quasi-metal and semiconductor with various bandgaps, which might be closely related to the periodical boundary conduction along the direction of tubular circumference of a carbon nanotube and variation of quantum confinement. These studies presented here are of significance for understanding the rolling effects on electronic characteristic and relationship of electronic characteristics between GNRs and carbon nanotubes (structure-property relationship).

Keywords: graphene nanoribbon, electronic characteristics, rolling effect, density- functional theory

PACS: 61.48.Gh, 64.70.Nd, 73.20.At, 71.15.Mb

DOI: 10.7498/aps.62.056103

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61071015, 61101009, 61201080), the Scientific Research Fund of Hunan Provincial Education Department (Grant No. 12A001), the Construct Program of the Key Discipline in Hunan Province, and Aid Program for Science and Technology Innovative Research Team in Higher Educational Institutions of Hunan Province.

[†] Corresponding author. E-mail: lgzzhang@sohu.com