

线缺陷石墨烯纳米带的电输运研究*

丁锦廷 胡沛佳 郭爱敏†

(中南大学物理与电子学院, 长沙 410083)

(2023 年 4 月 1 日收到; 2023 年 5 月 12 日收到修改稿)

石墨烯的能带工程是当前凝聚态物理的热点问题, 旨在费米能级处打开能隙. 另外实验报道石墨烯存在多种线缺陷, 但人们尚未讨论线缺陷与石墨烯能带工程间的关系. 本文采用 Landauer-Büttiker 公式及格林函数方法, 研究了三种 4-8 环线缺陷随机排列方式对石墨烯纳米带电输运的影响. 计算结果发现: 尽管 4-8 环线缺陷随机分布的石墨烯纳米带在费米能级处存在电子态, 但该电子态为局域态且体系在费米能级处存在透射能隙, 这是由线缺陷随机排列诱导产生结构无序进而引起的 Anderson 局域化现象. 当线缺陷无序程度较低或纳米带宽度较窄时, 石墨烯纳米带的透射能隙依赖 4-8 环线缺陷的随机排列方式; 随着线缺陷无序程度的增强或纳米带宽度的增加, 三种线缺陷石墨烯纳米带的透射能隙趋于一致. 总之, 4-8 环线缺陷随机分布的石墨烯纳米带具有透射能隙, 该能隙对线缺陷的排列方式、无序程度及纳米带宽度均表现稳健性.

关键词: 石墨烯纳米带, 量子输运, 线缺陷, 格林函数**PACS:** 73.23.-b, 72.80.Vp, 73.43.Cd, 72.10.Fk**DOI:** 10.7498/aps.72.20230502

1 引言

随着单层二维材料石墨烯的首次成功制备^[1], 且因其呈现一系列新奇的物理特性, 如 Klein 隧穿^[2]、量子自旋 Hall 效应^[3,4]、极高电子迁移率等^[5-7], 石墨烯在纳米电子学及自旋电子学等领域吸引了浓厚的研究兴趣^[8-10]. 然而, 石墨烯的无能隙特性限制了其在电子学领域的应用, 因此石墨烯的能带工程受到了极大关注和广泛研究^[11-14]. 目前, 人们已提出多种方法使得石墨烯体系在费米能级处打开能隙, 如施加电场或应力^[11], 引入杂质原子或缺陷结构^[12]等. 另外, 通过将石墨烯限制为准一维结构亦能打开能隙^[13,14], 即石墨烯纳米带 (graphene nanoribbon, GNR). 对于扶手椅型石墨烯纳米带 (armchair GNR, AGNR), 是否存在能隙由纳米带宽度决定, 且能隙大小随宽度增加而迅速下降^[13].

对于锯齿形石墨烯纳米带 (zigzag GNR, ZGNR)^[14], 在任何宽度下都不存在能隙, 表现出金属行为.

特别地, 在石墨烯制备过程中, 缺陷结构, 如点缺陷和线缺陷的出现往往无法避免^[15-20]. 早在石墨烯合成之初, Hashimoto 等^[15]便利用透射电子显微镜直接观察到石墨烯中的点缺陷结构. 随后, Islam 等^[16]将石墨烯连续暴露在能量略高于撞击阈值的电子束中, 人为调控石墨烯中空位缺陷的产生. 另一方面, Lahiri 等^[17]成功合成了具有 5-8 环线缺陷结构的石墨烯, 发现该线缺陷可以作为准一维的金属导线. Fei 等^[18]提出了多种具有 7-5-7 环线缺陷石墨烯的合成方法, 并发现这些结构在常温下表现出高稳定性. 最近, 诸多实验成功合成了含有 4-8 环线缺陷的石墨烯^[19,20]. 特别地, Liu 等^[19]在金表面通过去卤化和环脱氢反应制备了含有 4-8 环线缺陷的 ZGNRs, 并利用扫描隧道光谱表征了这种结构的金属行为. 他们的研究为 4-8 环线缺陷

* 国家自然科学基金 (批准号: 12274466)、湖南省杰出青年科学基金 (批准号: 2023JJ10058) 和中南大学高性能计算平台资助的课题.

† 通信作者. E-mail: aimin.guo@csu.edu.cn

在 ZGNRs 中可控合成提供了一条可行途径.

理论研究表明, 石墨烯中的线缺陷结构会在很大程度上改变其电子结构和输运性质^[21–24]. 例如: Gunlycke 和 White^[21] 发现石墨烯中的线缺陷可以作为一种谷过滤器, 谷极化率可以达到 100%. Song 等^[22] 发现 ZGNRs 中的线缺陷能够诱导出一些新奇量子态, 并且可以通过栅压来调节这些态, 实现一维电子通道. 最近, Kong 等^[24] 发现 4-8 型线缺陷石墨烯中存在狄拉克锥, 并利用应力对狄拉克锥进行调控.

本文通过格林函数方法结合 Landauer-Büttiker 公式, 对三种具有无序分布的 4-8 环线缺陷 ZGNRs (无序 ZGNRs) 进行了计算, 探讨了排列方式、无序程度和纳米带宽度对其电子结构和输运性质的影响. 计算表明, 无序 ZGNRs 中存在透射能隙, 呈现出半导体行为. 尽管当无序程度或纳米带宽度较低时, 不同排列方式的无序 ZGNRs 的透射能隙大小有明显差距, 但对于不同排列方式、无序程度和纳米带宽度, 透射能隙总是存在, 具有很好的稳健性.

2 模型与方法

事实上, ZGNRs 可视为两种链的周期排列, 分别命名为链 1 和链 2, 如图 1(a) 的彩色矩形区域所示. ZGNRs 的宽度 N 定义为任一链中碳原子的

个数, 长度 M 定义为总链数. 对于图 1(a) 中的 ZGNR, 宽度为 $N = 4$, 长度为 $M = 37$.

输运模型如图 1(b)–(d) 所示, 左电极和右电极为半无限长 ZGNRs, 如灰色区域所示; 中心散射区为无序 ZGNRs. 它可以由以下方式构成: 当链 1 和链 2 间插入一条链 1 或链 2 时, 就会形成一个 4-8 环线缺陷, 如图 1(b)–(d) 中的彩色矩形区域所示, 具体说明如下. 完美的 ZGNRs 由链 1 和链 2 周期排列所构成, 即 1 2 1 2 1 2... 首先给定一个确定且位于 0 和 1 间的数 P , 同时产生一组位于 0 和 1 间的随机数 P_1, P_2, P_3, \dots . 对第 I 类无序, 当 $P > P_i$ 时, 在第 i 组 (1 2) 间插入一条链 1, 如图 1(b) 所示. 对第 II 类无序, 当 $P > P_i$ 时, 则在第 i 组 (1 2) 间插入一条链 2, 如图 1(c) 所示. 对第 III 类无序, 需产生另一组位于 0 和 1 间的随机数 Q_1, Q_2, Q_3, \dots , 当 $P > P_i$ 且 $Q_i > 0.5$ 时, 在第 i 组 (1 2) 间插入链 1; 当 $P > P_i$ 且 $Q_i < 0.5$ 时, 则插入链 2, 如图 1(d) 所示. 显然, 无序 ZGNRs 的线缺陷概率为 P 且体系不存在长程序. 当 $P = 0$ 时, 体系为完美的 ZGNRs; 当 $P = 1$ 时, 体系为 4-8 环 GNRs^[19,23]; 而当 $0 < P < 1$ 时, 体系则为无序 ZGNRs. 不难发现, 引入第 I 类无序导致无序 ZGNRs 的边界由 4 元环和 6 元环构成; 第 II 类无序的引入, 导致无序 ZGNRs 的边界由 6 元环和 8 元环构成; 而第 III 类无序的引入, 导致无序 ZGNRs 的边界由 4 元环、6 元环及 8 元环构成.

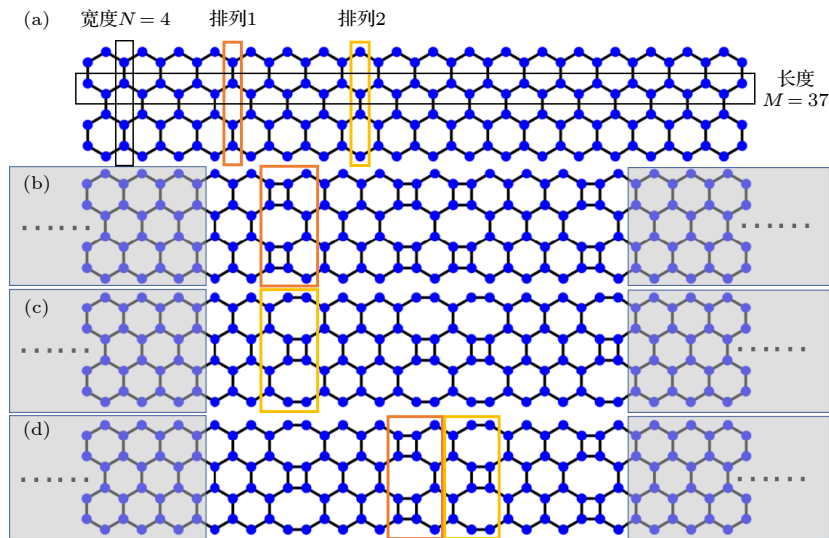


图 1 ZGNR 和三类无序 ZGNRs 示意图 (a) ZGNR; (b), (c), (d) 第 I, II 和 III 类无序 ZGNRs 与左右半无限长 ZGNRs 耦合形成的二端体系

Fig. 1. Schematic diagrams of ZGNR and three types of disordered ZGNRs: (a) ZGNR; (b), (c), (d) the two-terminal system constructed by the type I, II and III disordered ZGNRs coupled to left and right semi-infinite ZGNRs, respectively.

对于图 1(b)—(d) 中的输运模型, 在单电子紧束缚近似下, 体系的哈密顿量表示为

$$H = \sum_i \varepsilon_i a_i^\dagger a_i - \sum_{\langle i,j \rangle} t a_i^\dagger a_j, \quad (1)$$

其中 $a_i^\dagger (a_i)$ 为第 i 个碳原子的产生 (湮灭) 算符, ε_i 为第 i 个碳原子的在位能, t 为最近邻原子间的跃迁积分, $\langle i,j \rangle$ 表示求和时要遍历所有的最近邻跃迁. 计算中, 在位能取 $\varepsilon_i = 0$, 跃迁积分取 $t = 2.75$ eV, 并设为能量单位.

根据格林函数方法结合 Landauer-Büttiker 公式, 两端体系的电导写为 [25–28]

$$G(E) = \frac{2e^2}{h} T(E) = \frac{2e^2}{h} \text{tr} [\mathbf{I}_L \mathbf{G}^r \mathbf{I}_R \mathbf{G}^a], \quad (2)$$

其中 $T(E)$ 为入射电子的透射概率, E 为入射电子能量, $\mathbf{G}^r = (\mathbf{G}^a)^\dagger = 1/[E\mathbf{I} - \mathbf{H}_c - \Sigma_L^r - \Sigma_R^r]$ 为推迟格林函数, \mathbf{H}_c 为中心散射区哈密顿量, $\mathbf{I}_{L/R} = i[\Sigma_{L/R}^r - \Sigma_{L/R}^a]$ 为线宽函数和 $\Sigma_{L/R}^r$ 为推迟自能. 另外, e 是电子电荷, h 是普朗克常数和 \mathbf{I} 是单位矩阵, 矩阵阶数为中心区碳原子数目. 推迟自能定义为

$$\Sigma_L^r = \mathbf{h}_{Lc}^\dagger \mathbf{g}_L^r \mathbf{h}_{Lc},$$

$$\Sigma_R^r = \mathbf{h}_{Rc}^\dagger \mathbf{g}_R^r \mathbf{h}_{Rc},$$

其中 $\mathbf{h}_{Lc} (\mathbf{h}_{Rc})$ 代表左 (右) 半无限长 ZGNRs 与中心区的耦合哈密顿量; $\mathbf{g}_{L/R}^r$ 为左右半无限长 ZGNRs 的表面格林函数, 可以通过数值计算得到 [29,30].

3 结果与讨论

首先, 分别计算了宽度为 $N = 10$, 中心散射区长度为 $M = 10000$ 的 ZGNR 和三类无序 ZGNRs 的态密度和电导, 其中电导采用递归格林函数方法计算得到 [29,30]. 对于无序 ZGNRs, 线缺陷概率取 $P = 0.5$, 所有电导数据基于 500 个无序 ZGNRs 样本取平均得到. 图 2(a) 为 ZGNR 和三类无序 ZGNRs 态密度随能量 E 的变化曲线. 从图 2(a) 可以看出, ZGNR 和三类无序 ZGNRs 的态密度在能量 E 范围在 $-3t$ 到 $3t$ 之间都为有限值, 说明这些体系中均不存在能隙, 结果与实验测量相符 [19]. 与此同时, 态密度关于 $E = 0$ 对称, 这是由于完美 ZGNR 和无序 ZGNRs 存在电子-空穴对称性 [27,31], 表明 4-8 环线缺陷不会破坏体系的电子-空穴对称性. 图 2(b) 给出了 ZGNR 和三类无序 ZGNRs 的平均电导 $\langle G \rangle$ 随能量 E 的变化曲线. 从图 2(b) 可以看出, 当中

心散射区为完美的 ZGNR 时, 由于整个体系具有平移对称性, 透射谱呈现量子化的电导平台. 在费米能级处电导平台为 $G = 2e^2/h$, 体系呈现金属行为. 而对于三类无序 ZGNRs, 从图 2(b) 中红线、蓝线及黄线可以看出, 由于平移对称性的消失, 电导平台被破坏, 且整体电导被严重抑制. 更重要的是, 三类无序 ZGNRs 在费米能级附近电导几乎为 0, 表明无序 ZGNRs 中存在透射能隙 E_g . 这是由线缺陷随机排列诱导产生的结构无序引起的 Anderson 局域化. 当 ZGNR 存在随机排列的线缺陷时, 入射电子将遭受线缺陷的随机散射, 使得电子波函数局域在体系的某一空间, 此即结构无序诱导的 Anderson 局域化. 因此即使无序 ZGNRs 在费米能级附近存在很多电子态, 但是这些电子态的波函数均局域在体系某一空间而不参与导电, 从而无序 ZGNRs 在费米能级附近的电导趋于零而呈现透射能隙 E_g . 另外, 由于体系存在电子-空穴对称性, 所有电导曲线都关于能量 $E = 0$ 对称.

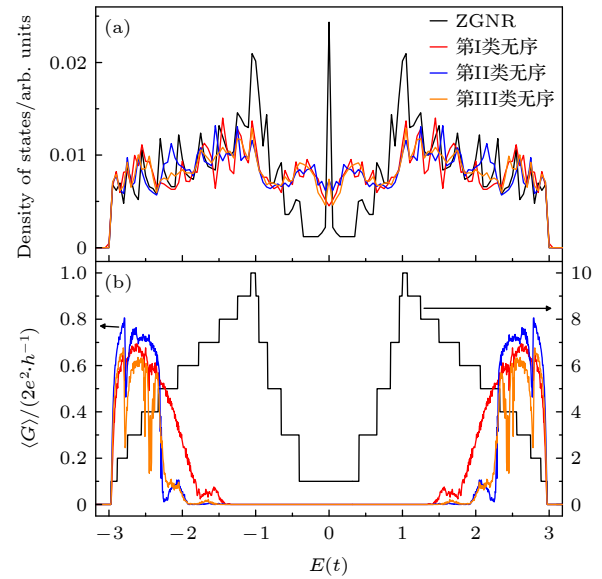


图 2 完美 ZGNR 和三类无序 ZGNRs 的电子结构和电输运性质 (a) 态密度随 E 的变化曲线; (b) 平均电导 $\langle G \rangle$ 随 E 的变化曲线, 其中左纵坐标对应无序 ZGNRs, 右纵坐标对应完美 ZGNR. 对于所有 ZGNRs: $N = 10$, $M = 10000$

Fig. 2. Electronic structures and transport properties of perfect ZGNR and three types of disordered ZGNRs: (a) Density of states as a function of E for perfect ZGNR and three types of disordered ZGNRs; (b) averaged conductance $\langle G \rangle$ as a function of E for perfect ZGNR (right axis) and three types of disordered ZGNRs (left axis). Here, $N = 10$ and $M = 10000$ for all ZGNRs.

为了证明透射能隙具有稳健性, 计算了三类无序 ZGNRs 在不同插入概率时的输运性质. 图 3(a)—

(c) 分别为第 I, II 和 III 类无序 ZGNRs 在不同插入概率时平均电导 $\langle G \rangle$ 随能量 E 的变化曲线. 从图 3 可以看出, 即使引入少量的 4-8 环线缺陷 ($P = 0.1$), 也会导致体系整体电导大幅度降低, 从而导致透射能隙的出现. 对于第 I, II 和 III 类无序, $P = 0.1$ 时的透射能隙分别可以达到 $1.25t$, $2.66t$ 和 $2.63t$. 随着 P 从 0.1 增加到 0.5, 体系无序程度增强, 三类无序 ZGNRs 的整体电导进一步下降, 同时透射能隙也进一步扩大, 这是由结构无序诱导的 Anderson 局域化, 因为结构无序越大, 电子波函数将更加局域化, 且有更多的电子波函数发生局域化现象. 当 $P = 0.5$ 时, 体系无序程度达到最大值, 三类无序对应的透射能隙达到 $2.64t$, $2.89t$ 和 $2.90t$. 当 P 从 0.5 进一步增加到 0.9, 体系逐渐接近 4-8 环 ZGNRs, 无序程度下降, 整体电导逐渐提升, 但透射能隙的变化有所不同. 当 $P = 0.9$ 时, 对于第 I 和 II 类无序, 体系透射能隙分别减小到了 $2.51t$ 和 $0.81t$, 但第 III 类无序对应的透射能隙反而增加到了 $3.01t$, 这表明对于不同排列方式, 透射能隙受 P 变化的影响不同. 另一方面, 不同排列方式也会影响透射能隙的大小. 比如, 第 I 类无序在 $P = 0.1$ 和第 II 类无序在 $P = 0.9$ 时透射能隙都较小, 分别为 $1.25t$ 和 $0.81t$. 相对而言, 第 III 类无序 ZGNRs 的透射能隙在不同 P 的影响下显然更加稳定. 我

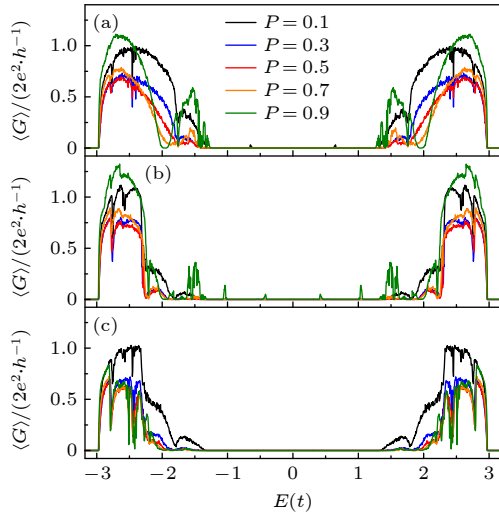


图 3 三类无序 ZGNRs 在不同概率 P 下的 $\langle G \rangle$ 随 E 的变化曲线. (a), (b), (c) 分别对应第 I, II 和 III 类无序 ZGNRs. 对于所有 ZGNRs: $N = 10$, $M = 10000$

Fig. 3. $\langle G \rangle$ as a function of E for three types of disordered ZGNRs for different probabilities P . (a), (b) and (c) correspond to three types of disordered ZGNRs, respectively. Here, $N = 10$ and $M = 10000$ for all disordered ZGNRs.

们指出: 虽然无序 ZGNRs 的电导数值依赖线缺陷排列方式, 但是体系均存在透射能隙且能隙大小基本与线缺陷排列方式无关.

最后固定 $P = 0.5$, 考虑宽度 N 对无序 ZGNRs 输运性质的影响. 图 4(a)–(c) 分别为第 I, II 和 III 类无序 ZGNRs 在不同宽度下平均电导 $\langle G \rangle$ 随能量 E 的变化曲线. 可以看到, 对于三类无序 ZGNRs, 在不同宽度均存在明显的透射能隙, 表明透射能隙的打开对宽度的变化具有稳健性. 伴随着宽度减小, 整体电导也逐渐减弱, 透射能隙也进一步打开. 这是由于宽度减小导致体系透射模式的减少. 另外, 图 4(a)–(c) 插图分别给出了三类无序 ZGNRs 的重整化电导与 E 的关系. 该重整化电导定义为平均电导与相应无序 ZGNR 宽度的比值. 我们看到重整化电导将随宽度增加而趋于稳定.

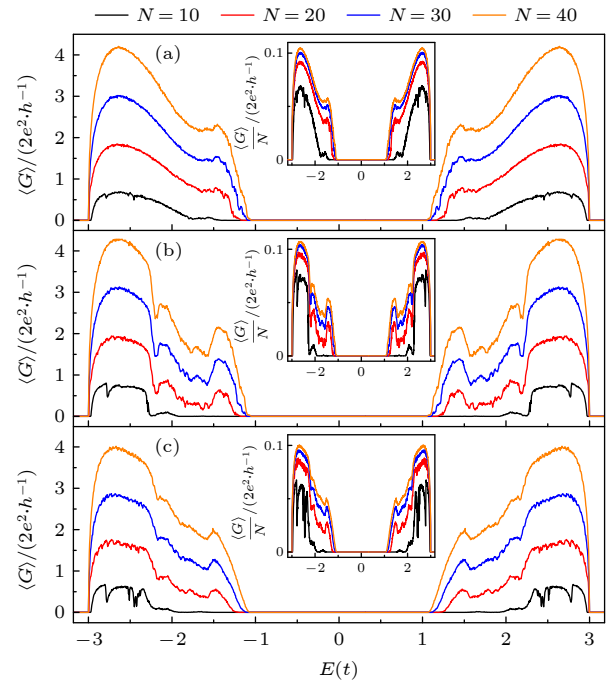


图 4 三类无序 ZGNRs 在不同宽度 N 下的 $\langle G \rangle$ 随 E 的变化曲线. (a), (b), (c) 分别对应第 I, II 和 III 类无序 ZGNRs. 其中插图为重整化电导与 E 的关系, 重整化电导定义为平均电导与无序 ZGNRs 宽度的比值. 对于所有 ZGNRs: $P = 0.5$, $M = 10000$

Fig. 4. $\langle G \rangle$ as a function of E for three types of disordered ZGNRs for different widths N : (a), (b), (c) correspond to three types of disordered ZGNRs, respectively. Here, the insets denote the renormalized conductance which is defined as the ratio of $\langle G \rangle$ to N . $P = 0.5$ and $M = 10000$ for all disordered ZGNRs.

但对于不同排列方式, 在相同宽度下打开的透射能隙大小有所区别. 具体地, 图 5 给出了透射能

隙随体系宽度变化的关系图. 从图 5 可以看出, 对于三类无序, 宽度增加都会导致透射能隙逐渐减小, 这一点与 AGNRs 类似. 但与之不同的是, 对于无序 ZGNRs, 随着宽度增加, 透射能隙减小的速率逐渐减缓. 这意味着, 无序 4-8 环线缺陷 ZGNR 的透射能隙即使在很大宽度下也不会消失, 表现很强的稳健性. 同时可以看到, 当 $N = 10$, 第 I 类无序 ZGNRs 对应的透射能隙略小于第 II 和 III 类无序 ZGNRs. 随着宽度增加, 三类无序 ZGNRs 对应的透射能隙趋于一致. 到 $N = 50$ 时, 三类无序 ZGNRs 所对应的透射能隙大小基本相同. 最后, 我们强调: 由于电子遭受线缺陷的散射随无序 ZGNRs 长度 M 的变小而逐渐减弱, 因此当 M 较小时, 透射能隙内的部分电子态可传导电子, 相应的电导将为有限值. 虽然如此, 较短的无序 ZGNRs (如 $M = 1000$) 仍存在透射能隙.

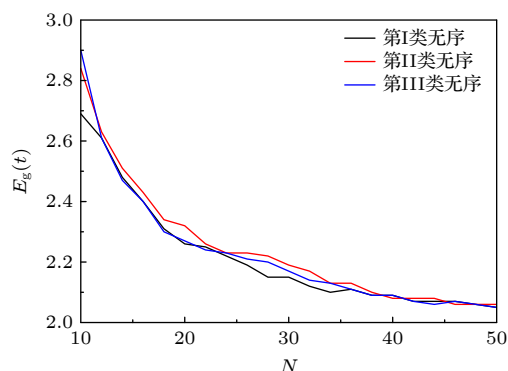


图 5 三类无序 ZGNRs 在费米能级附近的透射能隙 E_g 随宽度 N 的关系. 对于所有 ZGNRs: $P = 0.5$, $M = 10000$
Fig. 5. Size of transmission gaps E_g as a function of N for three type of disordered ZGNRs. Here, $P = 0.5$ and $M = 10000$ for all ZGNRs.

4 结 论

本文采用格林函数方法, 研究了三类具有无序 4-8 环线缺陷结构的 ZGNRs 的电子和输运性质. 计算结果表明, 在 ZGNRs 中随机地引入 4-8 环线缺陷虽然不会直接打开能隙, 但由于结构无序引起的局域化现象会导致费米能级附近电导的迅速下降, 进而打开一个很大的透射能隙. 同时, 发现不同的排列方式在无序程度较弱或纳米带宽度较小时, 会显著影响打开的透射能隙大小, 随着无序程度的增强和纳米带宽度的增加, 三类无序 ZGNRs 打开透射能隙的大小趋于一致. 并且, 该

透射能隙对于排列方式、无序程度和纳米带宽度均表现稳健性.

参考文献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D E, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [2] Beenakker C W J 2008 *Rev. Mod. Phys.* **80** 1337
- [3] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 226801
- [4] Xu X R, Cheng S G 2013 *J. Phys. Condens. Matter* **25** 075304
- [5] Huang Y L, Wang K T, Xing Y, Liu G B, Zhao H K 2019 *Carbon* **143** 641
- [6] Cheng S G, Liu H, Jiang H, Sun Q F, Xie X C 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 156801
- [7] Wei M, Zhou M, Wang B, Xing Y 2020 *Phys. Rev. B* **102** 075432
- [8] Chen X, Zhao H, Zhang Y, Liu L, Yang Z H, Song L L 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 198503 (in Chinese) [陈兴, 赵哈, 张艳, 刘露, 杨志宏, 宋玲玲 2021 物理学报 **70** 198503]
- [9] Fu H Y, Sun F, Liu R, Suo Y Q, Bi J J, Wang C K, Li Z L 2019 *Phys. Lett. A* **383** 867
- [10] Niu L L, Fu H Y, Suo Y Q, Liu R, Sun F, Wang S S, Zhang G P, Wang C K, Li Z L 2021 *Physica E* **128** 114542
- [11] Liu G L, Yang Z H, 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 076301 (in Chinese) [刘贵立, 杨忠华 2018 物理学报 **67** 076301]
- [12] Zhang H Z, Li J T, Lv W G, Yang H F, Tang C C, Gu C Z, Li J J 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 217301 (in Chinese) [张慧珍, 李金涛, 吕文刚, 杨海方, 唐成春, 顾长志, 李俊杰 2017 物理学报 **66** 217301]
- [13] Merino Díez N, Garcia Lekue A, Carbonell Sanromà E, Li J, Corso M, Colazzo L, Sedona F, Sánchez Portal D, Pascual J I, de Oteyza D G 2017 *ACS Nano* **11** 11661
- [14] Zhou M, Jin H, Xing Y 2020 *Phys. Rev. Appl.* **13** 044006
- [15] Hashimoto A, Suenaga K, Glotter A, Urita K, Iijima S 2004 *Nature* **430** 870
- [16] Islam A E, Susner M A, Carpena Núñez J, Back T C, Rao R, Jiang J, Pachter R, Tenney S A, Boeckl J J, Maruyama B 2020 *Carbon* **166** 446
- [17] Lahiri J, Lin Y, Bozkurt P, Oleynik I I, Batzill M 2010 *Nat. Nanotechnol.* **5** 326
- [18] Fei Y, Fu Y, Bai X, Du L, Li Z, Komber H, Low K H, Zhou S, Phillips D L, Feng X, Liu J 2021 *J. Am. Chem. Soc.* **143** 2353
- [19] Liu M, Liu M, She L, Zha Z, Pan J, Li S, Li T, He Y, Cai Z, Wang J, Zheng Y, Qiu X, Zhong D 2017 *Nat. Commun.* **8** 14924
- [20] Fan Q, Yan L, Tripp M W, Krejčí O, Dimosthenous S, Kachel S R, Chen M, Foster A S, Koert U, Liljeroth P 2021 *Science* **372** 852
- [21] Gunlycke D, White C T 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 136806
- [22] Song J, Liu H, Jiang H, Sun Q F, Xie X C 2012 *Phys. Rev. B* **86** 085437
- [23] Tong Z, Pecchia A, Yam C, Dumitrică T, Frauenheim T 2022 *Adv. Energy Mater.* **12** 2200657
- [24] Kong W, Wang R, Xiao X, Zhan F, Gan L Y, Wei J, Fan J, Wu X 2021 *J. Phys. Chem. Lett.* **12** 10874
- [25] Datta S 1995 *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [26] Zhang Y T, Jiang H, Sun Q F, Xie X C 2010 *Phys. Rev. B* **81** 165404

- [27] Chen L, Ouyang F, Ma S, Fang T F, Guo A M, Sun Q F, 2020 *Phys. Rev. B* **101** 115417
- [28] Hu P J, Wang S X, Chen X F, Gao X H, Fang T F, Guo A M, Sun Q F 2022 *Phys. Rev. Appl.* **17** 024074
- [29] Sancho M L, Sancho J L, Rubio J 1984 *J. Phys. F: Met. Phys.* **14** 1205
- [30] Sancho M L, Sancho J L, Sancho J L, Rubio J 1985 *J. Phys. F:Met. Phys.* **15** 851
- [31] 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]

Electron transport in graphene nanoribbons with line defects^{*}

Ding Jin-Ting Hu Pei-Jia Guo Ai-Min[†]

(School of Physics and Electronics, Central South University, Changsha 410083, China)

(Received 1 April 2023; revised manuscript received 12 May 2023)

Abstract

Bandgap engineering in graphene has been a hot topic in condensed matter physics. Although several line defects have been experimentally reported in graphene, the relationship between the bandgap engineering and the line defects has not yet been discussed. In this work, by combining the Green's function method with the Landauer-Büttiker formula, we study theoretically the electron transport along disordered ZGNRs through taking into account three types of line defects which arise from random distribution of 4-8 rings. Our results show that although there exist electronic states around the Fermi energy of the disordered ZGNRs with randomly distributed line defects, all these electronic states are localized and a transmission gap appears around the Fermi energy. This localization phenomenon originates from the structural disorder induced by the randomly distributed line defects. To demonstrate the robustness of transmission gaps, we further calculate the conductance values of disordered ZGNR with different insertion probabilities and widths, finding that the size of transmission gap strongly depends upon the types of disorder, disorder degree, and width. When the disorder degree of line defects is low or the width of the nanoribbon is narrow, there is a notable difference in the size of the transmission gaps among the three types of disordered ZGNRs. As the width or disorder degree increases, the transmission gap size tends to be consistent. Like armchair ZGNRs, the transmission gap size decreases with the increase of width or disorder of ZGNR. Nonetheless, the openings of the transmission gaps in three types of disordered ZGNRs remain robust, regardless of variations in degree of disorder or width. These results are helpful in designing line-defect based nanodevices.

Keywords: graphene nanoribbons, quantum transport, line defects, Green's function

PACS: 73.23.-b, 72.80.Vp, 73.43.Cd, 72.10.Fk

DOI: 10.7498/aps.72.20230502

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12274466), the Hunan Provincial Science Fund for Distinguished Young Scholars, China (Grant No. 2023JJ10058), and the High Performance Computing Center of Central South University, China.

[†] Corresponding author. E-mail: aimin.guo@csu.edu.cn

线缺陷石墨烯纳米带的电输运研究

丁锦廷 胡沛佳 郭爱敏

Electron transport in graphene nanoribbons with line defects

Ding Jin-Ting Hu Pei-Jia Guo Ai-Min

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 157301 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230502

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230502>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

双层硼烯纳米带的量子输运研究

Quantum transport properties of bilayer borophene nanoribbons

物理学报. 2022, 71(22): 227301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221304>

六方氮化硼表面石墨烯纳米带生长与物性研究

Synthesis and characterization of graphene nanoribbons on hexagonal boron nitride

物理学报. 2019, 68(16): 168102 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191036>

石墨烯p-n结在磁场中的电输运热耗散

Thermal dissipation of electric transport in graphene p-n junctions in magnetic field

物理学报. 2022, 71(12): 127203 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220029>

硼或氮掺杂的锯齿型石墨烯纳米带的非共线磁序与电子输运性质

Non-collinear magnetism and electronic transport of boron or nitrogen doped zigzag graphene nanoribbon

物理学报. 2019, 68(2): 027101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181754>

氧气分子吸附对单蒽分子器件自旋输运性质调控

Effects of oxygen adsorption on spin transport properties of single anthracene molecular devices

物理学报. 2020, 69(24): 248501 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201028>

石墨烯纳米带电极同分异构喹啉分子结电子输运性质

Electron transport properties of isomeric quinoline molecule junction sandwiched between graphene nanoribbon electrodes

物理学报. 2019, 68(23): 237302 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191154>