

Quantum Dots Bashed on Graphene Nanoribbons with Staggered Sublattice Potential

Yongjian Xiong

College of Science, Ningbo University, Ningbo

Email: xiongyongjian@nbu.edu.cn

Received: Nov. 11th, 2011; revised: Dec. 16th, 2011; accepted: Dec. 20th, 2011

Abstract: We addressed a proposal for quantum dots of graphene nanoribbons in the presence of staggered sublattice potential. The conductance resonances within low energy range are associated with the quasibond states in the dot. The energy levels of the quasibond states depend on the dot length and the configuration of the staggered potential of the junctions.

Keywords: Graphene; Quantum Dot; Transport

子晶格错位势形成的石墨烯纳米带量子点

熊永建

宁波大学理学院, 宁波

Email: xiongyongjian@nbu.edu.cn

收稿日期: 2011年11月11日; 修回日期: 2011年12月16日; 录用日期: 2011年12月20日

摘要: 根据子晶格错位势提出一种石墨烯纳米带量子点。体系在低能区的电导共振对应量子点区的准束缚态。准束缚态能量主要由量子点的长度以及量子点两端结区的子晶格错位势构形决定。

关键词: 石墨烯; 量子点; 电子输运

1. 引言

石墨烯(Graphene)是单层碳原子晶体, 具有六角形晶格结构, 是真正意义上的二维材料。由于其良好的机械性能, 以及奇特的电、光性质, 自 2004 年制备出来, 石墨烯迅速成为众多领域的研究热点, 有望成为硅半导体后新一代的电子学材料^[1,2]。然而, 要实现其在电子学等领域的应用, 必需制备出实用化的场效应管、量子点等石墨烯纳米电子学器件^[3]。

量子点有准零维的电子结构, 是实现量子储存的基本单元。以往广泛研究的是半导体量子点, 即在半导体异质结处存在的二维电子气上加静电势控制电子的运动, 形成准零维量子点区。由于石墨烯是天然的二维晶格, 人们希望用它制备出结构简单、性能优

良的量子点^[3,4]。实验室制备的石墨烯量子点与半导体量子点的结构很相似, 即刻蚀出尺度为几十纳米的石墨烯片, 形成量子点区^[5-10]。量子点通过狭窄的石墨烯限制区与电子库连接, 是开电子系统, 因而可以测量其输运性质^[5-10]。实验室中的样品观察到库仑振荡^[7]、激发态^[9]、自旋态^[10]等重要特征。

然而, 石墨烯量子点在理论上面临挑战, 即难以把载流子的运动限制在量子点区。首先, 理想的石墨烯样品没有带隙, 电子传播的能量没有限制^[11]。其二, 石墨烯的低能激发态遵守相对论 Dirac 方程, 有 Klein 透射的特性, 即电子可以透射过任意的电势垒, 所以无法用简单的电势场把电子限制在有限的空间区域^[11]。目前理论上提出一些方案, 如在石墨烯样品上加

特定的静电势场, 利用电子的横向运动克服 Klein 透射^[12-14]。另一方案是利用石墨烯纳米带中可能的带隙, 构造石墨烯结限制电子运动, 形成量子点结构^[15-17]。多数的理论模型中, 量子点是完全封闭的电子结构, 与实验上的开量子点有所区别。我们曾根据石墨烯纳米带构造出开的量子点, 其中存在准束缚态^[18]。

最近的研究指出, 通过吸附六角形氮化硼(hexagonal boron-nitride)^[19]或碳化硅(silicon carbide)衬底^[20], 可以在石墨烯的 AB-子晶格上产生不对称的势(称为错位势), 从而在石墨烯的电子能带中产生带隙。最近一些研究考虑这种错位势的效应。文献[21]中讨论了有错位势的锯齿型边界的石墨烯纳米带的电子输运性质。文献[22]中讨论了错位势对锯齿型边界的石墨烯纳米带的电子输运的自旋特性和谷特性的影响。受此启发, 本文考虑用石墨烯纳米带构造透射量子点结构(如图 1)。考虑在金属性的扶手椅型石墨烯纳米带(AGNR)上有两个结区, 其晶格存在错位势。结区限制低能电子运动, 在它们之间形成量子点区。我们将通过计算体系的电导讨论在量子点区的准束缚态。

2. 结构和理论模型

如图 1 所示, 用宽度为 N 的 AGNR 构造量子点, 各部分长度用超晶胞(虚线框内)数目表示。两个结中间为量子点区。左、右结与量子点区的宽度分别为 LL 、 LR 和 LD 。我们考虑两种结构: 图 1(a)表示点-I, 其左右结区的 AB-子晶格有相同的错位势; 图 1(b)表示点-II, 其左右结区的 AB-子晶格有相反的错位势。我们将看到, 左右结的错位势的这种对称性决定其电子结构。

体系的 Hamiltonian 写为

$$H = \sum_i \varepsilon_i c_i^\dagger c_i + \sum_i U_i c_i^\dagger c_i - t \sum_{\langle ij \rangle} (c_i^\dagger c_j + H.c.) \quad (1)$$

式中, c_i^\dagger 是第 i 个格点处电子产生算符, $t = 2.7$ eV 是最近邻碳原子间的跨越能量。计算中将以 t 标度能量。对理想晶格, 取在位能 $\varepsilon_i = 0$, $U_i = \pm U_0$ 是结区的子晶格错位势。我们主要关心量子点上的共振态, 因而没有讨论库仑作用。

我们用 Green 函数方法计算体系的电导。为此,

将无限长系统分为三个区: 半无限长的左(L)、右(R)导线, 中间散射区。中间区包括量子点, 以及左右结区。散射区的 Green 函数为

$$G_D(E) = (E - H_D - \Sigma_L(E) - \Sigma_R(E))^{-1} \quad (2)$$

这里, H_D 是散射区的 Hamiltonian。由于和导线耦合产生的自能函数为

$$\Sigma_L(E) = H_{LD} g_L(E) H_{LD}^+, \quad \Sigma_R(E) = H_{RD} g_R(E) H_{RD}^+ \quad (3)$$

其中 H_{LD} 和 H_{RD} 分别是对应的耦合矩阵, $g_{L,R}(E)$ 是左、右导线的表面推迟 Green 函数。我们用理想 AGNR 的 Bloch 本征传播模计算 $g_{L,R}(E)$ ^[18,23]。这一算法的优点是速度快, 不需要通常算法的自治过程。 $G_D(E)$ 则用递推方法计算。

体系的线性电导用 Landauer-Büttiker 公式计算,

$$G(E) = \frac{2e^2}{h} \text{Tr}[\Gamma_L(E) G_D(E) \Gamma_R(E) G_D^+(E)] \quad (4)$$

其中, 线宽函数 $\Gamma_{L,R}(E) = i[\Sigma_{L,R}(E) - \Sigma_{L,R}^+(E)]$ 。

Green 函数的对角项给出电子在每个格点的局域态密度,

$$\rho_i(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[G_D(i, i, E)] \quad (5)$$

为了描述电子沿传播方向的局域特性, 我们引入超晶胞的局域态密度,

$$\rho_{\text{cell}}(x, E) = \sum_i \rho_i(E) \quad (6)$$

其中求和是对超晶胞内的所有晶格。 x 是该晶胞的平均横向位置, 用碳原子间距 $a_0 \approx 1.42$ Å 标度。

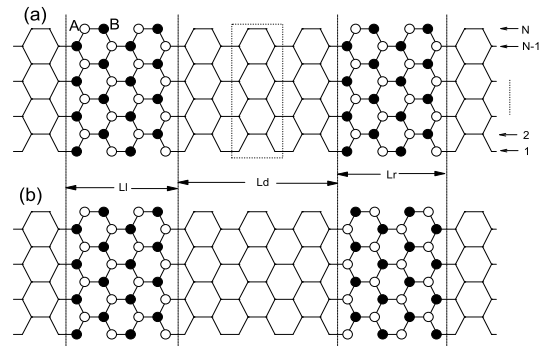


Figure 1. Structures of the quantum dot-I(a), and dot-II(b). The staggered sublattice potential in the junctions, $U_i = U_0$ and $U_i = -U_0$ are denoted as \bullet and \circ , respectively
图 1. 量子点-I(a)和量子点-II(b)结构。结区存在的错位势 $U_i = U_0$ 和 $U_i = -U_0$, 分别用“ \bullet ”和“ \circ ”标记

3. 结果与讨论

首先我们计算体系的线性电导。图 2 显示两种量子点体系的电导随 Fermi 能的变化，它们在低能区出现强烈的电导共振。我们取错位势 $U_0 = 0.1t$ ，而共振主要出现在 $\pm 0.1t$ 能区，可见电导共振源于结区的错位势。由于电子 - 空穴对称性，只显示了负能区的一部分共振峰。两种量子点体系的电导共振存在重要区别：在 $E = 0$ 处，量子点-I 表现为共振峰(图 2(a))，而点-II 为电导谷(图 2(b))。这表明，电导性质与体系的两个结区的错位势构形有关系。两种量子点的电导共振峰近似等间距，当保持 AGNR 的宽度不变而增加量子点区的长度 LD 时，共振峰数随之增加。

为了理解体系电导共振与量子点中的电子结构关系，我们考察图 2 中电导共振所对应的电子态的局域密度分布，如图 3 所示。我们只讨论长度为 $LD = 60$ 的情况，并且只考虑在正能区的电导共振。可以看出，在这些态下电子被强烈限制在量子点区形成准局域态。我们可以得出结论，体系的低能电导共振对应量子点中的准束缚态。这些准束缚态的局域电子态密度 ρ_{cell} 在量子点区(长度为 $180a_0$)表现出驻波行为，因此，准束缚态是两边结区量子限制的结果。我们再分析其对称性。点-I 中左右结错位势相同，但电子波在量子点的左右两个界面处受到反对称的散射，因而其准局域态是反对称的驻波。相反地，点-II 中左右结

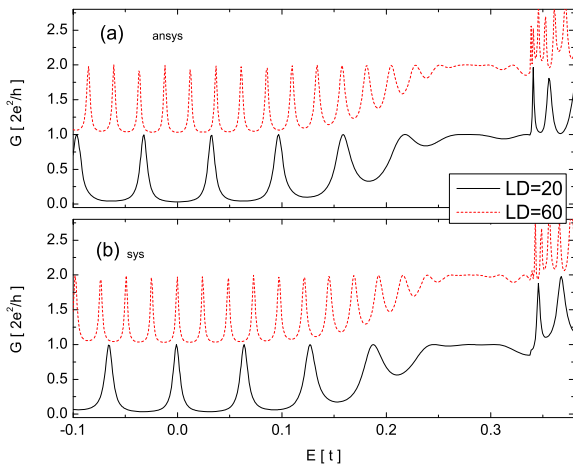


Figure 2. Conductance as a function of the Fermi energy for dot-I (a), and dot-II (b). The curves for $LD = 60$ are displaced by

$$G_0 = 2e^2/h. \text{ The parameters: } N = 14, LL = LR = 6$$

图 2. 点-I(a), 点-II(b)的电导随 Fermi 能的变化。 $LD = 60$ 的电导上移 $G_0 = 2e^2/h$ 。参数: $N = 14, LL = LR = 6$

错位势相反，电子波在左右界面处受到对称的散射，因而其准局域态是对称的驻波。

可以根据驻波性质估算准束缚电子态的能量。理想石墨烯片的能带为^[11]

$$\varepsilon(k) = t\sqrt{1+4f(k)} \quad (7)$$

其中

$$f(k) = \cos\left(\frac{3}{2}k_x a_0\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a_0\right) + \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a_0\right) \quad (8)$$

理想 AGNR 的低能激发态在 Dirac 点 $K = \left[0, 4\pi/(3\sqrt{3}a_0)\right]$ 附近，有线性色散

$$\varepsilon(k)_{\pm} \approx \pm t \frac{3}{2} k_x a_0 \quad (9)$$

图 3 中，量子点区的长度 $LD = 180a_0$ ，所对应的驻波的波长满足 $\Delta k_x \approx \pi/LD = \pi/180a_0$ 。因此，电导共振的能量间隔为 $\Delta\varepsilon \approx 0.026t$ 。可以看出，按驻波估算的准束缚态能量间隔符合图 3 中电导共振峰间距。

以下我们将讨论量子点中准束缚态可能受到的影响。首先我们考虑两个结区的长度不同，特别是当结区有不完整的超晶胞的情况。我们讨论点-II，图 4(b)表示左边结的长度固定为 $LL = 6$ ，右结长度不同时的电导。实线($d = 0$)对应右结长度为 $LR = 4$ 时的电

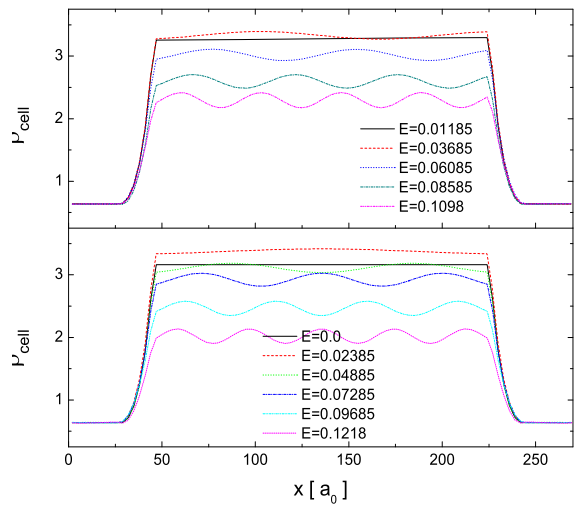


Figure 3. Local density of states of the super cells at the conductance resonances. The parameters: $N = 14, LD = 60, LL = LR = 6$

图 3. 电导共振态所对应的超晶胞的局域电子态密度。参数: $N = 14, LD = 60, LL = LR = 6$

导。此时，虽然两边结区宽度不相同，但电导共振特点没有变化，在 $E=0$ 处为电导峰。考虑把右边结从内侧依次去掉 d 层 ($d=1,2,3$) 晶格，即把这些层的错位势除去。这个过程破坏了结区超晶胞的完整性，但电导共振没有明显改变。计算点-I 也得到同样的结果。这一结果说明，图 2 中两种量子点结构的电导特性(如 $E=0$ 处的电导)是由左右结区的子晶格的错位势的构形决定的，而受结的微观晶格结构影响很弱。

然后我们讨论体系的尺度和无序效应。图 5 中，虚线是将 AGNR 宽度从 $N=14$ 增加到 $N=38$ 时的电导。高能区的电导发生显著增加，表明有更多的通道开始导电。而在低能区，电导共振无明显变化。我们再考虑在结区的错位势存在无序，即 $|U_i|=U_0+w$ 。其中 w 是无序量，计算中取 $w=5U_0$ 。如图中点线所示，在这样的无序强度下，低能区电导共振没有定性变化。峰的位置基本不变，只是峰的宽度增加，高度降低。以上结果说明，我们的量子点结构在实际的样品尺度，以及较强的无序下，其低能准束缚态有很强的稳定性。

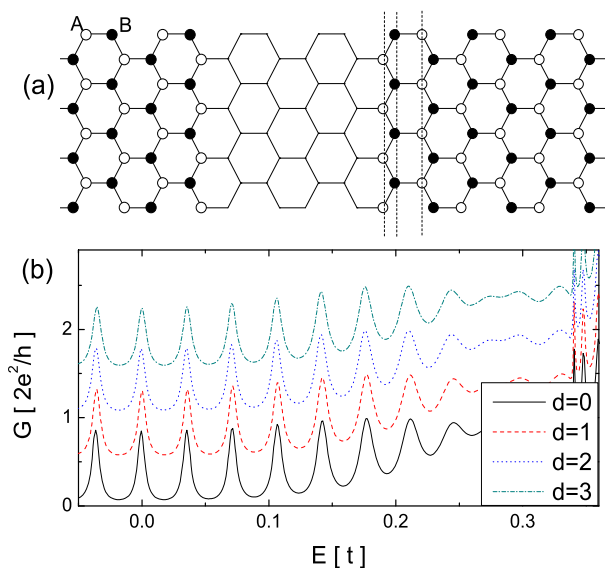


Figure 4. (b) Conductance of dot-II when the right junction has different length. $LD=40$, and the left junction has $LL=6$. The right junction has $LR=4$ when $d=0$. Then the staggered potential is removed for $d=1,2,3$ layers of lattices in turn (as shown by the dashed vertical lines in (a)). The curves are displaced upward by $G_0/2$ in turn

图 4. (b) 在不同右结长度时量子点-II 的电导。 $LD=40$ ，左结固定为 $LL=6$ 。 $d=0$ 时，右结长度为 $LR=4$ ，然后依次去掉 $d=1,2,3$ 层晶格((a)中的垂直虚线所示)的错位势，减少右结的长度。电导曲线依次上移 $G_0/2$

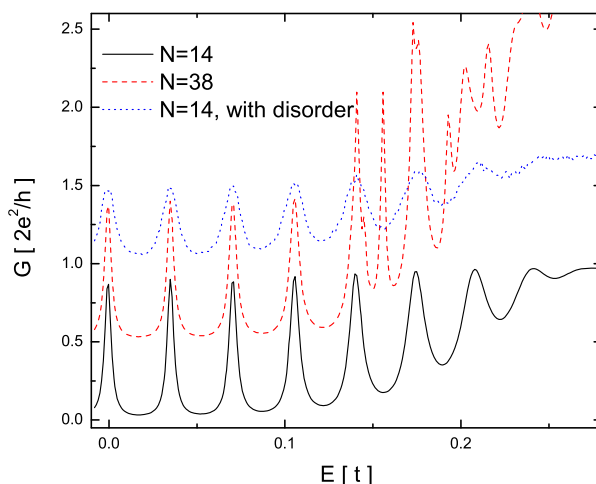


Figure 5. Conductance of dot-II. The solid curve corresponds to $N=14$. The ribbon width is increased to $N=38$ for the dashed curve. The dotted curve corresponds to $N=14$ with disordered staggered potential. The curves are displaced upward by $G_0/2$. The parameters are $LD=40$, $LL=LR=6$

图 5. 量子点-II 的电导。实线对对应的纳米带($N=14$)。虚线表示将纳米带宽度增加到 $N=38$ 。点线保持 $N=14$ ，但结区的错位势存在无序。电导依次移动 $G_0/2$ 。其它参数为 $LD=40$ ， $LL=LR=6$

4. 结论

本文考虑在金属性 AGNR 的部分区域上有子晶格错位势，形成两个有带隙的结。体系的电导在低能区发生电导共振，表明在结间区域存在准束缚电子态而形成透射量子点。准束缚态主要由左右结的错位势构形决定，而相对于体系尺度、无序等表现出很好的稳定性。我们只讨论了扶手椅的石墨烯纳米带，也可以用锯齿型边界的石墨烯带构造量子点。关于量子点中的电子库仑关联将在以后的工作中讨论。

5. 致谢

本文得到国家自然科学基金(No.10804058)和宁波大学研究生教育教学研究项目(YJ08K03)的资助。

参考文献 (References)

- [1] P. Avouris, Z. H. Chen and P. Vasili. Carbon-based electronics. Nature Nanotechnology, 2001, 2(10): 605-615.
- [2] A. K. Geim, K. S. Novoselov. The rise of graphene. Nature Materials, 2007, 6(3): 183-191.
- [3] A. V. Rozhkov, G. Giavaras, Y. P. Bliokh, et al. Electronic properties of mesoscopic graphene structures: Charge confinement and control of spin and charge transport. Physics Report, 2011, 503(2-3): 77-114.
- [4] T. Ihn, J. Güttinger, F. Molitor, et al. Graphene single-electron transistors. Materials Today, 2010, 13(3): 44-50.

- [5] L. A. Ponomarenko, F. Schedin, M. I. Katsnelson, et al. Chaotic dirac billiard in graphene quantum dots. *Science*, 2008, 320(5847): 356-358.
- [6] C. Stampfer, E. Schurtenberger, F. Molitor, et al. Tunable graphene single electron transistor. *Nano Letters*, 2008, 8(8): 2378-2383.
- [7] C. Stampfer, J. Guttinger, F. Molitor, et al. Tunable coulomb blockade in nanostructured grapheme. *Applied Physical Letters*, 2008, 92(1): 012102-012104.
- [8] J. Guttinger, C. Stampfer, S. Hellmuller, et al., Charge detection in graphene quantum dots. *Applied Physical Letters*, 2008, 93(21): 212102-212104.
- [9] S. Schnez, F. Molitor, C. Stampfer, et al. Observation of excited states in a graphene quantum dot. *Applied Physical Letters*, 2009, 94(1): 012107-012109.
- [10] J. Guttinger, T. Frey, C. Stampfer, et al. Spin states in graphene quantum dots. *Applied Physical Letters*, 2010, 105(11): 116801-116804.
- [11] A. H. C. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, et al. The electronic properties of grapheme. *Reviews of Modern Physics*, 2009, 81(1): 109-162.
- [12] P. G. Silvestrov, K. B. Efetov. Quantum dots in grapheme. *Physical Review Letters*, 2007, 98(1): 016802-016806.
- [13] B. Trauzettel, D. V. Bulaev, D. Loss, et al. Spin qubits in graphene quantum dots. *Nature Physics*, 2007, 3(3): 192-196.
- [14] P. Hewageegana, V. Apalkov. Electron localization in graphene quantum dots. *Physical Review B*, 2008, 77(24): 245426-245434.
- [15] Z. F. Wang, Q. W. Shi, Q. X. Li, et al. Z-shaped graphene nanoribbon quantum dot device. *Applied Physical Letters*, 2007, 91(5): 053109-053112.
- [16] Z. F. Wang, Q. X. Li and Q. W. Shi. Ballistic rectification in a Z-shaped graphene nanoribbon junction. *Applied Physical Letters*, 2008, 92(13): 223116-223116.
- [17] Z. P. Xu, Q.-S. Zhen and G.-H. Chen. Elementary building blocks of graphene-nanoribbon-based electronic devices. *Applied Physical Letters*, 2007, 90(22): 223115-223118.
- [18] Y.-J. Xiong, B.-K. Xiong. Resonant transport through graphene nanoribbon quantum dots. *Journal of Applied Physics*, 2011, 109(10): Article ID 103707.
- [19] G. Giovannetti, P. A. Khomyakov, G. Brocks, et al. Substrate-induced band gap in graphene on hexagonal boron nitride: Ab initio density functional calculations. *Physical Review B*, 2007, 76(7): Article ID 073103.
- [20] S. Y. Zhou, G.-H. Gweon, A. V. Fedorov, et al. Substrate-induced bandgap opening in epitaxial grapheme. *Nature Materials*, 2007, 6(10): 770-775.
- [21] Y.-T. Zhang, Q.-F. Sun, X. C. Xie. The effect of disorder on the valley-dependent transport in zigzag grapheme nanoribbons. *Journal of Applied Physics*, 2011, 109(12): Article ID 123718.
- [22] Z. H. Qiao, et al. Spin-polarized and valley helical edge modes in graphene nanoribbons. *Physical Review B*, 2011, 84(3): Article ID 035431.
- [23] H. Xu, T. Heinzl, M. Evaldsson, et al. Magnetic barriers in graphene nanoribbons: Theoretical study of transport properties. *Physical Review B*, 2008, 77(24): Article ID 245401.