

DOI: 10.7652/xjtuxb201502007

采用紧束缚格林函数法研究原子吸附 石墨烯纳米带电子输运

李昕, 张永, 殷德民, 王小力, 刘卫华

(西安交通大学电子与信息工程学院, 710049, 西安)

摘要: 采用紧束缚非平衡格林函数法分析了扶手椅型石墨烯纳米带(AGNR)和锯齿形石墨烯纳米带(ZGNR)器件吸附 H、F、O 和 OH 这 4 种原子的电子输运特性。用 π 电子结构体系的紧束缚理论分析了 GNR 的电子结构;用紧束缚扩展休克尔理论计算了 GNR 碳原子与所吸附原子间的电子相互作用;用非平衡格林函数法仿真了 GNR 吸附原子后的电流特性。研究表明:在平衡态下, AGNR 吸附 H 原子后对器件的输运谱影响最大,而吸附 OH 原子后使 GNR 的禁带宽度增加 0.3 eV;在非平衡态下,吸附 H 原子不仅增加了导带底附近态密度,而且直接在禁带引入了杂质能级,从而提高了 AGNR 器件产生的电流;H 原子吸附在 ZGNR 器件产生的电流约是吸附在 AGNR 电流的 1.5 倍;H 原子吸附在 GNR 非边界处比吸附在边界处产生的电流高。该研究结果可以对提高石墨烯气敏传感器和生物传感器的灵敏度提供理论基础。

关键词: 石墨烯纳米带;原子吸附;紧束缚;格林函数;输运谱

中图分类号: TN304.9 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-987X(2015)02-0037-06

Electronic Transport Properties of Atom Adsorption Graphene Nanoribbon Devices Based on Tight Binding Green's Function Method

LI Xin, ZHANG Yong, YIN Demin, WANG Xiaoli, LIU Weihua

(School of Electronics and Information Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: Electron transport properties of four kinds of atoms H, F, O and OH to adsorb armchair graphene nanoribbons (AGNR) and zigzag graphene nanoribbons (ZGNR) device are studied by using the tight binding non equilibrium Green function method. The electronic structure of GNR is analyzed using the tight binding theory of π electron structure. The electronic interaction among adsorbed atoms and GNR carbon atoms is calculated based on the expansion shock theory. The current characteristics of GNR adsorbing atoms are calculated using the non equilibrium Green function. The results show that the adsorption of H atoms has the greatest impact on the AGNR device transport spectrum in four kinds of atoms and the adsorption of OH atoms increases 0.3 eV of band gap at an equilibrium state, and that the current from H atom adsorption is larger than that of the other atoms at a non equilibrium state, because H atom adsorption not only increases density of states near the bottom of the conduction band, but also introduces impurity energy level in the band gap directly. The current from H atoms in ZGNR is 1.5 times higher than that from AGNR and the current of H atomic adsorption in middle of GNR

收稿日期: 2014-08-09。 作者简介: 李昕(1968—),女,副教授;王小力(通信作者),男,教授,博士生导师。 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(91123018,61172041,61172040);陕西省自然科学基金资助项目(2014JM7277)。

网络出版时间: 2014-11-13

网络出版地址: <http://www.cnki.net/kcms/detail/61.1069.T.20141113.1028.001.html>

is higher than that of its edge. The results provide a theoretical basis for improving the sensitivity of graphene gas sensors and biosensors.

Keywords: graphene nanoribbons; atomic adsorption; tight binding; Green's function; transmission spectra

对无机分子和高分子等的高灵敏度、高分辨率检测在生物和化学领域一直受到关注。在医学领域的理想分辨率甚至达到单个分子或原子的级别^[1-4]。石墨烯的发现和其优越的电学特性开启了对这个材料越来越多的研究热潮。因为石墨烯的晶格完整,载流子迁移率高,可以感知单个分子和原子的吸附引起的能带结构和电子输运变化,进而影响器件的输出特性。这种微弱电流特性变化的检测可以识别吸附气体或原子的属性^[5],这使得石墨烯纳米带(graphene nano ribbon, GNR)器件在传感器领域有了很好的应用前景。

关于 GNR 的气体吸附特性已经有了较多的研究报道^[6-8]。以密度泛函理论为核心的第一性原理被用来计算不同原子吸附在 GNR 上的电子结构,分析吸附原子与 GNR 之间的电荷转移,判断原子的最稳定吸附位置和原子吸附对 GNR 几何结构的影响^[9]。这种方法能精确地处理 GNR 的电子分布问题,但是计算时间较长。GNR 的能带也可以通过最近邻紧束缚法快速求得^[10],但该方法仅考虑了被吸附原子与 GNR 之间的 π 电子作用。将紧束缚理论和密度泛函理论二者相结合的扩展休克理论能较好地处理所有价电子的相互作用关系^[10]。关于 GNR 器件特性分析,目前主要采用基于非平衡格林函数法的量子输运模型,该模型可以分析关于不同边界结构的 GNR 器件的电子输运特性^[11-12],以及分析 GNR 吸附不同原子引起的电子分布、电子输运变化等。

本文在 GNR 平面通过吸附原子构造新的沟道结构,并尝试从器件的角度来探索其输运特性。用紧束缚理论分析原子吸附下 GNR 的电子结构,用扩展休克理论分析吸附原子与 GNR 的相互作用,以及不同吸附原子对 GNR 器件的输运谱、态密度和电流的影响。在输运求解过程中,通过引入自能矩阵将包含吸附原子的 GNR 体系的哈密顿矩阵转化成吸附原子对 GNR 哈密顿矩阵的修正,用求解二维结构电子输运方法来实现复杂的准三维结构电子输运问题的求解。

1 含有原子吸附的 GNR 器件求解

GNR 器件的电子输运求解主要包括器件电子

结构分析,器件静电特性分析和量子输运分析 3 个过程。含原子吸附的 GNR 电子结构主要包括 GNR 自身的电子结构、吸附原子的电子结构和 GNR 与吸附原子之间的电荷转移。用紧束缚理论描述含吸附原子的 GNR 体系^[13]方程如下

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_{\text{GNR}} + \mathbf{H}_{\text{a}} + \mathbf{H}_{\text{int-GNR}} \quad (1)$$

式中: $\mathbf{H}_{\text{GNR}}$ 是 GNR 的哈密顿矩阵; $\mathbf{H}_{\text{a}}$ 是吸附原子自身的哈密顿矩阵; $\mathbf{H}_{\text{int-GNR}}$ 是 GNR 和吸附原子的作用矩阵。在量子输运中,纳米器件的电极对沟道注入电子的过程可以用自能矩阵来描述,吸附原子与 GNR 之间的电荷转移过程也可以理解成吸附原子对 GNR 的电子注入或吸收。所以,含吸附原子的 GNR 体系的哈密顿矩阵可以认为是 GNR 吸附原子前的哈密顿矩阵加上吸附原子对被吸附碳原子的位能矩阵和被吸附碳原子与其最近邻 3 个碳原子相互作用的矩阵。这样,含有吸附原子的 GNR 体系的哈密顿量可以写成二维矩阵形式

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \mathbf{H}_{\text{GNR}} & \mathbf{H}_{\text{GNR-a}} \\ \mathbf{H}_{\text{a-GNR}} & \mathbf{H}_{\text{a}} \end{bmatrix} \quad (2)$$

式中: $\mathbf{H}_{\text{GNR-a}}$ 是 GNR 对吸附原子的作用矩阵; $\mathbf{H}_{\text{a-GNR}}$ 是吸附原子对 GNR 的作用矩阵。

用格林函数法处理二维哈密顿矩阵,可以得到 GNR 体系的格林函数为

$$[\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H}_{\text{GNR}} - \mathbf{H}_{\text{GNR-a}}(\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H}_{\text{a}})^{-1}\mathbf{H}_{\text{a-GNR}}]\mathbf{G}_{\text{GNR}} = \mathbf{I} \quad (3)$$

式中: $\mathbf{E}$ 是能量; $\mathbf{I}$ 是单位矩阵; $\mathbf{G}_{\text{GNR}}$ 是 GNR 哈密顿矩阵的格林函数。

GNR 在受到吸附原子影响下的有效哈密顿矩阵为

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = \mathbf{H}_{\text{GNR}} + \mathbf{H}_{\text{GNR-a}}(\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H}_{\text{a}})^{-1} + \mathbf{H}_{\text{a-GNR}} \quad (4)$$

用非平衡格林函数求解 GNR 器件的输运过程,要考虑电极电压对格林函数的影响。沟道的非平衡格林函数为^[14]

$$\mathbf{G} = [\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H}_{\text{int-GNR}} - \mathbf{U} - \mathbf{\Sigma}_{\text{S}} - \mathbf{\Sigma}_{\text{D}}]^{-1} \quad (5)$$

式中: $\mathbf{\Sigma}_{\text{S}}$ 和 $\mathbf{\Sigma}_{\text{D}}$ 分别是源和漏的自能矩阵,它反映半无限电极对沟道哈密顿矩阵的非共轭部分,其表达式为

$$\mathbf{\Sigma}_{\text{S,D}} = \mathbf{t}_{\text{S,D}}\mathbf{G}\mathbf{t}_{\text{S,D}}^{\text{T}} \quad (6)$$

式中: $\mathbf{t}_{\text{S,D}}$ 为沟道与源漏电极的耦合矩阵; $\mathbf{G}$ 是电极

的表面格林函数,它只考虑电极中与沟道相连原子的作用,而 $\mathbf{G}_{\text{GNR}}$ 考虑了所有电极原子; U 为沟道的电压分布,可以通过求解泊松方程来得到。根据二维泊松方程在沟道中的碳原子构成的 GNR 正六边形网格上的差分格式可以得到沟道电压为^[14]

$$U = \frac{q^2}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left(\frac{3}{4} a^2 \right) \mathbf{n}(r) \mathbf{D}^{-1} + \mathbf{U}_b \mathbf{D}^{-1} \tag{7}$$

式中: a 是 GNR 晶格常数; ϵ_0 和 ϵ_r 分别是真空介电常数和 GNR 的相对介电常数; $\mathbf{n}$ 是碳原子处的电荷密度; $\mathbf{U}_b$ 为电势的边界条件; $\mathbf{D}$ 为二阶导的矩阵算符。最后通过广义 Landauer Formalism 的公式可以得到在非平衡条件下沟道电流方程

$$I = \frac{2e}{h} \int \frac{dE}{2\pi} T(\mathbf{E}) [f_1(\mathbf{E}) - f_2(\mathbf{E})] \tag{8}$$

式中: h 为普朗克常量; e 为电子电荷; $f_1(\mathbf{E})$ 、 $f_2(\mathbf{E})$ 分别为左、右电极的费米分布。

2 结果和讨论

在这里主要讨论的是含原子吸附的扶手椅型 GNR (armchair GNR, AGNR) 两端器件的电流特性。图 1 为器件结构示意图,两端的源电极和漏电极都采用与沟道相同边界结构的 AGNR,单个原子吸附在沟道中 AGNR 上的 A 点位置,即近邻边界的碳原子上。以下研究 H、F、OH 和 O 这 4 种原子的吸附对 AGNR 两端器件电流特性的影响。4 种原子被吸附后会与 AGNR 表面的碳原子成键而构成最稳定的吸附位置,H、F、OH、O 距离石墨烯中碳原子的距离分别是 0.035、0.036、0.041 和 0.147 nm,如图 2 所示。不同原子的吸附对 GNR 紧束缚参数的影响见表 1^[13]。表 1 中 E_a 是吸附原子对碳原子的位能影响参数,它是从 GNR 的狄拉克点计算得

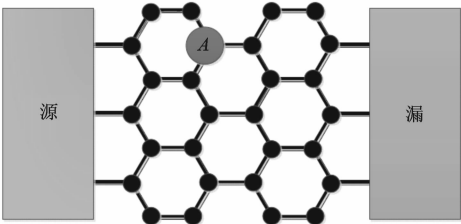


图 1 含原子吸附的 AGNR 两端器件示意图

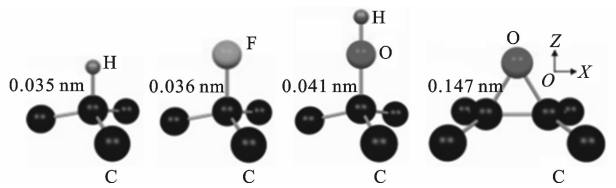


图 2 4 种原子与 AGNR 表面碳原子成键结构示意图

到的, $\gamma_{a-C,2p_z}$ 反映了被吸附原子的电子与吸附碳原子的 $2p_z$ 轨道电子之间的相互作用能, $\gamma_{C,2p_z-2p_z}$ 是吸附碳原子的 $2p_z$ 轨道电子在被吸附原子的微扰下与最近邻碳原子的 $2p_z$ 轨道电子相互作用能的修正值。 E_a 、 $\gamma_{a-C,2p_z}$ 和 $\gamma_{C,2p_z-2p_z}$ 都是与碳原子 π 轨道电子相互作用能的比值,所有电子轨道的作用不包括碳原子的 $2s$ 、 $2p_x$ 和 $2p_y$ 原子价电子轨道。假设吸附原子只对被吸附的碳原子有作用,而不影响 GNR 的结构,可以得到这些吸附模型的哈密顿矩阵为

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_\pi + \mathbf{H}_{\text{eff}} = \mathbf{H}_\pi + \sum \gamma_{C,2p_z-2p_z} + \gamma_{a-C,2p_z} (\mathbf{E}I - \epsilon_a)^{-1} \gamma_{a-C,2p_z} \tag{9}$$

式中: $\mathbf{H}_\pi$ 是沟道石墨烯带碳原子 π 轨道电子的哈密顿矩阵, $\mathbf{H}_{\text{eff}}$ 是吸附原子对沟道石墨烯带哈密顿矩阵的影响; $\mathbf{E}$ 是能量。

表 1 GNR 吸附不同原子后的紧束缚参数

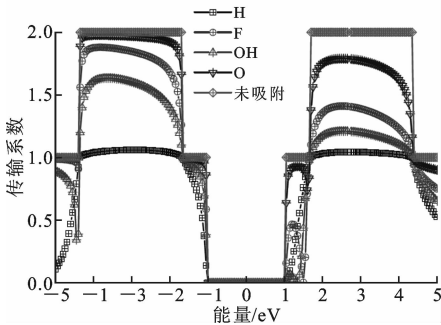
原子	电子轨道	E_a	$\gamma_{a-C,2p_z}$	$\gamma_{C,2p_z-2p_z}$
H	1s	-0.81	1.89	0.79
F	2s	-10.59	4.70	0.79
F	2p _z	-2.48	1.45	
OH	2s ⁰	-7.74	4.10	0.73
OH	2p _z ⁰	-1.26	1.24	
OH	1s ^H	-0.81	0.36	
O	2s	-7.74	3.47	0.92
O	2p _x	-1.26	±0.80	
O	2p _z	-1.26	0.76	0.89

2.1 不同原子的吸附对 AGNR 器件输运谱和态密度的影响

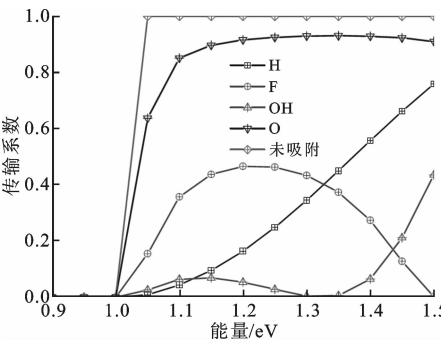
假设原子吸附在 AGNR 器件沟道中,H、F、O 和 OH 这 4 种原子都吸附在相同的位置上,即图 1 中的 A 位置。根据前面的理论分析进行求解,得到器件在平衡态的传输系数和非平衡态的态密度 (DOS) 特性如图 3 和图 4 所示。

通常的,只有费米能级附近电子的输运才能产生电流,所以重点讨论吸附原子在费米能级附近引起的态密度和传输系数的变化。在平衡态下,费米能级取在能量为零的位置。对比分析图 3a 的 5 种情况可知,H 的吸附对器件传输系数的影响最大,在电子能量为 1.5~4.5 eV 范围内,对比没有吸附原子的情况,所有吸附原子都使传输系数下降,其中吸附 H 后从 2.0 下降到 1.0 附近,下降范围最大。在电子能量为 1.0~1.5 eV 范围内,其他吸附原子的下降幅度较小,H 原子引起传输系数的下降最大

特别是在 1.0 eV 附近(见图 3b)。值得注意的是, GNR 在吸附 OH 原子后,在 1.0~1.5 eV 范围内器件的传输系数几乎为 0,使禁带宽度增加了 0.3 eV,这说明 OH 原子吸附有增加禁带宽度的趋势。



(a) 电子能量范围为-5~5 eV 时的传输系数



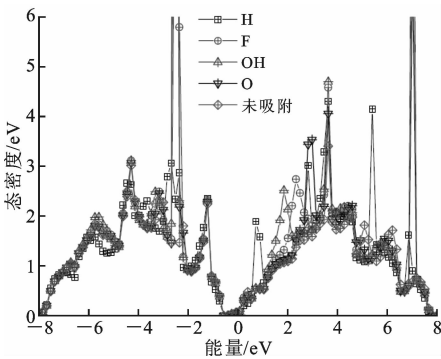
(b) 电子能量范围为 0.9~1.5 eV 时的传输系数

图 3 平衡态(0 V 偏压)下吸附与未吸附 4 种原子时 AGNR 器件的输运谱

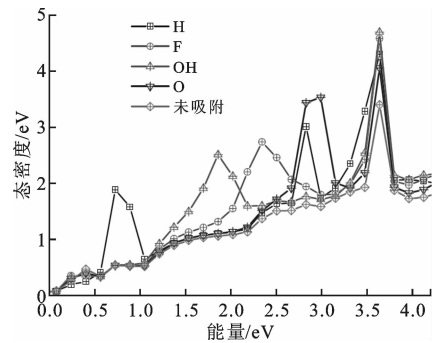
在非平衡态下(两端施加 1 V 电压),价带顶附近(电子能量在-4~0.5 eV 之间)不同原子的吸附对态密度影响不大。不过在导带底附近(电子能量在 0~4 eV 之间)吸附原子对态密度影响较大,从左至右依次出现几个尖峰,对应的分别为吸附 H、OH、F 和 O 原子(见图 4b),这说明吸附 H 原子对靠近导带底附近态密度增加贡献最大,有利于电流的传输。图 4b 中也发现 O 原子在非占据态的态密度的峰值最大,但是它离费米能级较远,所以对电子的输运贡献较小,同样,图 4a 中虽然没有吸附原子的 AGNR 在占据态的态密度峰值也很大,但是它离费米能级较远,所以对电子的输运贡献也较小。

2.2 不同原子吸附对 AGNR 器件电流的影响

分别吸附 H、F、O 和 OH 4 种原子后 AGNR 器件的电流特性如图 5 所示。从图中可以看出,器件吸附原子后电流都增加了,但是增加的幅度不同,这主要是因为不同原子与 AGNR 碳原子成键后的电荷转移特性不同所导致。要从吸附原子的核外电子



(a) 电子能量为-8~8 eV 范围时的态密度



(b) 电子能量为 0~4 eV 范围时的态密度

图 4 非平衡态(1 V 偏压)下吸附与未吸附 4 种原子时 AGNR 器件的态密度分布特性曲线

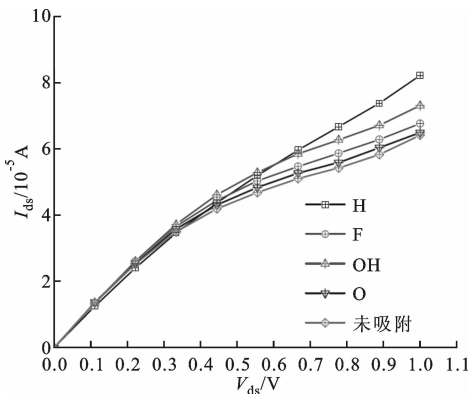


图 5 AGNR 器件吸附与未吸附 4 种原子后的电流特性曲线

轨道分布和与碳原子的成键方式来分析吸附原子对 AGNR 器件电流的影响。

由图 5 可以明显看到,吸附 H 原子产生的电流最大,这是因为 H 原子的 1s 轨道对器件的电导影响最大,且与 C 原子的距离最近(参见图 2),与 C 原子的 2p_z 轨道交叠的比较多。其后依次为 OH、F 和 O 原子。F 原子有 2 个共价轨道,分别为 2s 和 2p_z,在紧束缚模型中,这 2 个轨道代表 2 个独立的电子输运沟道,其输运特性正比于 $\gamma_{\text{H-C}, 2p_z}$ 的大小,所以从表 1 中可见,2s 比 2p_z 对电导的贡献更大。

OH 与 AGNR 的吸附原理主要是 O 原子在 C 原子正上方与 C 共价成键,O 和 F 原子一样通过 2s 和 2p π 轨道影响电子的电导。由于 O 的电导特性和 F 原子的比较类似,因此吸附了 F 和 OH 之后器件的电流均小于吸附 H 的电流。只有 O 原子是二价的,它与 2 个相邻的 C 原子进行成键,不像其他 3 种原子只与 AGNR 的一个碳原子成键或者吸附,而是与 AGNR 的 2 个不同晶胞原子进行杂化,抑制了电子在石墨烯带中的传导,所以吸附 O 原子产生的电流最小。

在吸附原子和被吸附碳原子及其相邻碳原子处容易形成电子局域化现象是 GNR 器件的特点,特别在狄拉克点附近更是如此,以下通过 AGNR 器件吸附 H、F、OH 和 O 原子后的局域态密度变化来分析电流特性。图 6 所示分别为 H、F、OH 和 O 吸附在 AGNR 后的局域态密度和总体态密度分布对比图。AGNR 器件吸附 H 原子后在禁带引入了杂质能级,所以减小了原来 AGNR 器件的禁带宽度。在图 6a 中引入的杂质能级与导带相邻,不是深局域能级,该能级的电子较容易跳跃到导带参与电子传输,所以有利于提高器件的电流。AGNR 器件吸附 F、OH 和 O 原子后并没有像吸附 H 原子那样直接在禁带引入了杂质能级(见图 6b~6d),而是在占据态和非占据态分别引入能级进行杂化,所以这些引入能级是非局域态的。由图 6c 可见,OH 原子引入能级最接近导带底,紧接着分别是 F 原子和 O 原子引入的能级。这与图 5 的电流增加趋势相吻合。虽然,这 3 种吸附原子使占据态和非占据态的态密度都得到相应的提高,但是由于真正参与运输的电子多分布在导带底或价带顶处,所以这些非局域态能级对提高 GNR 器件电流的贡献不如 H 原子大。

2.3 石墨烯吸附 H 原子在不同位置对器件电流的影响

由于 GNR 器件的电子在整个沟道区进行传输,在边界处的吸附位置的不同对输运谱有很大影响,所以分别针对扶手椅型(AGNR)和锯齿形(zigzag GNR,ZGNR)2 种边界的石墨烯带中比较有代表的位置,即边界和近邻边界的碳原子上,研究 H 原子吸附位置和器件电流的相关关系。图 7 是 AGNR 和 ZGNR 不同位置上吸附 H 原子示意图。其中位置 1 代表吸附物在 AGNR 的边界碳原子上,2 代表吸附物在 AGNR 的非边界碳原子上,3 代表吸附物在 ZGNR 的边界碳原子上,4 代表吸附物在 ZGNR 的非边界碳原子上。2 种类型的 GNR 的长和宽尺

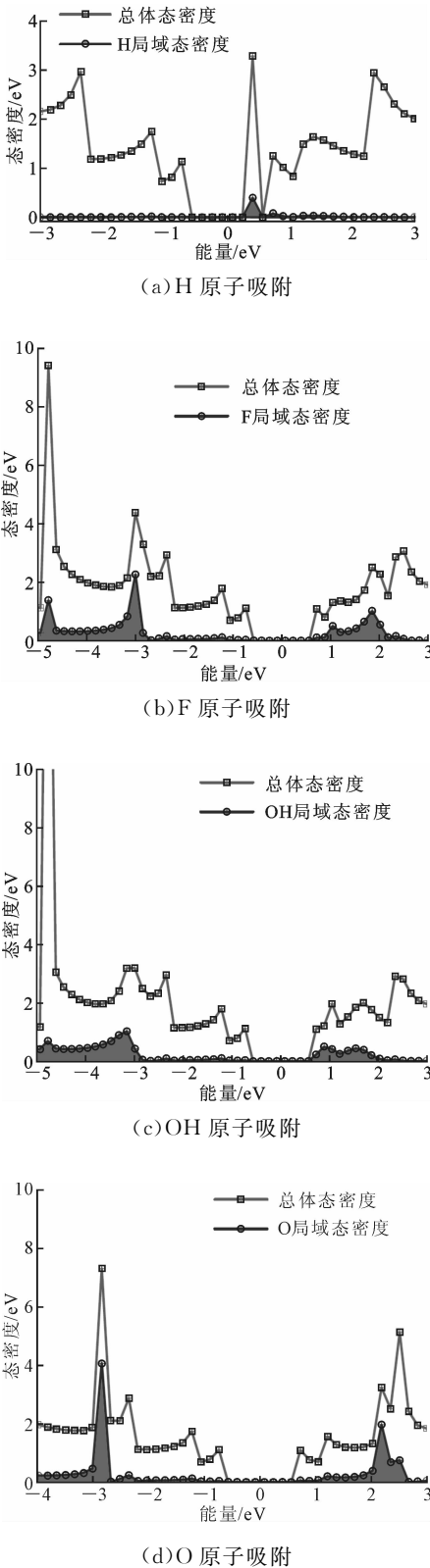


图 6 4 种原子吸附在 GNR 上的局域态密度和总体态密度分布图

度都在 1 nm 左右,其中 AGNR 的长为 0.71 nm,宽为 0.74 nm,ZGNR 的长为 0.61 nm,宽为 0.71 nm。得到的 4 种电流特性如图 8 所示,可以看到 H 原子

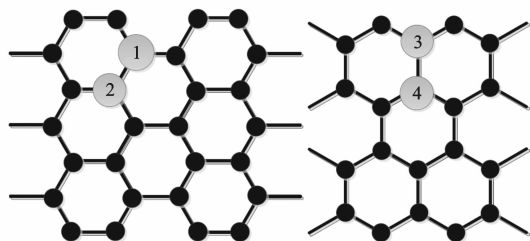


图7 AGNR和ZGNR不同位置上吸附H原子示意图

吸附在ZGNR非边界时得到的电流最大,而且无论吸附在边界还是非边界,ZGNR器件产生的电流大约是AGNR器件产生电流的1.5倍。H原子吸附在非边界时的电流比在边界时的电流要高,这与器件的边界状态有关,这也表明电子在GNR的输运是沿着一定路径的。相比较而言,ZGNR更有前途成为气敏传感器的敏感材料。

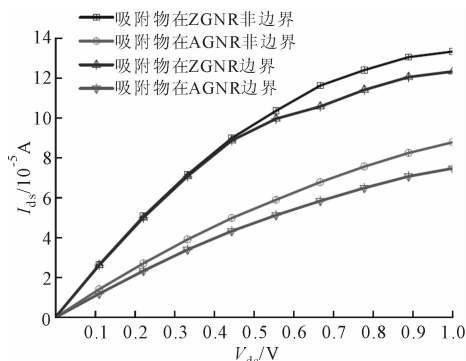


图8 不同位置上吸附H原子的GNR器件电流特性

3 总结与展望

本文基于紧束缚格林函数法分析了AGNR和ZGNR两端器件吸附H、F、OH和O的输运特性。主要探讨不同原子吸附对器件输运谱、态密度和电流的影响,也初步分析原子吸附位置和器件边界结构对电流的影响。平衡态下,吸附H原子后对AGNR器件的输运谱影响最大,而吸附OH原子有增加禁带宽度的趋势。非平衡态下,吸附H原子一方面增加了导带底附近态密度,这是因为H原子的1s轨道对器件的电导影响最大,且与C原子的距离最近,与C原子的2p_z轨道交叠得比较多。其后依次为OH、F和O原子。另一方面,H原子的吸附直接在禁带引入了杂质能级,对AGNR器件产生的电流最大,而F、OH和O原子的吸附只是在占据态和非占据态分别引入非局域态能级进行杂化,对电流的贡献较小。将单个H原子分别吸附在AGNR和ZGNR的边界和非边界的碳原子上,发现后者得到的电流更大。而无论边界还是非边界,H原子吸附

在ZGNR得到的电流是吸附在AGNR电流的1.5倍。对GNR器件吸附特性的分析不仅有助于GNR传感器的研究,而且采用不同的原子吸附也可以构造新的器件结构。

参考文献:

- [1] PEREIRA V M, DOSSANTOS J M B L, NETO A C. Modeling disorder in graphene [J]. *Physical Review*; B, 2008, 77(11): 115109.
- [2] FASOLINO A, LOS J, KATSNELSON M I. Intrinsic ripples in graphene [J]. *Nature Materials*, 2007, 6(11): 858-861.
- [3] NAKADA K, FUJITA M, DRESSELHAUS G, et al. Edge state in graphene ribbons: nanometer size effect and edge shape dependence [J]. *Physical Review*; B, 1996, 54(24): 17954-17961.
- [4] 李昕, 郭士西, 宋辉, 等. 石墨烯晶体管研究进展 [J]. *西安交通大学学报*, 2014, 48(10): 1-8.
LI Xin, GUO Shixi, SONG Hui, et al. Latest advance of researches on graphene transistors [J]. *Journal of Xi'an Jiaotong University*, 2014, 48(10): 1-8.
- [5] 李昕, 张娟, 李全福, 等. 面向集成电路的大尺寸单晶石墨烯的可控制备方法 [J]. *西安交通大学学报*, 2014, 48(6): 103-109.
LI Xin, ZHANG Juan, LI Quanfu, et al. A controllable preparation method for IC oriented large scale single crystal graphene [J]. *Journal of Xi'an Jiaotong University*, 2014, 48(6): 103-109.
- [6] HUANG B, LI Z, LIU Z, et al. Adsorption of gas molecules on graphene nanoribbons and its implication for nanoscale molecule sensor [J]. *The Journal of Physical Chemistry*; C, 2008, 112(35): 13442-13446.
- [7] LU G, OCOLA L E, CHEN J. Gas detection using low-temperature reduced graphene oxide sheets [J]. *Applied Physics Letters*, 2009, 94(8): 083111.
- [8] XUE Y Q, DATTA S, RATNER M A. First-principles based matrix Green's function approach to molecular electronic devices: general formalism [J]. *Chemical Physics*, 2002, 281(2/3): 151-170.
- [9] ATACA C, AKTURK E, ŞAHİN H, et al. Adsorption of carbon adatoms to graphene and its nanoribbons [J]. *Journal of Applied Physics*, 2011, 109(1): 013704.
- [10] REICH S, MAULTZSCH J, THOMSEN C, et al. Tight-binding description of graphene [J]. *Physical Review*; B, 2002, 66(3): 035412.

(下转第61页)