

Graphen Nanobänder

Theorie-Seminar: Elektronische Eigenschaften von Graphen

Ausarbeitung zum Vortrag am 18.05.09, Andreas Zusan, Universität Konstanz

1 Motivation

In den bisherigen Betrachtungen zu Graphen, wie dem Tight-Binding-Modell, der darauf basierenden Näherung für Anregungen in der Umgebung der Dirac-Punkte oder den Rechnungen zu zweilagigem Graphen, wurde immer von einem unendlich ausgedehnten System ausgegangen. Es wurde stets die Annahme der Translationsinvarianz in beide Raumrichtungen gemacht und keinerlei Randeffekte beachtet. Von großer Bedeutung sind jedoch auch Graphen-Strukturen in sehr kleinem Massstab, bei denen diese Annahme in mindestens einer Raumrichtung nicht mehr haltbar ist. Derartig kleine Graphen-Strukturen könnten z.B. in der Nanoelektronik ihre Anwendung finden.

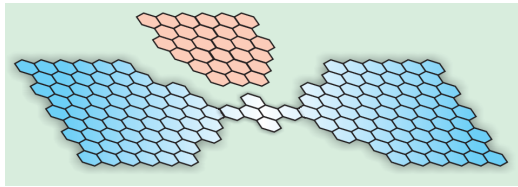


Abb. 1.1: Schematische Darstellung eines elektronischen Schalters aus Graphen. Der Ladungsfluss über den zentralen Quantendot zwischen den beiden Graphen-Elektroden (blau) kann über die Gate-Elektrode (rot) gesteuert werden. [1]

Auf Grund einer sehr hohen Elektron-Mobilität ($\mu \approx 2 \cdot 10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [7], zum Vergleich: $\mu \approx 10^3 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ für Silizium), die kaum von der Temperatur abhängt, sowie der sehr hohen Stabilität, die für Strukturen bis in die molekulare Größenordnung erhalten bleiben, sind in Zukunft Schaltkreise denkbar, die vollständig aus Graphen gefertigt sind (Abbildung 1.1). Jedoch weist die Bandstruktur von (Bulk-)Graphen (Abbildung 1.2) an den Ladungsneutralitätspunkten eine verschwindende Bandlücke auf.

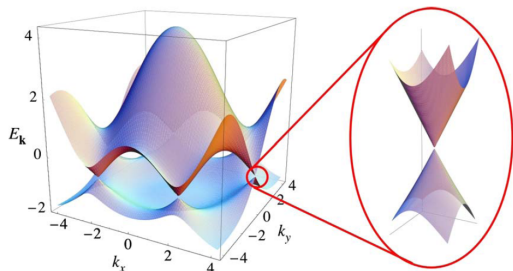


Abb. 1.2: Bandstruktur von Graphen. Der Ausschnitt zeigt die nahezu lineare Dispersion in der Umgebung der Ladungsneutralitätspunkte. [2]

Denkt man an den Einsatz von Graphen an Stelle von halbleitenden Materialien wie Silizium oder Galliumarsenid, stellt sich die Frage, ob unter speziellen Bedingungen auch hier eine endliche Bandlücke existiert. Dies ist z.B. für zweilagiges Graphen in einem externen Feld der Fall, aber, wie die folgenden Rechnungen zeigen werden, auch für Graphen Nanobänder. Die elektronischen Eigenschaften hängen dabei jedoch sehr stark von der Randart und der Größe des betrachteten Bandes ab.

2 Rückblick: Gitterstruktur und Dirac Gleichung für Graphen

2.1 Gitterstruktur, Hamilton-Operator, Wellenfunktionen

In Abbildung 2.1 ist die Gitterstruktur von Graphen gezeigt. Es handelt sich um ein hexagonales Gitter, das durch die beiden primitiven Einheitsvektoren $\mathbf{a}_1 = a_0(1,0)$ und $\mathbf{a}_2 = a_0(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$ sowie eine zweiatomare Basis, Atome A und B, aufgespannt wird. Die Größe a entspricht dem Abstand nächster Nachbarn, a_0 der Gitterkonstanten, die mit dem Abstand übernächster Nachbarn zusammenfällt. Die beiden Größen sind verknüpft über die Beziehung $a_0 = \sqrt{3}a$. Auf Grund der Struktur des direkten Gitters besitzt auch das reziproke Gitter eine hexagonale Symmetrie (Abbildung 2.1). Von besonderer Bedeutung sind die Eckpunkte der ersten Brillouin-Zone, die sog. Dirac-Punkte oder Ladungsneutralitätspunkte, an denen sich Valenz- und Leitungsband gerade berühren (Abbildung 1.2). Dabei existieren zwei inäquivalente Eckpunkte, die im Folgenden mit \mathbf{K} und \mathbf{K}' bezeichnet werden.

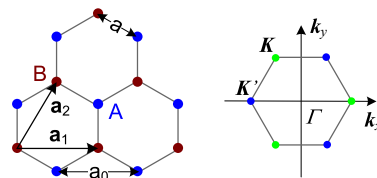


Abb. 2.1: Direktes und reziprokes Gitter von Graphen mit den Einheitsvektoren \mathbf{a}_1 und \mathbf{a}_2 , Untergitter A und B, dem Abstand nächster und übernächster Nachbarn a und a_0 sowie den Dirac-Punkten \mathbf{K} und \mathbf{K}' .

Die elektronischen Eigenschaften niederenergetischer Anregungen, d.h. Zuständen in der Umgebung von \mathbf{K} und \mathbf{K}' , können auf Basis des Tight-Binding-Modells in einer Effektiven-Massen-Näherung um \mathbf{K} bzw. \mathbf{K}' durch eine Gleichung beschrieben werden, die formal

der Dirac-Gleichung für masselose Teilchen entspricht:

$$\gamma a_0 \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \psi(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi(\mathbf{r}), \quad (1)$$

$$\gamma a_0 \begin{pmatrix} 0 & p_x + ip_y \\ p_x - ip_y & 0 \end{pmatrix} \psi'(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi'(\mathbf{r}). \quad (2)$$

Dabei ist $\gamma = \frac{\sqrt{3}}{2}t$, t das Kopplungs-Matrix-Element aus der Tight-Binding-Rechnung und $\gamma a_0 \approx 10^5$ m/s die Fermi-Geschwindigkeit der Ladungsträger. Für die Spinor-Wellenfunktionen $\psi(\mathbf{r})$ bzw. $\psi'(\mathbf{r})$ gilt

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_A(\mathbf{r}) \\ \psi_B(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad \psi'(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi'_A(\mathbf{r}) \\ \psi'_B(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Für die Dispersionsrelation in der Umgebung der Dirac-Punkte folgt der lineare Zusammenhang

$$\varepsilon = \pm \gamma a_0 |\mathbf{k}|,$$

wobei \mathbf{k} relativ zum jeweiligen Dirac-Punkt gemessen wird. Graphen verhält sich damit in der Umgebung der Dirac-Punkte als Halbleiter mit verschwindender Bandlücke. Die vollen Ortswellenfunktionen für Untergitter A und Untergitter B sind gegeben durch

$$\Psi_A(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}\psi_A(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{r}}\psi'_A(\mathbf{r}) \quad (4)$$

und

$$\Psi_B(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}\psi_B(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{r}}\psi'_B(\mathbf{r}). \quad (5)$$

Sie setzen sich jeweils aus Produkten einer ebenen Welle am Entwicklungspunkt \mathbf{K} bzw. \mathbf{K}' sowie der schwach variierenden Spinor Komponenten $\psi_A(\mathbf{r})$ bzw. $\psi'_A(\mathbf{r})$ und $\psi_B(\mathbf{r})$ bzw. $\psi'_B(\mathbf{r})$ zusammen, die in der Effektiven-Massen-Näherung als einhüllende Wellenfunktionen an die Stelle des stark oszillierenden Bloch-Anteils treten.

2.2 Verschiedene Randarten

Betrachtet man eine endliche Graphen-Struktur, lassen sich zwei unterschiedliche Randarten unterscheiden (Abbildung 2.2).

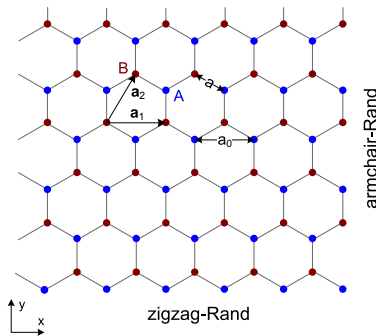


Abb. 2.2: zigzag- und armchair-Ränder in einer endlichen Graphen-Struktur. Die unterschiedlichen Randarten bestehen entweder aus Atomen eines Untergitters (zigzag) oder beider Untergitter (armchair).

Wird die Graphen-Schicht durch einen Schnitt in x -Richtung begrenzt, kommt es zur Ausbildung sog. zigzag-Ränder. Sie bestehen aus Atomen lediglich eines Untergitters. Erfolgt eine Begrenzung durch einen Schnitt in y -Richtung, entsteht ein sog. armchair-Rand. Dieser besteht aus Atomen beider Untergitter. Durch diese verschiedenen Randbedingungen weisen Graphenbänder der beiden Randarten unterschiedliche elektronische Eigenschaften auf. Sie werden im Folgenden näher diskutiert.

3 Zigzag-Nanobänder

3.1 Spinor-Wellenfunktionen, Zigzag-Randbedingungen

Wählt man ausgehend von Abbildung 2.2 eine Geometrie, die eine unendliche Ausdehnung in x -Richtung und eine endliche Breite W in y -Richtung aufweist, erhält man ein Graphenband mit zigzag-Rändern (Abbildung 3.1).

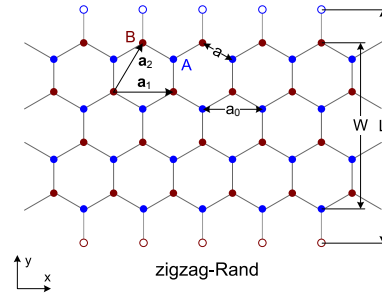


Abb. 3.1: Geometrie eines Graphen Nanobandes mit zigzag-Rändern. Dabei bezeichnet W die Breite des Bandes, über L werden die Randbedingungen formuliert.

Durch die resultierende Translationsinvarianz in x -Richtung kann für die Spinor-Wellenfunktion aus Gleichung (3) der Separationsansatz in eine ebene Welle und die noch unbekanntenen Spinor-Komponenten $\phi_A(y)$ und $\phi_B(y)$ mit

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_A(\mathbf{r}) \\ \psi_B(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = e^{ik_x x} \begin{pmatrix} \phi_A(y) \\ \phi_B(y) \end{pmatrix} \quad (6)$$

gemacht werden. Ein äquivalenter Ausdruck folgt für $\psi'(\mathbf{r})$. Die beiden zigzag-Ränder bestehen jeweils nur aus Atomen eines Untergitters, weshalb die Randbedingungen für die Ortswellenfunktionen in Gleichung (4) und (5) mit

$$\Psi_A(y=L) = 0, \quad \Psi_B(y=0) = 0 \quad (7)$$

folgen. Die Randbedingungen werden für Atome im Abstand L in y -Richtung formuliert, für die die Wellenfunktion bereits verschwindend sein soll. Da die Atome damit nicht mehr zur echten Breite des Bandes gezählt werden können, resultiert eine Unterscheidung

zwischen Abstand L und Breite W . Für die Breite gilt im zigzag-Fall

$$W = \left(\frac{3}{2}w + 2\right)a ,$$

wobei w eine natürliche Zahl ist.

3.2 Elektronische Bandstruktur, Oberflächenzustände

Bei den Randbedingungen in Gleichung (7) handelt es sich um eine relativ schwache Forderung, die dafür sorgt, dass keine Zustände beider Dirac-Punkte mischen (vgl. armchair-Randbedingungen in Abschnitt 4.1). Die folgende Rechnung kann damit für \mathbf{K} und \mathbf{K}' getrennt betrachtet werden.

Es wird zunächst der Ansatz (6) in die Dirac-Gleichung (1) für \mathbf{K} eingesetzt. Der Übergang zum Impulsoperator $p_j \rightarrow -i\partial_j$, dabei ist $\hbar = 1$, sowie eine Auswertung der Ableitung in x -Richtung liefern für die Spinor-Komponenten das gekoppelte Differentialgleichungssystem

$$(k_x - \partial_y)\phi_B(y) = \tilde{\varepsilon}\phi_A(y) , \quad (8)$$

$$(k_x + \partial_y)\phi_A(y) = \tilde{\varepsilon}\phi_B(y) , \quad (9)$$

wobei die Abkürzung $\tilde{\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{\gamma a_0}$ eingeführt wurde. Eine Entkopplung gelingt durch Multiplikation von Gleichung (8) mit $(k_x - \partial_y)$ unter Verwendung von Gleichung (9). Es folgt eine Differentialgleichung zweiter Ordnung für die Spinor-Komponente $\phi_B(y)$:

$$(k_x^2 - \partial_y^2)\phi_B(y) = \tilde{\varepsilon}^2\phi_B(y) . \quad (10)$$

$\phi_A(y)$ folgt über

$$\phi_A(y) = \frac{1}{\tilde{\varepsilon}}(k_x - \partial_y)\phi_B . \quad (11)$$

Die Gleichung für $\phi_B(y)$ besitzt die allgemeine Lösung

$$\phi_B(y) = \alpha e^{zy} + \beta e^{-zy} , \quad (12)$$

mit z als komplexe Zahl sowie α und β als Normierungskonstanten. Mit dieser Lösung ergibt sich für den Energieeigenwert $\tilde{\varepsilon}$

$$\tilde{\varepsilon} = \pm \sqrt{k_x^2 - z^2} .$$

Zur Berechnung eines Ausdrucks für die Spinor-Komponenten $\phi_A(y)$ und $\phi_B(y)$ wurde bisher nur die Translationsinvarianz ausgenutzt. Die zusätzlich zu erfüllenden Randbedingungen in Gleichung (7) liefern weiterhin

$$0 = e^{iKx} e^{ik_x x} \phi_A(L) + e^{-iKx} e^{ik_x x} \phi'_A(L) ,$$

$$0 = e^{iKx} e^{ik_x x} \phi_B(0) + e^{-iKx} e^{ik_x x} \phi'_B(0) .$$

Da später die Dispersion unabhängig von der Wahl der Dirac-Punkte sein sollte, wurden diese zu $\mathbf{K} = (K, 0) = \left(\frac{4\pi}{3a_0}, 0\right)$ und $\mathbf{K}' = (-K, 0)$ gewählt. Die

beiden Gleichungen sind für ein beliebiges x nur dann erfüllt, falls gilt

$$\phi_A(L) = \phi'_A(L) = \phi_B(0) = \phi'_B(0) = 0 .$$

Betrachtet man die Forderung zunächst nur für die Spinor-Komponenten bezüglich \mathbf{K} , also $\phi_A(L) = 0$ und $\phi_B(0) = 0$, folgt zusammen mit Gleichung (10) und (11)

$$0 = \alpha + \beta ,$$

$$0 = (k_x - z)\alpha e^{zL} + (k_x + z)\beta e^{-zL} .$$

Zusammen liefert dies eine transzendente Gleichung für z :

$$\frac{k_x + z}{k_x - z} = e^{2Lz} . \quad (13)$$

Die Gleichung besitzt keine analytische Lösung, jedoch können über eine grafische Herangehensweise Aussagen über z gemacht werden. Da nur reelle Energien $\tilde{\varepsilon}$ eine physikalische Bedeutung haben, müssen dabei nur die Fälle eines rein reellen oder rein imaginären z untersucht werden.

Für reelle Werte $z = k$ ist in Abbildung 3.2 die linke sowie rechte Seite von Gleichung (13) über z aufgetragen. Man erkennt, dass die Anzahl der Schnittpunkte beider Funktionen von der Wahl von k_x abhängt.

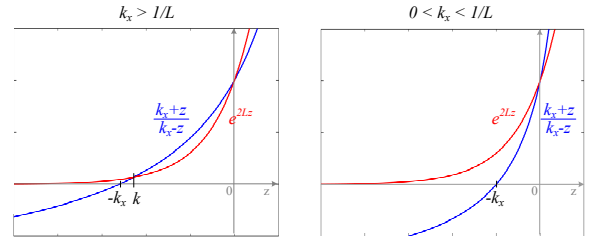


Abb. 3.2: Linke und rechte Seite von Gleichung (13) für reelle Werte $z = k$ aufgetragen als Funktion von z . Abhängig von der Wahl von k_x existiert eine unterschiedliche Anzahl an Schnittpunkten der beiden Funktionen.

Für $k_x > \frac{1}{L}$ existieren zwei Schnittpunkte, wobei die triviale Lösung für eine konstante Wellenfunktion sorgt und im Folgenden nicht weiter beachtet wird. Der zweite Schnittpunkt an der Stelle k liefert als Wellenfunktion eine evaneszente Welle, die als Oberflächenzustand mit der Energie $\tilde{\varepsilon}_s = \pm \sqrt{k_x^2 - k^2}$ identifiziert werden kann. Für sehr große k_x (im Rahmen der Effektiven-Massen-Näherung) folgt $k \rightarrow k_x$ und damit $\tilde{\varepsilon}_s \rightarrow 0$. Oberflächenzustände sind somit einem Band verschwindender Energie zuzuordnen und weisen eine Entartung auf. Ist $k_x < \frac{1}{L}$ existiert neben der trivialen Lösung kein weiterer Schnittpunkt und folglich auch keine Oberflächenzustände.

Für rein imaginäre Werte $z = ik_n$ lässt sich Gleichung (13) zu

$$k_x = \frac{k_n}{\tan(Lk_n)}$$

umformen (Abbildung 3.3). Für diesen Fall existiert eine beliebige Anzahl an diskreten Lösungen k_n , die gebundenen Zuständen mit der Energie $\tilde{\varepsilon}_c = \pm\sqrt{k_x^2 + k_n^2}$ zuzuordnen sind. Für sehr große $|k_x|$ folgt ein näherungsweise linearer Verlauf $\tilde{\varepsilon}_c = \pm k_x$.

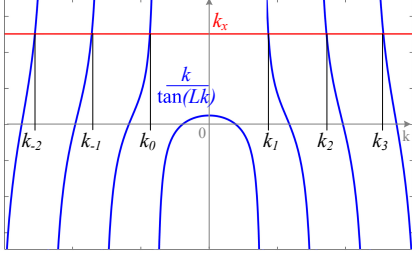


Abb. 3.3: Linke und rechte Seite von Gleichung (13) für rein imaginäre Werte $z = ik_n$ aufgetragen als Funktion von k . Die Nummerierung der Lösungen k_n erfolgte beliebig.

Eine Rechnung bezüglich des Dirac-Punktes \mathbf{K}' liefert im Vergleich zu obiger Rechnung ein wechselndes Vorzeichen $k_x \rightarrow -k_x$.

Vergleicht man die Resultate mit denen einer Tight-Binding-Rechnung eines zigzag-Bandes mit $L = 201a_0$ (Abbildung 3.4), erkennt man in der Umgebung der Dirac-Punkte deutliche Übereinstimmungen. So ist für große positive (negative) Abstände zum \mathbf{K} (\mathbf{K}')-Punkt das Band verschwindender Energie der Oberflächenzustände zu sehen. Um die Dirac-Punkten selbst sind Subbänder zu erkennen, die für sehr kleine Abstände annähernd parabelförmig, für größere Abstände nahezu linear verlaufen. Sie entsprechen den Eigenenergien gebundener Zustände. Trotz dieser guten Übereinstimmung zur Tight-Binding-Rechnung ist zu beachten, dass die hier präsentierte Herangehensweise über die Dirac-Gleichung nur niederenergetische Anregungen (bis zu Energien von etwa 1 eV) im Bereich von \mathbf{K} und \mathbf{K}' beschreibt.

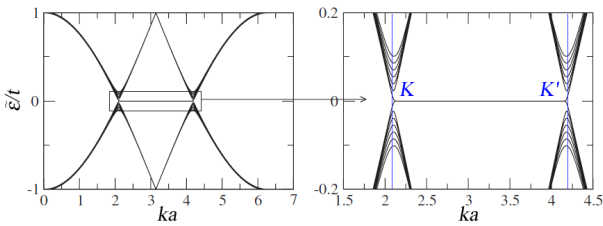


Abb. 3.4: Elektronische Bandstruktur eines Graphen Nanobandes mit zigzag-Rändern und $L = 201a_0$. Die Berechnung erfolgte über das Tight-Binding-Modell. [2]

4 Armchair-Nanobänder

4.1 Spinor-Wellenfunktionen, Armchair-Randbedingungen

Zur Diskussion von armchair-Nanobänder wird eine Geometrie gewählt, die eine Translationsinvarianz in y -Richtung und eine endliche Breite

$$W = L - a_0 = w \frac{a_0}{2}$$

in x -Richtung besitzt (Abbildung 4.1). Das resultierende Nanoband weist armchair-Ränder auf, die jeweils aus Atomen beider Untergitter aufgebaut sind.

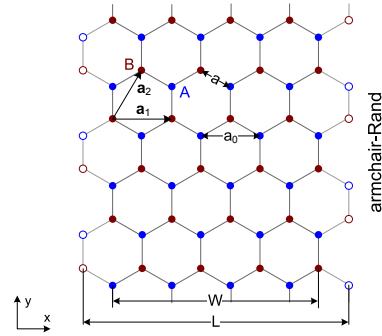


Abb. 4.1: Geometrie eines Graphen Nanobandes mit armchair-Rändern.

Entsprechend den zigzag-Bänder im letzten Abschnitt lässt sich für $\psi(\mathbf{r})$ und äquivalent für $\psi'(\mathbf{r})$ der Ansatz

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_A(\mathbf{r}) \\ \psi_B(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = e^{ik_y y} \begin{pmatrix} \phi_A(x) \\ \phi_B(x) \end{pmatrix} \quad (14)$$

formulieren. Die Randbedingungen sind nun gegeben durch

$$\Psi_A(x=0) = \Psi_A(x=L) = 0$$

und

$$\Psi_B(x=0) = \Psi_B(x=L) = 0 .$$

4.2 Elektronische Bandstruktur, gebundene Zustände

Das Einsetzen des Ansatzes (14) in die Dirac-Gleichung (1) bzw. (2) liefert für die Spinor Komponenten $\phi_B(x)$ und $\phi'_B(x)$ erneut die Gleichung (10) mit der allgemeinen Lösung (12). Jedoch folgen hier aus den Randbedingungen die Gleichungen

$$\begin{aligned} 0 &= e^{ik_y y} \phi_A(0) + e^{ik_y y} \phi'_A(0) , \\ 0 &= e^{iKL} e^{ik_y y} \phi_A(L) + e^{-iKL} e^{ik_y y} \phi'_A(L) , \\ 0 &= e^{ik_y y} \phi_B(0) + e^{ik_y y} \phi'_B(0) , \\ 0 &= e^{iKL} e^{ik_y y} \phi_B(L) + e^{-iKL} e^{ik_y y} \phi'_B(L) . \end{aligned}$$

Sie sind für ein beliebiges y nur dann erfüllt, falls gilt

$$\begin{aligned} \phi_\mu(0) + \phi'_\mu(0) &= 0 , \\ e^{iKL} \phi_\mu(L) + e^{-iKL} \phi'_\mu(L) &= 0 , \end{aligned}$$

mit $\mu = A, B$. Durch diese Forderung werden Zustände beider Dirac-Punkte gemischt, weshalb für $\phi_B(x)$ und $\phi'_B(x)$ die Ansätze

$$\begin{aligned}\phi_B(x) &= \alpha e^{ik_n x} + \beta e^{-ik_n x}, \\ \phi'_B(x) &= \gamma e^{ik_n x} + \delta e^{-ik_n x},\end{aligned}$$

mit einem Set von vier Konstanten α, β, γ und δ zu wählen sind. Damit sind die Randbedingungen nur erfüllt falls gilt

$$\alpha = -\delta, \quad \beta = \gamma = 0,$$

was zur Gleichung

$$\sin((k_n + K)L) = 0$$

führt. Mit $K = \frac{4\pi}{3a_0}$ und n als ganze Zahl sind die erlaubten Werte für den Wellenvektor k_n gegeben durch die reellen Nullstellen der Sinus-Funktion bzw. durch

$$k_n = \frac{n\pi}{L} - \frac{4\pi}{3a_0}. \quad (15)$$

Im Fall von armchair-Rändern existieren damit lediglich gebundene Zustände der Energie $\tilde{\varepsilon} = \pm\sqrt{k_y^2 + k_n^2}$. Jedoch hängen die elektronischen Eigenschaften stark von der Breite W des Nanobandes ab. Fordert man $k_n = 0$ folgt aus Gleichung (15) mit $L = (w+2)\frac{a_0}{2}$ der Zusammenhang

$$w = \frac{3}{2}n - 2.$$

Da es sich bei w um eine natürliche Zahl und bei n um eine ganze Zahl handelt, ist diese Beziehung nur für bestimmte Werte wie z.B. $w = 1, 4, 7, \dots$ und $n = 2, 4, 6, \dots$ erfüllt. Daraus folgt, dass nur für den Fall

$$w = 3m + 1 \quad (16)$$

der Wellenvektor k_n und für $k_y = 0$ damit auch die Energie $\tilde{\varepsilon} = \pm\sqrt{k_y^2 + k_n^2}$ verschwindet. Das System besitzt eine verschwindende Bandlücke für $k_y = 0$ und metallischen Charakter. In allen anderen Fällen, in denen die Breite des armchair-Bandes die Bedingung (16) nicht erfüllt, existiert eine endliche Bandlücke. Das System zeigt halbleitende Eigenschaften. Dabei gilt für die Bandlücke $E_g \propto \frac{1}{w}$, d.h. im Grenzfall breiter Bänder verschwindet die Bandlücke, was der Situation bei Bulk-Graphen entspricht.

In Abbildung 4.2 ist hierzu die Dispersion von drei armchair-Bänder mit $w = 3, 4, 5$ aufgetragen, die über das Tight-Binding-Modell berechnet wurden. Sowohl für $w = 3$ als auch für $w = 5$ ist eine Bandlücke an der Stelle $k = 0$ zu erkennen, die mit zunehmender Breite kleiner wird. Für $w = 4$ zeigt das System keine Bandlücke. Hier erfüllt die Breite des Nanobandes die Bedingung (16) mit $m = 1$. Damit wird obige Rechnung vom Tight-Binding-Modell bestätigt.

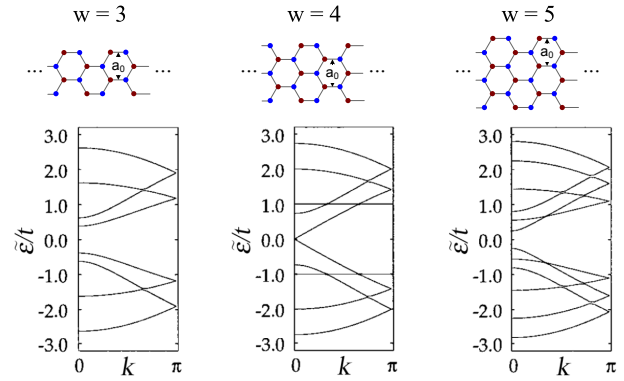


Abb. 4.2: Elektronische Bandstruktur von Graphen Nanobänder mit armchair-Ränder und unterschiedlicher Breite $W = 1.5a_0$, $W = 2a_0$ und $W = 2.5a_0$ aufgetragen über den Wellenvektor $k = k_y$. Die Berechnung erfolgte über das Tight-Binding-Modell. [4]

5 Zusammenfassung

Die obigen Betrachtungen über die Dirac-Gleichung für niederenergetische Anregungen in Graphen Nanobänder zeigten, dass die elektronischen Eigenschaften stark von deren Breite und der Geometrie derer Ränder abhängen. Hinsichtlich der Randarten sind zigzag- und armchair-Ränder zu unterscheiden. Für zigzag-Bänder existieren sowohl Oberflächenzustände mit verschwindender Energie, die eine Entartung aufweisen, an den Ränder lokalisiert sind und für einen metallischen Charakter des Systems sorgen, als auch delokalisierte Zustände mit nahezu parabelförmigen Subbänder in der Umgebung der Dirac-Punkte. Für armchair-Bänder existieren keinerlei Oberflächenzustände. Ihr elektronischer Charakter, ob halbleitend oder metallisch, hängt kritisch von der Breite des Nanobandes ab. Die Bandlücke verringert sich dabei mit zunehmender Breite des Nanobandes. Die Resultate wurden mit Bandstrukturen verglichen, die aus Tight-Binding-Rechnungen resultierten, wobei eine Übereinstimmung in den charakteristischen Merkmalen festzustellen war.

Literatur

- [1] A. K. Geim und A. H. MacDonald, *Graphene: Exploring carbon flatland*, Physics Today (2007).
- [2] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov und A. K. Geim, Reviews of Modern Physics **81**, 109 (2009).
- [3] L. Brey und H. A. Fertig, Physical Review B **73**, 235411 (2006).
- [4] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus and M. S. Dresselhaus, Physical Review B **54**, 17954 (1996).
- [5] T. Ando, Journal of the Physical Society of Japan **74** 777 (2005).
- [6] M. Y. Han, B. Özyilmaz, Y. Zhang and P. Kim, Physical Review Letters **98**, 206805 (2007).
- [7] B. Trauzettel, Physik Journal 6 (2007) Nr.7, 39.