

doi: 10.3969/j.issn.0490-6756.2017.03.023

# 环状碳纳米卷电子结构的紧束缚法研究

王 昭, 侯汝艳

(德宏师范高等专科学校, 芒市 678400)

**摘要:** 利用石墨平面碳原子轨道作  $sp^2$  杂化时  $\pi$  电子的紧束缚模型, 考虑波矢  $\vec{k}$  周期性边界条件, 构造了环状碳纳米卷模型, 研究了其电子结构性质. 结果表明环状碳纳米卷的电子结构与其几何结构密切相关, 通过控制手性、结构参数及卷环周长, 可将其调制成金属或不同带隙的半导体.

**关键词:** 环状碳纳米卷; 紧束缚模型; 电子结构; 能隙; 态密度

**中图分类号:** O481.1      **文献标识码:** A      **文章编号:** 0490-6756(2017)03-0561-07

## Tight binding studies on the electronic structure of toroidal carbon nanoscrolls

WANG Zhao, HOU Ru-Yan

(De Hong Normal College, Mangshi 678400, China)

**Abstract:** Based on the tight-binding model of  $\pi$  electrons which are relevant to  $sp^2$  hybridization of carbon atomic orbitals, and restricting  $\vec{k}$  by periodic boundary condition, the model and electronic structure of toroidal carbon nanoscrolls are constructed and analyzed. The results show that the electronic structure of toroidal carbon nanoscrolls is intimately related to its geometric structure, so carbon nanoscrolls can be modified as metallic or semi-conducting materials by controlling its chirality, structural parameters and toroid perimeter.

**Keywords:** Toroidal carbon nanoscrolls; Tight-binding model; Electronic structure; Band gap; Density of state

## 1 引言

自1991年发现碳纳米管<sup>[1]</sup>以来,一些基于碳纳米管的新结构也陆续被发现和合成出来,其中1997年Liu等<sup>[2]</sup>弯曲碳纳米管实现了首末两端的无缝连接,形成了封闭的环状碳纳米管<sup>[3]</sup>(toroidal carbon nanotube). 而碳纳米卷<sup>[4-5]</sup>(carbon nanoscrolls),一种与碳纳米管类似、结构非封闭而且内径大小容易调控的碳纳米材料<sup>[6]</sup>,理论上也可以弯曲后首尾相接,可形成封闭的环状碳纳米卷(toroidal carbon nanoscrolls, TCNS),但到目前为止,关于TCNS的合成及理论研究很少有报道.

基于石墨平面  $\pi$  电子的紧束缚模型,在忽略卷曲效应时,将 TCNS 看作是由石墨烯纳米带卷曲后首尾连接而成,考虑 TCNS 卷口及卷环的圆周方向上的边界条件,可得到 TCNS 的  $\pi$  电子的能带结果. 本文将研究扶手椅 (armchair) 型和锯齿 (zigzag) 型两种 TCNS (即 TACNS 和 TZCNS) 的电子结构,探索其电学性质与其手性指数、结构参数及卷环周长的内在联系,这对理解 TCNS 的物理性质具有重要意义.

## 2 模型与计算方法

如果只考虑成键  $\pi$  轨道和反成键  $\pi^*$  轨道,二

维石墨烯能量色散关系表示为<sup>[7]</sup>:

$$E(k_x, k_y) = \pm \gamma \left[ 1 + 4 \cos \frac{ak_y}{2} \cos \frac{\sqrt{3}}{2} ak_x + 4 \cos^2 \frac{ak_y}{2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (1)$$

$E$  表示能量,  $k_x$  和  $k_y$  是波矢  $\vec{k}$  的  $x, y$  方向的分量,  $\gamma \sim 2.5$  eV 表示最近邻的跃迁积分,  $a = 0.246$  nm 是石墨烯的晶格常数.

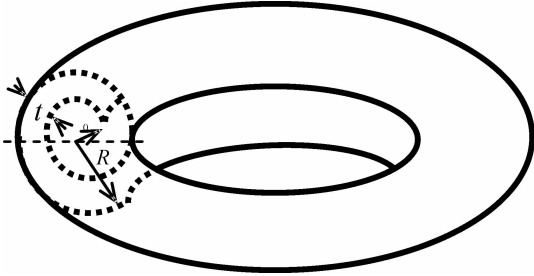


图 1 环状碳纳米卷参数图

Fig. 1 Structural parameters of TCNS

对于 TCNS, 卷口矢量  $\vec{C}_h = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2$ , 卷环的圆周矢量  $\vec{C}_l = p\vec{a}_1 + q\vec{a}_2$ , 故 TCNS 可用  $(m, n, p, q)$  表征, 其卷口半径方程为:  $R = R_0 + \frac{t}{2\pi}\theta$ , 卷环周长为:  $L = a \sqrt{p^2 + pq + q^2}$ . 考虑卷口及卷环的圆周方向上的周期性边界条件<sup>[7-9]</sup>, 则有:

$$\vec{k} \cdot \vec{C}_h = 2\pi j - \theta \quad (2)$$

$$\vec{k} \cdot \vec{C}_l = 2\pi l \quad (3)$$

TCNS 波矢  $\vec{k}$  同时满足(2)、(3)式, 则有:

$$k_x = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \frac{(j - \frac{\theta}{2\pi})(p - q) - l(m - n)}{np - mq} \quad (4)$$

$$k_y = \frac{2\pi}{a} \frac{(j - \frac{\theta}{2\pi})(p + q) - l(m + n)}{mq - np} \quad (5)$$

将波矢  $\vec{k}$  量子化边界条件(4)、(5)带入(1)式, 求得任意手性 TCNS 的能量色散关系为:

$$E(j, l, \theta) = \pm \gamma \left\{ 1 + 4 \cos \left( \frac{\pi}{mq - np} \left[ (j - \frac{\theta}{2\pi})(p + q) - l(m + n) \right] \right) \cdot \cos \left( \frac{\pi}{np - mq} \left[ (j - \frac{\theta}{2\pi})(p - q) - l(m - n) \right] \right) + 4 \cos^2 \left( \frac{\pi}{mq - np} \left[ (j - \frac{\theta}{2\pi})(p + q) - l(m + n) \right] \right) \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (6)$$

式中  $(j, l)$  为电子状态指数,  $j = 1, 2, \dots, N_m, l = 1, 2, \dots, N_p^{[10]}$ . 显然,  $E(j, l, \theta/2\pi) = E(j-1, l, \theta/2\pi+1)$ , 即  $E(j, l, \theta)$  是以  $2\pi$  为周期随  $\theta$  变化的周

期性函数.

利用(6)式可推导出高对称的锯齿型 TZCNS  $(m, 0, p, -2p)$  和扶手椅型 TACNS  $(m, m, p, -p)$  的能量色散关系分别为:

$$E(j, l, \theta) = \pm \gamma \left\{ 1 + 4 \cos \left( \frac{\pi l}{p} \right) \cdot \cos \left( \frac{\pi}{m} \left( j - \frac{\theta}{2\pi} \right) \right) + 4 \cos^2 \left( \frac{\pi}{m} \left( j - \frac{\theta}{2\pi} \right) \right) \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (7)$$

$$E(j, l, \theta) = \pm \gamma \left\{ 1 + 4 \cos \left( \frac{\pi l}{p} \right) \cdot \cos \left( \frac{\pi}{m} \left( j - \frac{\theta}{2\pi} \right) \right) + 4 \cos^2 \left( \frac{\pi l}{p} \right) \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (8)$$

式中  $j = 1, 2, \dots, 2m, l = 1, 2, \dots, 2p$ .

TZCNS 的能隙出现在  $l = p, 2p$  点, 在一个周期  $2\pi$  内其能隙可近似取:

$$E_{g, \text{TZCNS}} = \begin{cases} l = p, \min \left\{ 2\gamma \left| 1 - 2 \cos \left( \frac{j\pi}{m} - \frac{\theta}{2m} \right) \right| \right\} \\ 0 \leq \theta \leq \pi \\ l = 2p, \min \left\{ 2\gamma \left| 1 + 2 \cos \left( \frac{j\pi}{m} - \frac{\theta}{2m} \right) \right| \right\} \\ \pi \leq \theta \leq 2\pi \end{cases} \quad (9)$$

其中  $m = 3I, 3I-1$  ( $I$  为整数) 这类 TZCNS 的能隙变化满足(9)式, 而  $m = 3I+1$  这类 TZCNS 的能隙出现的位置恰好相反, 在  $0 \leq \theta \leq \pi$  时出现在  $l = 2p$  点, 在  $\pi \leq \theta \leq 2\pi$  时出现在  $l = p$  点.

TACNS 能隙出现在  $l = p/3, 2p/3$  点, 当  $p = 3I$  时, 在一个周期  $2\pi$  内可近似取:

$$E_{g, \text{TACNS}} = \begin{cases} l = p/3, \min \left\{ 4\gamma \left| \cos \left( \frac{j\pi}{2m} - \frac{\theta}{4m} \right) \right| \right\} \\ 0 \leq \theta \leq \pi \\ l = 2p/3, \min \left\{ 4\gamma \left| \sin \left( \frac{j\pi}{2m} - \frac{\theta}{4m} \right) \right| \right\} \\ \pi \leq \theta \leq 2\pi \end{cases} \quad (10)$$

而  $p \neq 3I$  的 TACNS 能隙可取:

$$E_{g, \text{TACNS}} = \begin{cases} l = p/3, 2 \min \{ |E(j, l, \theta)| \} & 0 \leq \theta \leq \pi \\ l = 2p/3, 2 \min \{ |E(j, l, \theta)| \} & \pi \leq \theta \leq 2\pi \end{cases} \quad (11)$$

将(1)式在  $l = p, 2p, l = p/3, 2p/3$  点进行泰勒级数展开, 可以分别得到 TZCNS 和 TACNS 对应的能量色散的近似表达式<sup>[11]</sup>:

$$E(\vec{k})_{\text{TZCNS}} = \pm \frac{\sqrt{3}\gamma a}{2} \sqrt{\beta_x^2 + \beta_y^2} \quad (12)$$

其中  $\beta'_{x,l=p} = k_x - \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}$ ,  $\beta_{y,l=p} = k_y - \frac{2\pi}{3a}$ ;  $\beta_{x,l=2p} = k_x$ ,  $\beta_{y,l=2p} = k_y - \frac{4\pi}{3a}$ .

$$E(\vec{k})_{\text{TACNS}} = \pm \frac{\sqrt{3}\gamma a}{2} \sqrt{\beta_x'^2 + \beta_y'^2} \quad (13)$$

其中  $\beta'_{x,l=p/3} = k_x - \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}$ ,  $\beta'_{y,l=p/3} = k_y - \frac{2\pi}{3a}$ ;  $\beta'_{x,l=2p/3} = k_x$ ,  $\beta'_{y,l=2p/3} = k_y - \frac{4\pi}{3a}$ . 由(12)、(13)式可知, 最低未占据分子轨道(LUMO)指数  $j$  的取值:

$$j_{\text{TZCNS}} = \begin{cases} \frac{m}{3} + \frac{\theta}{2\pi} & l = p \\ \frac{2m}{3} + \frac{\theta}{2\pi} & l = 2p \end{cases} \quad (14)$$

$$j_{\text{TACNS}} = \begin{cases} m + \frac{\theta}{2\pi} & l = p/3 \\ \frac{\theta}{2\pi} & l = 2p/3 \end{cases} \quad (15)$$

TZCNS 和 TACNS 态密度近似计算公式<sup>[10]</sup>:

$$D(\omega, \theta) = \sum_{j,l} \frac{2\Gamma}{\pi} \frac{1}{[E(j, l, \theta) - \omega]^2 + \Gamma^2} \quad (16)$$

其中  $\Gamma = 5 \times 10^{-5} \gamma$ .

### 3 结果与讨论

#### 3.1 TZCNS 及 TACNS 的能带结构

计算可以发现 TZCNS (16, 0, 2887, -5774) 在  $\theta = \pi, 2\pi$  时, 在  $l = p$  和  $l = 2p$  处均同时出现了能隙, 其大小相等, 分别为 0.286 eV, 0.556 eV, LUMO 指数分别为  $j = 6, 11$  和  $j = 6, 12$ , 而在  $\theta = 2\pi/3, 4\pi/3$  时, 能隙均为 0 eV, 分别出现在  $l = 2p, j = 11$  和  $l = p, j = 6$  处, 如图 2 所示. 由此可知,  $\theta$  发生变化, TZCNS (16, 0, 2887, -5774) 出现了金属  $\rightarrow$  半导体的连续转变, 最小能隙位置及 LUMO 指数  $j$  子能带均发生了变化, 这一变化规律与(9)、(14)式的结论完全相同. 可以证明,  $m \neq 3I$  的 TZCNS 在  $\theta = 2\pi I + 2\pi/3, 2\pi I + 4\pi/3$  时能隙均为 0 eV, 只是  $m = 3I + 1$  这类 TZCNS 对应零能隙位置都出现在  $l = 2p, p$  处, 而  $m = 3I - 1$  这类 TZCNS 恰好相反, 分别在  $l = p, 2p$  处, 如 TZCNS (17, 0, 2887, -5774) 零能隙位置在  $\theta = 2\pi/3, l = p$  及  $\theta = 4\pi/3, l = 2p$  两个位置.

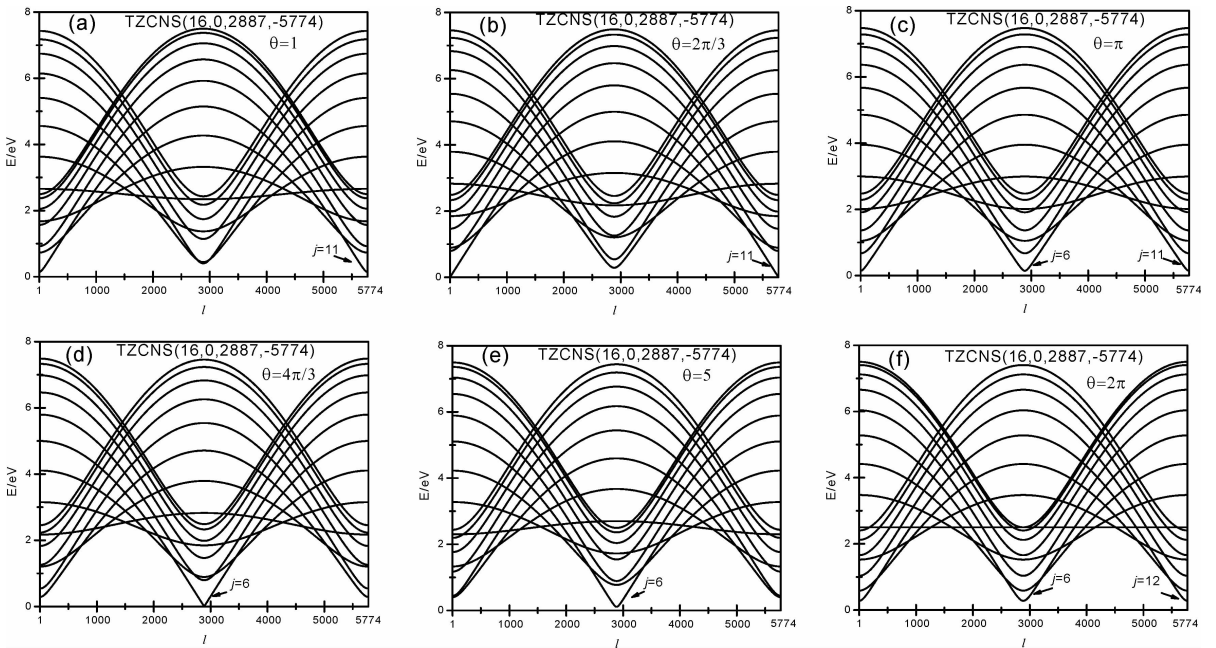


图 2 TZCNS(16, 0, 2887, -5774)能带图:

(a)  $\theta = 1$ ; (b)  $\theta = 2\pi/3$ ; (c)  $\theta = \pi$ ; (d)  $\theta = 4\pi/3$ ; (e)  $\theta = 5$ ; (f)  $\theta = 2\pi$

Fig. 2 The energy band structures of TZCNS(16, 0, 2887, -5774):

(a)  $\theta = 1$ ; (b)  $\theta = 2\pi/3$ ; (c)  $\theta = \pi$ ; (d)  $\theta = 4\pi/3$ ; (e)  $\theta = 5$ ; (f)  $\theta = 2\pi$

图 3 是 TZCNS(18, 0, 2887, -5774)的能带图. 结果表明, 当  $\theta = \pi$  时, TZCNS (18, 0, 2887, -5774) 在  $l = p$  和  $l = 2p$  处同时出现大小相等的

能隙, 均为 0.736 eV, LUMO 指数分别为  $j = 6, 13$ ; 当  $\theta = 2\pi$  时, 能隙为 0 eV, 出现在  $l = 2p, j = 13$  处, 如图 3 所示. 可以证明,  $m = 3I$  的 TZCNS 在  $\theta$

$=2\pi I$  时能隙均为 0 eV, 位置都出现在  $l=2p$  处. 通过图 2、图 3 的分析可知, 当  $\theta$  发生变化, TZCNS 都出现了金属  $\rightarrow$  半导体的连续转变, 能隙位置及

LUMO 指数  $j$  变化规律与 (9)、(14) 式相符. 这表明结构参数  $\theta$  和手性指数  $m$  对调制 TZCNS 的电子结构有着重要的作用.

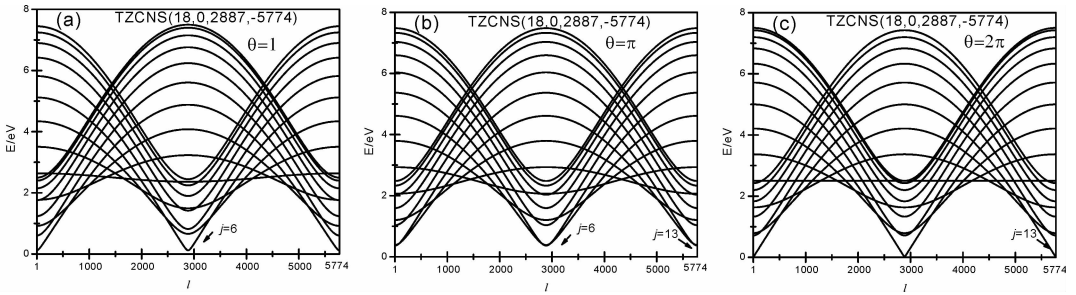


图 3 TZCNS(18, 0, 2887, -5774) 能带图: (a)  $\theta=1$ ; (b)  $\theta=\pi$ ; (c)  $\theta=2\pi$

Fig. 3 The energy band structures of TZCNS(18, 0, 2887, -5774): (a)  $\theta=1$ ; (b)  $\theta=\pi$ ; (c)  $\theta=2\pi$

图 4 是 TACNS (16, 16, 2887, -2887)、(16, 16, 2886, -2886) 的能带图. 结果表明, TACNS (16, 16, 2887, -2887) 在  $\theta=1$  时, 能隙出现在  $l=p/3, j=16$  处, 大小为 0.156 eV;  $\theta=\pi$  时, 在  $l=p/3$  和  $l=2p/3$  处同时出现能隙, 大小均为 0.490 eV, LUMO 指数分别为  $j=16, 1$ ; 当  $\theta=2\pi$  时, 能隙为 0.0032 eV, 出现在  $l=2p/3, j=1$

处, 如图 4 所示. TACNS (16, 16, 2886, -2886) 表现和 (16, 16, 2887, -2887) 类似, 只是在  $\theta=2\pi$  时能隙为 0 eV, 呈金属型. 可以证明, TACNS 在  $\theta=2\pi I$  时能隙位置都出现在  $l=2p/3$  处, 只是  $p \neq 3I$  的 TACNS 均为半金属, 而  $p=3I$  的 TACNS 均为金属型. 这表明手性指数  $p$  和结构参数  $\theta$  对调制 TACNS 的电子结构有着重要的作用.

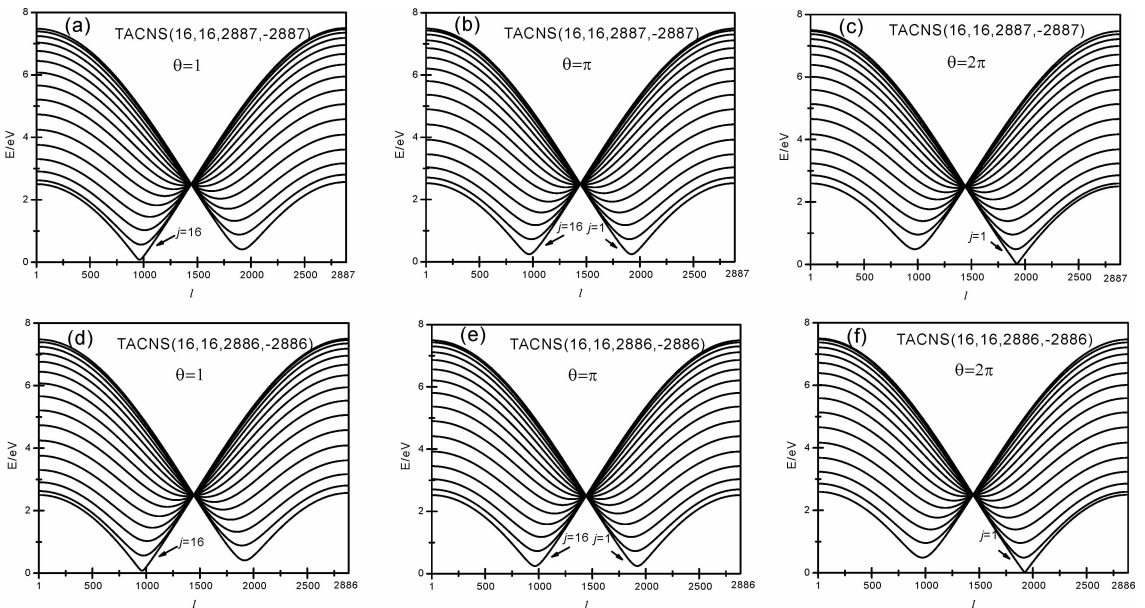


图 4 TACNS (16, 16, 2887, -2887) 能带图:

(a)  $\theta=1$ ; (b)  $\theta=\pi$ ; (c)  $\theta=2\pi$ ; TACNS (16, 16, 2886, -2886) 能带图: (d)  $\theta=1$ ; (e)  $\theta=\pi$ ; (f)  $\theta=2\pi$

Fig. 4 The energy band structures of TACNS (16, 16, 2887, -2887):

(a)  $\theta=1$ ; (b)  $\theta=\pi$ ; (c)  $\theta=2\pi$ ; TACNS(16, 16, 2886, -2886): (a)  $\theta=1$ ; (b)  $\theta=\pi$ ; (c)  $\theta=2\pi$

### 3.2 TZCNS 及 TACNS 的能隙变化

图 5 显示的是 TZCNS 和 TACNS 的  $E_g$  随  $\theta$  变化的规律. 经计算可发现 TZCNS (16, 0, 2887, -5774)、(18, 0, 2887, -5774) 和 TACNS

(16, 16, 2886, -2886)、(16, 16, 2887, -2887) 的能隙随着  $\theta$  的增大呈现周期性的变化, 变化周期均为  $2\pi$ , 如图 5 所示. 当  $\theta=0$  时, TCNS 的表现和环状碳纳米管类似, 但是随着  $\theta$  的增大, TCNS 的

能隙都出现了金属(半金属) → 半导体的周期性反复转变,但这种转变有四种类型:对于 TZCNS,  $m \neq 3I$  时零能隙出现在  $\theta = 2\pi I + 2\pi/3, 2\pi I + 4\pi/3$  处,而  $m = 3I$  则在  $\theta = 2\pi I$  处;对于 TACNS,最小能

隙都出现在  $\theta = 2\pi I$  处,只是  $p = 3I$  时能隙为 0 eV,而  $p \neq 3I$  时能隙非常小,表现为半金属型. 这些能隙变化结论和以上能带分析结果一致.

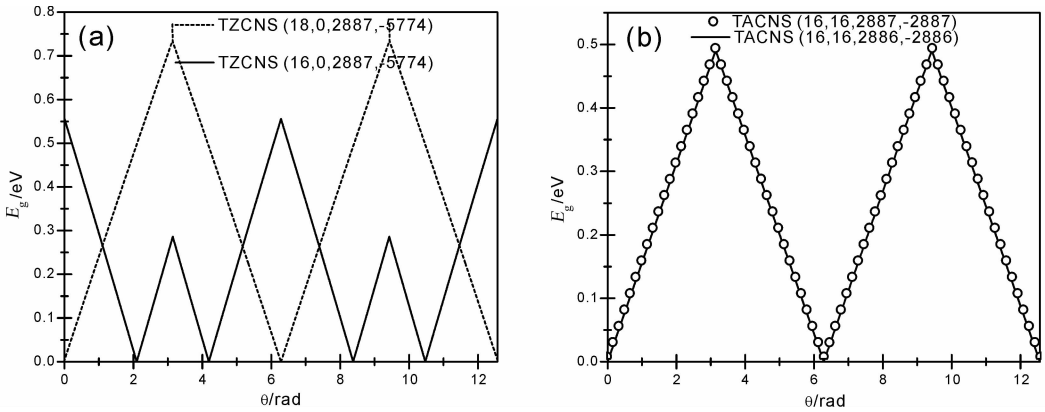


图 5  $E_g$  随  $\theta$  变化的规律:

(a) TZCNS(16, 0, 2887, -5774)、(18, 0, 2887, -5774); (b) TACNS (16, 16, 2886, -2886)、(16, 16, 2887, -2887)

Fig. 5 The  $\theta$  dependences of  $E_g$ :

(a) TZCNS(16, 0, 2887, -5774)、(18, 0, 2887, -5774); (b) TACNS (16, 16, 2886, -2886)、(16, 16, 2887, -2887)

图 6 显示的是 TZCNS 和 TACNS 的  $E_g$  随  $p$  变化的规律. 经计算可发现,随着  $p$  的增大,TZCNS (16, 0,  $p$ ,  $-2p$ )和(18, 0,  $p$ ,  $-2p$ )的能隙始终保持不变,而 TACNS (16, 16,  $p$ ,  $-p$ )的能隙出现了振荡型衰减,当  $\theta = \pi$  时振荡衰减持续到  $p = 20$  后就变得非常平缓,当  $\theta = 2\pi$  时振荡衰减持续较长,振荡周期为 3,如图 6 所示,这一结果和环状

碳纳米管及有限长碳纳米管结论类似<sup>[12]</sup>. 对于 TZCNS,从(6)及(11)式可以看出,其能隙大小不受  $p$ ,即卷环周长的影响;对于  $\theta = 2\pi$  的 TACNS,  $p = 3I$  时能隙为 0,  $p = 3I - 1$  和  $p = 3I + 1$  时呈半导体型,所以其能隙振荡周期为 3. 以上能隙随  $p$  变化规律和能带分析结果一致.

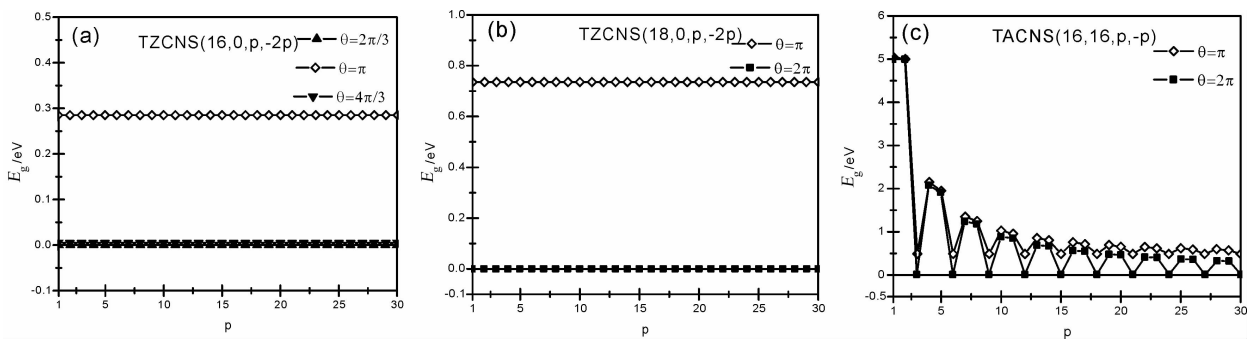


图 6  $E_g$  随  $p$  变化的规律:

(a) TZCNS(16, 0,  $p$ ,  $-2p$ ); (b) TZCNS (18, 0,  $p$ ,  $-2p$ ); (c) TACNS (16, 16,  $p$ ,  $-p$ )

Fig. 6 The  $p$  dependences of  $E_g$ :

(a) TZCNS(16, 0,  $p$ ,  $-2p$ ); (b) TZCNS (18, 0,  $p$ ,  $-2p$ ); (c) TACNS (16, 16,  $p$ ,  $-p$ )

图 7 显示的是 TZCNS 和 TACNS 的  $E_g$  随手性指数  $m$  变化的规律. 经计算可发现,随着手性指数  $m$  的增大, TZCNS ( $m$ , 0, 2887,  $-5774$ ) 和 TACNS ( $m$ ,  $m$ , 2887,  $-2887$ ) 的能隙都出现了衰减(TACNS 在  $\theta = 2\pi$  时除外). 对于 TZCNS ( $m$ , 0, 2887,  $-5774$ ), 当  $\theta = 2\pi/3, \pi$  和  $2\pi$  时能隙都出

现了振荡衰减,振荡周期为 3,这一结果和无限长 ZCNS 结论类似<sup>[8]</sup>;对于有 TACNS ( $m$ ,  $m$ , 2887,  $-2887$ ), 当  $\theta = 2\pi$  时能隙保持不变,当  $\theta = 2\pi/3$  和  $\pi$  时能隙都出现了衰减,衰减持续到  $m = 25$  后基本保持不变,如图 7 所示. 以上能隙随  $m$  变化规律和能带分析结果一致.

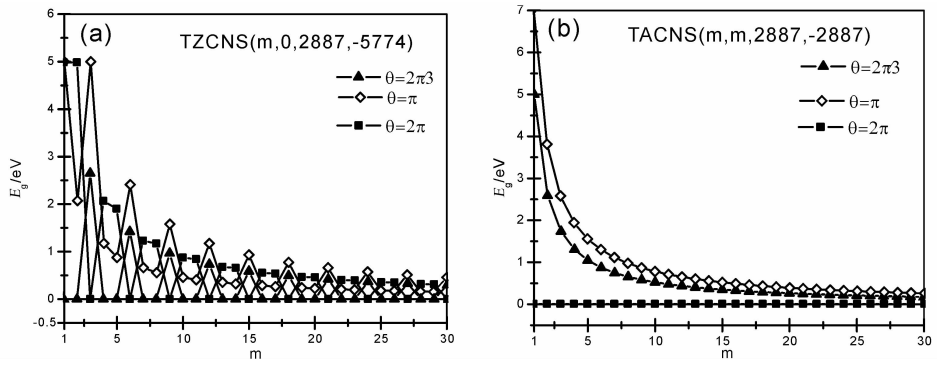


图 7  $E_g$  随  $m$  变化的规律:  
 (a) TACNS ( $m, 0, 2887, -5774$ ); (b) TACNS ( $m, m, 2887, -2887$ )  
 Fig. 7 The  $m$  dependences of  $E_g$ :  
 (a) TACNS ( $m, 0, 2887, -5774$ ); (b) TACNS ( $m, m, 2887, -2887$ )

3.3 TZCNS 及 TACNS 的态密度

图 8 显示的是  $\theta$  变化时 TACNS 及 TZCNS 的电子态密度图. 由于 TCNS 具有准零维结构, 其 DOS 含有很多像  $\delta$  函数一样的对称峰, 这些峰的高度与电子态的简并度有关, 而简并度又取决于手性指数  $m$  及结构参数  $\theta$  的取值<sup>[10, 13]</sup>. TCNS 在费米能附近电子态大多都为两重简并, 因为在 HOS 和 LUS 处  $E(j, l) = E(2m - j, l)$ <sup>[10]</sup>, 比如  $m = 16, \theta = 2\pi/3$  及  $m = 18, \theta = 2\pi$  的两种 TZCNS 的电子态为四重简并, 在费米能附近为两重简并;  $m = 18$  时峰的高度比  $m = 16$  大两倍, 这说明  $m = 18$  的 TZC-

NS 具有更强的导电能力<sup>[7]</sup>, 见图 8(c)、(d). TCNS 费米能附近的主峰数目与  $p$  的取值有关, 当  $\theta = 2\pi$  时 TACNS  $p = 2887$  在费米能附近出现的主峰数目多于  $p = 2886$ ; 而  $m = 16, \theta = 2\pi/3$  及  $m = 18, \theta = 2\pi$  的两种 TZCNS 在  $p = 2887$  时, 出现在费米能附近的主峰数目相同. TCNS 的 VHS 主峰的位置也和  $\theta$  的取值有关, 比如 TACNS ( $16, 16, 2886, -2886$ ), 当  $\theta < \pi$  时中心奇点间距随着  $\theta$  的增大而逐渐增大, 在  $\theta = \pi$  时达到最大; 当  $\pi < \theta < 2\pi$  时中心奇点间距逐渐小, 在  $\theta = 2\pi$  时达到最小, 这一现象和图 5  $E_g$  随  $\theta$  变化的规律相符.

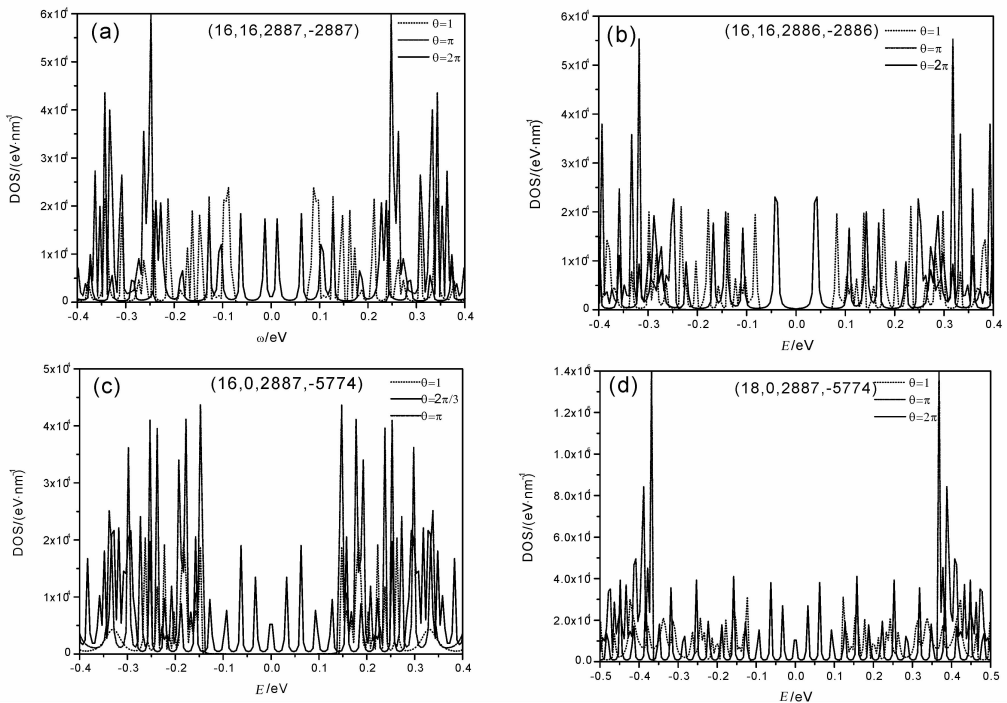


图 8 DOS 随  $\theta$  的变化:  
 (a) ( $16, 16, 2887, -2887$ ); (b) ( $16, 16, 2886, -2886$ ); (c) ( $16, 0, 2887, -5774$ ); (d) ( $18, 0, 2887, -5774$ )  
 Fig. 8 The  $\theta$  dependences of DOS:  
 (a) ( $16, 16, 2887, -2887$ ); (b) ( $16, 16, 2886, -2886$ ); (c) ( $16, 0, 2887, -5774$ ); (d) ( $18, 0, 2887, -5774$ )

## 4 结 论

通过考虑波矢量子化边界条件,使用紧束缚法构造了 TCNS 结构模型,导出了相应的能量色散关系,研究了 TACNS 和 TZCNS 的电子结构性质. 结果表明,TCNS 随着  $\theta$  的增大出现了金属(半金属)  $\rightarrow$  半导体的周期性反复转变:对于 TZCNS,  $m \neq 3I$  时零能隙出现在  $\theta = 2\pi I + 2\pi/3, 2\pi I + 4\pi/3$  处,  $m = 3I$  则在  $\theta = 2\pi I$  处;对于 TACNS,最小能隙都出现在  $\theta = 2\pi I$  处,只是  $p = 3I$  时能隙为  $0\text{eV}$ ,  $p \neq 3I$  时表现为半金属型. 另外,随着  $p$  的增大, TZCNS 的能隙始终保持不变,而 TACNS 的能隙出现了振荡型衰减. 最后,TCNS 随着手性指数  $m$  的增大,能隙都出现了衰减(TACNS 在  $\theta = 2\pi$  时除外),导电能力也在逐渐增强. 这一结果为进行 TCNS 的电特性实验研究提供理论基础.

### 参考文献:

- [1] Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon [J]. *Nature*, 1991, 354: 56.
- [2] Liu J, Dai H, Hafner J H, *et al.* Fullerene 'crop circles' [J]. *Nature*, 1997, 385: 780.
- [3] Dunlap B I. Connecting carbon tubules [J]. *Phys Rev B*, 1992, 46: 1933.
- [4] Bacon R. Growth, structure, and properties of graphite whiskers [J]. *J Appl Phys*, 1960, 31 (2): 283.
- [5] Viculis L H, Mack J J, Kaner R B. A chemical route to carbon nanoscrolls[J]. *Science*, 2003, 299 (5611): 1361.
- [6] Braga S F, Coluci V R, Legoas S B, *et al.* Structure and dynamics of carbon nanoscrolls[J]. *Nano Lett*, 2004, 4(5): 881.
- [7] Chen Y, Lu J, Gao Z X. Structural and electronic study of nanoscrolls rolled up by a single graphene sheet[J]. *J Phys Chem C*, 2007, 111(4): 1625.
- [8] Hamzah M A N, Johari Z, Hamid F K A, *et al.* Geometry effect on graphene nanoscrolls band gap [J]. *J Comput Theor Nanosci*, 2013, 10: 581.
- [9] Bovin S A, Chibotaru L F, Ceulemans A. The quantum structure of carbon tori[J]. *J Mol Catal A: Chem*, 2001, 166: 47.
- [10] Lin M F, Chen R B, Shyu F L. Electronic structures of chiral carbon toroids[J]. *Solid State Commun*, 1998, 107(5): 227.
- [11] Supriyo D. Quantum transport: atom to transistor [M]. London: Cambridge University Press, 2005.
- [12] Zhua H Y, Klein D J, Schmalza T G, *et al.* Geometric boundary effects on the electronic properties of finite carbon nanotubes[J]. *J Phys Chem Solids*, 1998, 59(3): 417.
- [13] Shyu F L, Tsai C C, Lin M F, *et al.* Electronic properties of carbon tori in external fields[J]. *J Phys Soc Jpn*, 2006, 75(10): 104710.