

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE



UNIVERSITÉ MOULOUD MAMMARI DE TIZI-OUZOU
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



N°/...../.....

Laboratoire de Physique et Chimie Quantique

MÉMOIRE DE MASTER

FILIÈRE : Physique

SPÉCIALITÉ : Nanophysique

Présenté par : Khelifi Lydia

Thème:

**Etude théorique du transport de charge et de chaleur
dans les nanorubans de graphène (GNR)**

Devant le jury d'examen composé de :

<i>M.</i>	ZIANE	Abdelhamid	Professeur	U.M.M.T.O.	Directeur
<i>M.</i>	ZENIA	Hand	Maître de Conférences A	U.M.M.T.O.	Encadreur
<i>M.</i>	MESSAOUDI	Omar	Maître de Conférences B	U.M.M.T.O.	Examinateur
<i>Mme.</i>	CHEBALLAH	Yamina	Maître de Conférences A	U.M.M.T.O.	Examinatrice

Soutenue publiquement le : 02/07/2025

Remerciements

Ce travail a été réalisé au sein du Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ) de l'Université Mouloud MAMMERRI de Tizi-Ouzou, je tiens donc à remercier son directeur Monsieur A. MEZEGHRANE ainsi que tous les autres membres du laboratoire.

Je tiens tout d'abord à exprimer ma profonde gratitude à mon promoteur, H. Zenia, pour avoir bien voulu diriger ce travail. De la même façon je remercie également Mlle S. Louifi son doctorante au LPCQ, que je considère comme ma co-encadrante elle a toujours été là pour m'aider et m'orienter au cours de l'élaboration de ce mémoire.

Je tiens à remercier Monsieur A. Ziane, d'avoir bien voulu accepter de présider le jury de ce mémoire. J'adresse toute ma gratitude à Monsieur O. Messaoudi et Mme Y. Cheballah, pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail en acceptant de faire partie du jury de ce mémoire.

Je tiens à remercier sincèrement Monsieur M. Zemirli pour sa gentillesse, sa simplicité et sa grande générosité.

Enfin, ma reconnaissance et ma gratitude les plus profondes vont à ma famille, mes copines et mes amies.

Résumé

Dans ce travail, nous proposons d'explorer les propriétés thermiques et électroniques des nanorubans de graphène purs et en présence d'impuretés magnétiques ou non magnétiques. La conductivité des nanorubans sera la quantité clé que nous calculerons et comparerons aux données expérimentales et travaux théoriques antérieurs. La question à laquelle nous voudrions apporter notre contribution est de savoir comment la largeur et la structure des bords ainsi que les défauts impactent le transport de charge et de chaleur dans les nanorubans de graphène. Pour cette étude, nous utilisons le formalisme des fonctions de Green atomistiques (AGF) qui se concentre sur la modélisation théorique du comportement des électrons à l'échelle nanométrique et permet de calculer précisément la transmission électronique en tenant compte des effets quantiques et des défauts. Nos calculs montrent que la géométrie des nanorubans ou bien la nature des bords, les impuretés influencent fortement la transmission et la conductance des électrons. Étudier ces facteurs est crucial pour le développement de dispositifs électroniques à base de graphène.

Mots-clés : *nanorubans de graphène, zigzag, armchair, fonctions de Green, transmission.*

Abstract

In this work, we propose to explore the thermal and electronic properties of pure graphene nanoribbons as well as those with magnetic or non-magnetic impurities. The conductivity of the nanoribbons will be the key quantity that we calculate and compare with experimental data and previous theoretical studies. The question to which we aim to contribute is how the width and edge structure, as well as defects, impact charge and heat transport in graphene nanoribbons. For this study, we use the atomistic Green's function (AGF) formalism, which focuses on the theoretical modeling of electron behavior at the nanoscale and allows precise calculation of electronic transmission while accounting for quantum effects and defects. Our calculations show that the geometry of the nanoribbons, the nature of their edges, and the impurities strongly influence electron transmission and conductance. Studying these factors is crucial for the development of graphene-based electronic devices.

Key words: *Graphene nanoribbons, zigzag, armchair, Green's functions, transmission.*

Table des matières

Table des matières	i
Table des figures	iv
Introduction générale	1
1 Introduction au graphène : structure, propriétés et enjeux	3
1 Généralités	3
2 Découverte et historique du graphène	3
2.1 La structure géométrique du graphène	3
3 Structure cristalline du graphène	4
3.1 Configuration électronique du graphène et hybridation sp^2	4
4 Propriétés électroniques et thermiques du graphène parfait	6
4.1 Calcul ab initio de la structure électronique	6
4.2 La structure de bande en liaisons fortes	6
4.3 La densité d'état	9
4.4 Propriétés thermiques	10
5 Les nanorubans de graphène (GNR)	10
5.1 Structure électronique	11
6 Applications à base de GNR	12
7 Conclusion	13
2 Théories et modélisation : méthode AGF pour le transport électronique et thermique dans les nanorubans de graphène	14
1 Introduction	14
2 Le hamiltonien	14
3 Fonction de Green pour un système isolé	15
4 Fonction de Green pour un système ouvert (non isolé)	16
4.1 Méthodes théoriques utilisées pour l'étude du système	16
4.2 Application de la méthode AGF aux nanorubans de graphène	17
4.3 Algorithme de Lopez Sancho	18
4.4 L'hamiltonien effectif	19
4.5 La conductance	20
4.6 Calcul du courant électrique	20

5	Effets du magnétisme et de défauts	20
5.1	Effets d'une impureté	21
5.2	Résonance Fano dans les structures nanométriques . .	21
6	Conclusion	22
3	Étude de la transmission électronique dans un nanoruban de graphène : effets du magnétisme et des impuretés	23
1	Introduction	23
2	Modèle de base : nanoruban de graphène propre attaché à des électrodes de type carré	23
2.1	Type Armchair AGNRs	23
2.2	Type Zigzag ZNRs	25
2.3	Conclusion	26
3	Nanoruban de graphène propre attaché à des électrodes de type graphène	26
3.1	Construction des blocs d'hamiltonien de la région centrale et des électrodes	27
3.2	Calcul de la transmission électronique	27
4	Effets du magnétisme sur la transmission électronique dans le nanoruban de graphène	29
4.1	Modélisation de l'aimantation	29
4.2	Réseau carré	31
4.3	Le courant électronique pour le nanoruban de graphène	33
4.4	La conductance pour le nanoruban de graphène	35
4.5	Conclusion	37
5	Applications et perspectives : la spintronique	37
	Conclusion générale	38

Table des figures

1.1	Structure du graphène : sous-réseaux A (noir) et B (blanc), \vec{a}_1 et \vec{a}_2 sont les vecteurs de translation primitifs.	4
1.2	Différentes formes allotropiques du carbone : a) diamant, b) graphite, c) fullerène C ₆₀ , d) nanotube de carbone, e) graphène, qui correspond à un seul plan atomique dans le graphite [5].	4
1.3	Représentation d'un carbone à l'état d'hybridation sp^2 . Les trois orbitales hybridées sp^2 forment entre elles un angle de 120° [5].	5
1.4	Illustration de la liaison σ et du recouvrement latéral π formé par les orbitales p_z [5].	6
1.5	Structure de bande de graphène par le calcul ab initio [6]	6
1.6	La structure de bande du graphène en fonction de l'inclusion successive des couches voisines dans l'hamiltonien en liaison fortes.	9
1.7	La densité d'états du graphène pour les voisins successifs pour différents paramètres relatifs à l'inclusion successive des couches voisines.	9
1.8	a) Coupe-type d'un nanoruban de graphène suivant la direction de l'axe du ruban, b) Structure cristallographique d'un ruban de type <i>armchair</i> , c) Structure cristallographique d'un ruban de type <i>zigzag</i> [10].	11
1.9	Structure de bande pour un nanoruban de type <i>armchair</i> obtenue avec Kwant.	11
1.10	Structure de bande d'un nanoruban de graphène de type <i>zigzag</i> obtenue avec Kwant.	12
2.1	Schéma d'un système à deux électrodes et une région centrale : hamiltoniens et couplages [1].	17
2.2	La figure représente une feuille de graphène dopée par une impureté (indiquée par un cercle rouge) reliée à deux contacts ferromagnétiques (FM) le moment magnétique des contacts est orienté selon un angle relatif θ [21].	21

3.1	Représentation des deux structures atomiques d'un nanoruban de graphène de type <i>armchair</i> connecté à des électrodes de structure carrée tracée avec kwant.	24
3.2	Courbes de la conductance en fonction de l'énergie pour le nanoruban <i>armchair</i> , obtenues avec Kwant (WFM) et octave (AGF).	24
3.3	Courbes de la conductance en fonction de l'énergie pour le nanoruban <i>armchair</i> , obtenues avec Kwant (WFM) et Octave (AGF).	25
3.4	Représentation de la structure atomique d'un nanoruban de graphène de type <i>zigzag</i> tracée avec kwant.	25
3.5	Courbes des conductance en fonction de l'énergie pour le nanoruban <i>zigzag</i> , tracée avec Kwant.	26
3.6	Construction des blocs du hamiltonien <i>TB</i> d'un AGNR : à gauche représente le bloc initial et à droite le bloc avec quatres atomes supplémentaires (<i>1^{re}itération</i>).	27
3.7	Calcul de la transmission électronique et de la densité d'états du AGNR avec la méthode AGF pour de différentes largeurs $N=5, 10, 20$	28
3.8	Effet du magnétisme sur la transmission électronique et la densité d'états du AGNR pour de différent largeur $N=5, 10, 20$	31
3.9	La conductance en fonction de l'énergie ϵ_F pour différentes orientations relatives de l'aimantation dans les contacts. Les autres paramètres sont $V = 0.5$, $M_L = M_R = 1$, et $\mu = 0$ (respectivement $\mu = -0.05$) pour la figure de gauche (droite).	32
3.10	Conductance en fonction de l'énergie ϵ_F pour différentes valeurs du potentiel chimique μ	33
3.11	Le courant électronique en fonction de la tension pour différentes valeurs de μ	33
3.12	Le courant électronique en fonction de la tension pour différentes valeurs de θ	34
3.13	Le courant électrique en présence d'impureté en fonction de la tension pour différentes valeurs de l'énergie de l'impureté ϵ_F	35
3.14	Conductance en fonction de l'énergie (ϵ_F) pour différentes valeurs du potentiel chimique μ , de l'angle θ et de la température $k_B T$	36
3.15	La conductance en fonction de l'énergie ϵ_F pour différentes positions d'impuretés.	36

Introduction générale

Le transport électronique et phononique dans les systèmes mésoscopiques est devenu un domaine d'étude crucial ces dernières décennies. Cette importance résulte des avancées en techniques expérimentales et computationnelles qui permettent désormais de connecter des molécules nanométriques à des électrodes métalliques pour étudier leurs propriétés de transport. L'un des buts principaux recherchés est de trouver des matériaux à même de permettre la miniaturisation des dispositifs tout en diminuant leur consommation énergétique. Le graphène est de nos jours l'un de ces matériaux les plus étudiés tant sur le plan expérimental que théorique. La structure unique du graphène, avec son réseau hexagonal d'atomes de carbone, et la géométrie particulière des nanorubans de graphène (**GNR**) confèrent aux dispositifs à base de ces matériaux des propriétés de transport électronique et thermique remarquables. Il est possible d'empiler plusieurs couches de graphène légèrement désorientées les unes par rapport aux autres, formant ainsi des structures dites "multicouches" ou "moiré lattices"[1]. Dans le cas qui nous concerne ces systèmes consistent généralement en un dispositif central (ou barrière) de petite taille constitué de graphène ou de nanorubans de graphène aux bords de type *armchair* (bord chaise) ou *zigzag*, reliés à des électrodes beaucoup plus grandes. Ces dernières servent alors de réservoirs de chaleur et de particules. En imposant une différence de potentiel ou un gradient de température entre les deux électrodes un courant de charge et/ou de chaleur s'écoule à travers la barrière (dispositif). Le courant ainsi généré dépend fortement des propriétés intrinsèques de la barrière, comme, entre autres, la nature du nanoruban, sa largeur et la présence de défauts. On peut aussi manipuler ces propriétés à l'aide d'une tension de grille ou de l'application d'un champ magnétique. Sur le plan théorique deux méthodes principales sont utilisées pour étudier ces phénomènes, qui sont la méthode de raccordement des fonctions d'onde (WFM pour Wave Function Matching) et la méthode des fonctions de Green atomistiques (AGF pour Atomistic Green's Functions) [2]. Ces recherches ont des applications variées dans la miniaturisation technologique et l'exploitation de phénomènes quantiques à l'échelle atomique, notamment dans les domaines de la dissipation thermique, des jonctions Josephson, de la thermoélectricité et de la spintronique. Un exemple concret de cette recherche est le développement de transistors à effet de champ basés sur des nanorubans de graphène (GNR-

FETs). Le graphène peut être utilisé dans les écrans à émission d'électrons (EED) car il présente un rapport d'aspect élevé et un effet tunnel électronique par les liaisons pendantes aux extrémités des nanorubans. Les écrans basés sur le graphène constituent des panneaux tactiles flexibles prometteurs pour les écrans de nouvelle génération. De plus, le graphène est utilisé dans divers composites pour les rendre plus précieux, légers et résistants pour de nouvelles applications [3].

Chapter 1

Introduction au graphène : structure, propriétés et enjeux

1 Généralités

Ce chapitre présente les concepts essentiels relatifs au graphène et au transport thermique et électronique à l'échelle nanométrique. Nous commencerons par décrire la structure cristalline du graphène ainsi que son hybridation sp^2 , qui confèrent au matériau ses propriétés uniques. Nous décrirons brièvement ses propriétés thermiques et électroniques, en renvoyant à l'étude détaillée des résultats de densité d'états et de structure de bande. Nous aborderons enfin les types de nanorubans de graphène **GNR** et leurs applications.

2 Découverte et historique du graphène

Le domaine des nanomatériaux a connu une véritable révolution en 2004 lorsque les physiciens André Geim et Konstantin Novoselov, travaillant à l'université de Manchester, ont réussi à isoler pour la première fois le graphène, une couche unique d'atomes de carbone d'une épaisseur d'un seul atome[4]. Cette découverte, réalisée à partir d'une méthode simple consistant à utiliser du ruban adhésif pour extraire des couches ultra-minces de graphite, a ouvert la voie à l'étude des matériaux bidimensionnels (2D).

2.1 La structure géométrique du graphène

Le graphène est constitué d'un feuillet bidimensionnel où les atomes de carbone sont arrangés en un motif hexagonal parfaitement régulier, visible sur la figure 1.1. Cette structure peut être vue comme deux réseaux triangulaires distincts, appelés sous-réseaux A et B, qui diffèrent par l'orientation de leurs liaisons chimiques. La cellule élémentaire du graphène comprend un atome de chaque sous-réseau. Chaque atome de carbone est lié à trois atomes voisins immédiats situés dans l'autre sous-réseau, possède six voisins de second ordre dans son propre sous-réseau, ainsi que trois voisins de troisième ordre dans l'autre

sous-réseau. La distance entre deux atomes de carbone voisins les plus proches est de 1.42 \AA [3].

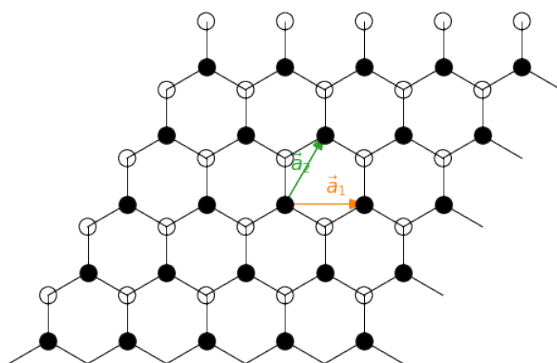


Figure 1.1: Structure du graphène : sous-réseaux A (noir) et B (blanc), \vec{a}_1 et \vec{a}_2 sont les vecteurs de translation primitifs.

3 Structure cristalline du graphène

Le carbone est l'élément de base formant le graphène. Il se présente sous plusieurs formes allotropiques illustrées dans la figure 1.2. Parmi les allotropes solides naturellement présents sur terre, on trouve le diamant et le graphite, ce dernier étant constitué d'un empilement de couches de carbone organisées selon une structure hexagonale. D'autres formes sont également observées, dont la plus connue est le Buckminsterfullerène C_{60} , une molécule sphérique composée de 20 hexagones et 12 pentagones.

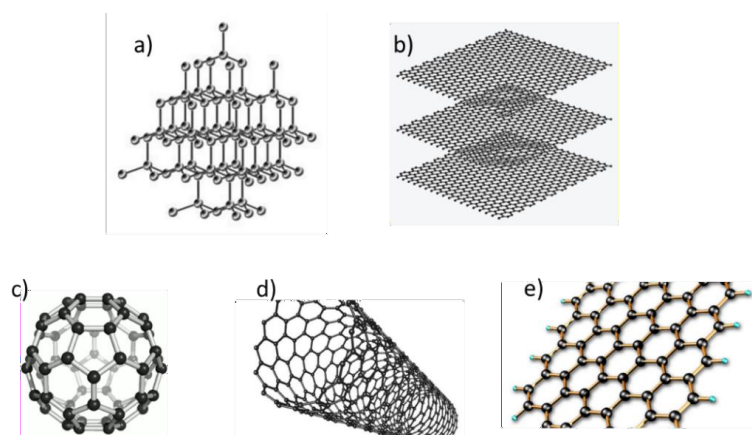


Figure 1.2: Différentes formes allotropiques du carbone : a) diamant, b) graphite, c) fullerène C_{60} , d) nanotube de carbone, e) graphène, qui correspond à un seul plan atomique dans le graphite [5].

3.1 Configuration électronique du graphène et hybridation sp^2

Toute la particularité du graphène repose sur sa structure électronique. Le carbone possède six électrons avec la configuration $1s^2 2s^2 2p^2$. Les orbitales $2s$, $2p_x$ et $2p_y$ se combinent en hybridation sp^2 , formant trois orbitales sp^2 ,

chacune avec un électron, tandis que l'orbitale $2p_z$ reste inchangée et occupée par un électron (voir la figure.1.3).

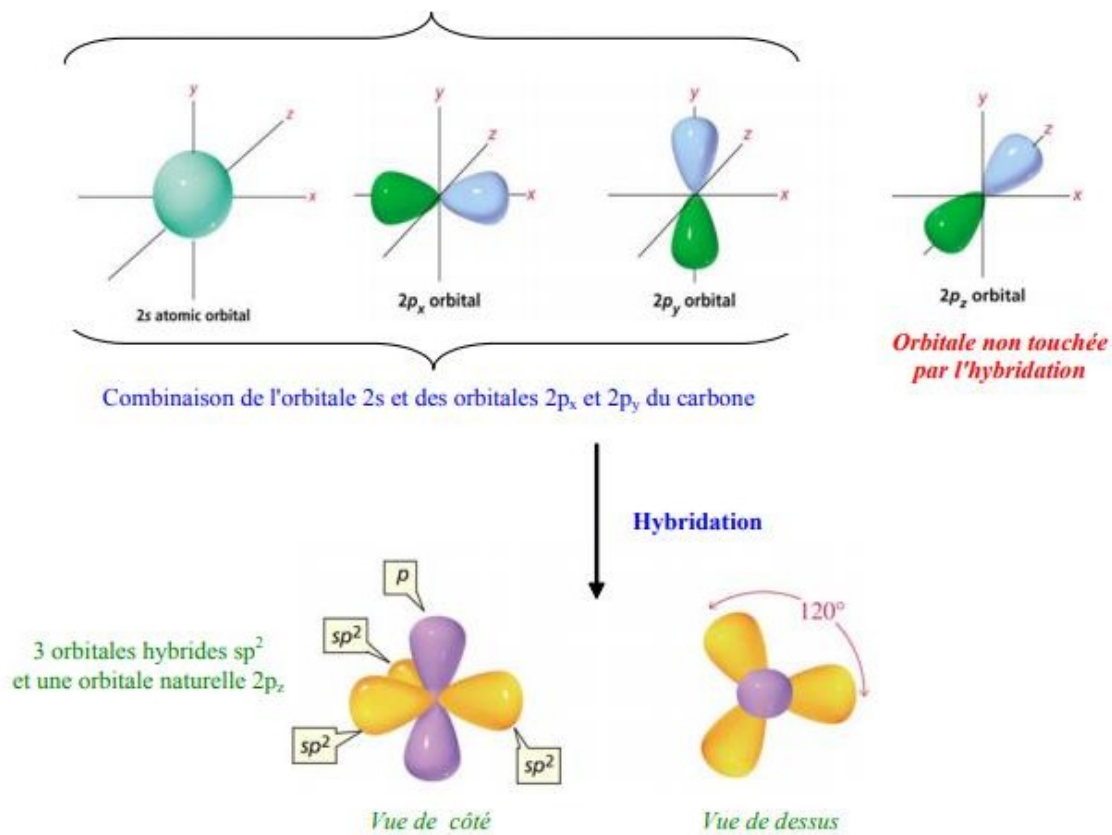


Figure 1.3: Représentation d'un carbone à l'état d'hybridation sp^2 . Les trois orbitales hybridées sp^2 forment entre elles un angle de 120° [5].

Les orbitales sp^2 des atomes voisins se recouvrent directement, créant de fortes liaisons σ responsables de la structure hexagonale plane du graphène. Les orbitales p_z , perpendiculaires au plan formé de l'hybridation, se recouvrent faiblement et forment les bandes π et π^* qui dominent les propriétés électroniques du matériau (voir la figure 1.4), cette dernière figure illustre la formation des liaisons σ et π dans le graphène: les liaisons σ proviennent du recouvrement axial des orbitales sp^2 , tandis que les liaisons π résultent du recouvrement latéral des orbitales p_z perpendiculaires au plan. Ce recouvrement latéral étant plus faible, les orbitales p_z conservent leur caractère atomique, ce qui justifie l'utilisation du modèle des liaisons fortes pour décrire la structure électronique du graphène, en se concentrant principalement sur les bandes π (voir la figure 1.4). Les orbitales π liantes donnent naissance à la bande de valence, et celles anti-liantes π^* à la bande de conduction. Ces deux bandes se rejoignent au niveau de Fermi, aux six points de Dirac situés aux points K de la zone de Brillouin. La dispersion y est linéaire d'où le nom de point de Dirac (voir la figure 1.5). Ainsi, le graphène ne possède pas de gap. Toutefois, la densité d'états au niveau de Fermi est nulle. C'est pourquoi le graphène est appelé un semi-métal ou encore un semi-conducteur à gap nul [4].

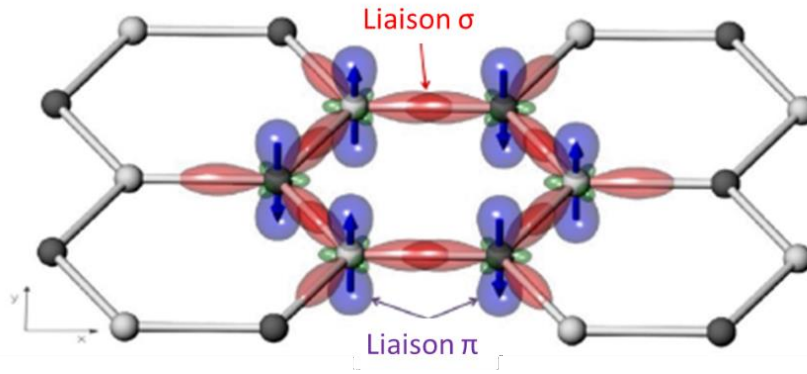


Figure 1.4: Illustration de la liaison σ et du recouvrement latéral π formé par les orbitales p_z [5].

4 Propriétés électroniques et thermiques du graphène parfait

4.1 Calcul ab initio de la structure électronique

La figure 1.5 à gauche représente la structure de bandes du graphène suivant les directions de haute symétrie, le long d'un trajet Γ -M-K- Γ où le niveau de Fermi est ramené à 0 eV. Les flèches violettes indiquent les bandes σ , la flèche orange la bande π , et la flèche verte la bande π^* . Des bandes σ^* sont visibles au-dessus de 3 eV. Au point K , les bandes π et π^* se touchent au niveau de Fermi en un point appelé *point de Dirac*. L'image de droite de la figure 1.5 représente la première zone de Brillouin hexagonale. Les lignes d'énergie constante $\epsilon_{\vec{k}}$ forment des poches plus ou moins circulaires autour des points K et K' . On dit que les états sont localisés dans les vallées K et K' .

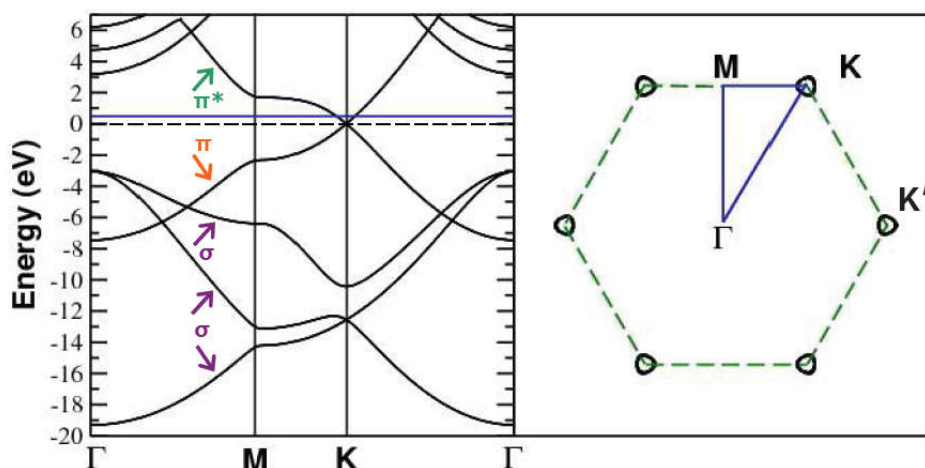


Figure 1.5: Structure de bande de graphène par le calcul ab initio [6]

4.2 La structure de bande en liaisons fortes

La structure de bande électronique du graphène peut être obtenue à partir d'un modèle des liaisons fortes, en anglais Tight-Binding (TB) qui considère les

interactions électroniques entre atomes de carbone jusqu'aux troisièmes voisins, ainsi que les corrections dues aux recouvrements des orbitales atomiques. Le réseau est composé de deux sous-réseaux A et B, ce qui conduit à une fonction d'onde totale exprimée comme une combinaison linéaire des contributions des deux sous-réseaux. En résolvant l'équation de Schrödinger dans cette base, on obtient une relation de dispersion dépendant des paramètres physiques tels que les intégrales de saut ($\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2$); de recouvrement (s_0, s_1, s_2) où l'indice se réfère aux couches de premier, deuxième et troisième voisins; E_{2p} énergie de l'orbitale $2p$. Cette approche met en lumière l'importance des contributions des seconds et troisièmes voisins pour obtenir une correspondance précise avec les résultats issus des calculs *ab initio*, tout en fournissant des paramètres tight-binding optimisés [4]. Les paramètres sont indiqués dans le tableau 1.1.

Table 1.1: Paramètres *tight-binding* obtenus dans la référence [4].

Voisins	ϵ_{2p} (eV)	γ_0 (eV)	γ_1 (eV)	γ_2 (eV)	s_0	s_1	s_2
1 ^{er}	0.00	-2.74	–	–	0.065	–	–
2 ^{ème}	-0.21	-2.74	-0.07	–	0.065	0.002	–
3 ^{ème}	-0.21	-2.74	-0.07	-0.015	0.065	0.002	0.001

La fonction d'onde totale de Bloch d'un électron dans les bandes π et π^* issues des orbitales p_z peut s'écrire comme

$$\Psi_{\vec{k}}(\mathbf{r}) = C_A \Psi_{\vec{k}}^A + C_B \Psi_{\vec{k}}^B, \quad (1.1)$$

où

$$\Psi_{\vec{k}}^{A/B}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}_{A/B}} e^{i\vec{k}\cdot\mathbf{r}_{A/B}} \Phi_{A/B}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A/B}). \quad (1.2)$$

Ici, N est le nombre de cellules unitaires, C_A et C_B sont les contributions provenant respectivement des sous-réseaux A et B , Φ désigne les orbitales atomiques $2p_z$, \vec{k} est le vecteur d'onde de Bloch, et \mathbf{R}_A et \mathbf{R}_B sont les positions des atomes A et B respectivement par rapport à une origine choisie. Si H est l'hamiltonien et $\epsilon_{\vec{k}}$ la valeur propre, alors :

$$H\Psi_{\vec{k}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\vec{k}}\Psi_{\vec{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.3)$$

La relation de dispersion pour les bandes de valence et de conduction dans le cas général est donnée par

$$\epsilon^{\pm}(k) = \frac{(2\epsilon_0 - \epsilon_1) \pm \sqrt{(\epsilon_1 - 2\epsilon_0)^2 - 4\epsilon_2\epsilon_3}}{2\epsilon_3}. \quad (1.4)$$

Les formes explicites des dispersions en présence de différents niveaux de voisins sont discutées ci-dessous.

- Dans le cas de l'approximation aux plus proches voisins, la relation de dispersion devient

$$\epsilon^\pm(k) = \frac{(\epsilon_{2p} - s_0\gamma_0g(k)) \pm (\gamma_0 - s_0\epsilon_{2p})g(k)}{1 - s_0^2g(k)}. \quad (1.5)$$

- Avec l'approximation au second plus proche, la relation énergie-impulsion correspondante est

$$\epsilon^\pm(k) = \frac{\epsilon_{2p} + \gamma_1u(k) \mp \gamma_0g(k)}{1 + s_1u(k) \mp s_0g(k)}. \quad (1.6)$$

- Avec l'approximation au troisième plus proche voisin, on aura les expressions suivantes

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= 2s_0\gamma_0g(k) + (s_0\gamma_2 + \gamma_0s_2)t(k) + 2s_2\gamma_2g(2k). \\ \epsilon_2 &= [\epsilon_{2p} + \gamma_1u(k)]^2 - [\gamma_0^2g(k) + \gamma_0\gamma_2t(k) + \gamma_2^2g(2k)]. \\ \epsilon_3 &= [1 + s_1u(k)]^2 - [s_0^2g(k) + s_0s_2t(k) + s_2^2g(2k)]. \end{aligned}$$

avec :

$$\epsilon_0 = \epsilon_{2p}, \quad \epsilon_1 = 2\gamma_0s_0|f(k)|^2, \quad \epsilon_2 = E_{2p} - \gamma_0^2|f(k)|^2, \quad \epsilon_3 = 1 - s_0^2|f(k)|^2.$$

$$f(\tilde{\mathbf{k}}) = e^{ik_x \frac{a}{3}} + 2e^{-ik_x \frac{a\sqrt{3}}{2}} \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right)$$

On a aussi

$$g(\vec{k}) = 1 + 4 \cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4 \cos\left(\frac{3k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right), \quad (1.7)$$

$$g(2\vec{k}) = 1 + 4 \cos^2(k_y a) + \cos(3k_x a) \cos(k_y a). \quad (1.8)$$

La Figure 1.6 illustre la structure de bande électronique selon le modèle TB, en considérant les interactions des premiers, deuxièmes et troisièmes voisins les plus proches. La comparaison se fait par rapport au calcul *ab initio*. Après chaque ajout de voisin, incluant les paramètres de liaisons fortes, on constate qu'avec ce modèle, on peut obtenir une bonne précision de la structure de bande.

Les valeurs numériques et l'utilisation de ces paramètres sont bien détaillées dans l'article de Kundu [4].

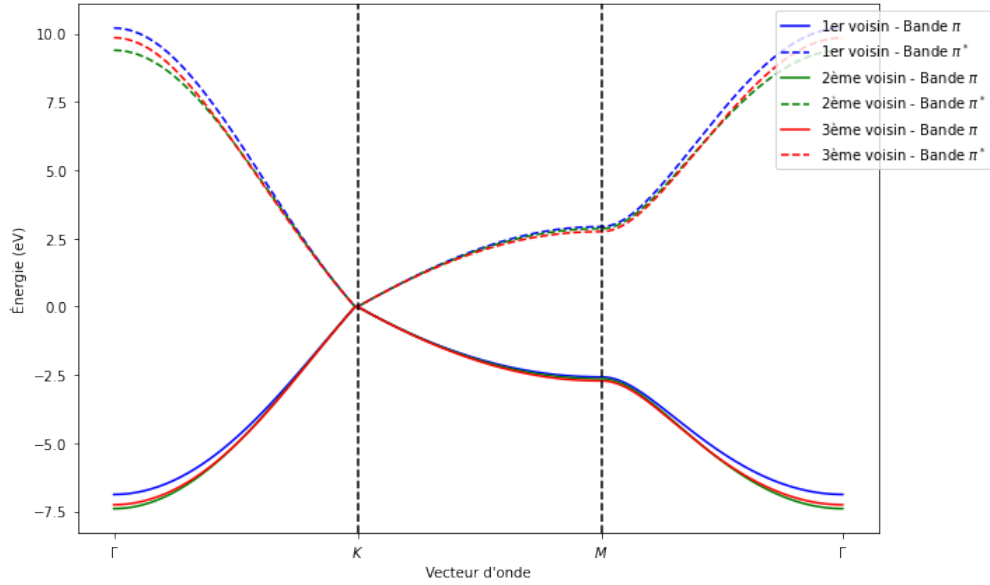


Figure 1.6: La structure de bande du graphène en fonction de l'inclusion successive des couches voisines dans l'hamiltonien en liaison fortes.

4.3 La densité d'état

Nous avons tracé la densité d'états (DOS : density of states) en considérant successivement les interactions jusqu'au troisième voisin. Pour l'interaction du premier voisin uniquement, la DOS est tracée avec la correction de l'intégrale de recouvrement S_0 . La différence entre la présence et l'absence de cette correction est bien détaillée dans l'article de Kundu [4]. Ainsi, pour les deux autres cas, on ajoute les paramètres de TB nécessaires, cités précédemment.

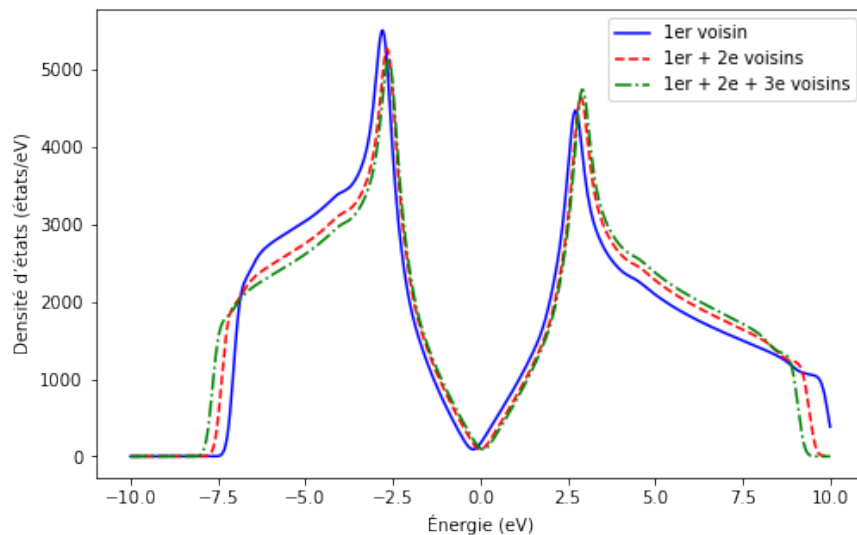


Figure 1.7: La densité d'états du graphène pour les voisins successifs pour différents paramètres relatifs à l'inclusion successive des couches voisines.

Les deux pics sont les singularités de Van Hove où la densité d'états atteint un maximum comme visible sur la figure 1.7. Ces points singuliers sont symétriques en absence du terme de recouvrement, tandis que les singularités

se déplacent légèrement vers l'énergie de Fermi à $E=0$ pour la bande de valence, elles s'éloignent légèrement pour la bande de conduction en présence du terme S .

4.4 Propriétés thermiques

Les propriétés thermiques du graphène suspendu ont été étudiées à partir d'un dispositif utilisant la spectroscopie Raman [7]. Il s'est alors avéré que le matériau (graphène) est doté d'une conductivité thermique qui dépasse celle du diamant. L'absence des interactions avec d'autres couches comme dans le graphène fait augmenter la conductivité thermique à 5000 W/mK. Récemment, une étude a montré qu'une monocouche de graphène exfoliée sur du silicium peut maintenir une conductivité thermique supérieure à celle du cuivre ; c'est le meilleur conducteur thermique connu en ce moment. Pour le graphène monocouche, la conductivité thermique est extrêmement élevée, lorsque le nombre de couches augmente (FLG: few-layer graphene), la conductivité thermique diminue. Cette diminution s'explique principalement par l'augmentation des processus de diffusion phonon-phonon. Cette propriété découle de la structure bidimensionnelle et des vibrations atomiques (phonons) très efficaces pour transporter la chaleur [8].

5 Les nanorubans de graphène (GNR)

Les nanorubans de graphène sont obtenus en découpant un feuillet de graphène selon une direction particulière. Il existe deux types de configurations de bord; *armchair* et *zigzag*. Ces deux configurations résultent d'une différence de 30° de l'axe de découpe du plan de graphène [6] (voir la figure 1.8). Les calculs basés sur l'approximation des liaisons fortes prédisent que les GNR en zigzag sont toujours métalliques alors que ceux de type armchair peuvent être soit métalliques, soit semi-conducteurs, en fonction de leur largeur [9].

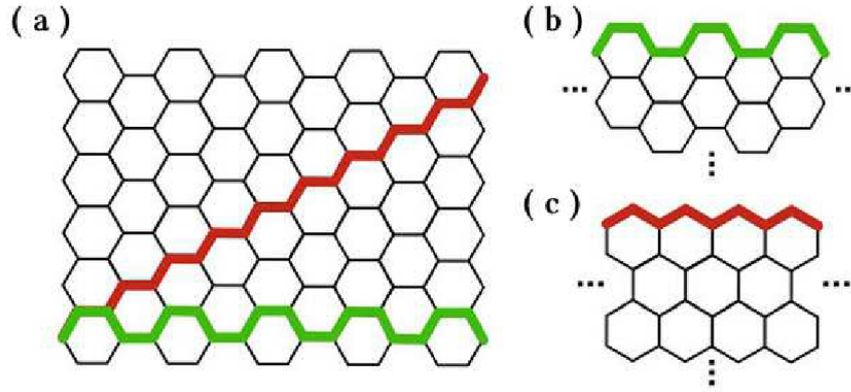


Figure 1.8: a) Coupe-type d'un nanoruban de graphène suivant la direction de l'axe du ruban, b) Structure cristallographique d'un ruban de type *armchair*, c) Structure cristallographique d'un ruban de type *zigzag* [10].

5.1 Structure électronique

5.1.1 Type armchair

Les calculs *ab initio* basés sur la théorie (DFT) montrent que les nanorubans de type *armchair* sont semi-conducteurs avec un écart d'énergie inversement proportionnel à la largeur du GNR [11]. Pour cette partie le système est supposé périodique dans la direction longitudinale x , ce qui permet d'introduire un quasi-moment k_x .

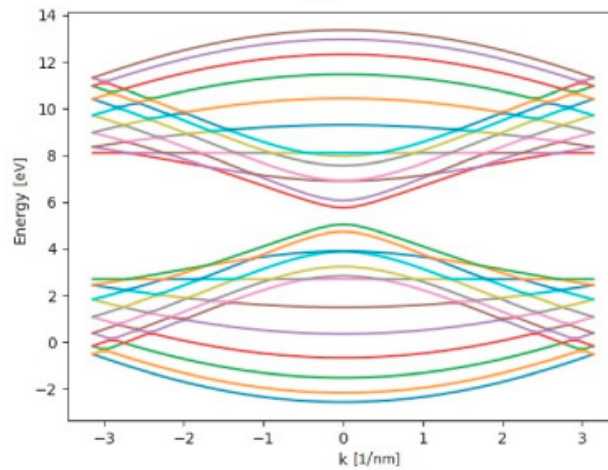


Figure 1.9: Structure de bande pour un nanoruban de type *armchair* obtenue avec Kwant.

5.1.2 Type zigzag

Les nanorubans en zigzag sont différents de ceux de type *armchair*. Les premiers ont un comportement métallique, où la bande de conduction et la bande de valence se recouvrent au voisinage du niveau de Fermi, et présentent des bords polarisés en spin, et un couplage antiferromagnétique entre les

moments magnétiques des atomes de carbone est observé à proximité des bords.

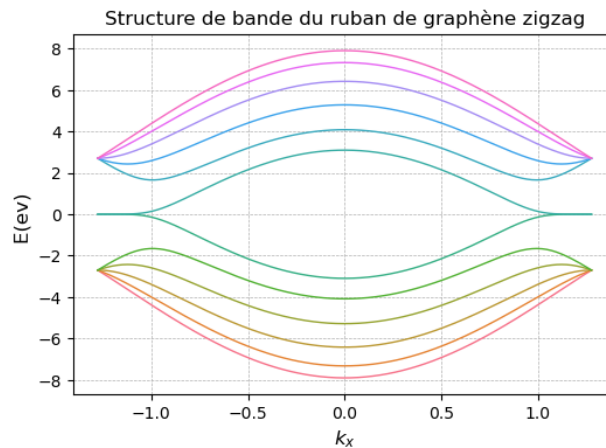


Figure 1.10: Structure de bande d'un nanoruban de graphène de type *zigzag* obtenue avec *Kwant*.

Sur la figure 1.10, nous avons tracé la structure de bande électronique d'un nanoruban de graphène de type *zigzag* à l'aide d'un modèle *TB* avec *Kwant*, le ruban possède une largeur finie de $N = 12$ sites dans la direction transverse représentant les atomes du ruban sur sa largeur. On remarque l'existence des bandes plates autour de $E = 0$ indiquant une absence de dispersion; elles ne se propagent pas, elles sont fortement localisées. Ces états localisés apparaissent sur les bords du ruban dits états de bord [19-20].

6 Applications à base de GNR

Les nanorubans de graphène (GNR) présentent un fort potentiel pour de nombreuses applications de pointe grâce à leurs propriétés électroniques et structurales uniques. Leur comportement semi-conducteur, contrôlable par la largeur et la structure des bords, en fait des candidats privilégiés pour la miniaturisation des dispositifs électroniques, notamment les transistors à effet de champ à base de nanorubans de graphène (GNR-FET), permettant d'envisager une électronique à l'échelle atomique et le développement de circuits plus rapides et plus compacts. Les GNR sont également étudiés pour la spintronique, où leur structure permet la manipulation du spin des électrons, ouvrant la voie à de nouveaux dispositifs de mémoire et de traitement de l'information. Sur le plan optique, leurs propriétés permettent la réalisation d'émetteurs de lumière classiques et quantiques ultra-minces, robustes et intégrables dans des composants photoniques avancés. Par ailleurs, leur grande sensibilité de surface les rend adaptés à la détection de molécules ou de gaz, ce qui en fait d'excellents capteurs chimiques ou biologiques. Enfin, les nanorubans de graphène sont envisagés pour des applications dans l'énergie, comme les supercondensateurs et les batteries, ainsi que dans les

matériaux composites pour renforcer la résistance mécanique et la conductivité de nouveaux matériaux.

7 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre quelques fondements structuraux et électroniques nécessaires à la compréhension du transport électronique dans les systèmes à base de graphène. Les particularités de sa structure de bande, notamment l'absence du gap et la présence de points de Dirac, expliquent le comportement de semi-métal à gap nul. La densité d'états a mis en évidence les singularités de Van Hove et l'influence du recouvrement des orbitales sur la symétrie des bandes de conduction et de valence. Enfin, nous avons comparé les configurations de bord *armchair* et *zigzag*.

Chapter 2

Théories et modélisation : méthode AGF pour le transport électronique et thermique dans les nanorubans de graphène

1 Introduction

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à un système constitué de deux électrodes (gauche, droite) connectées à des nanorubans de graphène qui joue le rôle d'une barrière (région centrale). Ce réseau est soumis à une excitation externe, soit par l'application d'un potentiel électrique, soit par l'injection d'une onde. L'objectif est de décrire comment les porteurs de charge (électrons) se propagent à travers le nanoruban, en utilisant le formalisme des fonctions de Green atomiques (AGF). La technique des fonctions de Green avancées (AGF) est parfaitement adaptée pour modéliser le transport électronique à travers une barrière (dispositif) connectée à des contacts semi-infinis (les électrodes). Dans cette approche, la fonction de Green agit comme un propagateur, transmettant l'effet d'une cause à travers l'ensemble du système [12].

2 Le hamiltonien

Le hamiltonien du système, dans le formalisme de la seconde quantification. Ce hamiltonien correspond au système dans lequel une impureté (ou un défaut) a été introduite, s'écrit :

$$H = \sum_{i,\sigma} \varepsilon_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.} + \sum_{\sigma} \varepsilon_{f\sigma} f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + \sum_{\langle i, \text{imp} \rangle, \sigma} V_f f_{\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \text{h.c.}, \quad (2.1)$$

avec les termes définis comme suit :

- $\varepsilon_{i\sigma}$ est l'énergie sur site d'un électron au site i avec une projection de

spin σ .

- t_{ij} est l'intégrale de saut entre les sites i et j .
- $\varepsilon_{f\sigma}$ est l'énergie d'un électron se trouvant sur l'impureté avec une projection de spin σ .
- V_f est l'hybridation entre l'impureté et ses voisins les plus proches.

Ce hamiltonien de type TB , avec les paramètres pour le graphène spécifiés ci-dessus, représente un cadre théorique standard et bien établi dans l'étude du transport quantique dans les matériaux de faible dimension. Par exemple, Yang et al. [13] ont utilisé une approche théorique similaire pour étudier la résonance de Fano dépendante du spin dans un graphène dopé par des impuretés couplé à des contacts ferromagnétiques, démontrant ainsi la pertinence de cette méthodologie pour les applications en spintronique.

3 Fonction de Green pour un système isolé

Dans le cadre de la physique des systèmes quantiques isolés, la fonction de Green est un outil fondamental permettant de décrire les propriétés spectrales d'un système qui peut être une molécule, cristal ou bien une chaîne atomique, etc. Elle fournit des informations sur les niveaux d'énergie disponibles et sur la manière dont une excitation, comme un électron par exemple, se propage à travers le système.

Pour un système isolé décrit par un hamiltonien H [14], la fonction de Green retardée ¹ est définie par la relation suivante :

$$G^r(\epsilon) = [\epsilon + i\eta - H]^{-1} \quad (2.2)$$

Cette expression est valable pour toutes les valeurs d'énergie ϵ et non pas uniquement pour les énergies propres de H .

Où ϵ est l'énergie considérée, η est un petit paramètre positif introduit pour assurer la causalité et H est l'opérateur hamiltonien du système en question. Et donc elle peut être vue comme étant une amplitude de probabilité pour qu'un électron, introduit en un point (ou état) du système à un certain temps, se retrouve dans un autre point à un autre instant. Autrement dit : elle décrit la propagation des particules dans le système [15].

¹La fonction de Green retardée G^r décrit comment un électron se propage vers le futur après une perturbation, tandis que la fonction avancée G^a décrit la propagation venant du passé.

4 Fonction de Green pour un système ouvert (non isolé)

Dans ce travail, nous nous intéressons à un système ouvert, c'est-à-dire un système non isolé, couplé à des électrodes permettant l'échange de particules et d'énergie avec l'environnement. Ce type de modélisation est essentiel pour étudier les phénomènes de transport électronique à l'échelle nanométrique. Le couplage aux électrodes introduit des effets de dissipation et rend possible le calcul du courant de conduction à travers le dispositif (ainsi que plusieurs paramètres) et les électrons dans des états localisés à l'interface.

4.1 Méthodes théoriques utilisées pour l'étude du système

Pour étudier les propriétés de transport électronique dans un système ouvert couplé à des électrodes, plusieurs approches théoriques peuvent être utilisées. Parmi les plus courantes, on trouve d'une part la méthode des fonctions de Green hors équilibre (NEGF), qui permet une description rigoureuse du transport quantique, en tenant compte des effets de couplage aux électrodes via les auto-énergies. D'autre part, la méthode de raccordement des fonctions d'onde (WFM) consiste à relier directement les états électroniques du conducteur à ceux des électrodes par des conditions de continuité, ce qui permet de calculer la transmission sans faire intervenir les fonctions de Green [16].

4.1.1 Méthode de raccordement (WFM)

La méthode de raccordement des fonctions d'onde (Wave Function Matching, WFM) est une technique utilisée en mécanique quantique ainsi pour étudier la diffusion des ondes; donc ce formalisme basé sur la fonction d'onde. À travers une région centrale et deux électrodes idéales côté gauche et côté droit pour modéliser le comportement des électrons, comme le montre la figure 2.1 [2].

4.1.2 Méthode des fonctions de Green atomiques (AGF)

La méthode des fonctions de Green atomiques (AGF) est une approche puissante pour étudier le transport quantique dans les nanostructures, comme les nanorubans de graphène. Elle repose sur la formulation du transport électronique à partir des fonctions de Green retardées du système, permettant de décrire la propagation des électrons en présence de couplages aux électrodes. Le système est généralement divisé en trois parties : deux électrodes semi-infinies (gauche et droite) et une région centrale de taille finie. L'influence des électrodes sur la région centrale est introduite via des self-énergies calculées à partir des fonctions de Green de surface des électrodes. Une fois les fonctions de Green du système connues, les grandeurs physiques comme la transmission électronique, la densité d'états locale (LDOS) ou la conductance et le courant électronique peuvent être obtenues à l'aide de la formule de Landauer et de la

formule de Caroli. Cette méthode permet de modéliser aussi facilement l'effet du magnétisme ainsi que celui des impuretés, qui influencent grandement sur le transport dans les nanomatériaux [2].

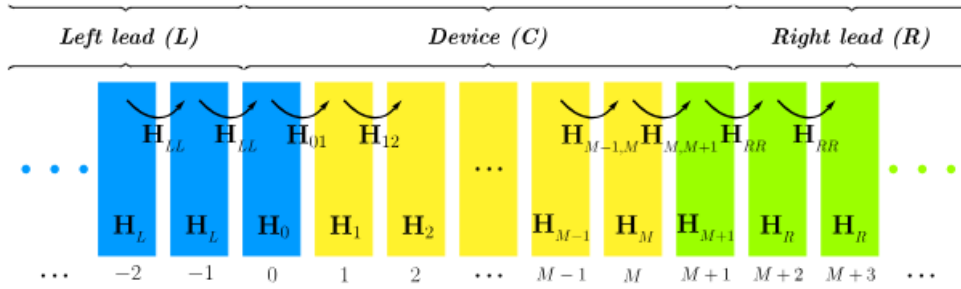


Figure 2.1: Schéma d'un système à deux électrodes et une région centrale : hamiltoniens et couplages [1].

4.2 Application de la méthode AGF aux nanorubans de graphène

Dans notre travail, nous appliquons la méthode AGF pour calculer les propriétés électroniques et magnétiques à travers un nanoruban de graphène (GNR), modélisé dans le cadre d'une approche *TB* (2.1).

4.2.1 Construction de la région centrale et des électrodes

Lorsqu'on connecte le système à deux électrodes (gauche et droite), on passe à un **système ouvert**, le système est alors composé de trois parties (représentées par des hamiltoniens) :

- H_C : la région centrale (le dispositif),
- H_L : l'électrode gauche,
- H_R : l'électrode droite,
- H_{LC}, H_{RC} : les couplages entre la région centrale et les électrodes.

4.2.2 Fonction de Green pour un système ouvert

La fonction de Green retardée du système couplé est définie comme opérateur inverse de l'hamiltonien H :

$$(\omega^2 I + i\eta - H) G(\omega, \mathbf{k}_\perp) = I \quad [17] \quad (2.3)$$

où η est un nombre infinitésimal positif pour assurer la causalité et la convergence, \mathbf{k}_\perp la composante normale à la direction du transport et I la matrice identité.

La forme matricielle, s'écrit comme suit :

$$\begin{pmatrix} \omega^2 I - H_L & -H_{LL} & 0 \\ -H_{LL}^\dagger & \omega^2 I - H_C & -H_{RR} \\ 0 & -H_{RR}^\dagger & \omega^2 I - H_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_L & G_{LC} & G_{LR} \\ G_{CL} & G_C & G_{CR} \\ G_{RL} & G_{RC} & G_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

On note que le H_L , H_R sont les hamiltoniens complets des électrodes gauche et droite, H_C est l'hamiltonien de la région centrale (région active), H_{RR} et H_{LL} sont des sous-blocs de H_L , H_R qui décrivent l'interaction entre deux couches ou bien comment les états quantiques dans une tranche interagissent avec ceux de la tranche voisine.

L'effet de ces réservoirs est modélisé à travers les **autoénergies** $\Sigma_L^r(\omega)$ et $\Sigma_R^r(\omega)$. Celles-ci modifient l'Hamiltonien effectif du système central et traduisent la dissipation ainsi que l'échange de particules avec les électrodes, la fonction de Green dans l'équation (2.2) devient alors comme suit :

$$G_C^r(\omega) = [\omega + i\eta - H_C - \Sigma_L^r(\omega) - \Sigma_R^r(\omega)]^{-1} \quad [18]. \quad (2.5)$$

où Σ_L, Σ_R sont données par :

$$\Sigma_L = H_{LL}^\dagger g_L H_{LL} \quad (2.6)$$

$$\Sigma_R = H_{RR} g_R H_{RR}^\dagger \quad (2.7)$$

avec g_L, g_R sont les fonctions de Green de surfaces des électrodes. On peut calculer numériquement à l'aide de l'algorithme de Lopez Sancho [2].

4.3 Algorithme de Lopez Sancho

Dans ce travail, les fonctions de Green de surface g_L et g_R sont calculées à l'aide de l'algorithme récursif de **Lopez–Sancho**, largement utilisé pour calculer les fonctions de Green de surface des électrodes semi-infinies.

Partie gauche

1. On commence par initialiser les matrices de la partie gauche du système: la matrice locale H_L , les matrices de couplage entre les couches H_{LL} , ainsi que la matrice modifiée par l'énergie complexe :

$$h_s^{(0)} = (\omega + i\eta)I - H_L.$$

Les matrices de départ sont ensuite définies par :

$$h_+^{(0)} = -H_{LL}, \quad h_-^{(0)} = -H_{LL}^\dagger.$$

2. La fonction de Green de surface g_L est ensuite calculée de manière récursive. À chaque itération, les matrices intermédiaires sont mises à jour selon les relations de décimation, tout en sauvegardant les résultats précédents. Au fur et à mesure des itérations, les trois matrices convergent vers une même valeur:

$$h_s^{(i)} = h_+^{(i)} = h_-^{(i)}.$$

3. Un critère de convergence est imposé : la boucle récursive s'arrête lorsque la différence entre deux itérations successives devient inférieure à une tolérance fixée.
4. Une fois la convergence atteinte, la fonction de Green de surface gauche est donnée par :

$$g_L = [h_s^{(i)}]^{-1}.$$

Partie droite

Les mêmes étapes sont appliquées à la partie droite du système en utilisant les matrices H_R et H_{RR} . L'algorithme suit le même processus : initialisation, itérations récursives et vérification de la convergence jusqu'à l'obtention de la fonction de Green de surface g_R [19].

4.4 L'hamiltonien effectif

L'hamiltonien effectif H_{eff} décrit le système central couplé aux électrodes, en incorporant les autoénergies Σ_L et Σ_R (2.7) (2.6) qui modélisent l'échange de particules et d'énergie avec les réservoirs. Par définition, l'hamiltonien effectif s'écrit :

$$H_{\text{eff}} = H_C + \Sigma_L(\omega) + \Sigma_R(\omega), \quad (2.8)$$

où H_C est l'hamiltonien isolé de la région centrale. En écriture matricielle l'équation (2.8) devient :

$$H_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} H_0 + \Sigma_L & H_{01} & 0 & \cdots & 0 \\ H_{01}^\dagger & H_1 & H_{12} & \cdots & 0 \\ 0 & H_{12}^\dagger & H_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & H_{M-1,M} \\ 0 & 0 & 0 & H_{M-1,M}^\dagger & H_M + \Sigma_R \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

La fonction de Green de la région centrale s'écrit alors :

$$G_C(\omega) = (\omega I - H_{\text{eff}})^{-1}. \quad (2.10)$$

Une fois G_C calculée, la fonction de transmission T , qui décrit le passage de la gauche vers la droite à travers cette région peut être obtenue à partir de **la formule de Caroli**, qui s'écrit de la manière suivante

$$T(\omega) = \text{Tr} \left[G_C(\omega) \Gamma_L(\omega) G_C^\dagger(\omega) \Gamma_R(\omega) \right] \quad [20], \quad (2.11)$$

avec $\Gamma_{R(L)}$ qui est le taux d'injection de surface, ou bien la capacité de l'électrode droite ou gauche à injecter des électrons dans le système qui s'exprime comme étant :

$$\Gamma_{L,R}(\epsilon) = i \left(\Sigma_{L,R}(\omega) - \Sigma_{L,R}^\dagger(\omega) \right) \quad [2]. \quad (2.12)$$

4.5 La conductance

La conductance d'un système quantique peut s'exprimer en fonction de la transmission électronique à une fréquence ω , selon **la formule de Landauer** comme suit :

$$G(\epsilon) = \frac{2e^2}{h} T(\epsilon). \quad (2.13)$$

où $T(\epsilon)$ représente la probabilité de transmission, h est la constante de Planck, et le terme $\frac{2e^2}{h}$ correspond à la conductance quantique élémentaire², le facteur 2 prend en compte la dégénérescence de spin des électrons [14].

4.6 Calcul du courant électrique

Le courant électrique résulte du déséquilibre de population électronique entre les deux électrodes. Étant proportionnel à la probabilité de transmission, il s'écrit comme suit :

$$I = \frac{e}{h} \int d\omega T(\omega) [f_L(\omega) - f_R(\omega)]. \quad (2.14)$$

avec $f_{L/R}(\omega)$ la distribution de Fermi des électrodes gauche (L) et droite (R) qui décrit l'occupation des états électroniques en fonction de l'énergie, du potentiel chimique μ et de la température T . Elle est donnée par:

$$f_{L/R}(\epsilon) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\epsilon - \mu_{L/R}}{k_B T}\right)}. \quad (2.15)$$

où μ_L et μ_R les potentiels chimiques des électrodes gauche/droite dépendent de la tension appliquée et $k_B T$ la constante de Boltzmann [20].

5 Effets du magnétisme et de défauts

Le graphène a révélé de nouvelles propriétés physiques ainsi que des applications potentielles, ce qui a suscité un grand intérêt à son égard ces dernières années. Parmi les différents travaux dans ce domaine, l'étude de l'effet d'une impureté magnétique adsorbée à la surface du graphène [7]. Dans la figure 2.2, nous montrons schématiquement le graphène dopé par une impureté,

²C'est la valeur minimale que peut prendre la conductance dans un canal de conduction quantique : $G_0 = \frac{2e^2}{h} \approx 7.75 \times 10^{-5} \text{ S}$.

connecté à des contacts magnétiques. On suppose qu'une impureté est positionnée au-dessus d'un atome de carbone et interagit avec lui via l'hybridation impureté-graphène V_f . Le moment magnétique des contacts est aligné selon un angle relatif θ . On suppose que les contacts gauche et droit sont polarisés en spin, où les configurations parallèle ($\theta = 0$) et antiparallèle ($\theta = \pi$) sont considérées.

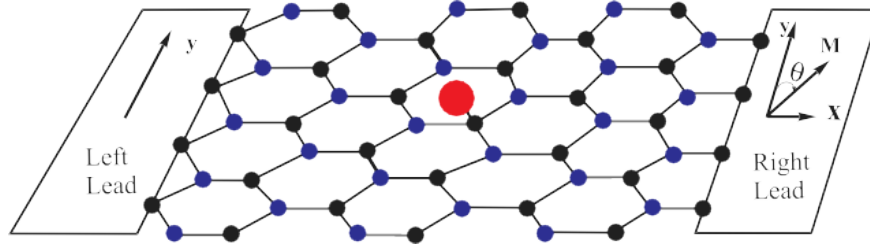


Figure 2.2: La figure représente une feuille de graphène dopée par une impureté (indiquée par un cercle rouge) reliée à deux contacts ferromagnétiques (FM) le moment magnétique des contacts est orienté selon un angle relatif θ [21].

5.1 Effets d'une impureté

L'introduction d'une impureté dans un dispositif à base de graphène, connecté à deux électrodes, modifie profondément les propriétés électroniques locales et globales du système. Une telle impureté perturbe le flux des électrons, créant des variations dans la densité électronique autour d'elle et pouvant induire des états électroniques localisés, voire des résonances spécifiques selon la nature de l'impureté et son interaction avec le réseau de graphène [22].

5.2 Résonance Fano dans les structures nanométriques

L'une des principales caractéristiques de la résonance de Fano est de montrer un profil de raie asymétrique bien distinct. Cette asymétrie provient du couplage entre un état discret (mode fin) et un continuum (mode large). Ce type de résonance peut être observé dans de nombreux domaines de la physique, dans la nanostructure plasmonique ainsi qu'en physique quantique. Le phénomène de la résonance Fano peut également apparaître naturellement dans le transport électrique cohérent à travers des nanostructures. L'électron peut traverser la nanostructure par deux voies (soit en passant par un état discret, soit par le continuum de la bande de conduction) ce qui crée une interférence modifiant fortement la transmission électronique. Cette conductance peut être soit amplifiée soit réduite à certaines énergies ce qui permet de contrôler le passage des électrons [23].

6 Conclusion

Ce chapitre a présenté les fondements théoriques et la méthodologie employée pour l'étude du transport électronique et thermique dans les nanorubans de graphène. Nous avons introduit le formalisme des fonctions de Green atomiques (AGF), une approche rigoureuse et adaptée à la modélisation des systèmes ouverts couplés à des électrodes semi-infinies. L'utilisation de l'algorithme récursif de Lopez–Sancho permet de calculer les fonctions de Green de surface des électrodes, nécessaires au calcul des auto-énergies qui représentent l'interaction entre la région centrale et les contacts. Aussi nous avons présenté les outils permettant de relier ces fonctions de Green aux grandeurs physiques observables, telles que la transmission électronique, la conductance, et le courant, via notamment les formules de Landauer et de Caroli. Enfin, les effets du magnétisme et des défauts, en particulier l'impact des impuretés magnétiques et la manifestation de la résonance de Fano ont été discutés, illustrant la richesse des phénomènes quantiques pouvant influencer le transport électronique à l'échelle nanométrique.

Chapter 3

Étude de la transmission électronique dans un nanoruban de graphène : effets du magnétisme et des impuretés

1 Introduction

Parmi les nombreuses configurations du graphène, les nanorubans de graphène (GNRs)- des bandes étroites de graphène de largeur finie offrent une plateforme idéale pour étudier des phénomènes quantiques de transport, notamment du fait de la présence de bords qui modifient considérablement leur spectre électronique.

La géométrie des bords, en particulier armchair ou zigzag, influence fortement les propriétés électroniques : alors que les GNRs armchair peuvent présenter un gap électronique dépendant de leur largeur, les GNRs zigzag exhibent des états de bord fortement localisés, souvent associés à des phénomènes magnétiques. Ce chapitre présente aussi les résultats de simulations étudiant le transport électronique à travers une barrière non magnétique contenant une impureté unique positionnée entre deux contacts magnétiques. L'objectif est de comprendre l'influence des propriétés de l'impureté ainsi que des paramètres externes (température, les champs électriques, ou magnétiques etc.) sur la conductance.

2 Modèle de base : nanoruban de graphène propre attaché à des électrodes de type carré

2.1 Type Armchair AGNRs

La figure 3.1 illustre deux configurations atomiques d'un nanoruban de graphène de type *armchair*. Les différentes couleurs utilisées permettent de distinguer les diverses régions du système les extrémités en rouge représentent les électrodes (ou contacts) de forme carrée, connectées au nanoruban de graphène. Celui-ci est relié, d'un côté, à une région centrale carrée (en bleu,

sur la partie gauche de la figure 3.1). C'est le même motif qui est répété ainsi, et de l'autre côté, connecté directement au électrode carré.

Les résultats de transmission associés à la structure présentée dans la figure 3.1 sont illustrés dans les figures 3.2 et 3.3.

Dans cette partie, nous avons effectué plusieurs tests numériques sur ce modèle de base afin d'analyser le comportement de transmission électronique à travers la structure.

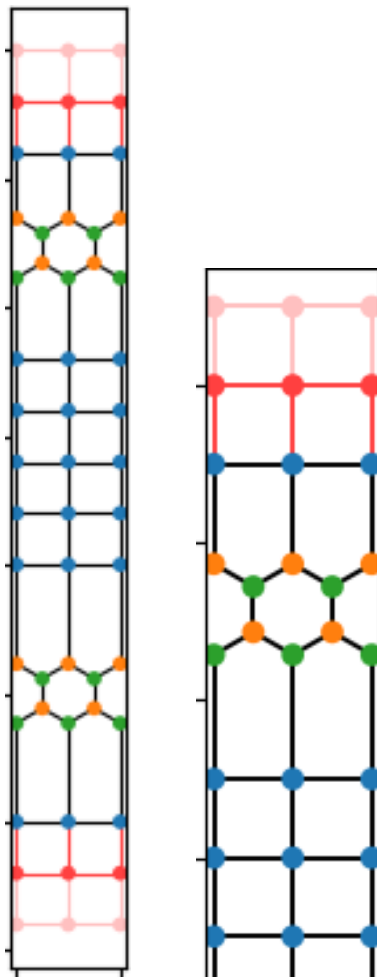


Figure 3.1: Représentation des deux structures atomiques d'un nanoruban de graphène de type *armchair* connecté à des électrodes de structure carrée tracée avec kwant.

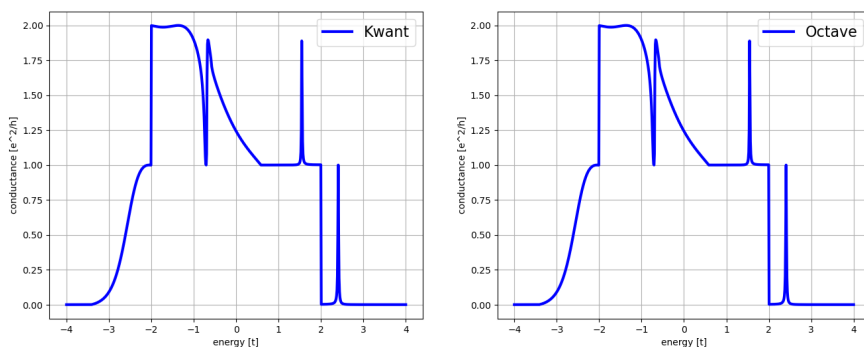


Figure 3.2: Courbes de la conductance en fonction de l'énergie pour le nanoruban armchair, obtenues avec Kwant (WFM) et octave (AGF).

On observe les courbes de conductance (exprimée en unités de e^2/h) en

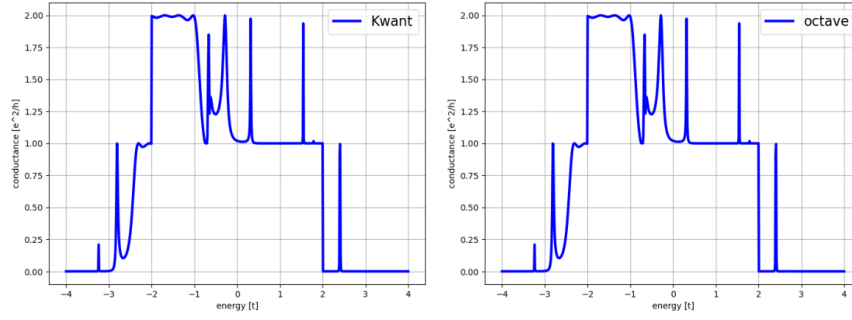


Figure 3.3: Courbes de la conductance en fonction de l'énergie pour le nanoruban armchair, obtenues avec Kwant (WFM) et Octave (AGF).

fonction de l'énergie (en unités de t) pour un nanoruban de graphène de type *armchair*, obtenues à l'aide de deux approches numériques différentes, **Kwant** (WFM) et **Octave** (AGF). Pour certaines plages d'énergie, la transmission est nulle, ce qui correspond à des états propagatifs non permis. À l'inverse, les pics de transmission signalent la présence d'états permis dans la région centrale.

On observe que dans la figure de conductance 3.3, il y a beaucoup plus d'états permis (transmis) que dans la figure 3.2, qui correspondent à la géométrie du nanoruban plus complexe figure 3.1. On observe une bonne concordance entre notre approche AGF, calculée sous **Octave**, et les résultats obtenus avec **Kwant**, ce qui confirme la validité des résultats numériques obtenus.

2.2 Type Zigzag ZNRs

La figure 3.4 montre la structure atomique d'un nanoruban de graphène de type *zigzag*, connecté de part et d'autre à deux électrodes carrées.

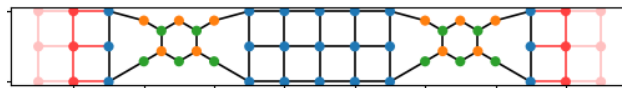


Figure 3.4: Représentation de la structure atomique d'un nanoruban de graphène de type *zigzag* tracée avec kwant.

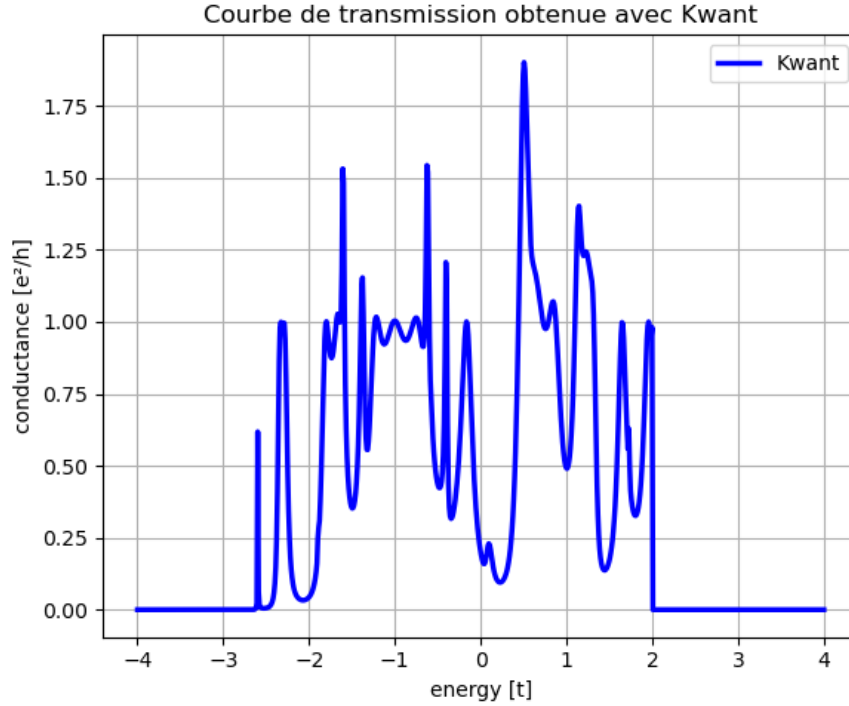


Figure 3.5: Courbes des conductance en fonction de l'énergie pour le nanoruban *zigzag*, tracée avec Kwant.

Pour les nanorubans de type *zigzag*, les courbes obtenues avec Kwant révèlent une structure plus complexe que celle des nanorubans *armchair*. En effet, on note l'apparition de pics supplémentaires qui ne sont pas présents dans les nanorubans *armchair*. Ces pics sont dus à la présence d'états localisés aux bords du nanoruban.

2.3 Conclusion

Les résultats de transmission obtenus en comparant les nanorubans *armchair* et *zigzag* confirment la sensibilité du transport aux propriétés géométriques et électroniques du ruban. La symétrie de la structure influence la forme globale de la courbe de transmission.

3 Nanoruban de graphène propre attaché à des électrodes de type graphène

Dans cette section, nous étudions le transport électronique à travers un nanoruban de graphène de type *armchair* connecté directement à deux électrodes semi-infinies constituées également de graphène. Contrairement au cas précédent où les contacts étaient modélisés par des électrodes de type carré, ce modèle assure une meilleure continuité cristalline entre la région centrale (le ruban) et les électrodes. L'étude est menée en utilisant la méthode des fonctions de Green **AGF**. Nous analysons notamment comment la nature des contacts influence les courbes de conductance.

3.1 Construction des blocs d'hamiltonien de la région centrale et des électrodes

Les AGNR (Armchair Graphene Nanoribbons) est formé par une répétition régulière de cellules élémentaires le long de la direction transversale du ruban. Chaque cellule contient un nombre fini d'atomes. Dans notre modèle, la cellule de base est composée de six atomes connectés entre eux par des interactions de type TB entre premiers voisins. Pour augmenter la largeur du ruban dans la direction transversale, on ajoute progressivement des blocs supplémentaires contenant chacun quatre atomes à chaque itération, comme on le voit dans la figure 3.6, en respectant la même logique de connexions.

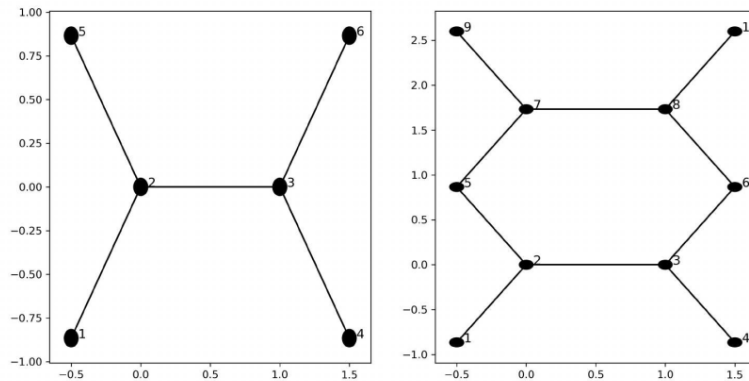


Figure 3.6: Construction des blocs du hamiltonien TB d'un AGNR : à gauche représente le bloc initial et à droite le bloc avec quatre atomes supplémentaires (1^{re} itération).

Chaque bloc est représenté par une petite matrice (hamiltonien local H_S) et les liaisons entre les blocs successifs sont décrites par des matrices de couplage H_{SS} . En combinant ces éléments, on construit l'hamiltonien total du ruban sous la forme d'une grande matrice tridiagonale par blocs.

3.2 Calcul de la transmission électronique

Afin de mettre en évidence l'effet de la largeur du ruban sur les propriétés de transport, nous faisons varier le paramètre N (le nombre de sites dans la direction transversale) en modifiant le nombre de blocs élémentaires constituant la cellule centrale. Cette variation permet d'analyser l'évolution de la transmission électronique et de la densité d'états pour des géométries de ruban de plus en plus larges.

On présente dans la figure 3.7 l'évolution de la transmission $T(\omega)$ et de la densité d'états $DOS(\omega)$ pour trois largeurs différentes du nanoruban $N = 5, 10, 20$ avec

- à gauche : la transmission en fonction de l'énergie ω ,
- à droite : la densité d'états totale.

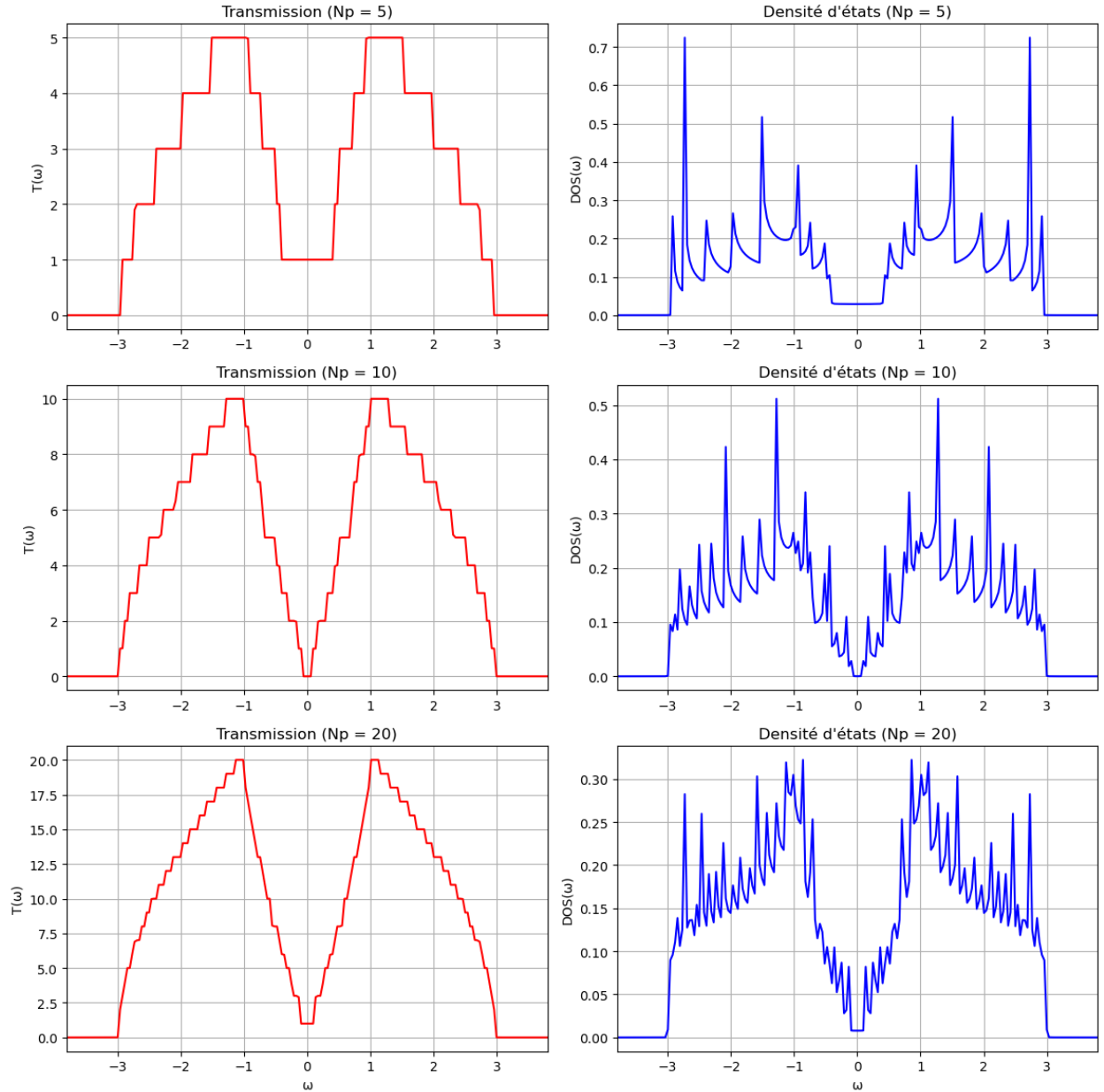


Figure 3.7: Calcul de la transmission électronique et de la densité d'états du AGNR avec la méthode AGF pour de différentes largeurs $N=5, 10, 20$.

Analyse des résultats de Transmission $T(\omega)$:

Dans le cas d'un ruban étroit avec $N = 5$, les marches de transmission sont bien visibles, avec un nombre limité de canaux. Cela reflète un nombre réduit de modes de conduction. Lorsque la largeur du ruban augmente, le nombre de marches de transmission augmente également. Pour $N = 10$, on observe environ 10 marches, et la transmission devient plus lisse, révélant davantage de canaux de conduction. Dans le cas d'un ruban encore plus large, avec $N = 20$, jusqu'à 20 canaux sont visibles; la transmission devient alors quasi-continue, ce qui est typique d'un système avec une large dimension transversale.

Conclusion

En augmentant N , c'est-à-dire la largeur du ruban, on observe une augmentation du nombre de canaux de conduction, ce qui rend la transmission plus lisse et quasi-continue dans le cas de rubans larges.

Analyse des résultats de la densité d'états $Dos(\omega)$:

La densité d'états présente des pics marqués et irréguliers dont la forme rappelle celle d'une chaîne linéaire. Lorsque la largeur du ruban N augmente, ces pics deviennent plus nombreux et plus fins, formant une structure plus dense et plus complexe. Cette évolution traduit l'apparition d'un gap. Donc N augmente la densité d'états (DOS) de l'AGNR converge à celle du graphène bidimensionnel (2D). Cependant, le gap qui apparaît dépend de la famille d'AGNR :

- AGNR de type $3p+2$ le gap est très petit ou nul.
- AGNR de type $3p+1$ le gap est fini.

Où p est un entier positif.

4 Effets du magnétisme sur la transmission électronique dans le nanoruban de graphène

Dans cette section, nous étudions l'influence de l'aimantation des électrodes sur le transport électronique à travers le nanoruban de graphène de type armchair (AGNR) et de type carré. L'objectif est de comprendre comment la polarisation de spin induite dans les électrodes influence la conductivité et la nature des états électroniques dans le système.

4.1 Modélisation de l'aimantation

Pour introduire le magnétisme, nous utilisons un modèle simple, qui consiste à créer une séparation en énergie entre les états de spin up \uparrow et spin down \downarrow . Cette séparation est modélisée par un terme effectif $\pm M$ (où M représente l'intensité du moment magnétique) ajouté aux éléments diagonaux des hamiltoniens des électrodes (voir la figure 2.2 [21]). Dans le code, les électrodes sont polarisées en spin.

Pour le fil gauche (Left Lead) :

- L'énergie pour les électrons de spin up : $E_{\uparrow} = e_L - M_L - eV$.
- L'énergie pour les électrons de spin down : $E_{\downarrow} = e_L + M_L - eV$.

Ici, M_L représente l'amplitude M du champ magnétique dans le fil gauche, et V est la tension utilisée. Cette différence d'énergie $2M_L$ ¹ entre les deux canaux de spin crée une polarisation de spin dans le fil gauche.

¹ $\Delta E = E_{\downarrow} - E_{\uparrow} = (e_C + M_L) - (e_C - M_L) = 2M_L$

Pour le fil droit (Right Lead) : Le comportement est plus complexe et on intègre une magnétisation qui peut être orientée avec un angle θ par rapport à l'axe de quantification qui est prise comme celui de \vec{M}_L , modélisant un champ non colinéaire.

- L'énergie effective pour le spin up : $E_{\uparrow} = e_R - M_R \cos(\theta)$.
- L'énergie effective pour le spin down : $E_{\downarrow} = e_R + M_R \cos(\theta)$.
- Un terme hors-diagonal $t_{\uparrow\downarrow} = M_R \sin(\theta)$ est également introduit dans l'hamiltonien de la cellule unitaire du fil droit. Ce terme représente le couplage entre les états de spin up et spin down.

Cette approche permet d'étudier l'effet du magnétisme sur la transmission électronique et la densité d'états du AGNR pour différentes largeurs. Pour illustration on prend $N=5, 10, 20$, ($\theta = \frac{\pi}{2}$, $M_L = M_R = 1.4$ et $eV = 0$) et on obtient les résultats montrés sur la figure 3.8. On voit que pour la valeur de M choisie qui est relativement grande, l'effet est de décaler les bandes de spin \uparrow vers les basses énergies contrairement aux bandes de spin \downarrow qui sont décalées vers les hautes énergies.

La transmission est réduite: on observe que la quantification caractéristique (présence d'escaliers pour la transmission) est préservée et atténuée. Plus précisément :

- Pour $\omega < 0$, seuls les canaux de conduction majoritaires, alors que les canaux minoritaires sont fortement supprimés.
- Pour $\omega \gg 0$, la transmission est faible.

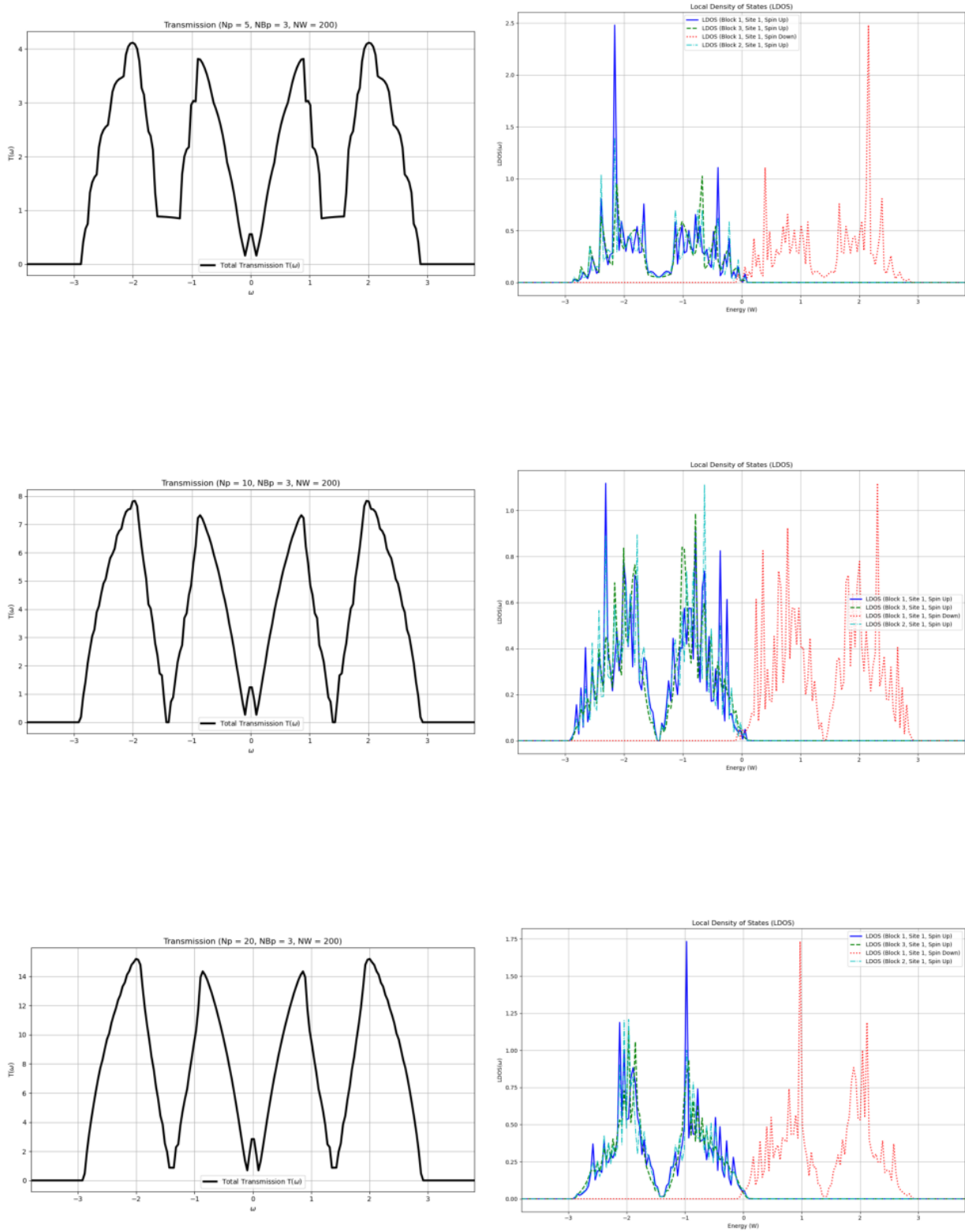


Figure 3.8: Effet du magnétisme sur la transmission électronique et la densité d'états du AGNR pour de différent largeur $N=5, 10, 20$.

4.2 Réseau carré

4.2.1 Cas d'une impureté non-magnétique

Dans cette partie, ce que nous faisons n'est pas exactement l'introduction d'une impureté dans le graphène, mais plutôt la substitution d'un atome de carbone C par un autre atome. Cette impureté possède une intégrale de saut

modifiée, qui affecte les interactions avec ses atomes voisins.

Sur la figure 3.9, on montre la conductance linéaire en présence d'une impureté non magnétique au centre de la barrière, en fonction de l'énergie atomique ε_F de l'impureté. L'asymétrie dans le profil de la conductance est apparente sur la figure de droite.

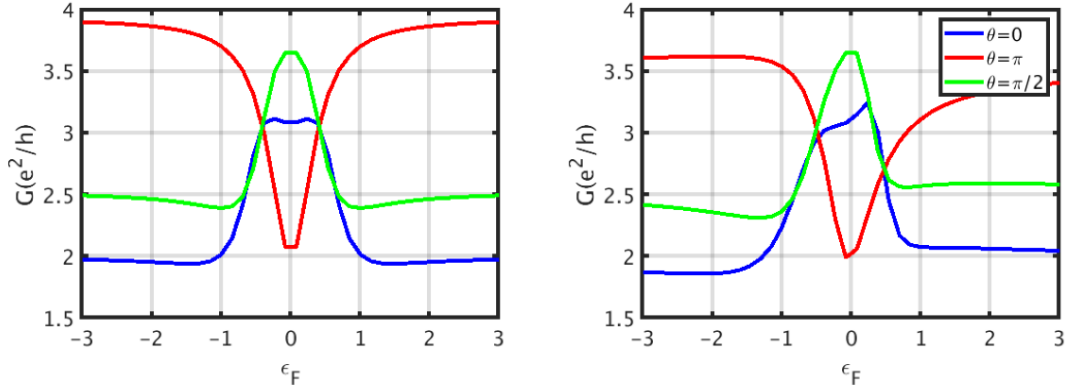


Figure 3.9: La conductance en fonction de l'énergie ε_F pour différentes orientations relatives de l'aimantation dans les contacts. Les autres paramètres sont $V = 0.5$, $M_L = M_R = 1$, et $\mu = 0$ (respectivement $\mu = -0.05$) pour la figure de gauche (droite).

Ceci est dû au fait que le système possède la symétrie électron-trou, qui reste valide même lorsqu'on y substitue un atome par une impureté possédant également cette symétrie. On constate en effet que sur la courbe de gauche avec $\mu = 0$, la conductance est parfaitement symétrique. Elle est maximale (pour $\theta = 0$ et $\theta = \pi/2$) lorsque $\varepsilon_F = 0$, même si elle est diminuée par rapport au cas parfait. En revanche, lorsque le potentiel chimique est déplacé, vers $\mu = -0.05$ sur la figure de droite, on perd la symétrie électron-trou ainsi que celle de la conductance.

4.2.2 Cas d'impureté magnétique

Sur la figure 3.10, on montre la conductance linéaire, en présence d'une impureté magnétique à la surface de la barrière, en fonction de l'énergie atomique ε_F de l'impureté, et ce pour différentes valeurs du potentiel chimique μ . Pour simuler la nature magnétique de l'impureté, on considère $\varepsilon_{F\uparrow} = \varepsilon_F - 0.3$ et $\varepsilon_{F\downarrow} = \varepsilon_F + 0.4$. L'asymétrie dans le profil de la conductance est apparente dès que μ diffère de 0.

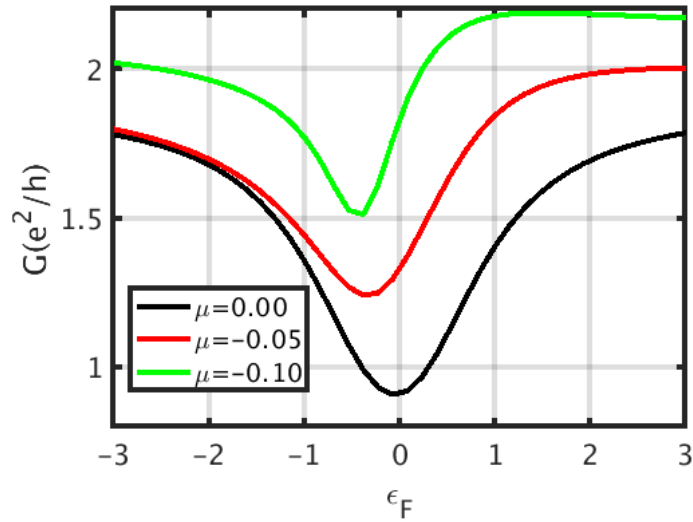


Figure 3.10: Conductance en fonction de l'énergie ϵ_F pour différentes valeurs du potentiel chimique μ .

On observe également que la conductance varie en fonction de μ , ce qui découle des variations de la densité d'états au voisinage de μ .

4.3 Le courant électronique pour le nanoruban de graphène

4.3.1 Le courant sans impuretés

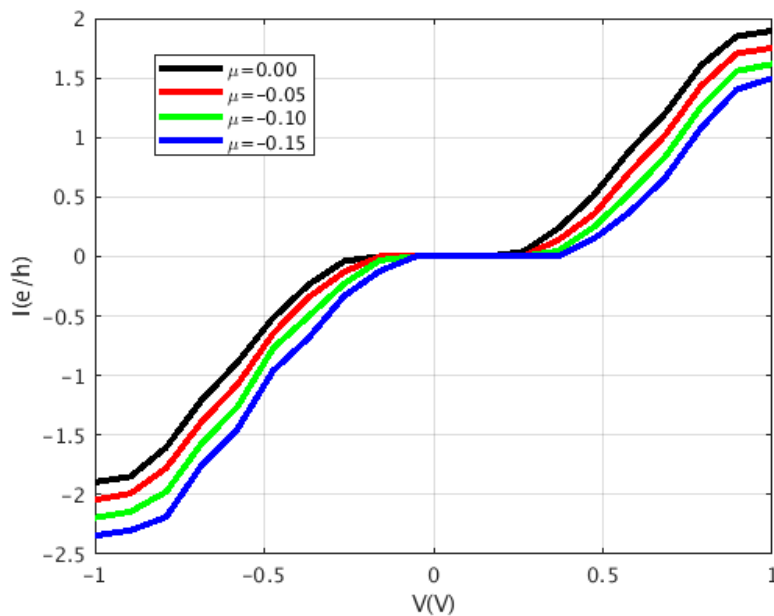


Figure 3.11: Le courant électronique en fonction de la tension pour différentes valeurs de μ .

Le potentiel chimique μ contrôle le niveau de Fermi et donc la densité de porteurs de charge dans le nanoruban. Pour $\mu = 0$, le système est au point de neutralité de charge avec une conduction minimale autour de $V = 0$. Lorsque μ devient plus négatif le niveau de Fermi se décale vers la bande de valence, augmentant la densité des électrons et donc la conductance globale du système.

Cette augmentation du courant avec des valeurs plus négatives de μ reflète l'augmentation de la densité d'états disponibles pour la conduction.

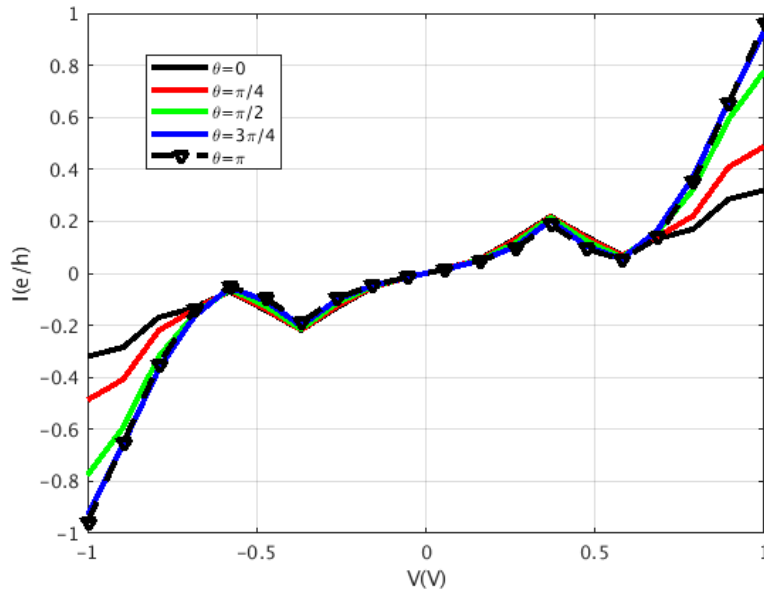


Figure 3.12: Le courant électronique en fonction de la tension pour différentes valeurs de θ .

Le graphe 3.12 montre l'évolution du courant électronique dans un nanoruban de graphène en fonction de la tension appliquée, pour différentes valeurs de l'angle θ entre les aimantations des deux contacts (la magnitude de l'aimantation étant fixée à 1 de chaque côté). On observe que le courant varie, quand θ augmente de 0 à π , le courant pour une tension donnée tend à légèrement augmenter, et il existe des écarts entre les courbes, particulièrement à des tensions négatives. Cela révèle l'effet du couplage magnétique entre contacts : l'injection de spin dépend de l'orientation relative des aimantations, modifiant la transmission des électrons à travers le nanoruban. Pour $\theta = 0$ (contacts parallèles, noir), le courant est plus faible dans certaines plages, tandis que pour $\theta = \pi$ (contacts antiparallèles, noir à pointillés), le courant est légèrement plus élevé à tension négative. Cela traduit une dépendance du transport au degré de non-colinéarité des aimantations, caractéristique d'un effet de magnétorésistance dans les nanorubans de graphène.

4.3.2 Le courant avec impuretés

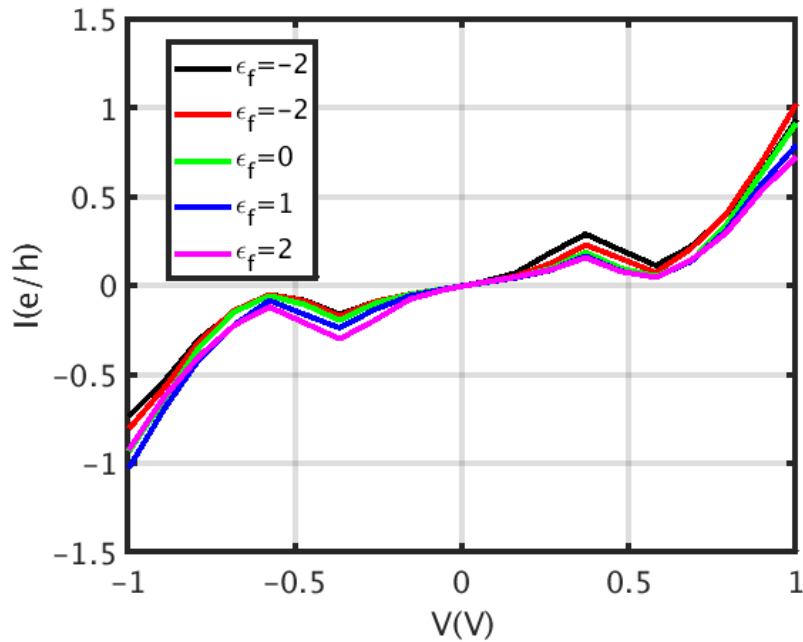


Figure 3.13: Le courant électrique en présence d'impureté en fonction de la tension pour différentes valeurs de l'énergie de l'impureté ε_F .

Les impuretés magnétiques introduisent des états localisés dans le gap du nanoruban, créant des résonances de transmission qui se manifestent par les oscillations observées dans les courbes 3.13. Ces oscillations reflètent les interférences quantiques entre les électrons diffusés par l'impureté magnétique et ceux transmis directement. L'asymétrie des courbes indique que les effets de l'impureté dépendent de la polarité de la tension appliquée, caractéristique du transport résonant dans les systèmes à impuretés magnétiques.

4.4 La conductance pour le nanoruban de graphène

Dans cette partie, nous nous intéressons à l'effet d'une impureté magnétique sur le nanoruban de graphène. Nous présentons les résultats de simulations explorant l'influence de divers paramètres physiques sur la conductance d'un nanoruban de graphène en présence d'impureté. Nous analyserons spécifiquement l'impact du potentiel chimique (μ), de la température ($k_B T$) et l'angle entre \vec{M}_L et \vec{M}_R de couplage (θ) sur la conductance G en fonction de l'énergie de l'impureté (ε_F), tout en mettant en évidence les caractéristiques de l'effet Fano.

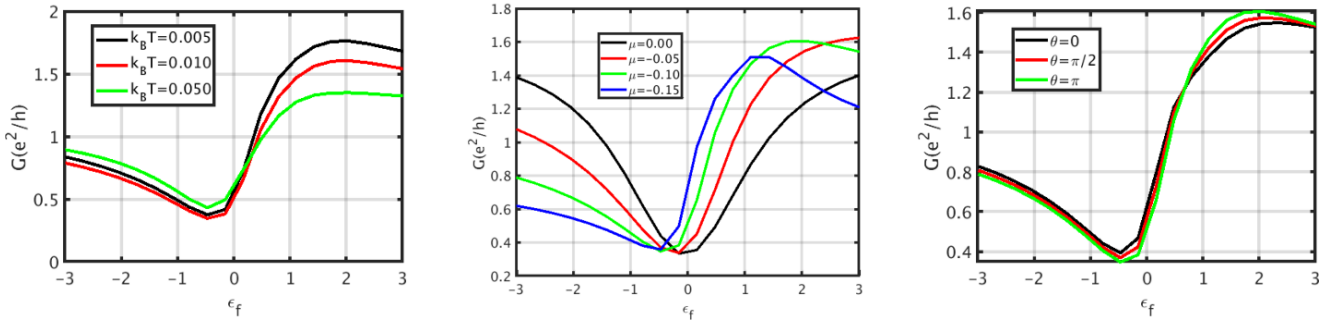


Figure 3.14: Conductance en fonction de l'énergie (ϵ_F) pour différentes valeurs du potentiel chimique μ , de l'angle θ et de la température $k_B T$.

De la figure 3.14 on remarque que la conductivité électrique est particulièrement sensible aux paramètres mentionnés. On constate qu'une augmentation de la température tend à atténuer l'amplitude de la résonance et à élargir la vallée de Fano. Cela implique que les électrons occupent une large gamme d'états énergétiques.

Les profils de conductance observés montrent une forte dépendance à μ , ce qui reflète la structure de bande unique des AGNR où la densité d'états peut varier considérablement avec l'énergie. Lorsque l'angle relatif θ entre les aimantations des électrodes magnétiques varie, la transmission des électrons dépendante de leur spin à travers l'impureté est modifiée. Ce phénomène, lié à l'alignement magnétique des électrodes, constitue un principe fondamental de la spintronique.

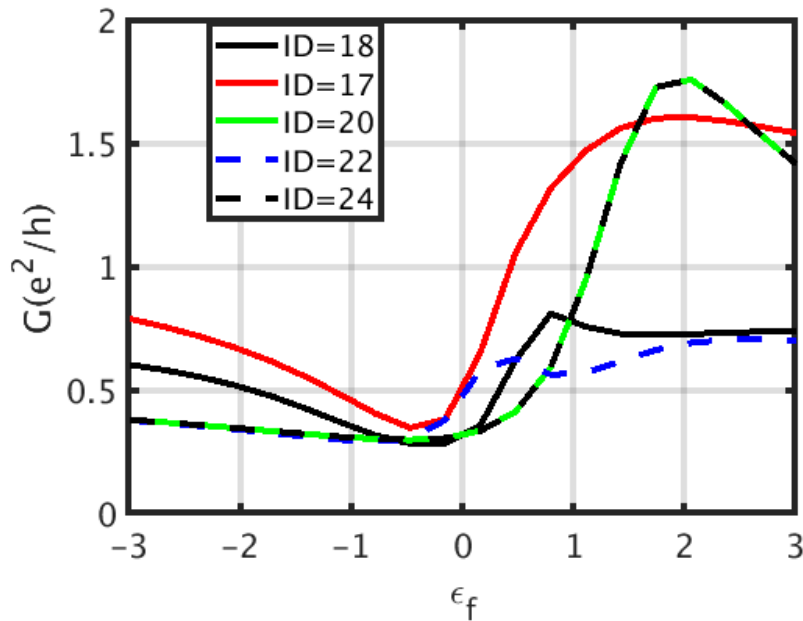


Figure 3.15: La conductance en fonction de l'énergie ϵ_F pour différentes positions d'impuretés.

Pour la figure 3.15, le déplacement du pic de conductance et sa variation d'amplitude indiquent que certaines positions d'impuretés sont plus favorables au transport électrique et les variations dans la forme des courbes (largeur

des pics, asymétrie) induisent des effets de localisation différents selon la configuration atomique, des courbes plus larges suggèrent une délocalisation plus importante des états électroniques. Pour la valeur de ID est un indice de la largeur transversale du ruban du nanoruban. Plus la valeur de ID est élevée (par exemple, ID=24), plus le ruban du graphène est large, et ID 17 désigne un nanoruban d'une largeur spécifique, crée par 17 itérations (ou blocs) additionnelles, ce qui influence sur ses propriétés électroniques et de transport, notamment sur sa conductance.

4.5 Conclusion

Dans l'ensemble, les résultats obtenus pour le système AGNR avec une impureté magnétique illustrent la complexité des interactions entre le confinement quantique, la diffusion induite par l'impureté, la polarisation de spin, ainsi que divers facteurs externes tels que le potentiel chimique, l'orientation magnétique et la température. Les phénomènes de transport dépendants du spin, notamment la forte sensibilité à l'alignement magnétique et à la position de l'impureté, jouent un rôle clé dans la conception et l'amélioration des dispositifs spintroniques de nouvelle génération. Ces résultats confirment et enrichissent les travaux précédents sur le transport de spin dans les matériaux carbonés de faible dimension, soulignant l'importance cruciale de l'ingénierie des impuretés pour maîtriser le flux de spins de manière efficace.

5 Applications et perspectives : la spintronique

Les résultats de simulation présentés dans ce chapitre sur les systèmes AGNR avec des impuretés magnétiques ont des implications importantes pour ce domaine en plein essor. La spintronique vise à exploiter le spin intrinsèque de l'électron, en plus de sa charge, pour développer de nouveaux dispositifs électroniques aux fonctionnalités améliorées, telles que la non-volatilité, une vitesse de traitement des données accrue et une consommation d'énergie réduite. Des matériaux comme le graphène et ses dérivés, y compris les AGNR, sont particulièrement prometteurs pour les applications spintroniques en raison de leurs longues longueurs de cohérence de spin et de leurs propriétés électroniques modulables [24].

Conclusion générale

Ce travail a permis d'approfondir la connaissance des propriétés électroniques et thermiques des nanorubans de graphène, tant dans leur état pur que lorsqu'ils sont soumis à la présence d'impuretés magnétiques ou non magnétiques. Grâce à l'utilisation du formalisme des fonctions de Green atomistiques (AGF), nous avons pu modéliser avec précision le transport quantique dans ces structures à l'échelle nanométrique.

L'étude a mis en lumière le rôle déterminant de la géométrie des nanorubans (qu'ils soient de type *zigzag* ou *armchair*), de leur largeur, de la nature des bords, ainsi que de la présence d'impuretés et du magnétisme, sur la conductance et la transmission électronique. Nous avons démontré que la symétrie électron-trou est un facteur clé dans le profil de la conductance, et que sa rupture, un dopage ou l'introduction d'impuretés magnétiques, entraîne des phénomènes d'asymétrie ainsi que l'apparition de résonances de type Fano.

Ces résultats soulignent l'importance du contrôle des défauts, du dopage et des conditions aux bords pour optimiser les performances de transport des nanorubans de graphène. Ils ouvrent la voie à de nombreuses applications potentielles en nanoélectronique, spintronique et dans le domaine des dispositifs thermiques avancés. Ce travail contribue ainsi à une meilleure compréhension des mécanismes fondamentaux du transport dans les matériaux bidimensionnels et met en avant le rôle essentiel de la modélisation théorique pour le développement futur des technologies basées sur le graphène. Pour conclure, cette étude pose des bases solides pour les recherches futures, ouvrant la voie à une exploitation optimale des nanorubans de graphène dans plusieurs secteurs technologiques, grâce à une synergie harmonieuse entre modélisation théorique rigoureuse et validation expérimentale pertinente.

Bibliography

- [1] F. Mesple, *Etude expérimentale des hétérodéformations dans les moirés des bicouches de graphène*. Université Grenoble Alpes, 2022. Soumis le 2 mai 2023.
- [2] H. Boumrar, M. Hamidi, H. Zenia, S. Lounis, *Equivalence of wave function matching and Green's functions methods for quantum transport: generalized Fisher–Lee relation*, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 50, 505301, 2020.
- [3] T. Radsar, H. Khalesi, V. Ghods, *Optical and Quantum Electronics*, *Optical and Quantum Electronics*, 53, 178, 2021.
- [4] R. Kundu, *Tight-binding parameters for graphene*, *Modern Physics Letters B*, 25, 163, 2010.
- [5] M. Schneider Johannes, *Electronic Properties of Graphite*, *Journal of the Physical Society of Japan* 91, 2010.
- [6] B. Keyan, *Transport électronique dans le graphène*, PhD thesis, Paris XI, 2011.
- [7] W. Cai et al., *Thermal Transport in Suspended and Supported Graphene*, *Nano Letters*, 10, 1645, April 20, 2010.
- [8] F. Mazzamuto, *Étude théorique des propriétés thermiques et thermoelectriques des nanorubans de graphène*, 2011.
- [9] M. Begui, *Calcul de la fonction de Green quantique dans une sphère de dimension N* . Mémoire, 2019.
- [10] Toriyama, M., Kaneko, K. (s.d.). *Nano Electronics: A New Era of Devices*. ResearchGate. <https://www.researchgate.net/publication/280932787> Nano Electronics A New Era of Devices.
- [11] ke, R. and Klimeck, G. and Bowen, R.C. and Jovanovic, D. *Single and multiband modeling of quantum electron transport through layered semiconductor devices*, *Journal of Applied Physics*, 81, 12, 7845, 1997.

- [12] Safer, Z. *Étude avec code Siesta des propriétés électroniques des nanorubans de carbone en fonction de la largeur*. Mémoire de Master, Université Abderrahmane Mira – Béjaïa, 2018.
- [13] Barone, V. and Hod, O. and Scuseria, G.E. *Electronic Structure and Stability of Semiconducting Graphene Nanoribbons*, Nano Letters, 6(12), 2748, 2006.
- [14] Yang, F. and Cheng, Y. and Liu, F. and Chen, X. *Spin-dependent Fano resonance in an impurity-doped graphene coupled to ferromagnetic leads*, Applied Physics Letters, 102, 032403, 2013.
- [15] Bruus, H. and Flensberg, K. *Introduction to Many-body Quantum Theory in Condensed Matter Physics*, Oxford University Press, 2002.
- [16] Rallis, K. and Dimitrakis, P. and Karafyllidis, I.G. and Rubio, A. and Sirakoulis, G.C. *Electronic Properties of Graphene Nanoribbons With Defects*, IEEE Transactions on Nanotechnology, 20, 151, 2021.
- [17] Teichert, F. and Zienert, A. and Schuster, J. and Schreiber, M. *An improved Green's function algorithm applied to quantum transport in carbon nanotubes*, Computational Materials Science, 2019.
- [18] Tran, V.-T. and D'Agosta, R. and Bescond, M. and Volz, S. *Ab Initio Phonon Transport Based on Nonequilibrium Green's Function Formalism: A Practical Approach*, Physica Status Solidi B, 240, 2400353, 09 November 2024.
- [19] Lopez Sancho, M. P. and Lopez Sancho, J. M. and Rubio, J. *Highly convergent schemes for the calculation of bulk and surface Green functions*, Journal of Physics F: Metal Physics, 14, 1205, 1984.
- [20] Fetter, A. L. and Walecka, J. D. *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw-Hill, 1971.
- [21] Kim, W. Youn and Kim, K. S. *Carbon nanotube, graphene, nanowire, and molecule-based electron and spin transport phenomena*, Journal of Computational Chemistry, 29, 1073, 2008.
- [22] M.F. Limonov, M.V. Rybin, A.N. Poddubny, Y.S. Kivshar, *Fano resonances in photonics*, Nature Photonics, 11, 543, 2017.
- [23] Ch.W. Groth, M. Wimmer, A.R. Akhmerov, X. Waintal, *Kwant: a software package for quantum transport*, New Journal of Physics, 16, 063065, 2014.

- [24] S. Roche, J. Åkerman, B. Beschoten, J.-C. Charlier, M. Chshiev, S.P. Dash, B. Dlubak, J. Fabian, A. Fert, M. H. D. Guimarães, F. Guinea, I. Grigorieva, C. Schönemberger, and P. Seneor, *Graphene spintronics: the European Flagship perspective*, *2D Materials*, 2, 030202 (2015).