

ТРАНСПОРТ ЭЛЕКТРОНОВ И СПИНОВ В АДИАБАТИЧЕСКОМ КВАНТОВОМ НАСОСЕ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНОВЫХ НАНОЛЕНТ

Е. С. Гричук^{a,}, Э. А. Манькин^{a,b}*

^a *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
115409, Москва, Россия*

^b *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 1 апреля 2011 г.

Численно анализируется эффект адиабатического квантового насоса в двухбарьерных структурах на основе графеновых нанолент. Рассчитан заряд, проходящий через систему за один цикл изменения управляющих потенциалов (высот барьеров). Показано, что при определенных условиях этот заряд квантуется. Рассмотрена возможность генерирования не только электронных, но также спиновых и чисто спиновых токов. В устройствах на основе нанолент типа «зигзаг» спиновый ток возникает при учете их магнитной структуры и приложении поперечного электрического поля, нарушающего симметрию между спинами «вверх» и «вниз». В устройствах на основе нанолент типа «кресло», не обладающих магнитной структурой, такая симметрия нарушается при использовании ферромагнитного диэлектрика (нанесенного, например, на область между затворами) за счет эффекта близости.

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование экспериментально открытого в 2004 г. графена [1] представляет существенный интерес как с теоретической, так и с прикладной точек зрения. Огромный интерес к этому материалу определяется его необычными электронными свойствами, обусловленными, в частности, линейным спектром его низкоэнергетических электронных возбуждений. Это приводит к ряду особенностей [2–4], среди которых можно отметить идеальное прохождение нормально падающего электрона через потенциальный барьер произвольной формы (парадокс Клейна) [5], полувольный квантовый эффект Холла [6], наблюдающийся, вследствие большого расстояния между уровнями Ландау, даже при комнатной температуре, а также необычное «преломление» волнового пакета на границе потенциального барьера (эффект электронной линзы Веселаго) [7, 8]. Сам графен, являясь бесщелевым полупроводником, не очень подходит для создания на его основе полевых

транзисторов. Однако в узких полосках графена, называемых графеновыми нанолентами (graphene nanoribbon), квантово-размерные эффекты могут приводить к образованию конечной запрещенной зоны. Зонная структура и, в частности, величина запрещенной зоны нанолент существенным образом зависят от ориентации их границ относительно кристаллической решетки графена (выделяют два основных типа ориентации: нанолента типа «кресло», armchair graphene nanoribbon (AGNR) и нанолента типа «зигзаг», zigzag graphene nanoribbon (ZGNR)). Высокая подвижность носителей, возможность создания ненулевой запрещенной зоны и управления транспортом электронов внешним электрическим полем, а также ряд других свойств позволяют рассматривать графен в качестве перспективного материала для изготовления полевых транзисторов и других компонент наноэлектроники. Значительный интерес представляют также и более сложные углеродные наноструктуры на основе графена, графана и углеродных нанотрубок.

Состояния в графене можно описывать двухкомпонентной спинорной волновой функцией

*E-mail: evgeny.sg@gmail.com

$$\psi(\mathbf{r}) = (\psi_A(\mathbf{r}), \psi_B(\mathbf{r}))^T,$$

которая подчиняется уравнению Шредингера (имеющему в низкоэнергетическом приближении вид 2 + 1-мерного релятивистского уравнения Дирака)

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

с гамильтонианом

$$H = \hbar v_F \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где v_F — скорость Ферми (для графена $v_F = 10^8$ см/с), $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y)$ — вектор матриц Паули, $\mathbf{k} = -i\nabla$. Электрически нейтральному графену соответствует энергия Ферми $E_F = 0$, а поверхность Ферми в этом случае вырождается в две (неэквивалентные) дираковские точки.

Сшивая решения уравнения (1) по обе стороны от прямоугольного потенциального барьера, легко убедиться, что в случае нормального падения вследствие наличия подбарьерных (дырочных) состояний отраженной волны не возникает (парадокс Клейна) [5, 8]. Такое поведение можно также объяснить сохранением спиральности $h = \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}/k$. Утверждение остается справедливым для барьера произвольной формы, что ограничивает возможности создания квантовых точек в графене с помощью электростатических потенциальных барьеров. Рассматривая движение электрона с конечным поперечным импульсом (т. е. с отличным от нормального углом падения), можно показать, что даже один потенциальный барьер позволяет создать связанные состояния [9, 10]. Поведение электронов в графеновых двухбарьерных структурах в общем случае оказывается более сложным [8].

Значительный интерес к графену наблюдается и в другой активно развивающейся области — спинтронике [11, 12]. Слабость сверхтонкого взаимодействия (только около 1% атомов углерода являются изотопами ^{13}C с отличным от нуля ядерным спином), а также слабость спин-орбитального взаимодействия (вследствие легкости атома углерода), обуславливают возможные большие значения времен и длин спиновой релаксации в графене. Экспериментально наблюдались длины спиновой релаксации до нескольких микрометров при комнатной температуре [13, 14]. Ожидается, что графеновые устройства могут найти многочисленные применения в спинтронике [15–19]. Спин электрона, локализованного в квантовой точке, может играть и роль кубита [20, 21].

Основное число работ по электронному транспорту в графене посвящено изучению стационарных явлений. Существенный интерес представляет также изучение нестационарных явлений как в графене, так и в мезоскопических системах вообще. Одним из примеров таких явлений является эффект квантового насоса, который заключается в возникновении конечного среднего тока через систему при периодическом изменении ее внешних параметров (например, потенциалов на затворах) в отсутствие внешнего приложенного напряжения [22–27]. Если параметры меняются адиабатически (с частотой много меньшей обратного характерного времени прохождения электрона через устройство), то заряд, проходящий через систему за один цикл изменения параметров, в нулевом порядке по частоте может быть выражен через стационарную матрицу рассеяния системы [22, 23, 25].

Эффект адиабатического квантового насоса в графене был ранее рассмотрен в работах [28, 29]. Было показано, что свойства квантового насоса на основе графена существенно отличаются от таковых для обычных систем из-за отмеченных выше особенностей прохождения электронов через потенциальные барьеры в графене. Возможность генерирования спиновых токов во внешнем магнитном поле была рассмотрена в работе [30]. Вычисления в этих работах выполнялись в рамках дираковского приближения (1).

В настоящей работе мы продолжаем начатые ранее исследования [31] эффекта адиабатического квантового насоса в двухбарьерных структурах на основе графеновых нанолент типов AGNR и ZGNR. Ввиду возможных применений графена в спинтронике, рассматривается вопрос о возможности генерации не только электронных, но и спиновых токов.

2. МОДЕЛЬ

Рассматриваемое устройство на основе графеновой наноленты AGNR или ZGNR, схематически показанное на рис. 1а, представляет собой бесконечную наноленту с двумя потенциальными барьерами, U_1 и U_2 (создаваемыми, например, верхними затворами). Периодически изменяемые высоты барьеров служат управляющими параметрами квантового насоса (рис. 1б). Для моделирования устройства мы используем приближение сильной связи с учетом перескоков между ближайшими, вторыми ближайшими и третьими ближайшими соседями. Это простое приближение приводит к зонной структу-

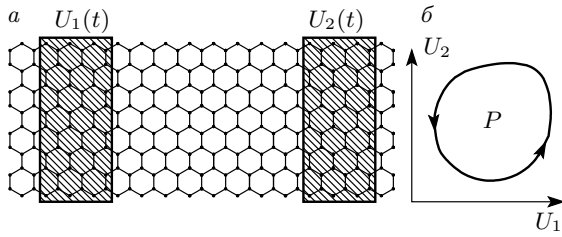


Рис. 1. а) Схематическое изображение устройства на основе наноленты 8-ZGNR. Управляющие потенциалы U_1 и U_2 занимают по N_1 элементарных ячеек. Расстояние между барьерами составляет N_0 элементарных ячеек. б) Перекачка заряда осуществляется периодическим изменением потенциалов U_1 и U_2 , так что точка $(U_1(t), U_2(t))$ описывает на плоскости U_1U_2 замкнутый контур P

ре, качественно согласующейся с расчетами по более сложным методам, например, по методам функционала плотности [32]. Потенциальные барьеры моделируются добавлением соответствующих энергий к диагональным матричным элементам гамильтониана. Гамильтониан имеет следующий вид [3, 4]:

$$H_C = - \sum_{ij} t_{ij} a_i^\dagger a_j + H_U, \quad (2)$$

$$H_U = \sum_i \sum_{k=1}^2 U_k \Delta_{kii} a_i^\dagger a_i, \quad (3)$$

где a_i^\dagger и a_i — операторы рождения и уничтожения электрона на узле i , суммирование проводится по ближайшим соседям с матричным элементом перескока $t_{ij} = t$, а также, в зависимости от выбираемой модели, по вторым ближайшим соседям с $t_{ij} = t_1$ и третьим ближайшим с $t_{ij} = t_2$. Типичные значения этих параметров для графена составляют $t = 2.7$ эВ, $t_1 \approx t_2 = 0.1t$. Диагональная матрица Δ_k задает профиль потенциального барьера U_k : $\Delta_{kii} = 1$, если узел i находится под барьером U_k , в противном случае этот матричный элемент равен нулю.

Для вычисления проходящего через систему заряда (используя матрицу рассеяния или коэффициенты эмиссии, см. ниже) мы используем стандартный метод функций Грина [33–36], согласно которому устройство разбивается на три части: левый контакт, центральную часть, включающую потенциальные барьеры U_1 и U_2 , и правый контакт. Соответственно, гамильтониан записывается в виде

$$H = H_L + V_L + V_L^\dagger + H_C + V_R + V_R^\dagger + H_R, \quad (4)$$

где H_L , H_C и H_R — гамильтонианы соответственно левого контакта, центральной части и правого

контакта, а слагаемое V_L (V_R) описывает перескоки между левым (правым) контактом и центральной областью. Вычислив (с помощью итерационных или точных методов) поверхностные функции Грина контактов, $g_L^r(E)$ и $g_R^r(E)$, с помощью уравнения Дайсона можно найти запаздывающую функцию Грина устройства,

$$G^r(E) = [E - H_C - \Sigma_L^r(E) - \Sigma_R^r(E)]^{-1}, \quad (5)$$

где собственно-энергетические функции $\Sigma_\alpha^r = V_\alpha g_\alpha^r V_\alpha^\dagger$ ($\alpha = L, R$) учитывают полубесконечные контакты.

Введем также функции уширения $\Gamma_\alpha = i(\Sigma_\alpha^r - \Sigma_\alpha^a)$, играющие роль операторов тока в полубесконечных контактах. Тогда полная спектральная функция, диагональные матричные элементы которой дают локальную плотность состояний, определяется выражением

$$A(E) = i(G^r - G^a) = G^r \Gamma G^a = G^a \Gamma G^r,$$

где $\Gamma = \Gamma_L + \Gamma_R$ — полная функция уширения, $G^a = G^{r\dagger}$.

Коэффициент прохождения $T(E)$ и кондактанс $G(E)$ системы выражается через функцию Грина стандартным образом,

$$T(E) = \text{Tr} [G^r \Gamma_L G^a \Gamma_R], \quad G(E) = G_0 T(E), \quad (6)$$

где $G_0 = (2)e^2/h$ — квант кондактанса, множитель 2 в котором появляется при учете двукратного вырождения по спину.

Следуя работам [37, 38], приведем краткий вывод выражения для заряда, проходящего через систему при периодическом изменении управляющих потенциалов $\{U_i(t)\}$. Полный заряд в области устройства при нулевой температуре дается интегралом от спектральной функции,

$$\tilde{Q} = e \int_{-\infty}^{E_F} \frac{dE}{2\pi} \text{Tr} A = ie \int_{-\infty}^{E_F} \frac{dE}{2\pi} \text{Tr} [G^r - G^a], \quad (7)$$

где e — заряд электрона, а E_F — уровень Ферми в контактах.

Пусть управляющие потенциалы периодически меняются во времени по гармоническому закону с частотой ω , постоянным сдвигом фаз ϕ и амплитудой U_0 :

$$U_1(t) = U_{10} + U_0 \cos(\omega t), \quad U_2(t) = U_{20} + U_0 \cos(\omega t - \phi).$$

При бесконечно малой вариации потенциалов $\{\delta U_i(t)\}$ из устройства вытекает заряд δQ , равный

$$\delta Q(t) = - \sum_i \frac{\partial \tilde{Q}}{\partial U_i} \delta U_i(t). \quad (8)$$

Используя уравнения Дайсона

$$\frac{\partial G^r}{\partial U_i} = G^r \Delta_i G^r, \quad \frac{\partial G^r}{\partial E} = -G^r \left(I - \frac{\partial \Sigma^r}{\partial E} \right) G^r$$

(I — единичная матрица) и интегрируя по частям, получаем

$$\begin{aligned} \delta Q(t) &= -ie \sum_i \int_{-\infty}^{E_F} \frac{dE}{2\pi} \times \\ &\times \text{Tr} [G^r \Delta_i G^r - G^a \Delta_i G^a] \delta U_i(t) = \\ &= \frac{e}{2\pi} \sum_i \text{Tr} (G^r \Gamma G^a \Delta_i) \Big|_{E_F} \delta U_i(t) - \\ &- e \sum_i \int_{-\infty}^{E_F} \frac{dE}{2\pi} \text{Tr} \left[G^r \left(\frac{\partial \Sigma^r}{\partial E} G^r \Gamma + \frac{\partial \Gamma}{\partial E} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \Gamma G^a \frac{\partial \Sigma^a}{\partial E} \right) G^a \Delta_i \right] \delta U_i(t). \quad (9) \end{aligned}$$

Анализ показывает, что вклад второго слагаемого незначителен по сравнению с первым вдали от краев подзон размерного квантования [39, 40] (в частности этот вклад отсутствует в приближении широкой зоны (wide-band limit), когда $\partial \Sigma^{r,a} / \partial E = 0$). Пренебрегая этим слагаемым, получаем следующее выражение для заряда, вытекающего из устройства в контакты:

$$\begin{aligned} \delta Q(t) &= \frac{e}{2\pi} \sum_i \text{Tr} (G^r \Gamma G^a \Delta_i) \delta U_i(t) = \\ &= \frac{e}{2\pi} \sum_{i,\alpha} \text{Tr} (G^r \Gamma_\alpha G^a \Delta_i) \delta U_i(t) = \\ &= -e \sum_i \frac{dN_\alpha}{dU_i} \delta U_i(t), \quad (10) \end{aligned}$$

где dN_α / dU_i — коэффициенты эмиссии (emissivity),

$$\frac{dN_\alpha}{dU_i} = -\frac{1}{2\pi} \text{Tr} (G^r \Gamma_\alpha G^a \Delta_i) = -\frac{1}{2\pi} \text{Tr} (A_\alpha \Delta_i), \quad (11)$$

$A_\alpha = G^r \Gamma_\alpha G^a$ — частная спектральная функция.

Используя соотношения Фишера–Ли [41], связывающие матрицу рассеяния S_{ik} системы с функцией Грина G^r , можно получить выражение для коэффициентов эмиссии через матрицу рассеяния:

$$\begin{aligned} \frac{dN_\alpha}{dU} &= \frac{1}{2\pi} \sum_k \sum_{i \in \alpha} \text{Im} \frac{\partial S_{ik}}{\partial U} S_{ik}^* = \\ &= \frac{1}{2\pi} \text{Im} \text{Tr} \left(\frac{\partial S}{\partial U} S^\dagger \right)_{\alpha\alpha}, \quad (12) \end{aligned}$$

где след берется по открытым каналам в контакте α .

Из устройства в контакт α втекает заряд

$$\delta Q_\alpha(t) = -e \sum_i \frac{dN_\alpha}{dU_i} \delta U_i(t).$$

Тогда полный заряд Q_α , втекающий из устройства в контакт α за один период изменения управляющих параметров, есть

$$\begin{aligned} Q_\alpha &= \int \delta Q_\alpha(t) = \\ &= -e \int_0^T dt \left(\frac{dN_\alpha}{dU_1} \frac{dU_1}{dt} + \frac{dN_\alpha}{dU_2} \frac{dU_2}{dt} \right) \quad (13) \end{aligned}$$

(рассматривается интересующий нас ниже случай двух барьеров). Это выражение, записанное через матрицу рассеяния, обычно называют формулой Броуэра [22]:

$$Q_\alpha = -\frac{e}{2\pi i} \oint \text{Tr} (dS S^\dagger)_{\alpha\alpha}. \quad (14)$$

Если в контактах открыт только один канал (в этом случае матрица S имеет размер 2×2), то в силу сохранения заряда ($Q_L + Q_R = 0$) получим

$$Q_R = \frac{Q_R}{2} - \frac{Q_L}{2} = \frac{e}{4\pi i} \oint \text{Tr} (\sigma^z dS S^\dagger). \quad (15)$$

С помощью теоремы Стокса выражение для заряда можно представить также в виде поверхностного интеграла [22]:

$$\begin{aligned} Q_\alpha &= -\frac{e}{\pi} \int_P dU_1 dU_2 \Pi_\alpha(U_1, U_2), \\ \Pi_\alpha(U_1, U_2) &= \sum_k \sum_{i \in \alpha} \text{Im} \frac{\partial S_{ik}^*}{\partial U_1} \frac{\partial S_{ik}}{\partial U_2}. \quad (16) \end{aligned}$$

В приведенных ниже численных результатах рассматривается заряд, втекающий в правый ($\alpha = R$) контакт, $Q \equiv Q_R$, $\Pi \equiv \Pi_R$.

3. НАНОЛЕНТЫ «КРЕСЛО»

Наноленты N -AGNR (N — число димеров C–C, укладываемых на ширине ленты) можно условно разделить на три семейства в зависимости от значения N по модулю 3 (остатка от деления N на 3). В простом приближении ближайших соседей с $t_1 = t_2 = 0$ наноленты N -AGNR при $N = 3n - 1$ с целым n обладают металлическими свойствами, поскольку не имеют запрещенной зоны, тогда как все

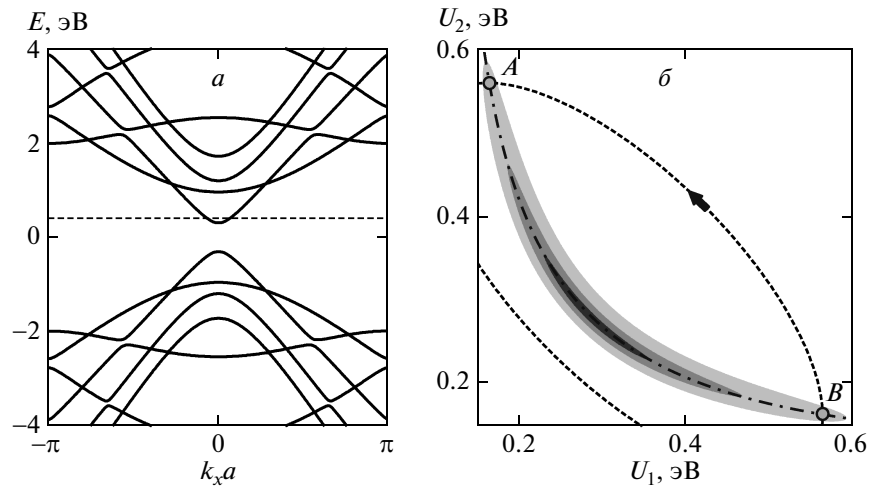


Рис. 2. а) Зонная структура наноленты 9-AGNR ($t_1 = 0, t_2 = 0.1t$); б) Зависимость $\Pi(U_1, U_2)$ при фиксированной энергии Ферми $E_F = 0.4$ эВ. Резонансная кривая обозначена штрихпунктирной линией, контур управляющих потенциалов — штриховой. Линии пересекаются в резонансных точках A и B . Градациями серого показана функция Π .
 Параметры: $N_0 = 25, N_1 = 12, U_{10} = U_{20} = 0.34$ эВ, $U_0 = 0.25$ эВ, $\phi = 3\pi/4$

остальные ленты имеют ненулевую запрещенную зону и являются полупроводниками. Учет $t_2 \neq 0$ приводит к образованию конечной запрещенной зоны в лентах $(3n - 1)$ -AGNR, однако ее ширина оказывается на порядок меньше, чем в полупроводниковых нанолентах с близким значением N (учет $t_1 \neq 0$ в области низких энергий приводит к простому сдвигу зон) [42, 43]. Таким образом, все наноленты AGNR являются полупроводниками с конечной запрещенной зоной, ширина которой обратно пропорциональна ширине ленты с коэффициентом пропорциональности, зависящим от семейства. Зонная структура наноленты 9-AGNR показана на рис. 2а.

Поскольку подбарьерные состояния отсутствуют (при ограниченных значениях энергий), в противоположность бесконечному графену, двойной потенциальный барьер в нанолентах AGNR позволяет реализовать простейший вариант квантовой точки. На рис. 3а показана зависимость коэффициента прохождения $T(E)$ от энергии падающего электрона. Видно, что в устройстве реализуется хорошо известный эффект резонансного туннелирования: электрон с энергией E проходит через устройство без отражения ($T = 1$) всякий раз, когда E совпадает с энергией квазисвязанного состояния в центральной области устройства.

Ранее было показано [44, 45], что в эффекте адиабатического квантового насоса в квантовых точках в режиме резонансного туннелирования заряд, прошедший через систему за один период изменения

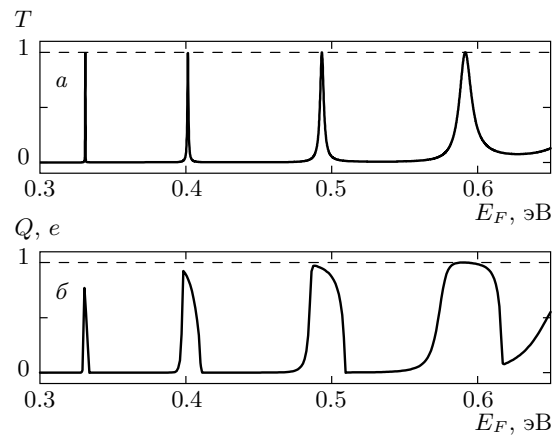


Рис. 3. а) Зависимость коэффициента прохождения T от энергии падающего электрона для двойного барьера высотой $U_1 = U_2 = 0.28$ эВ. б) Зависимость прошедшего заряда Q от энергии Ферми E_F .
 Параметры те же, что в случае рис. 2

управляющих параметров, квантуется (вообще говоря, приближенно). Это квантование может быть объяснено простой моделью «турникета» [45]. Было предложено также и наглядное геометрическое условие квантования [46]. Пусть в контактах имеется только один открытый канал. Единичный вектор $\mathbf{n}(t)$, определяемый из условия $S^\dagger \sigma^z S = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ ($\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ — вектор матриц Паули), описывает на единичной сфере некоторую замкнутую кри-

вую. Достаточным условием квантования заряда является малость площади (по модулю 4π), ограничиваемой этой кривой.

Рассмотрим эффект квантового насоса в устройстве на основе 9-AGNR. На рис. 2б показана зависимость $\Pi(U_1, U_2)$ при фиксированной энергии Ферми в контактах $E_F = 0.4$ эВ. Как видно из рисунка, на плоскости (U_1, U_2) функция $\Pi(U_1, U_2)$ имеет резонансный пик, достигая максимума (по модулю) на резонансной линии, на которой энергия Ферми E_F равна энергии квазисвязанного состояния в центральной области. Аналогичным образом выглядит зависимость коэффициента прохождения (не показано). Вдоль резонансной линии коэффициент прохождения достигает единицы, когда $U_1 = U_2$. Если контур управляющих потенциалов охватывает большую часть этого пика, прошедший через систему заряд квантуется.

Квантование заряда можно объяснить следующим образом (модель «турникета»). Рассмотрим контур AB управляющих потенциалов на рис. 2б. Когда этот контур пересекает точку A , квазисвязанное состояние опускается ниже уровня Ферми в контактах и электрон туннелирует из контактов в центральную область. Вероятность туннелирования через левый барьер намного больше, чем через правый, поскольку высота левого барьера значительно меньше высоты правого. В точке B ситуация оказывается противоположной: квазисвязанное состояние поднимается выше уровня Ферми и опустошается в правый контакт, поскольку теперь правый барьер ниже, чем левый. Таким образом, за один цикл изменения потенциалов через систему слева направо проходит один электрон (два электрона при учете двукратного вырождения по спину), что при частоте $\omega = 2\pi \cdot 1$ ГГц соответствует току $I = e\omega/2\pi = 0.16$ нА.

На рис. 3б показана зависимость прошедшего заряда Q от энергии Ферми E_F в контактах для фиксированного контура потенциалов. При изменении E_F резонансная кривая на плоскости (U_1, U_2) появляется всякий раз, когда E_F равна энергии квазисвязанного состояния. В соответствии с этим на зависимости $Q(E_F)$ наблюдаются пики, отвечающие пикам резонансного туннелирования (см. рис. 3а). Отметим, что квантование не является точным; его точность определяется тем, какая часть резонансной кривой $\Pi(U_1, U_2)$ охватывается контуром потенциалов.

Расстояние между пиками соответствует расстоянию между квазисвязанными уровнями. Если в рассматриваемом диапазоне энергий спектр прибли-

женно считать линейным, $E(k) = 3(t - 2t_2)ak/2$ (a — расстояние между ближайшими атомами углерода) [42], то для частицы в бесконечной потенциальной яме ширины $L = 3aN_0$ расстояние между уровнями равно

$$\Delta E_0 = 3\pi(t - 2t_2) \frac{a}{2L} = \frac{\pi(t - 2t_2)}{2N_0} = 0.135 \text{ эВ.}$$

Конечность высоты потенциальных барьеров приводит к уменьшению этого значения до $\Delta E \approx 0.09$ эВ.

4. НАНОЛЕНТЫ «ЗИГЗАГ»

Важной особенностью нанолент ZGNR является наличие в зонной структуре краевых состояний, локализованных на границе ленты и отсутствующих у бесконечного графена [47]. При $t_1 = t_2 = 0$ краевым состояниям соответствуют практически бездисперсионные решения вблизи $E = 0$. Эти состояния локализованы (с одинаковыми весами) на противоположных границах ленты на разных подрешетках (кристаллическая решетка графена может рассматриваться как две вложенные гексагональные решетки Браве, обозначаемые обычно А и В), например, на подрешетке А на верхней границе и на подрешетке В на нижней. Конечная дисперсия обусловлена конечной шириной ленты. В пределе бесконечно широкой ленты дисперсия исчезает. При этом краевые состояния обладают нулевой энергией и занимают одну треть зоны Бриллюэна. Учет $t_1 \neq 0$ приводит к возникновению конечной дисперсии и в этом случае [48]. Зонная структура наноленты 10-ZGNR показана на рис. 4а.

Другой важной особенностью нанолент ZGNR является эффект четности, проявляющийся в существенно различном характере прохождения электрона через p - n -переход в наноленте N -ZGNR (N — число зигзагообразных линий атомов С, укладываемых на ширине ленты) с четным и нечетным N [49, 50]. Если значение N четно, то лента симметрична относительно центра и моды классифицируются по четности. Если с одной стороны перехода есть только четные моды, а с другой — только нечетные, то коэффициент прохождения обращается в нуль. Если барьер имеет конечную ширину, то коэффициент прохождения экспоненциально мал, в соответствии с тем, что электрон туннелирует через классически запрещенную область. Таким образом, двойной барьер в нанолентах N -ZGNR с четным N также позволяет создать простейший вариант квантовой точки. В случае нечетных N симметрии относительно центра ленты нет и подобный

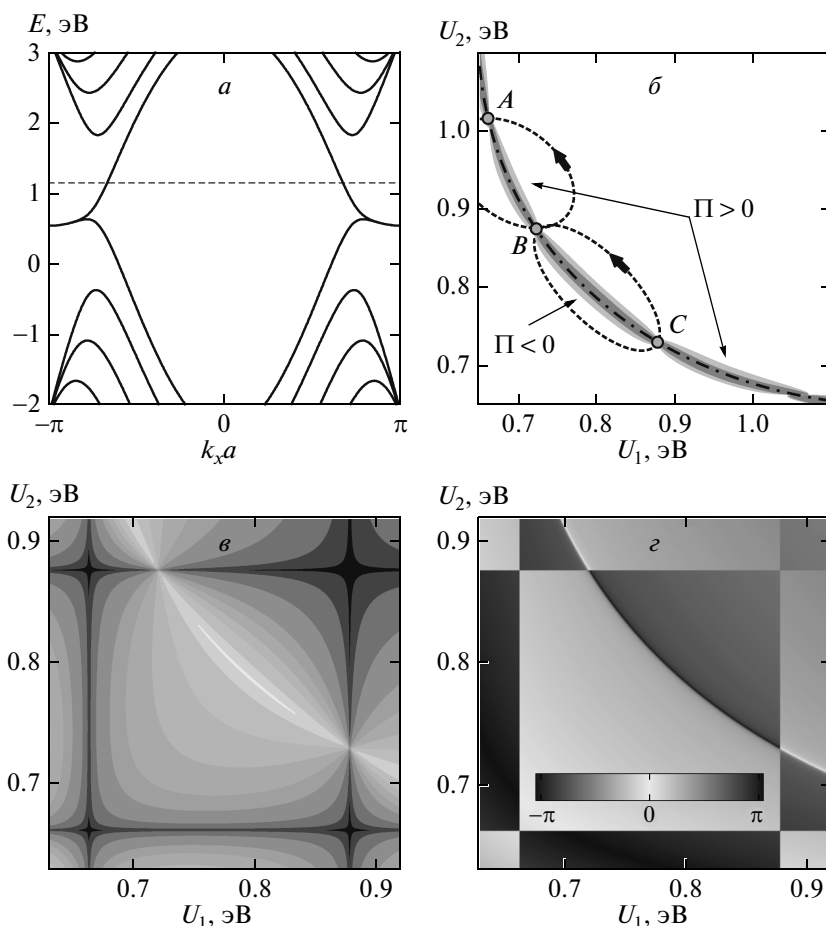


Рис. 4. а) Зонная структура наноленты 10-ZGNR ($t_1 = 0.1t, t_2 = 0$). б) Зависимость $\Pi(U_1, U_2)$ при фиксированной энергии Ферми $E_F = 1.15$ эВ. Резонансная кривая обозначена штрихпунктирной линией, контуры управляющих потенциалов — штриховыми. Линии пересекаются в резонансных точках A, B и C (параметры контура AB : $U_{10} = 0.7$ эВ, $U_{20} = 0.96$ эВ, $U_0 = 0.09$ эВ, $\phi = 5\pi/8$; контура BC : $U_{10} = U_{20} = 0.34$ эВ, $U_0 = 0.25$ эВ, $\phi = 3\pi/4$). в) Зависимость коэффициента прохождения $T(U_1, U_2)$ при той же энергии Ферми (градиациями серого показан $\ln T$). г) Зависимость фазы амплитуды прохождения $\text{Arg } S_{12}(U_1, U_2)$ при той же энергии Ферми. Параметры: $N_0 = 25, N_1 = 7$

эффект отсутствует. Кроме этого, наличие квазисвязанных состояний под барьером приводит к возможности резонансного отражения электрона при определенных значениях энергии (т.е. прозрачность барьера при фиксированной энергии налетающего электрона уже не является монотонной функцией его высоты, как это имело место в случае нанолент AGNR) [51, 52]. Подобное поведение является типичным для квазиодномерных систем, например, для Т-образных квазиодномерных проволок (см. работу [53] и ссылки в ней).

Рассмотрим эффект квантового насоса в устройстве на основе 10-ZGNR. На рис. 4в показана зависимость коэффициента прохождения $T(U_1, U_2)$ от

высот потенциальных барьеров при фиксированной энергии Ферми E_F . Кроме резонансного прохождения наблюдается и отмеченный выше эффект резонансного отражения. Обращение коэффициента прохождения в нуль сопровождается скачком фазы амплитуды прохождения $t(E) = S_{12}(E)$ на π , что видно на рис. 4г. Зависимость $\Pi(U_1, U_2)$ показана на рис. 4б. Вдоль резонансной линии функция $\Pi(U_1, U_2)$ имеет серию пиков, знаки которых чередуются. Контуры управляющих потенциалов, охватывающие пики разных знаков, соответствуют прохождению заряда через систему в противоположных направлениях.

Подобное поведение также можно объяснить с

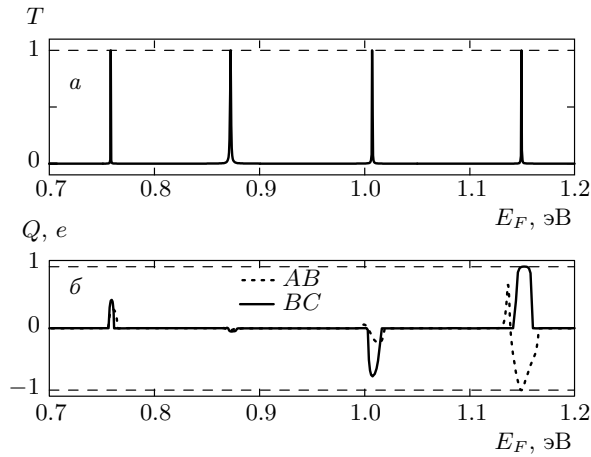


Рис. 5. а) Зависимость коэффициента прохождения T от энергии падающего электрона для двойного барьера высотой $U_1 = U_2 = 0.79$ эВ. б) Зависимость прошедшего заряда Q от энергии Ферми E_F . Параметры такие же, как на рис. 4

помощью модели «турникета», принимая во внимание существование резонансов отражения. Рассмотрим на рис. 4б контур BC , охватывающий отрицательный пик. Когда этот контур пересекает точку B , как и в предыдущем случае, электрон туннелирует из левого контакта в центральную область. На правом барьере выполняется условие резонансного отражения. В точке C ситуация противоположная. Таким образом, за один цикл изменения потенциалов через систему слева направо проходит один электрон.

Контур AB на рис. 4б охватывает положительный пик. В точке A высота левого барьера меньше высоты правого. Однако при пересечении точки A электрон туннелирует из правого контакта, поскольку на левом барьере выполнено условие резонансного отражения. В точке B электрон уходит в левый контакт и, таким образом, электрон проходит через систему в противоположном направлении — справа налево.

На рис. 5б показаны зависимости прошедшего заряда Q от энергии Ферми E_F для контуров AB и BC . В соответствии со сказанным выше при $E_F = 1.15$ эВ $Q = +e$ для контура BC и $Q = -e$ для контура AB . Так же как и в предыдущем случае, пикам на зависимости $Q(E_F)$ соответствуют пики резонансного туннелирования $T(E_F)$, как видно на рис. 5а.

5. ГЕНЕРАЦИЯ СПИНОВЫХ ТОКОВ

Хотя сам графен не обладает магнитным порядком, некоторые его производные (квантовые точки, наноленты, наноструктуры и т.п.) проявляют магнетизм. Поэтому представляет интерес анализ возможности генерирования спиновых токов в таких устройствах. Более детальный анализ нанолент ZGNR, например с помощью метода функционала плотности с учетом спина или модели Хаббарда, показывает, что в такой системе (при слабом допировании) возникает коллинеарная антиферромагнитная структура: спины электронов, локализованных на разных границах ленты, направлены противоположно друг другу.

Для качественного описания антиферромагнитной структуры можно использовать простое приближение среднего поля [12, 47], в котором в гамильтониане (2) появляется дополнительное слагаемое, так что полный гамильтониан имеет вид

$$H = - \sum_{ij,s} t_{ij} a_{is}^\dagger a_{js} + \sum_{i,ss'} \frac{m_i}{2} a_{is}^\dagger \sigma_{ss}^z a_{is'} + HU, \quad (17)$$

где в первом слагаемом суммирование проводится по первым и вторым ближайшим соседям, а m_i — локальная намагниченность на узле i .

Гамильтониан (17) вместе с уравнением для определения локальной намагниченности m_i составляют самосогласованную задачу. Однако существенно более простая феноменологическая модель, в которой величина m_i считается постоянной на каждой из подрешеток, дает качественно правильное описание [54]. В соответствии с этой моделью, $m_i = m_0$ для узлов i в одной подрешетке и $m_i = -m_0$ — в другой. Параметры m_0 и t_{ij} определяются исходя из наилучшего согласия между зонной структурой в феноменологической модели и, например, расчетами по методу функционала плотности [54]. Зонная структура наноленты 10-ZGNR с учетом намагниченности показана на рис. 6а.

Поскольку состояния с противоположными спинами локализованы на противоположных границах ленты [12, 47, 55], приложение поперечного электрического поля в центральной области позволяет нарушить симметрию между ними, благодаря чему генерируются спиновый и чисто спиновый токи [56]. Поперечное электрическое поле можно учесть с помощью дополнительного слагаемого в выражении (17):

$$H_E = \sum_{i,s} E_T \left(y_i - \frac{W}{2} \right) a_{is}^\dagger a_{is}, \quad (18)$$

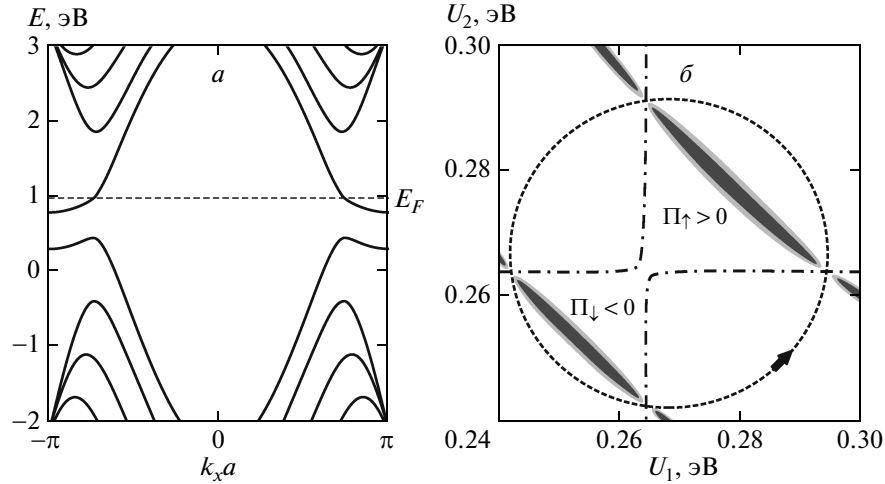


Рис. 6. а) Зонная структура наноленты 10-ZGNR с учетом намагниченности ($t_1 = 0.1t$, $t_2 = 0$, $m_0 = 0.18t$). б) Зависимости $\Pi_{\uparrow\downarrow}(U_1, U_2)$ при фиксированной энергии Ферми $E_F = 0.974$ эВ и поперечном электрическом поле $E_T = 10$ мВ/нм. Контур управляющих потенциалов показан штриховой линией ($U_{10} = 0.268$ эВ, $U_{20} = 0.267$ эВ, $U_0 = 0.025$ эВ, $\phi = \pi/2$). Коэффициент прохождения обращается в нуль вдоль штрихпунктирных линий (резонансное отражение). Параметры: $N_0 = 15$, $N_1 = 9$, $N_2 = 5$

где E_T — напряженность приложенного поля, y_i — поперечная координата узла i , а W — ширина ленты. Суммирование проводится по узлам в области, к которой приложено электрическое поле (ширина области — N_0 , расстояние до потенциальных барьеров — N_2 элементарных ячеек).

С учетом того, что направление спина электрона при прохождении его через устройство сохраняется, оба направления спина можно рассматривать независимо. Если также предположить, что слабое допирование, обусловленное потенциальными барьерами U_1 и U_2 не разрушает антиферромагнитного состояния [57] (возможное уменьшение значения m_0 качественно не меняет результатов), можно вычислить электронный и спиновый токи через устройство. Зная число электронов, прошедших через систему, определим полный прошедший заряд Q_C и спин Q_S (для удобства используем одинаковые единицы для обеих величин):

$$Q_C = Q_{\uparrow} + Q_{\downarrow}, \quad Q_S = Q_{\uparrow} - Q_{\downarrow}. \quad (19)$$

На рис. 6б показаны зависимости $\Pi_{\uparrow,\downarrow}(U_1, U_2)$ при фиксированной энергии Ферми E_F для противоположных направлений спина. Пики имеют противоположные знаки, поэтому за один цикл изменения потенциалов через систему проходит нулевой суммарный заряд, но отличный от нуля спин. Механизм квантования тот же, что описанный выше, при этом пики Π_{\uparrow} и Π_{\downarrow} качественно отвечают пикам в кон-

турах соответственно AB и BC . Зависимости электронных и спиновых токов от энергии Ферми E_F показаны на рис. 7. При энергии Ферми $E_F = 0.974$ эВ и выбранных параметрах контура управляющих потенциалов оба пика охватываются этим контуром, что дает конечный спиновый ток $Q_S = -2e$ при обращаемом в нуль электронном токе, $Q_C = 0$.

Анализ в рамках модели Хаббарда и метода функционала плотности показывает, что наноленты AGNR, в отличие от ZGNR, не обладают магнитным порядком. Получить спин-поляризованный ток в нанолентах AGNR можно, например, с помощью использования эффекта близости [18, 58], который заключается в возникновении обменного расщепления за счет взаимодействия с нанесенным на участок ленты слоем ферромагнитного диэлектрика. Роль такого диэлектрика может играть, например, EuO, для которого теоретические оценки дают величину обменного расщепления порядка 5–10 мэВ [58].

Если диэлектрик нанесен на участок ленты между затворами U_1 и U_2 , то в этой области гамильтониан (2) приобретает дополнительное слагаемое

$$H_e = \sum_{i,ss'} h a_{is}^{\dagger} \sigma_{ss'}^z a_{is'}, \quad (20)$$

где h — величина обменного расщепления.

Генерация спинового тока оказывается возможной благодаря взаимодействию (20), которое приводит к сдвигу резонансной кривой. Если параметры

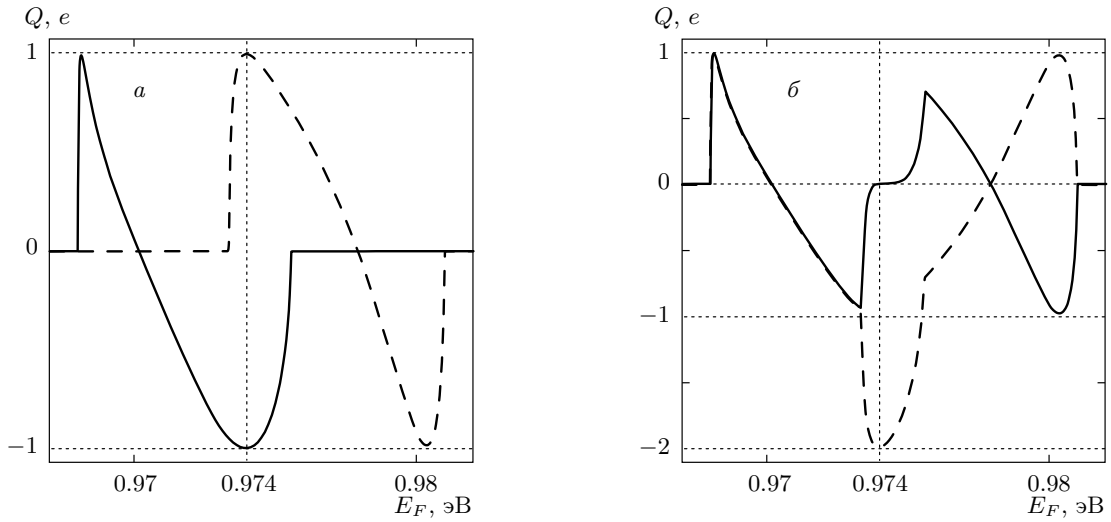


Рис. 7. а) Зависимости прошедших зарядов Q_{\uparrow} (сплошная линия) и Q_{\downarrow} (штриховая линия) от энергии Ферми E_F . б) Зависимости полного прошедшего заряда Q_C (сплошная линия) и спина Q_S (штриховая линия) от энергии Ферми E_F

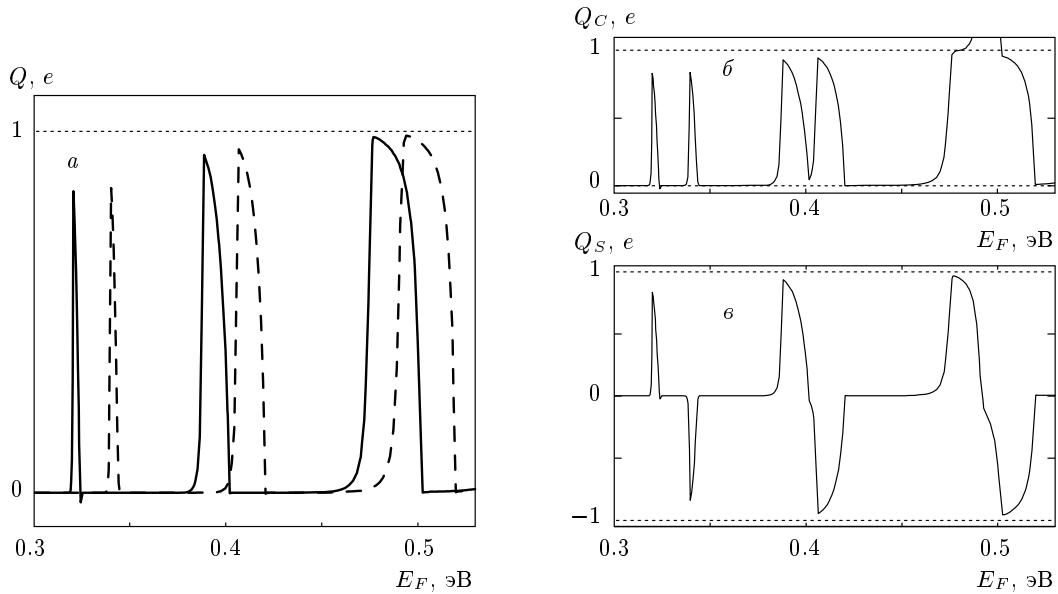


Рис. 8. а) Зависимости прошедших зарядов Q_{\uparrow} (сплошная линия) и Q_{\downarrow} (штриховая линия) от энергии Ферми E_F . б и в) Зависимости полного прошедшего заряда Q_C и спина Q_S от энергии Ферми E_F . Параметры: $h = 10$ мэВ (см. рис. 2)

контура управляющих потенциалов U_{10} , U_{20} , U_0 и ϕ выбраны так, что, например, резонансный пик Π_{\uparrow} охватывается контуром, а пик Π_{\downarrow} не охватывается, то через систему будут проходить только электроны со спином «вверх»: $Q_{\uparrow} = e$, $Q_{\downarrow} = 0$. На рис. 8 показаны зависимости генерируемых токов от энергии Ферми. В сравнении со случаем, когда ферромаг-

нитный диэлектрик отсутствует (см. рис. 3), пики кривых $Q_{\uparrow, \downarrow}(E_F)$ сдвинуты на $\Delta E \approx \pm h = \pm 10$ мэВ при расстоянии между пиками $\Delta E_F \approx 2h = 20$ мэВ. Поэтому на кривых $Q_C(E_F)$ и $Q_S(E_F)$ наблюдаются пары пиков, каждому из которых соответствует прохождение через систему электрона с соответствующим направлением спина. В противоположность

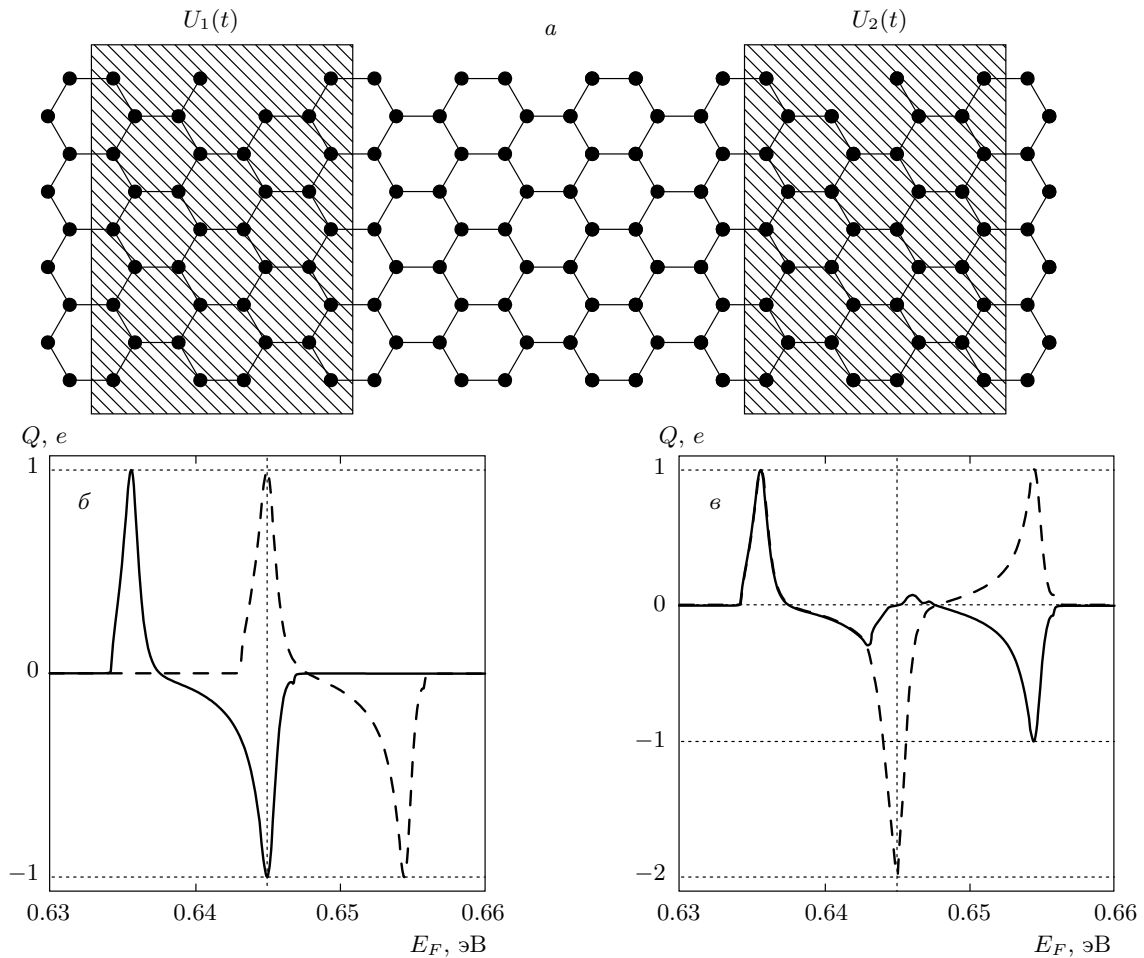


Рис. 9. *а)* Схематическое изображение устройства на основе наноленты 9-AGNR с дефектами под барьерами. *б)* Зависимости прошедших зарядов Q_{\uparrow} (сплошная кривая) и Q_{\downarrow} (штриховая) от энергии Ферми E_F . *в)* Зависимости полного прошедшего заряда Q_C (сплошная кривая) и спина Q_S (штриховая) от энергии Ферми E_F . Параметры: $N_0 = 25$, $N_1 = 5$, $U_{10} = U_{20} = 0.645$ эВ, $U_0 = 0.084$ эВ, $\phi = \pi/2$, $h = 5$ мэВ

случаю нанолент ZGNR генерация чисто спинового тока в данном случае оказывается невозможной вследствие того, что в рассматриваемом диапазоне энергий Ферми всегда $Q_{\uparrow, \downarrow} \geq 0$, т. е. заряд проходит лишь в одном направлении.

Как было сказано выше, ситуация меняется при наличии в области барьера квазисвязанных состояний, приводящих к возникновению резонансов отражения. Анализ показывает, что дефекты в графеновых нанолентах могут существенным образом влиять на коэффициент прохождения, а возникающие при этом квазисвязанные состояния могут приводить к возникновению резонансов отражения также и в нанолентах типа AGNR [59]. Для демонстрации этого эффекта рассмотрим устройство на основе наноленты AGNR с дефектом под барьерами (рис. 9*а*)

на расстоянии N_1 элементарных ячеек от границ барьера. Поведение устройства оказывается качественно аналогичным устройству на основе наноленты ZGNR. Зависимости генерируемых электронных и спиновых токов показаны на рис. 9*б, в* и качественно соответствуют таковым на рис. 7.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе в продолжение ранее начатых исследований [31] рассмотрен эффект адиабатического квантового насоса в двухбарьерных графеновых структурах на основе нанолент типов AGNR и ZGNR, различающихся ориентацией их границы относительно кристаллической решетки. Расчеты

выполнены с использованием приближения сильной связи и метода функций Грина. Численный анализ показывает, что при энергиях, близких к энергиям квазисвязанных состояний в центральной области устройства, наблюдается резонансное туннелирование, а также (приближенное) квантование прошедшего через систему заряда.

Такое поведение объясняется с помощью модели «турникета» [45]. Контур периодически изменяющихся управляющих параметров (высот потенциальных барьеров) пересекает резонансную кривую в двух точках. В этих точках энергия E_0 квазисвязанного уровня сравнивается с фиксированным уровнем Ферми E_F в контактах, так что электрон туннелирует либо в центральную область устройства, если уровень E_0 опускается ниже E_F , либо, в противоположном случае, в один из контактов — в левый или правый — в зависимости от соотношения прозрачностей левого и правого барьеров. В случае монотонной зависимости прозрачности барьеров от их высоты направление переноса заряда фиксировано и определяется направлением контура управляющих потенциалов. Наличие квазисвязанных состояний в области барьера, приводящих к резонансному отражению, позволяет генерировать токи в обоих направлениях. Это обстоятельство существенно при рассмотрении генерации спиновых токов, поскольку подбором параметров устройства можно добиться обращения полного электронного тока в нуль при конечном спиновом токе.

Следует отметить, что проведенный численный анализ не является самосогласованным: формы всех потенциальных барьеров фиксировались изначально, а не находились в результате решения самосогласованной задачи (уравнений Шредингера–Пуассона). Однако точная форма потенциальных барьеров, как ожидается, не влияет качественно на результаты. В частности, как показал численный анализ, проведенный в работе [31], использование сглаженных (но не самосогласованных) потенциальных барьеров $U_1(t)$ и $U_2(t)$ приводит качественно к тем же результатам. Тем не менее анализ самосогласованной задачи, включающей, в частности, зарядовые эффекты, представляет существенный интерес и составляет предмет дальнейших исследований.

Отметим также, что рассмотренные устройства требуют возможности изготовления графеновых наноструктур с атомной точностью, что, очевидно, является весьма нетривиальной задачей. Однако быстрый прогресс в этой области [60, 61] позволяет надеяться на возможность экспериментальной реализации подобных устройств в ближайшем будущем.

Авторы благодарны Министерству образования и науки (госконтракт № 02.740.11.0433) и РФФИ (грант № 10-02-00399) за финансовую поддержку.

ЛИТЕРАТУРА

1. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., *Science* **306**, 666 (2004).
2. T. Ando, *Physica E* **40**, 213 (2007).
3. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres et al., *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
4. N. M. R. Peres, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2673 (2010).
5. M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Nature Phys.* **2**, 620 (2006).
6. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., *Nature* **438**, 197 (2005).
7. V. V. Cheianov, V. Fal'ko, and B. L. Altshuler, *Science* **315**, 1252 (2007).
8. J. M. Pereira Jr., F. M. Peeters, A. Chaves et al., *Semicond. Sci. Technol.* **25**, 033002 (2010).
9. J. M. Pereira Jr., V. Mlinar, F. M. Peeters et al., *Phys. Rev. B* **74**, 045424 (2006).
10. P. G. Silvestrov and K. B. Efetov, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 016802 (2007).
11. I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
12. O. V. Yazyev, *Rep. Progr. Phys.* **73**, 056501 (2010).
13. N. Tombros, C. Józsa, M. Popinciuc et al., *Nature* **448**, 571 (2007).
14. M. Popinciuc, C. Józsa, P. J. Zomer et al., *Phys. Rev. B* **80**, 214427 (2009).
15. W. H. Wang, K. Pi, Y. Li et al., *Phys. Rev. B* **77**, 020402 (2008).
16. W. Y. Kim and K. S. Kim, *Nature Nanotechnol.* **3**, 408 (2008).
17. F. Muñoz-Rojas, J. Fernández-Rossier, and J. J. Palacios, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 136810 (2009).
18. V. Hung Nguyen, V. Nam Do, A. Bournel et al., *J. Appl. Phys.* **106**, 053710 (2009).
19. A. Saffarzadeh and R. Farghadan, *Appl. Phys. Lett.* **98**, 023106 (2011).
20. B. Trauzettel, D. V. Bulaev, D. Loss et al., *Nature Phys.* **3**, 192 (2007).

21. P. Recher and B. Trauzettel, *Nanotechnology* **21**, 302001 (2010).
22. P. W. Brouwer, *Phys. Rev. B* **58**, R10135 (1998).
23. M. Moskalets and M. Büttiker, *Phys. Rev. B* **66**, 205320 (2002).
24. M. Moskalets and M. Büttiker, *Phys. Rev. B* **68**, 161311 (2003).
25. L. Arrachea and M. Moskalets, *Phys. Rev. B* **74**, 245322 (2006).
26. Л. С. Брагинский, М. М. Махмудиан, М. В. Энтин, *ЖЭТФ* **127**, 1046 (2005).
27. М. М. Махмудиан, М. В. Энтин, Л. С. Брагинский, *ЖЭТФ* **132**, 561 (2007).
28. E. Prada, P. San-Jose, and H. Schomerus, *Phys. Rev. B* **80**, 245414 (2009).
29. R. Zhu and H. Chen, *Appl. Phys. Lett.* **95**, 122111 (2009).
30. R. P. Tiwari and M. Blaauboer, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 243112 (2010).
31. E. Grichuk and E. Manykin, *Europhys. Lett.* **92**, 47010 (2010).
32. A. Cresti, N. Nemes, B. Biel et al., *Nano Res.* **1**, 361 (2008).
33. A.-P. Jauho, N. S. Wingreen, and Y. Meir, *Phys. Rev. B* **50**, 5528 (1994).
34. S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1997).
35. С. Датта, *Квантовый транспорт: от атома к транзистору*, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Ижевск (2009).
36. F. Muñoz-Rojas, D. Jacob, J. Fernández-Rossier et al., *Phys. Rev. B* **74**, 195417 (2006).
37. Y. Wei and J. Wang, *Phys. Rev. B* **66**, 195419 (2002).
38. J. Wu, B. Wang, and J. Wang, *Phys. Rev. B* **66**, 205327 (2002).
39. J. Wang, Q. Zheng, and H. Guo, *Phys. Rev. B* **55**, 9770 (1997).
40. Q. Zheng, J. Wang, and H. Guo, *Phys. Rev. B* **56**, 12462 (1997).
41. D. S. Fisher and P. A. Lee, *Phys. Rev. B* **23**, 6851 (1981).
42. C. T. White, J. Li, D. Gunlycke et al., *Nano Lett.* **7**, 825 (2007).
43. D. Gunlycke and C. T. White, *Phys. Rev. B* **77**, 115116 (2008).
44. Y. Levinson, O. Entin-Wohlman, and P. Wölfle, *Physica A* **302**, 335 (2001).
45. V. Kashcheyevs, A. Aharony, and O. Entin-Wohlman, *Phys. Rev. B* **69**, 195301 (2004).
46. Y. Makhlin and A. D. Mirlin, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 276803 (2001).
47. M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 1920 (1996).
48. K. Sasaki, S. Murakami, and R. Saito, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 113110 (2006).
49. A. R. Akhmerov, J. H. Bardarson, A. Rycerz et al., *Phys. Rev. B* **77**, 205416 (2008).
50. A. Cresti, G. Grosso, and G. P. Parravicini, *Phys. Rev. B* **77**, 233402 (2008).
51. K. Wakabayashi and M. Sigrist, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3390 (2000).
52. K. Wakabayashi and T. Aoki, *Int. J. Mod. Phys. B* **16**, 4897 (2002).
53. Z. Shao, W. Porod, and C. S. Lent, *Phys. Rev. B* **49**, 7453 (1994).
54. M. Wimmer, I. Adagideli, S. Berber et al., *Phys. Rev. Lett.* **100**, 177207 (2008).
55. Y.-W. Son, M. L. Cohen, and S. G. Louie, *Nature* **444**, 347 (2006).
56. Е. С. Гричук, Э. А. Маныкин, *Письма в ЖЭТФ* **93**, 414 (2011).
57. S. Lakshmi, S. Roche, and G. Cuniberti, *Phys. Rev. B* **80**, 193404 (2009).
58. H. Haugen, D. Huertas-Hernando, and A. Brataas, *Phys. Rev. B* **77**, 115406 (2008).
59. T. C. Li and S.-P. Lu, *Phys. Rev. B* **77**, 085408 (2008).
60. J. Cai, P. Ruffieux, R. Jaafar et al., *Nature* **466**, 470 (2010).
61. B. Song, G. F. Schneider, Q. Xu et al., *Nano Lett.* **11**, 2247 (2011).