

01

Электронный и спиновый транспорт в адиабатическом квантовом насосе на основе графеновых нанолент типа „armchair“

© *Е.С. Гричук, Э.А. Маныкин*

Национальный исследовательский ядерный университет „МИФИ“,
Москва
Национальный исследовательский центр „Курчатовский институт“,
Москва
E-mail: evgeny.sg@gmail.com

Поступило в Редакцию 16 июня 2011 г.

В рамках приближения сильной связи рассматривается эффект адиабатического квантового насоса в графеновых двухбарьерных структурах на основе нанолент типа „armchair“. Получено аналитическое выражение для билинейного отклика, справедливое при малых энергиях Ферми. Показано, что использование эффекта близости с ферромагнитным диэлектриком позволяет создавать спиновые и чисто спиновые токи. Численно найдены зависимости генерируемого электронного и спинового тока от энергии Ферми. Дана оценка справедливости адиабатического приближения, исходя из найденных характерных времен нахождения электрона в системе.

Графен, обладающий рядом уникальных электронных свойств, является перспективным материалом для изготовления устройств микро- и наноэлектроники, оптоэлектроники, а также спинтроники. Кроме стационарного электронного транспорта в графене, исследованию которого посвящено огромное число публикаций, существенный интерес представляют нестационарные явления. В качестве примера можно привести эффект квантового насоса, активно изучающийся в области мезоскопической физики. Эффект заключается в возникновении конечного среднего тока через систему при периодическом изменении ее внешних параметров (например, потенциалов на затворах) в отсутствие внешнего приложенного напряжения. Если период изменения параметров системы много больше характерного времени нахождения

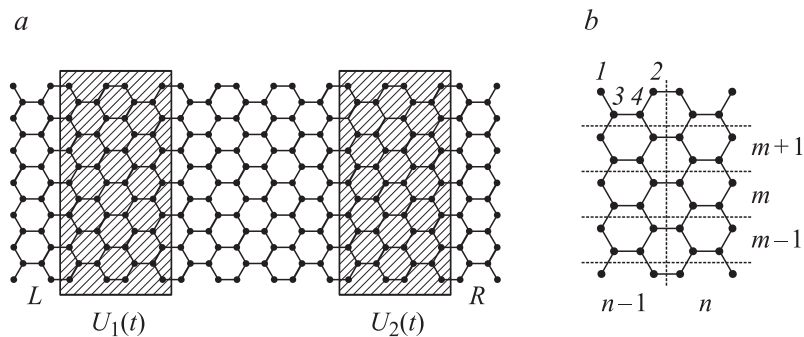


Рис. 1. *a* — схематическое изображение рассматриваемого устройства. Расстояние между затворами составляет N_0 элементарных ячеек, затворы занимают N_1 элементарных ячеек. *b* — элементарная ячейка наноленты типа „armchair“.

электрона в устройстве, проходящий через систему заряд (средний ток) выражается через стационарную матрицу рассеяния, которая зависит от времени как от параметра [1–3].

Особенности эффекта адиабатического квантового насоса в графеновых нанолентах рассматривались авторами ранее в работах [4,5]. В частности, было показано, что наличие антиферромагнитной структуры у нанолент типа „zigzag“ приводит к возможности генерирования спиновых и чисто спиновых токов без приложения внешнего магнитного поля. В данной работе рассматривается эффект адиабатического квантового насоса в графеновых нанолентах типа „armchair“. Анализируется возможность генерации спиновых токов.

Рассматриваемое устройство схематически показано на рис. 1, *a*. Периодически изменяющимися внешними параметрами являются потенциалы U_k ($k = 1, 2$) на затворах. Для описания наноленты используется приближение сильной связи, гамильтониан в котором имеет вид

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} a_i^\dagger a_j + \sum_{k=1}^2 U_k \sum_{i \in (U_k)} a_i^\dagger a_i, \quad (1)$$

где t — матричный элемент перескока, равный $t = 2.7$ eV для ближайших соседей.

Для анализа нестационарных явлений при периодическом изменении параметров системы широко используется метод матрицы рассеяния Флоке [2,3]. В рамках этого формализма можно вычислить средний ток, протекающий через систему. В первом порядке по частоте $\Omega = 2\pi/T$ изменения параметров системы (адиабатическое приближение) получается выражение, которое можно записать в нескольких эквивалентных формах [1–3,6]:

$$I = -i \frac{e}{2\pi} \int_0^T \frac{dt}{T} \left[S(t) \frac{\partial S^\dagger(t)}{\partial t} \right]_{11} = -i \frac{e\Omega}{4\pi^2} \oint_{\partial A} (S dS^\dagger)_{11} \\ = \frac{e\Omega}{2\pi^2} \int_A dU_1 dU_2 \Pi(U_1, U_2), \quad (2)$$

где

$$\Pi(U_1, U_2) = \text{Im} \left(\frac{\partial S}{\partial U_1} \frac{\partial S^\dagger}{\partial U_2} \right)_{11}. \quad (3)$$

В этих выражениях $S(t) \equiv S(U_1(t), U_2(t))$ — „замороженная“ матрица рассеяния системы. Предполагается, что в каждом из контактов имеется только один открытый канал проводимости. В этом случае S -матрица имеет размер 2×2 . В литературе выражение (2) часто называют формулой Броуэра [1].

Если амплитуда изменения потенциалов U_1 и U_2 мала, так что в контуре A всюду $\Pi(U_1, U_2) = \Pi(U_{10}, U_{20}) = \text{const}$, выражение (2) упрощается:

$$I = \frac{e\Omega}{2\pi^2} \Pi(U_{10}, U_{20}) \int_A dU_1 dU_2 = \frac{e\Omega}{2\pi^2} \Pi(U_{10}, U_{20}) S_A, \quad (4)$$

где S_A — площадь контура A .

Задача о прохождении электрона через потенциальный барьер в случае нанолента „armchair“ имеет аналитическое решение [7] (в отличие от случая нанолента типа „zigzag“, где на границе потенциального барьера происходит смешивание мод). Аналитическое выражение для мод с поперечным волновым вектором k_\perp и продольным волновым

вектором k имеет вид [7]

$$\tilde{\psi}(n, m) = \phi(m) e^{ikn} \begin{pmatrix} e^{-ik+i\theta} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \phi(m) = \sin(k_{\perp} m), \quad (5)$$

где n, m — индекс элементарной ячейки, а компоненты вектора отвечают узлам типов 1 и 2 соответственно (рис. 1, *b*). Из этого выражения видно, что поперечный профиль моды $\phi(m)$ не зависит от продольного волнового вектора k . Поэтому зависимость от поперечного индекса m будем опускать (она одинакова во всех областях). Удобно образовать новый вектор

$$\psi(n) = \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_1(n+1) \\ \tilde{\psi}_2(n) \end{pmatrix} = e^{ikn} \begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Поперечный волновой вектор k_{\perp} определяется из нулевых граничных условий на границах ленты: $k_{\perp} = 2\pi j / (N+1)$, где N — ширина ленты, а $j = 1, 2, \dots, \lfloor N/2 \rfloor$. Выражение, определяющее угол θ (набег фазы электронной волны между узлами типов 1 и 2 соседних элементарных ячеек), а также дисперсионное соотношение, связывающее волновые векторы k_{\perp}, k и энергию E , приведены в явном виде, например, в [7].

Условия сшивки на границе n_0 потенциала для соседних областей i и j имеют простой вид [7]: $\psi^{(i)}(n_0) = \psi^{(j)}(n_0)$. Общие решения слева, в области L , и справа, в области R , представляются в виде линейных комбинаций $\psi^{(L)}(n) = A\psi(n) + C\psi^*(n)$ и $\psi^{(R)}(n) = D\psi(n) + B\psi^*(n)$, где коэффициенты A, B, C и D связаны матрицей рассеяния S : $S(A, B)^T = (C, D)^T$. Эта матрица может быть вычислена аналитически. Ее последующее дифференцирование в выражении (3) позволяет найти билинейный (по амплитудам U_1 и U_2) отклик системы (4). При $U_{1,2} \rightarrow 0$ выражение для отклика заметно упрощается, поскольку этот предел соответствует прозрачной системе без барьеров. В этом случае в вычислениях удобно пользоваться T -матрицей, которая связывает коэффициенты в области L с коэффициентами в области R : $T(A, C)^T = (D, B)^T$. Выразив элементы S -матрицы через элементы T -матрицы, выражение для $\Pi(U_1, U_2)$ можно записать в виде

$$\Pi(U_1, U_2) = \text{Im} \left(\frac{\partial T_{21}}{\partial U_1} \frac{\partial T_{21}^*}{\partial U_2} + \frac{\partial T_{11}}{\partial U_1} \frac{\partial T_{11}^*}{\partial U_2} \right). \quad (7)$$

Выражение для T -матрицы в указанном пределе легко продифференцировать. В пределе $U_{1,2} \rightarrow 0$ получаем:

$$\Pi(U_1, U_2) = -\frac{\sin^2(kN_1) \sin(2k(N_1 + N_2))}{4 \cos^2(k_{\perp}/2) \sin^2(k/2)} E^2 \left| \frac{\partial e^{i\theta}}{\partial U} \right|^2, \quad (8)$$

где зависимость $e^{i\theta}$ от U появляется при замене $E \rightarrow E - U$ в области потенциального барьера высотой U . Функция $|\partial e^{i\theta}/\partial U|^2$ в пределе $k \rightarrow 0$ ведет себя как $|\partial e^{i\theta}/\partial U|^2 = 4/k^2 + O(1/k)$. Отметим, что выражение (8) находится в согласии (в соответствующем пределе) с вычислениями для бесконечного графена (широкой ленты) в рамках низкоэнергетического (дираковского) приближения в работе [8].

Если управляющие потенциалы периодически меняются во времени по гармоническому закону, $U_1(t) = U_0 \cos \omega t$, $U_2(t) = U_0 \sin \omega t$, для билинейного отклика получаем

$$I = -\frac{e\Omega \sin^2(kN_1) \sin(2k(N_1 + N_0))}{2\pi 4 \cos^2(k_{\perp}/2) \sin^2(k/2)} E^2 \left| \frac{\partial e^{i\theta}}{\partial U} \right|^2 U_0^2. \quad (9)$$

Функция $I(k)$ (или $I(E)$) является знакопеременной, причем осцилляции возникают за счет синусоидальных множителей. Заметим также, что особенность этой функции $I(k) \sim 1/k$ при малых волновых векторах является следствием соответствующей особенности в функции плотности состояний.

На рис. 2 показаны зависимости (без учета двукратного вырождения по спину) прошедшего через систему заряда $Q(k) = TI(k)$, полученные из выражения (9), а также путем численного интегрирования в (2). На этом же рисунке показаны соответствующие зависимости $I(E_F)$ от энергии Ферми в контактах. Видно, что при больших k и E_F обе кривые совпадают, тогда как при малых k и E_F наблюдаются существенные различия, так как в этом случае функция $\Pi(U_1, U_2)$ уже не является постоянной внутри выбранного контура управляющих потенциалов. Поскольку при $k \rightarrow 0$ билинейный отклик расходится как $1/k$, выражение $kQ(k)$ стремится к константе. В противоположность этому заряд, полученный путем численного интегрирования, не имеет такой особенности.

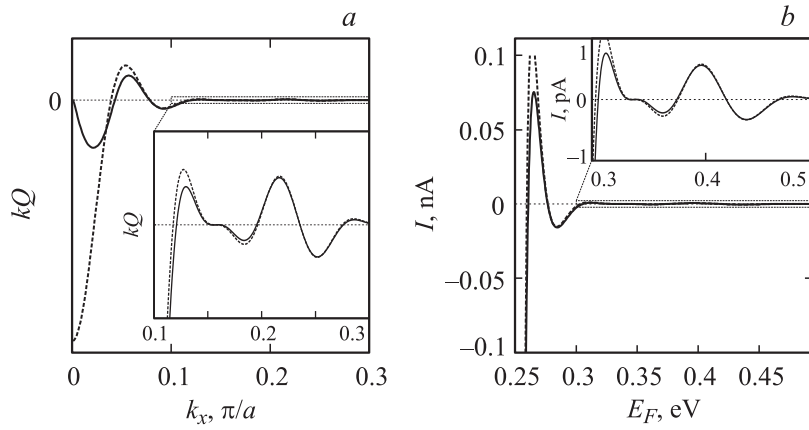


Рис. 2. *a* — зависимость $kQ(k)$ от волнового вектора Ферми k в контактах. *b* — соответствующая зависимость $I(E_F)$ от энергии Ферми E_F в контактах. Сплошная линия — результат численного интегрирования в (2), пунктирная линия — результат расчета согласно выражению (9). Ширина ленты — 18 димеров $C-C$, $N_0 = 20$, $N_1 = 20$, $U_0 = 0.01$ eV, $\omega = 2\pi \cdot 5$ GHz.

Существенный интерес представляет также рассмотрение возможности генерирования спиновых токов в нанолентах типа „armchair“. Анализ показывает, что наноленты этого типа не обладают магнитным порядком, поэтому в простой двухбарьерной структуре спиновый ток не возникает ни при приложении разности потенциалов, ни в эффекте квантового насоса. Конечный спиновый ток можно получить за счет использования эффекта близости, который заключается в возникновении обменного расщепления при взаимодействии с нанесенным на графен слоем ферромагнитного диэлектрика, например EuO , для которого теоретические оценки дают величину обменного расщепления порядка 5–10 meV [9,10].

Рассмотрим устройство, показанное на рис. 1, *a*, и будем считать, что на область между затворами нанесен слой EuO . Тогда гамильтониан (1) в этой области приобретет дополнительное слагаемое, нарушающее симметрию между противоположными направлениями спинов, $H_{es} = \sum_{i,ss'} ha_{is}^\dagger \sigma_{ss}^z a_{is'}$, где h — величина обменного расщепления.

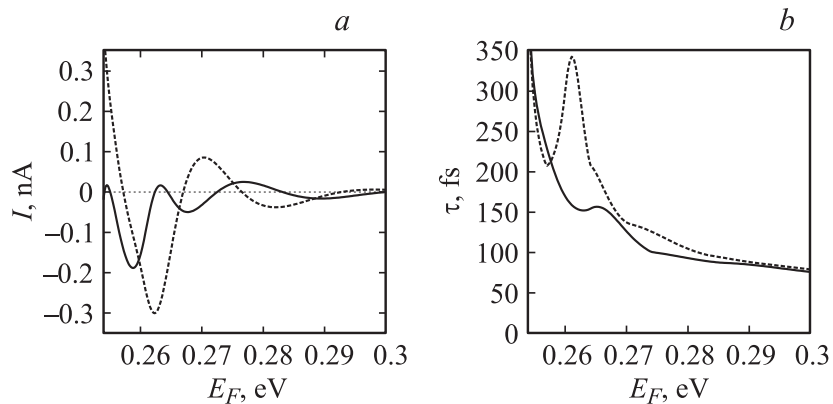


Рис. 3. *a* — зависимость электронного I_C тока (сплошная линия) и спинового тока I_S (пунктирная линия) от энергии Ферми E_F в контактах. *b* — зависимость вignerовского времени задержки для электронов со спином „вверх“ (сплошная линия) и спином „вниз“ (пунктирная линия) от энергии Ферми. Ширина ленты — 18 димеров C–C, $N_0 = 50$, $N_1 = 20$, $U_0 = 0.01$ eV, $\omega = 2\pi \cdot 5$ GHz.

Вычислив токи I_\uparrow и I_\downarrow , соответствующие электронам с противоположными направлениями спинов, можно определить полный электронный ток $I_C = I_\uparrow + I_\downarrow$ и спиновый ток $I_S = I_\uparrow - I_\downarrow$ (для удобства измеряемые в одинаковых единицах). Простых аналитических выражений для величины генерируемых токов в этом случае получить не удастся. Однако из выражения (9) можно ожидать, что генерируемые токи и в этом случае будут знакопеременными функциями энергии, что приведет к возможности генерирования чисто спиновых токов. Как видно из рис. 3, *a*, на котором показаны зависимости электронного и спинового токов от энергии Ферми, при определенных значениях энергии Ферми генерируется чисто спиновый ток.

С физической точки зрения справедливость адиабатического приближения основана на том, что если период T изменения параметров системы много больше характерного времени τ нахождения электрона в системе, электрон фактически рассеивается на „замороженном“ рассеивателе. Таким образом, критерием адиабатичности является условие $T \gg \tau$. Для оценки τ может быть использован подход

Вигнера–Смита [11]. Введем вигнеровское время задержки

$$\tau_w = \frac{i\hbar}{2} \text{Tr} \left(S^\dagger \frac{\partial S}{\partial U} \right), \quad (10)$$

где $U(x) \equiv U$ — однородный „пробный“ потенциал, прикладываемый ко всей системе. На рис. 3, *b* показана зависимость максимального времени задержки вдоль контура управляющих потенциалов от энергии Ферми для спинового квантового наноса. Видно, что характерные времена задержки составляют величину порядка 100–300 fs. При приближении энергии к дну подзоны время задержки увеличивается ввиду уменьшения групповой скорости. Этим временам соответствуют частоты порядка десятков терагерц, многократно превосходящие частоты порядка гигагерц, типичные для подобных экспериментов [12,13].

Таким образом, в данной работе рассмотрен эффект адиабатического квантового насоса в нанолентах типа „armchair“. С помощью численных методов найдены зависимости среднего электронного и спинового токов от энергии Ферми. Анализ показал, что использование ферромагнитного диэлектрика, например EuO, нанесенного на область между затворами или под один из затворов, позволяет создать спиновый квантовый насос, генерирующий не только спиновый, но и чисто спиновый ток. Значительные успехи, достигнутые в последнее время в создании графеновых наноструктур с определенным типом границ, позволяют надеяться на экспериментальную реализацию подобных устройств в ближайшие несколько лет.

Авторы благодарны Министерству образования и науки (госконтракт № 02.740.11.0433) и Российскому фонду фундаментальных исследований (проект № 10-02-00399) за финансовую поддержку.

Список литературы

- [1] *Brouwer P.W.* // Phys. Rev. B. 1998. V. 58. P. R10135.
- [2] *Moskalets M., Büttiker M.* // Phys. Rev. B. 2002. V. 66. P. 205320.
- [3] *Arrachea L., Moskalets M.* // Phys. Rev. B. 2006. V. 74. P. 245322.
- [4] *Grichuk E., Manykin E.* // EPL. 2010. V. 92. P. 47010.
- [5] *Гричук Е.С., Маныкин Э.А.* // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т. 93. В. 7. С. 414.

- [6] Avron J.E., Elgart A., Graft G.M., Sadun L. // Phys. Rev. B. 2000. V. 62. P. R10618.
- [7] Klymenko Y.O., Shevtsov O. // Eur. Phys. J. B. 2009. V. 69. P. 383.
- [8] Prada E., San-Jose P., Schomerus H. // Phys. Rev. B. 2009. V. 80. P. 245414.
- [9] Haugen H., Huertas-Hernando D., Brataas A. // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. P. 115406.
- [10] Hung Nguyen V., Nam Do V., Bournel A., Lien Nguyen V., Dollfus P. // J. Appl. Phys. 2009. V. 106. P. 053710.
- [11] Smith F.T. // Phys. Rev. 1960. V. 118. P. 349.
- [12] Switkes M., Marcus C.M., Campman K., Gossard A.C. // Science. 1999. V. 283. P. 1905.
- [13] Buitelaar M.R., Kashcheyevs V., Leek P.J., Talyanskii V.I., Smith C.G., Anderson D., Jones G.A.C., Wei J., Cobden D.H. // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 101. P. 126803.