

18,12

## Спектры спин-поляризации в щелевой графеновой сверхрешетке

© А.Н. Король<sup>1,2</sup>, В.Н. Исай<sup>2</sup>, Н.В. Медвидь<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Laboratory on Quantum Theory in Linköping, ISIR, Linköping, Sweden

<sup>2</sup>Национальный университет пищевых технологий, Киев, Украина

E-mail: korolam@ukr.net

(Поступила в Редакцию 5 июня 2014 г.)

Рассматривается одномерная сверхрешетка, построенная на основе однослойного щелевого графена. В континуальной модели с помощью метода трансферных матриц рассчитываются спин-зависимые транспортные характеристики данной структуры. Показано, что спин-поляризация может достигать максимальной величины в широком диапазоне значений параметров задачи.

В последние годы активно изучаются энергетические спектры и транспортные характеристики различных наноструктур на основе графена, в том числе в условиях воздействия внешних потенциалов — скалярного и векторного [1–21].

Экспериментально была продемонстрирована возможность регулируемого задания этих потенциалов. При этом очевидно, что изучение влияния электрического и магнитного полей на свойства графеновых наноструктур важно с практической точки зрения. В частности, сделан весомый вклад в современную спинтронику, показано, что с помощью определенного ряда графеновых структур можно осуществлять разделение электронов с различным направлением спина (спиновых каналов), так, что эти структуры могут служить в качестве спин-фильтров. Тут следует иметь в виду, что графен является перспективным материалом для спиновой фильтрации, поскольку квазичастицы имеют в нем большую длину свободного пробега, и это позволяет использовать баллистический режим пролета носителей заряда. Добавим к сказанному, что, как показано в работах [13,14], использование графеновых сверхрешеток (СР) может увеличить спин-поляризацию электронных пучков.

Расчет коэффициента трансмиссии, кондактанса, спин-поляризации, магнетосопротивления чаще всего проводится с помощью метода трансферных матриц для безмассовых дирак-вейлевских фермионов на основе континуальной модели для одно- или двухслойного графена.

При выборе векторного потенциала  $\mathbf{A}$  обычно используется калибровка Ландау, а зависимость потенциала  $A$  от координаты вдоль направления СР задается линейной или плавной периодической функцией, либо соответствующий компонент вектора  $\mathbf{A}$  считается постоянной величиной (модель Кронига–Пенни) [10–13].

В цитируемых статьях рассматривалась преимущественно бесщелевая графеновая сверхрешетка, а в данной работе мы акцентируем внимание не на бесщелевой сверхрешетке (соответствующей безмассовому уравнению вейль-дираковского типа), а на решетке, имеющей

в энергетическом спектре запрещенную зону для случая нормального падения электронов на СР (gapped graphene superlattice в англоязычной литературе). Созданию и изучению таких СР уделяется особое внимание, поскольку наличие запрещенной зоны играет ключевую роль в получении полупроводниковых приборов транзисторного типа [16–20]. В частности, химическими методами удалось получить ширину щели, равную нескольким десяткам электрон-вольта. В данной работе рассчитываются спин-зависимые транспортные характеристики указанной сверхрешетки. Анализируется влияние различных параметров СР на спин-поляризацию  $P$ , в первую очередь влияние на величину  $P$  ширины запрещенной зоны. Результаты работы показывают, что спин-поляризация достигает максимального значения в широком диапазоне значений параметров задачи.

Магнитное воздействие на слой графена можно осуществить с помощью ферромагнитных полосок, накладываемых на магнитный изолятор, который приводится в непосредственное соприкосновение с графеновой поверхностью [14,15]. Влияние обменного поля учитывается соответствующей энергией  $V_m$  в гамильтониане, так что внешний потенциал можно записать в виде  $U = V_e + \xi V_m$  для барьерных слоев и  $U = 0$  для внебарьерных участков СР,  $V_e$  — высота электростатического барьера;  $\xi = 1$  для спина вверх и  $\xi = -1$  — для спина вниз (другие возможности не рассматриваются).

В дальнейшем рассмотрении задачи будем основываться на уравнении вейль-дираковского типа

$$[v_F(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p}) + m v_F^2 \sigma_z + U(x)\hat{I}] \Psi = E \Psi, \quad (1)$$

где  $v_F \approx 10^6$  м/с — скорость Ферми,  $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$  — оператор импульса,  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ ,  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  — матрицы Паули для псевдospина,  $U(x)$  — внешний потенциал, зависящий лишь от координаты  $x$ ,  $\hat{I}$  — единичная двумерная матрица, массовое слагаемое обозначим далее, как это принято в литературе, символом  $\Delta$ . Функция  $\Psi$  представляет собой двухкомпонентный псевдospинор  $\Psi = [\tilde{\Psi}_A, \tilde{\Psi}_B]^T$ ,  $\tilde{\Psi}_A, \tilde{\Psi}_B$  — огибающие функции для графеновых подрешеток  $A$  и  $B$ ,  $T$  — символ транспони-

рования. Предположим, что потенциал  $U(x)$  состоит из периодически повторяющихся прямоугольных барьеров вдоль оси  $Ox$ , причем внутри каждого  $j$ -го барьера  $U_j(x) = \text{const}$ . Тогда, учитывая трансляционную инвариантность решения по оси  $Oy$ , можно записать  $\tilde{\Psi}_{A,B} = \Psi_{A,B} e^{ik_y y}$  и из уравнения (1) получить для  $\Psi_{A,B}$

$$\frac{d^2 \Psi_{A,B}}{dx^2} + (k_j^2 - k_y^2) \Psi_{A,B} = 0, \quad (2)$$

где  $k_j = \text{sign}(s_{j+})[(E - U_j)^2 - \Delta^2]^{1/2}$ ;  $s_{\pm} \equiv E - U(x) \pm \Delta$ , приняты единицы измерения:  $v_F = \hbar = 1$ . Если представить решения для собственных функций  $\psi_{A,B}$  в виде суммы плоских волн, движущихся в прямом и обратном направлении вдоль оси  $Ox$ , то получится

$$\Psi(x) = \left[ a_j e^{iq_j x} \begin{pmatrix} 1 \\ g_j^+ \end{pmatrix} + b_j e^{-iq_j x} \begin{pmatrix} 1 \\ g_j^- \end{pmatrix} \right], \quad (3)$$

где  $q_j = \text{sign}(s_{j+}) \sqrt{k_j^2 - k_y^2}$ , если  $k_j^2 > k_y^2$ , и  $q_j = i \sqrt{k_y^2 - k_j^2}$  в противном случае,  $g_j^{\pm} = \frac{\pm q_j + ik_y}{E}$ , верхняя строка в (3) относится к подрешетке  $A$ , нижняя — к  $B$ .

Ключевой величиной, через которую выражается кондактанс и спин-поляризация рассматриваемой системы, является коэффициент трансмиссии электронов через решетку  $T$ . Кондактанс при низких температурах можно найти, воспользовавшись формулой Ландауэра–Буттикера

$$G_{\uparrow\downarrow} = G_0 \int_0^{\frac{\pi}{2}} T_{\uparrow\downarrow} \cos \theta d\theta, \quad (4)$$

где

$$G_0 = \frac{2e^2 m v_F L}{\hbar^2},$$

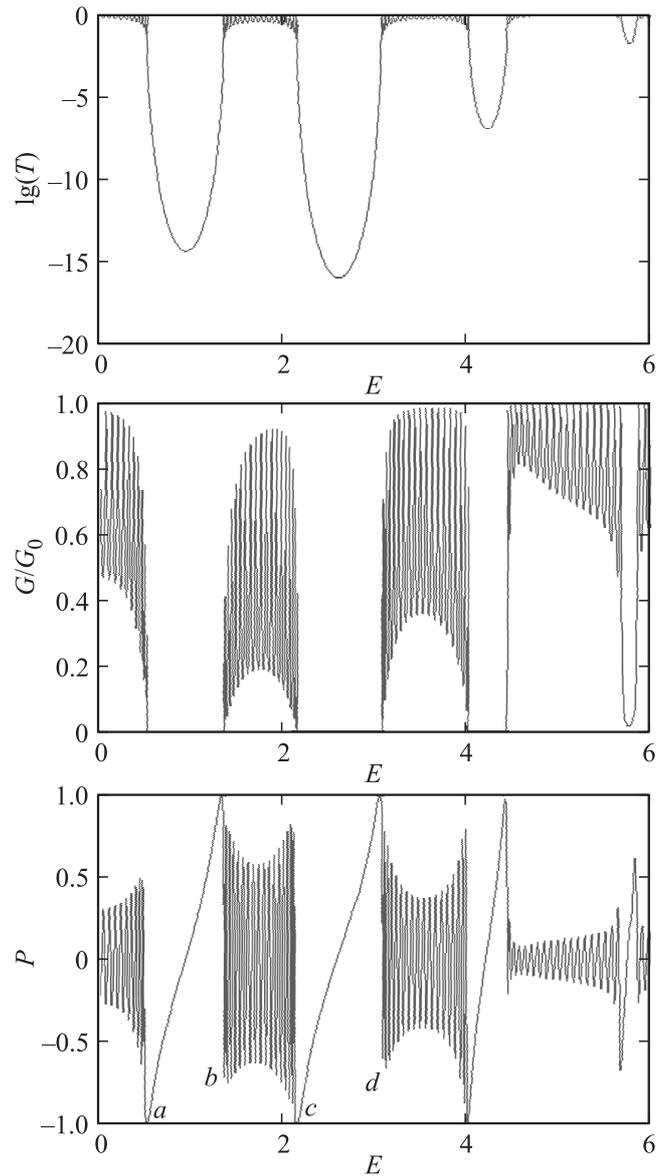
$L$  — ширина графенового образца по оси  $Oy$ ,  $e$  — элементарный заряд,  $m$  — масса электрона,  $v_F$  — скорость Ферми, стрелки обозначают направление спина. Спин-поляризация определяется формулой

$$P = 100\% (G_{\uparrow} - G_{\downarrow}) / (G_{\uparrow} + G_{\downarrow}). \quad (5)$$

Коэффициент трансмиссии находится в результате сшивания волновых функций на границах барьера–ямы, и поскольку эта процедура неоднократно описывалась в литературе (см., например, [2,5,8,21]), мы не будем на ней останавливаться и перейдем к анализу полученных результатов.

Сразу подчеркнем, что результаты расчетов, представленные на всех рисунках, получены для случая нормального падения электронно волны на СР ( $k_y = 0$ ).

На рис. 1 изображены зависимости от энергии трех величин: верхний рисунок — коэффициент трансмиссии; средний рисунок — приведенный кондактанс  $G/G_0$ , нижний рисунок — спин-поляризация  $P$  для одинаковых значений параметров: ширина барьера  $b$  и квантовой



**Рис. 1.** Зависимость от энергии электронов трех величин: коэффициента трансмиссии (верхний рисунок), приведенного кондактанса (средний рисунок) и спин-поляризации (нижний рисунок).

ямы  $w$   $b = w = 1$ ,  $\Delta = 1$ , число периодов СР  $N = 10$ ,  $V_e = 2$ ,  $V_m = 0.01$ .

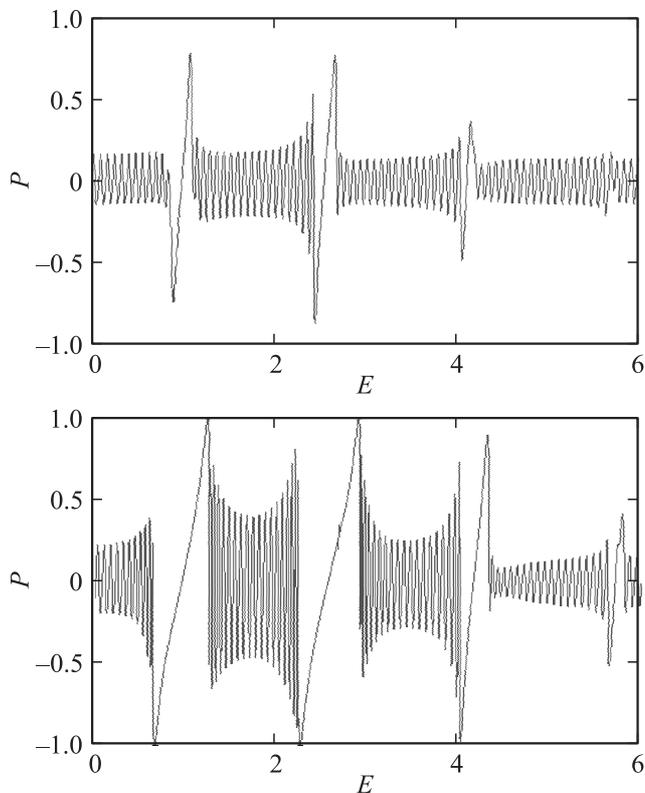
Видно, что спин-поляризация достигает максимального значения  $|P| = 1$  (или 100%) в точках, соответствующих переходу от запрещенной зоны к разрешенной и наоборот. В интервалах энергии, отвечающих разрешенным состояниям, наблюдаются осцилляции  $P(E)$  со значением  $|P| < 1$ , число которых равно количеству соответствующих осцилляций в зависимости  $T(E)$ . Переходные интервалы энергии  $ab$ ,  $cd$  отвечают запрещенным зонам.

Из определяющей величину  $P$  формулы (5) очевидно, что близкая к стопроцентной спин-поляризация реали-

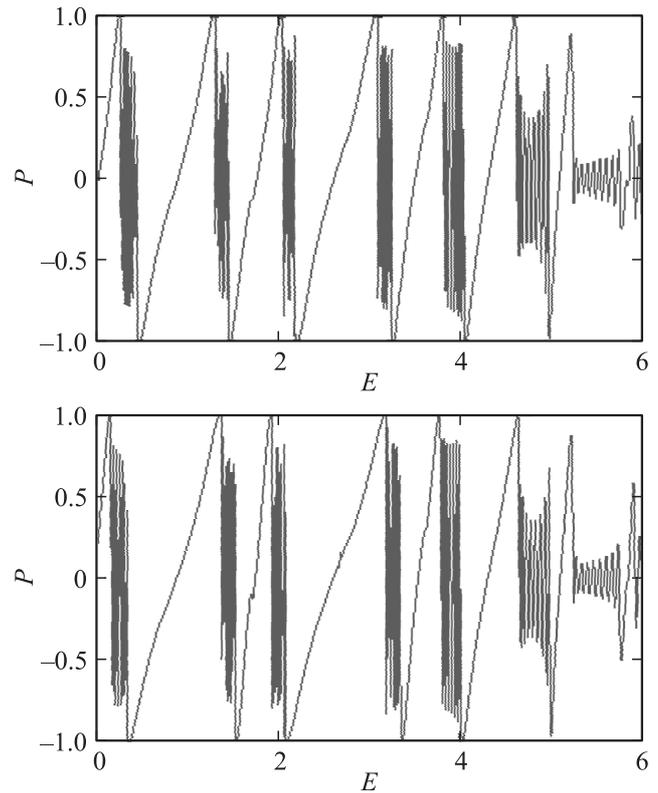
зается тогда, когда значения кондактанса для спинов с ориентацией вверх и вниз различаются достаточно сильно. В рассматриваемой здесь структуре это имеет место при условии, что энергия электрона со спином, например, вверх  $E \uparrow$  попадает в разрешенную зону, а со спином вниз  $E \downarrow$  — в запрещенную, или наоборот, причем необходимо, чтобы значения  $T$  для щели были достаточно малы. Если же  $E \uparrow$  и  $E \downarrow$  соответствуют максимуму и минимуму  $T$  в разрешенной зоне (см., например, интервал  $bc$  на рис. 1), то значения  $P$  не достигают единицы. Также спин-поляризация меньше единицы при энергиях, соответствующих щелям, для которых  $T$  недостаточно мало, например при энергиях  $E > 4$  на нижнем рисунке.

Поскольку мы рассматриваем спин-поляризацию именно в щелевой сверхрешетке, важной является зависимость величины  $P$  от ширины запрещенной зоны  $\Delta$ . Эта зависимость иллюстрируется рис. 2. При малых значениях  $\Delta$  величина  $P < 1$  для всех энергий (при  $\Delta = 0$ , т.е. для бесщелевой решетки,  $P$  близко к нулю (если  $k_y = 0$ )).

Для достаточно больших  $\Delta$  существует набор значений энергии, для которого спин-поляризация достигает максимума (см. рис. 2); чем значение  $\Delta$  больше, тем больше энергий, для которых  $P = 1$  на всей шкале энергий. Отметим также, что поскольку с ростом  $\Delta$



**Рис. 2.** Спин-поляризация как функция энергии для разных значений ширины запрещенной зоны  $\Delta$ . Значения параметров:  $N = 10$ ,  $b = w = 1$ ,  $V_e = 2$ ,  $V_m = 0.01$ ,  $\Delta = 0.7$  и  $0.3$  для верхнего и нижнего рисунков соответственно.

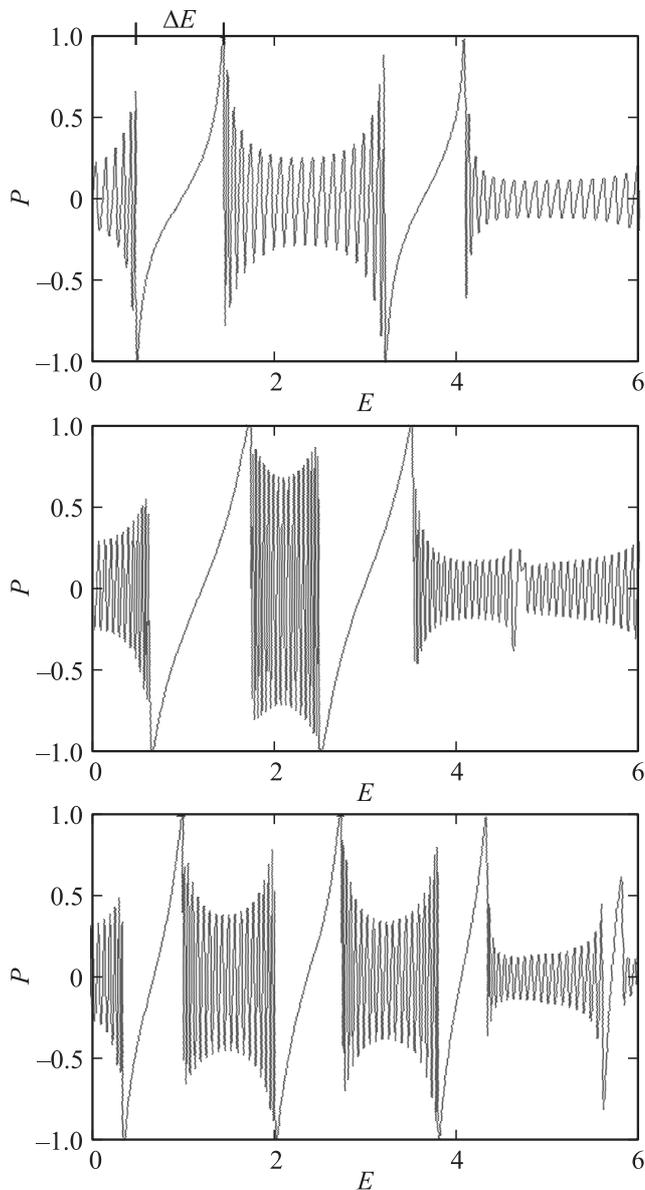


**Рис. 3.** Зависимость спин-поляризации от энергии для случая разных значений ширины запрещенной зоны в парных и непарных барьерах; значения параметров:  $N = 10$ ,  $b = w = 1$ ,  $V_e = 2$ ,  $V_m = 0.01$ , в парных барьерах  $\Delta = 1$ , в непарных  $\Delta = 0.7$  и  $0.3$  для верхнего и нижнего рисунков соответственно.

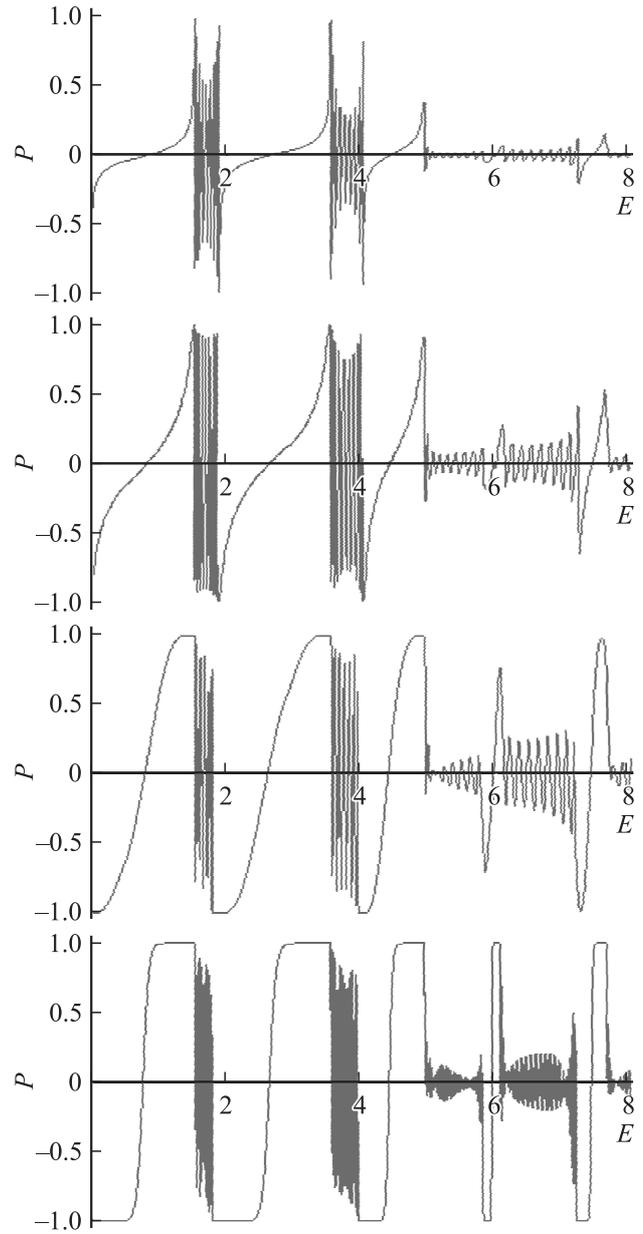
ширины щелей увеличиваются, то происходит смещение значений энергии, для которых  $P = 1$ , на оси энергий.

Интересно рассмотреть случай, когда величина  $\Delta$  неодинакова в разных барьерах; в частности, пусть в парных барьерах  $\Delta = \Delta_1$ , а в непарных  $\Delta = \Delta_2$ . Соответствующий расчет для спин-поляризации представлен на рис. 3. Сверхрешетка в данном случае приобретает квазипериодический характер и отвечает начальной генерации СР Фибоначчи; ее спектры также приобретают квазипериодические черты. Это накладывает свой отпечаток и на спектры поляризации. Именно, происходит расщепление разрешенных зон согласно закону Фибоначчи, приводящее к образованию дополнительных пиков с  $P \sim 1$ . В данном случае, поскольку каждая разрешенная зона распадается на две с одновременным появлением одной новой щели, количество пиков с  $P \approx 1$  и  $P \approx -1$  удваивается. При этом происходит также смещение пиков с  $|P| \approx 1$  по оси энергий. Таким образом, результатом квазипериодического влияния является концентрация пиков с высоким значением спин-поляризации в фиксированном энергетическом интервале (за счет увеличения их числа) и их смещение на оси энергий.

Как известно, в периодических и квазипериодических графеновых щелевых СР образуется особая сверхрешеточная дираковская щель (запрещенная зона, [2,3]). Характерной особенностью этой зоны является то, что ее расположение на оси энергий не зависит от величины периода СР  $b + w$ , но чувствительно к отношению  $b/w$ . Это обстоятельство находит свое выражение и в спектре  $P(E)$ . Соответствующий сверхрешеточной дираковской зоне интервал энергии проявляется в спин-поляризации и отмечен на рис. 4 как  $\Delta E$ . Как следует из работы [3], середина этого интервала приходится на значение энергии, приблизительно равное  $V_e/2$ . С изменением



**Рис. 4.** Спин-поляризация как функция энергии для разных значений ширины потенциальных барьеров и квантовых ям; значения параметров:  $N = 10$ ,  $V_e = 2$ ,  $V_m = 0.01$ ,  $\Delta = 1$ , для верхнего рисунка  $b = w = 0.6$ , для среднего рисунка  $b = 1.2$ ,  $w = 0.7$ , для нижнего рисунка  $b = 0.7$ ,  $w = 1.2$ .



**Рис. 5.** Зависимость спин-поляризации от энергии для таких параметров:  $b = w = 1$ ,  $V_e = 2$ ,  $\Delta = 1$  для всех рисунков;  $V_m = 0.01$  и  $0.1$  для первого (начиная сверху) и третьего рисунков,  $V_m = 0.02$  для второго и четвертого рисунков,  $N = 10$  для трех первых рисунков и  $N = 40$  для четвертого рисунка.

величины периода  $b + w$  положение этого интервала не изменяется, а другие фрагменты спектра сдвигаются по оси энергий.

Из рис. 5 видно, что максимальная спин-поляризация достигается уже при совсем незначительных значениях эффективного обменного потенциала  $V_m$ . Как уже отмечалось, это имеет место благодаря сильному (на много порядков) отличию коэффициента трансмиссии  $T$  в разрешенных и запрещенных зонах. Также рис. 5 показывает, как изменяется спектр  $P(E)$  с увеличением

обменного потенциала, видно, что с ростом  $V_m$  вместо отдельных пиков образуются интервалы энергий, для которых  $|P| = 1$ ; при дальнейшем увеличении  $V_m$  эти интервалы расширяются.

Также рис. 5 показывает, что на спектры спин-поляризации сильное влияние имеет эффект сверхрешетки. Сравнивая второй (сверху) и четвертый рисунки, убеждаемся в том, что увеличение числа периодов решетки приводит к существенному расширению интервалов энергии, для которых спин-поляризация максимальна.

В заключение отметим, что, варьируя значения различных параметров изучаемой структуры, можно гибко регулировать спектры спин-поляризации. Например, рост значения спин-поляризации достигается за счет либо ширины запрещенной зоны, либо числа периодов сверхрешетки, либо величины обменного потенциала.

## Список литературы

- [1] Q. Zhao, J. Gong, C.A. Muller. Phys. Rev. B **85**, 104 201 (2012).
- [2] L. Wang, X. Chen. J.Appl. Phys. **109**, 033 710 (2010).
- [3] L. Wang, S. Zhu. Phys. Rev. B **81**, 205 444 (2010).
- [4] V.H. Nguyen, A. Bournel, P. Dollfus. Semicond. Sci. Technol. **26**, 125 012 (2011).
- [5] M. Barbier, P. Vasilopoulos, F.M. Peeters. Phys. Rev. B **80**, 205 415 (2009).
- [6] P. Zhao, X. Chen. Appl. Phys. Lett. **99**, 182 108 (2011).
- [7] T. Ma, C. Liang, L. Wang. Appl. Phys. Lett. **100**, 252 402 (2012).
- [8] Yu.P. Bliokh, V. Freilikher, S. Savel'ev. Phys. Rev. B **79**, 075 123 (2009).
- [9] П.В. Ратников. Письма в ЖЭТФ **90**, 515 (2009).
- [10] L. Dell'Anna, A. Martino. Phys. Rev. B **83**, 155 449 (2011).
- [11] R.M. Mazir, P. Vasilopoulos, A. Matulis, F.M. Peeters. Phys. Rev. B **77**, 235 443 (2008).
- [12] Yu-Xian Li. J. Phys. Cond. Matter **22**, 015 302 (2010).
- [13] J. Sun, H.A. Fertig, L. Brey. Phys. Rev. Lett. **105**, 156 801 (2010).
- [14] Z.P. Niu, F.X. Li, B.G. Wang, L. Sheng, D.Y. Xing. Eur. Phys. J. B **66**, 245 (2008).
- [15] E. Faizabadi, M. Esmacilzadeh, F. Sattari. Eur. Phys. J. B **85** (2012).
- [16] M.Y. Han, B. Ozyilmaz, Y. Zhang, F. Kim. Phys. Rev. Lett. **98**, 206 805 (2007).
- [17] G. Giovanetti, P.A. Khomyakov, G. Brocks, P. Kelly, J. van der Brink. Phys. Rev. B **76**, 073 103 (2007).
- [18] S.Y. Zhou, G. Gweon, A.V. Fedorov, F. Guinea, A.H. Castro Neto, A. Lanzara, P. First, W. de Heer, D.-H. Lee. Natur. Mater. **6**, 770 (2007).
- [19] R. Balog, B. Jorgensen, L. Nilsson, M. Anderson, E. Rienks, M. Bianchi. Natur. Mater. **9**, 315 (2010).
- [20] S. Casolo, R. Martinazzo, G.F. Tantardini. J. Phys. Chem. C **115**(8), 3250 (2011).
- [21] А.Н. Король, В.Н. Исай. ФТТ **55**, 2468 (2013).