

铁磁条对石墨烯中谷依赖电子输运性质的影响

卢建夺, 潘晓倩, 张珂雨, 潘和庆, 王俊懿, 任天翔

(武汉科技大学应用物理系, 武汉 430065)

摘要: 本文建立了铁磁条和硬势垒共同调制下的石墨烯纳米结构模型, 计算了铁磁条产生的磁场的大小和铁磁条的宽度对石墨烯中谷依赖的电子输运性质的影响, 重点研究了该石墨烯纳米结构中电子的电导和谷极化特征。数值计算结果表明, 该纳米结构中可实现显著的谷极化效应, 且磁场的大小和铁磁条的宽度均会对其中的电子电导和谷极化产生较大的影响。因此, 我们可以通过控制铁磁条的宽度和其产生的磁场的大小来获得实际需要的谷极化强度。这项研究有助于理解和设计谷电子学设备。

关键词: 铁磁条; 石墨烯; 电子输运; 谷极化

中图分类号: O469 **文献标识码:** A **DOI:** 10.19907/j.0490-6756.2022.064001

Effect of the ferromagnetic stripe on the valley-dependent electron transport properties in graphene

LU Jian-Duo, PAN Xiao-Qian, ZHANG Ke-Yu,

PAN He-Qing, WANG Jun-Yi, REN Tian-Xiang

(Department of Applied Physics, Wuhan University of Science and Technology, Wuhan 430065, China)

Abstract: The graphene nanostructure model under the joint modulation of ferromagnetic stripes and hard barriers is established. The effects of the magnitude of magnetic field generated by ferromagnetic stripes and the width of ferromagnetic stripes on the valley-dependent electron transport properties in graphene are calculated, and the electron conductance and the valley polarization in the graphene nanostructure are studied. The numerical results show that the significant valley polarization effect can be realized in such a nanostructure, and the strength of the magnetic field and the width of the ferromagnetic stripes will have a great influence on the electron conductance and valley polarization. Therefore, the valley polarization intensity actually required can be obtained by controlling the width of the ferromagnetic stripes and the strength of the magnetic field generated by it. This study is very helpful for understanding and designing valleytronic devices.

Keywords: Ferromagnetic stripe; Graphene; Electronic transport; Valley polarization

1 引言

由于石墨烯存在巨大的自旋电子应用^[1-5], 人们在过去的近二十年中对其进行了大量的研究, 并

获得了许多有趣的结果^[6-12]。其中, Zhang 等^[6]研究了一维周期电垒调制下基于石墨烯超晶格的电子滤波器。Lu^[8]研究了电子在磁场调制下石墨烯中的共振输运, 发现巨大的磁阻可以通过调制磁场

收稿日期: 2022-04-30

基金项目: 国家自然科学基金(11304236); 武汉科技大学大学生创新创业训练计划(21ZA062)

作者简介: 卢建夺(1980—), 男, 山东菏泽人, 博士, 教授, 主要研究方向为自旋电子学和谷电子学. E-mail: lujianduo@wust.edu.cn

来实现和控制;分析了在真实磁场和肖特基金属条(SM)的调制下单层石墨烯中的电子输运,发现SM对电子的输运性质有重要影响.

另一方面,在铁磁金属条(FM)的调制下,石墨烯中的电子自旋输运也引起了人们极大的兴趣^[13,14].在这种结构中,电子自旋依赖的传输特性可以通过局部应变^[15,16]、栅极电压^[17]和(或)磁场来调控.其中,Song等^[13]提出并证明了电压不仅可以有效地控制自旋滤波器,而且可以有效地控制自旋阀,并获得较大的自旋电流.Zhai等^[15]研究了应变调制下石墨烯中的自旋相关的电子输运,并可以有效地控制电子的自旋极化.接下来,Wu等^[16]在FM调制下石墨烯中获得了100%的自旋极化,这一发现可以有效地促进基于石墨烯的自旋电子器件的发展.

因为石墨烯本身不能抑制自旋依赖的Klein隧穿效应^[18],导致FM调制下石墨烯中的自旋极化效率有限,因此人们开始转向于谷电子学,研究电子在石墨烯^[19-21]或硅^[22,23]中的谷依赖传输,并且实现了完美的谷极化.特别是Zhai等^[19]提出了两种谷滤波器,可以很容易地被应变和磁场控制.后来,Lu^[20]在石墨烯中获得了相当大的谷极化,它可以很容易地被周期、应变和电压控制.此外,在硅超晶格结构中,谷极化可明显增强^[24].在这些工作的激励下,我们研究FM对石墨烯中电子谷依赖的影响,分析FM的宽度和磁场大小对电子电导和谷极化的影响,促进基于石墨烯的谷电子器件的发展.

2 理论方法与公式

本文将从理论上研究FM和硬势垒共同调制下石墨烯纳米结构,如图1a所示.该结构在实验上可以通过在石墨烯上面沉积一个FM来实现,其中FM的磁化方向沿x轴正方向.K和K'谷附近电子的总有效矢量势场的理论模型分别如图1b和1c所示.图1b中,符号a,b和c分别表示FM的宽度、FM与硬势垒的距离和硬势垒的宽度.当FM和石墨烯之间的距离非常小时,铁磁条产生的磁场可以近似为狄拉克δ函数并有如下形式^[25,26]: $B=B_z(x)z$,而且 $B_z(x)=B[\delta(x)-\delta(x-a)]$,符号B是FM产生的磁场的大小.沿着x轴方向施加在结构上的张力可以诱导局部应变,并且变形可以用规范向量势 A_S 描述,且 $A_S=\delta t\theta[x-(a+b)]\theta[(a+b+c)-x]y$,其中 $\theta(x)$ 是阶跃函数, δt

为应变引起的最近邻跳跃振幅t的变化^[27].

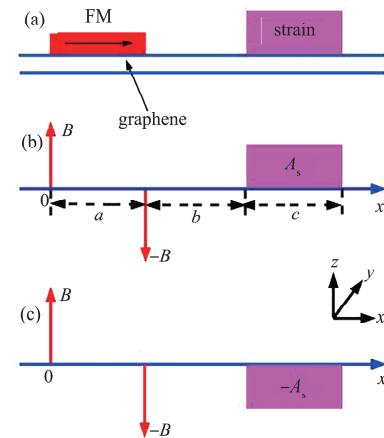


图 1 (a) FM 和硬势垒调制下石墨烯纳米结构图;(b) 对应 K 谷电子有效矢量势场理论模型;(c) 对应 K' 谷电子有效矢量势场理论模型

Fig. 1 (a) Graphene nanostructure modulated by FM and strained barrier; (b) the theoretical model of K valley electron effective vector potential field; (c) the theoretical model of K' valley electron effective vector potential field

考虑到单个粒子,低能量的电子运动可以用以下狄拉克方程来描述

$$[V_F \sigma(P + e A_M + \eta e A_S)] \Psi = E \Psi \quad (1)$$

式中, V_F 为费米速度, $\sigma=(\sigma_x, \sigma_y)$ 为泡利矩阵; $P=(p_x, p_y)$ 为动量算符; e 为电子电荷;符号 $\eta=\pm 1$ 分别表示K和K'谷; A_M 为朗道规范下的磁矢势并有如下形式:

$$A_M = \begin{cases} B, & 0 < x < a \\ 0, & x < 0 \text{ 或者 } x > a \end{cases} \quad (2)$$

为计算方便,所有的物理量用如下的无量纲形式表示:

$$\begin{aligned} E \rightarrow E_0 E, B(x) \rightarrow B_0 B(x), r \rightarrow l_{B_0} r, k \rightarrow \frac{k}{l_{B_0}}, \\ A_{M(S)}(x) \rightarrow B_0 l_{B_0} A_{M(S)}(x) \end{aligned} \quad (3)$$

式中, $l_{B_0} = \sqrt{\hbar/e B_0}$ 为磁场长度; $E_0 = \hbar V_F / l_{B_0}$ 为能量尺度; $B_0 = 0.1$ T; $l_{B_0} = 81.1$ nm; $E_0 = 7.0$ meV.由于系统在y方向上具有转移不变性,在第j个区域,电子的波函数可有以下形式:

$$\Psi(x, y) = \left\{ \begin{array}{l} \tau_j e^{iq_j x} + \gamma_j e^{-iq_j x} \\ \frac{q_j + i k_j}{E} \tau_j e^{iq_j x} + \frac{-q_j + i k_j}{E} \gamma_j e^{-iq_j x} \end{array} \right\} e^{-ik_y y} \quad (4)$$

式中, $k_j = k_y + A_j$, $k_j^2 + q_j^2 = E^2$,其中 k_y 是电子的横向波矢, q_j 是电子的径向波矢, $A_j = A_M + A_S$ 表示电子受到的总的势场.利用波函数的边界条件和转

移矩阵方法, 可获得电子透射几率 $T_{K,K'} = \frac{q_5}{q_1} \tau_5^2$.

因此, 电子的电导可以通过以下公式得到

$$G_{K,K'}(E) = G_0 \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} T_{K,K'}(E, \sin\varphi) \cos\varphi d\varphi \quad (5)$$

式中, $G_0 = 2 e^2 E_0 L_y / (\pi \hbar)$ 为电导单元; φ 是电子的入射角; L_y 为样品尺寸. 当获得电子的电导后, 谷极化可用如下公式计算 $P = (G_K - G_{K'}) / (G_K + G_{K'})$. 这里, $G_K, G_{K'}$ 分别表示 K 和 K' 谷电子的电导.

3 数值结果与讨论

在这一部分中, 我们将对数值计算结果进行讨论. 由于本文的主要目的是分析铁磁条对谷依赖的电子输运性质的影响, 所以在接下来的计算中固定了一些参数: 硬势垒 $A_s = 1.0$, 硬势垒的宽度 $c = 1.5$, 以及 FM 与硬势垒的距离 $b = 1.5$. 首先, 我们分析对应不同大小的磁场, 电子电导和相应的谷极化随电子费米能量的变化关系, 如图 2 所示. 这

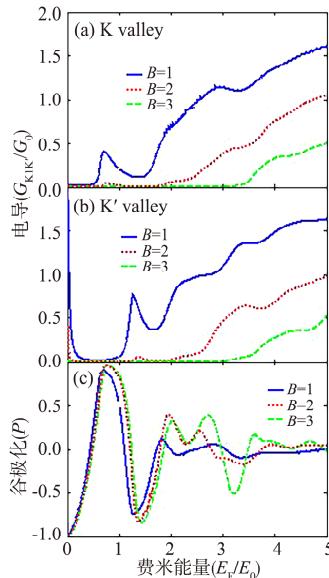


图 2 对于不同大小的磁场, 电子电导和相应的谷极化随电子费米能量的变化关系图

Fig. 2 For different strengths of the magnetic field, the electron conductance and corresponding valley polarization as a function of the electron Fermi energy

这里我们取磁场大小 $B = 1.0$. 从图 3a 和 3b 所示的电导曲线中不难发现, 当 FM 宽度增加时, 无论是 K 谷的电子电导还是 K' 谷的电子电导都明显变小, 特别是在低费米能区域. 这是因为当 FM 的宽度变大时, 入射电子波和反射电子波的干涉加强, 导致电子的透射能力减弱, 所以电子电导变小.

里, FM 的宽度取为 $a = 1.5$. 从图 2a 和 2b 所示的电导曲线中, 我们发现了一个有趣的现象, 即 K 谷和 K' 谷的电子电导出现了明显的差异, 也就是在此石墨烯纳米结构中, 出现了明显的谷分裂现象, 而且随着磁场的增大, 差异越来越明显. 此外, 当磁场变大时, 无论是 K 谷的电子电导还是 K' 谷的电子电导都明显变小, 这说明磁场对电子电导有明显的抑制作用. 图 2c 给出了相应的谷极化, 我们发现随着磁场的增加, 谷极化效应也越来越明显, 即谷极化逐渐变大. 因此, FM 产生的磁场虽然抑制了电子电导, 但增加了谷极化. 从图中我们还发现, 随着费米能量的增加, 电导逐渐增加, 但是谷极化现象逐渐变弱, 直到消失. 所以, 无论是磁场还是费米能量都可以很好地控制谷极化, 这一结论有助于谷电子器件的研究.

接下来, 我们分析 FM 的宽度对电子电导和相应谷极化的影响, 如图 3 所示.

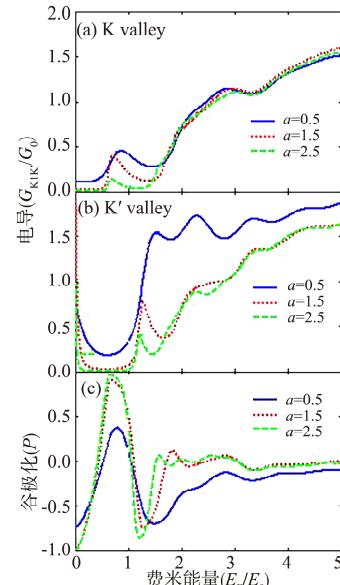


图 3 对于不同 FM 的宽度, 电子电导和相应的谷极化随电子费米能量的变化关系图

Fig. 3 For different widths of the FM, the electron conductance and corresponding valley polarization as a function of the electron Fermi energy

我们还发现 K 谷的电子电导明显不同于 K' 谷的电子电导, 而且随着 a 的变大, 差异越来越明显. 这一现象也反映在电子的谷极化曲线中, 如图 3c 所示. 随着 FM 宽度的增加, 电子的谷极化越来越大, 特别是在低费米能区域, 极化率接近 100%. 当费米能增加的时候, 电子的谷极化快速减小. 另

外,当 a 较小即纳米结构的尺寸较小时,量子现象比较明显,电导和谷极化对结构尺寸的依赖性比较强,也就是我们从图中看到的 FM 的宽度对电导和谷极化峰的位置影响较大。反之,当 a 逐渐增大时,量子现象逐渐变弱,尺寸效应变弱,所以 $a=1.5$ 和 2.5 时电导和谷极化峰的位置差别不大。因此我们可以通过调节 FM 的宽度或者电子费米能量来控制电子的谷极化,进而获得实际所需的谷极化强度,满足谷电子器件的设计需要。

4 结 论

本文研究了 FM 和硬势垒共同调制的石墨烯中电子的谷依赖的输运特性;重点分析了 FM 的宽度和 FM 产生的磁场大小对电子的电导和相应谷极化的影响;发现无论是 FM 的宽度还是其产生的磁场大小都对电子的谷极化有明显作用;此外,电子的费米能量对谷极化也起到非常重要的作用。所以,我们可以通过控制 FM 的宽度、FM 产生的磁场大小以及电子费米能量对电子电导和相应的谷极化进行调制,进而促进谷电子器件的设计。

参 考 文 献:

- [1] Wang Z F, Jin S, Liu F. Spatially separated spin carriers in spin-semiconducting graphene nanoribbons [J]. Phys Rev Lett, 2013, 111: 096803.
- [2] Pallecchi E, Lafont F, Cavaliere V, et al. High electron mobility in epitaxial graphene on 4H-SiC (0001) via post-growth annealing under hydrogen [J]. Sci Rep, 2014, 4: 4558.
- [3] Roy T, Liu L, de la Barrera S, et al. Tunneling characteristics in chemical vapor deposited graphene-hexagonal boron nitride-graphene junctions [J]. Appl Phys Lett, 2014, 104: 123506.
- [4] 徐为成. 自旋为 1 的系统的量子非经典性度量 [J]. 四川大学学报: 自然科学版, 2022, 59: 014003.
- [5] 王婧, 石瑞英, 朱国栋. 高响应率石墨烯-CsPbBr₃量子点光电探测器 [J]. 四川大学学报: 自然科学版, 2021, 58: 025001.
- [6] Zhang H Y, Gao Y, Zhang Y P, et al. A tunable electron wave filter based on graphene superlattices with periodic potential patterns [J]. Appl Phys Lett, 2011, 99: 072108.
- [7] Lu J D, Xu B, Li Y B, et al. Transport properties in a graphene-based magnetic nanostructure modulated by a Schottky metal stripe [J]. Mat Sci Semicon Proc, 2014, 22: 59.
- [8] Lu W T. Resonant tunneling and magnetoresistance effect in magnetically modulated graphene [J]. Appl Phys Lett, 2014, 105: 012103.
- [9] Lu J D, Li Y B, Liu H Y, et al. Transport properties in a monolayer graphene modulated by the realistic magnetic field and the Schottky metal stripe [J]. Physica E, 2016, 83: 345.
- [10] Barbier M, Peeters F M, Vasilopoulos P, et al. Dirac and Klein-Gordon particles in one-dimensional periodic potentials [J]. Phys Rev B, 2008, 77: 115446.
- [11] Zhang Y, Tan Y W, Stormer H L, et al. Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene [J]. Nature, 2005, 438: 201.
- [12] Novoselov K S, Mccann E, Morozov S V, et al. Unconventional quantum Hall effect and Berry's phase of 2p in bilayer graphene [J]. Nature Phys, 2006, 2: 177.
- [13] Song Y, Dai G. Spin filter and spin valve in ferromagnetic graphene [J]. Appl Phys Lett, 2015, 106: 223104.
- [14] Wu Q P, Liu Z F, Chen A X, et al. Pure valley and spin polarization current in ferromagnetic graphene junction [J]. J Appl Phys, 2017, 121: 053906.
- [15] Zhai F, Yang L. Strain-tunable spin transport in ferromagnetic graphene junctions [J]. Appl Phys Lett, 2011, 98: 062101.
- [16] Wu Q P, Liu Z F, Chen A X, et al. Generation of full polarization in ferromagnetic graphene with spin energy gap [J]. Appl Phys Lett, 2014, 105: 252402.
- [17] Yokoyama T. Controllable spin transport in ferromagnetic graphene junctions [J]. Phys Rev B, 2008, 77: 073413.
- [18] Zhang Y T, Zhai F. Strain enhanced spin polarization in graphene with Rashba spin-orbit coupling and exchange effects [J]. J Appl Phys, 2012, 111: 033705.
- [19] Zhai F, Zhao X F, Chang K, et al. Magnetic barrier on strained graphene: A possible valley filter [J]. Phys Rev B, 2010, 82: 115442.
- [20] Lu W T. Valley-dependent band structure and valley polarization in periodically modulated graphene [J]. Phys Rev B, 2016, 94: 085403.
- [21] Zhang Y, Guo B, Zhai F, et al. Valley-polarized edge pseudomagnetoplasmons in graphene: a two-component hydrodynamic model [J]. Phys Rev B,

- 2018, 97: 115455.
- [22] Li W, Lu W T, Li Y F, *et al.* Defect enhanced spin and valley polarizations in silicene superlattices [J]. *Physica E*, 2017, 88: 284.
- [23] Lu W T, Li Y F, Tian H Y. Spin and valley-dependent electronic structure in silicene under periodic potentials [J]. *Nanoscale Res Lett*, 2018, 13: 84.
- [24] Niu Z P, Zhang Y M, Dong S. Enhanced valley-solved thermoelectric transport in a magnetic silicene superlattice [J]. *New J Phys*, 2015, 17: 073026.
- [25] Vancura T, Ihn T, Broderick S, *et al.* Electron transport in a two-dimensional electron gas with magnetic barriers [J]. *Phys Rev B*, 2000, 62: 5074.
- [26] Lu J D. The magnetoresistance effect in a nanostructure with the periodic magnetic barriers [J]. *Appl Surf Sci*, 2008, 254: 3939.
- [27] Pereira V M, Castro Neto A H, Peres N M R. Tight-binding approach to uniaxial strain in graphene [J]. *Phys Rev B*, 2009, 80: 045401.

引用本文格式:

中 文: 卢建夺, 潘晓倩, 张珂雨, 等. 铁磁条对石墨烯中谷依赖电子输运性质的影响[J]. 四川大学学报: 自然科学版, 2022, 59: 064001.

英 文: Lu J D, Pan X Q, Zhang K Y, *et al.* Effect of the ferromagnetic stripe on the valley-dependent electron transport properties in graphene [J]. *J Sichuan Univ: Nat Sci Ed*, 2022, 59: 064001.