Письма в ЖЭТФ, том 93, вып. 7, с. 414 – 418 © 2011 г. 10 апреля

Эффект спин-поляризованного квантового насоса в графеновых нанолентах с границей "zigzag"

Е. С. Гричук[*1)], *Э. А. Маныкин*[*+]

[*] *Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", 115409 Москва, Россия*

[+] *Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", 123182 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 10 февраля 2011 г.

Численно проанализирован эффект адиабатического спин-поляризованного квантового насоса в графеновых нанолентах с границей "zigzag". Поскольку основное состояние такой ленты антиферромагнитно (электроны с противоположными спинами локализованы на противоположных границах ленты), возможна генерация спиновых токов в такой системе с помощью эффекта квантового насоса при нарушении симметрии между состояниями с противоположными спинами. Предлагается два способа такого нарушения: дефекты на границе ленты и приложение поперечного электрического поля. Показано, что в обоих случаях возможна генерация не только электронного и спинового токов, но также и чисто спинового тока.

Экспериментальное открытие графена в 2004 году [1] привело к большому всплеску активности в области теоретического и экспериментального исследований низкоразмерных систем. Огромный интерес к графену обусловлен прежде всего его необычными электронными свойствами. Как известно, низкоэнергетические электронные возбуждения в графене, имеющие линейный закон дисперсии, описываются уравнением, по своей форме совпадающим с уравнением Дирака для безмассовой частицы. Это приводит к ряду особенностей в электронных свойствах графена ("парадокс" Клейна [2], полуцелый квантовый эффект Холла [3], электронная линза Веселаго [4] и др. [5–7]). Высокая подвижность носителей, возможность создания ненулевой запрещенной зоны (например, за счет квантоворазмерных эффектов) и управления транспортом электронов внешним электрическим полем, а также ряд других свойств позволяют рассматривать графен и его производные в качестве перспективного материала для изготовления полевых транзисторов и других компонент наноэлектроники.

Хотя сам графен не обладает магнитным порядком, некоторые его производные (квантовые точки, наноленты и т.п.) проявляют магнетизм [8]. Учитывая слабость сверхтонкого взаимодействия (только около 1% атомов углерода являются изотопами C_{13} с отличным от нуля ядерным спином), а также слабость спин-орбитального взаимодействия, предсказываются большие значения времен и длин спиновой релаксации в графене. Экспериментально наблюдались длины спиновой релаксации до нескольких микрометров при комнатной температуре [9, 10]. Таким образом, ожидается, что графеновые устройства могут найти многочисленные применения в спинтронике [11–15].

Изучение нестационарных явлений в мезоскопических системах представляет существенный интерес. Один из примеров таких явлений – 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. Если параметры меняются адиабатически – с частотой, много меньшей обратного характерного времени прохождения электрона через устройство, – проходящий через систему заряд может быть выражен через стационарную матрицу рассеяния системы [16, 17].

Эффект адиабатического квантового насоса в графене изучался в дираковском приближении в работах [18, 19]. В графеновых нанолентах эффект был рассмотрен авторами ранее [20] без учета магнитной структуры. Наличие же такой структуры у нанолент с границей типа "zigzag" (ZGNR, zigzag graphene nanoribbon) открывает возможность генерирования электронных и спиновых токов.

Рассматриваемое устройство схематически показано на рис. 1a. Периодически изменяющимися внешними параметрами являются потенциалы на затворах, которые моделируются добавлением энергий $U_1(t)$ и $U_2(t)$ к соответствующим диагональным матричным элементам гамильтониана. Ширина затворов – N_2, расстояние до области с дефектом (или приложенным поперечными полем) – N_1, ее ширина – N_0 элементарных ячеек.

Для описания наноленты мы используем модель сильной связи. Одноэлектронный гамильтони-

[1)] e-mail: evgeny.sg@gmail.com

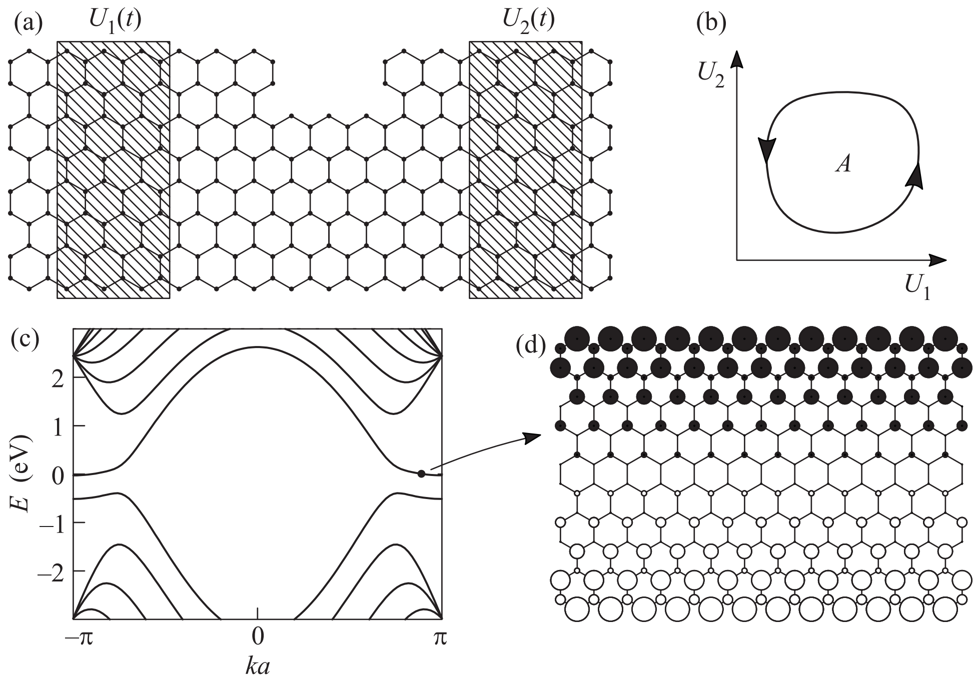

Рис. 1. (a) Схематическое изображение устройства; (b) Контур управляющих потенциалов; (c) Зонная структура наноленты 10-ZGNR в модели (1); (d) Распределение амплитуды волновой функции состояния с $E = 0$ эВ: черный (белый) кружок – спин вверх (вниз), радиус пропорционален логарифму модуля амплитуды волновой функции

ан в приближении среднего поля имеет следующий вид [21]:

$$H = -\sum_{ij,s} a^\dagger_{is} t_{ij} a_{js} + \sum_{k=1}^{2} U_k \sum_{i\in U_k, s} a^\dagger_{is} a_{is} + \\ + \sum_{i,ss'} \frac{m_i}{2} a^\dagger_{is} \sigma^z_{ss'} a_{is'} - 3t', \quad (1)$$

где суммирование в первом слагаемом проводится по ближайшим соседям (i,j) с $t_{ij} = t$ и по вторым ближайшим соседям (i,j) с $t_{ij} = t'$.

Локальная намагниченность m_i в (1) должна определяться с помощью некоторой самосогласованной процедуры. Однако значительно более простая феноменологическая модель, предполагающая постоянство m_i на каждой из подрешеток, приводит к зонной структуре, качественно согласующейся с вычислениями с помощью модели Хаббарда в приближении среднего поля или с помощью метода функционала плотности [22]. Имея в виду это обстоятельство, положим $m_i = m_0$ на одной подрешетке и $m_i = -m_0$ на другой. В расчетах использованы следующие численные значения: $t = 2.7$ эВ, $t' = 0.1t$, $m_0 = 0.18t$.

Профиль электростатического потенциала, создаваемого затворами U_1 и U_2 и поперечным полем E_T (см. ниже), также должен определяться самосогласованным образом (например, с помощью решения системы уравнений Шредингера и Пуассона). В настоящей работе мы для простоты ограничиваемся прямоугольными профилями, предполагая, что основные выводы не претерпят качественных изменений при более сложном расчете. Это частично подтверждается тем, что использование сглаженных (но не самосогласованных) профилей U_1 и U_2 не приводит к качественным изменениям в результатах.

Считая, что направление спина электрона при прохождении его через устройство сохраняется, оба спиновых канала можно рассматривать независимо. В адиабатическом приближении число электронов $N_{s\alpha}$ со спином s, втекающих в контакт α (L – левый, R – правый) за один цикл изменения управляющих потенциалов U_i с периодом T, дается формулой Броуэра [16]

$$N_{s\alpha} = -\int_0^T dt \left[\frac{dN_{s\alpha}}{dU_1}\frac{dU_1}{dt} + \frac{dN_{s\alpha}}{dU_2}\frac{dU_2}{dt}\right], \ \alpha = L, R. \quad (2)$$

Коэффициенты эмиссии (emissivity) $dN_{s\alpha}/dU_j$ могут быть выражены через матрицу рассеяния $S_{ik,s}$ устройства:

$$\frac{dN_{s\alpha}}{dU_j} = \frac{1}{2\pi}\sum_k \sum_{i\in\alpha} \mathrm{Im}\,\frac{\partial S_{ik,s}}{\partial U_j} S^*_{ik,s}, \quad (3)$$

где суммирование по i производится по всем открытым каналам в контакте α. Используя теорему Стокса, средний ток $I_{s\alpha} = eN_{s\alpha}/T$ (e – заряд электрона),

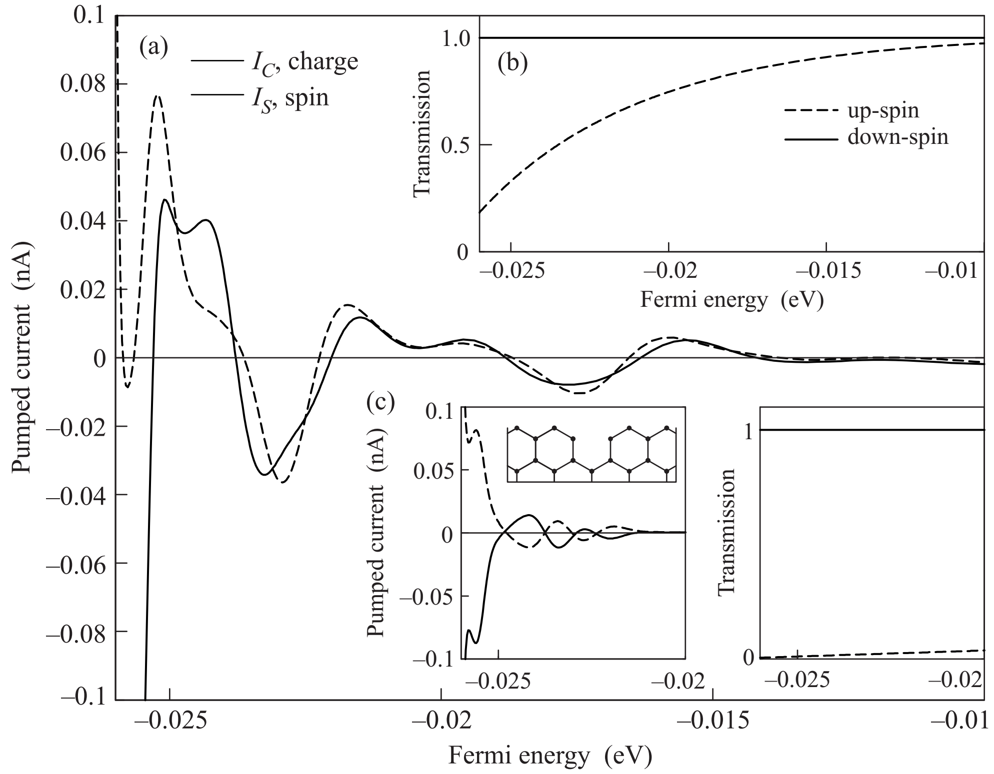

Рис. 2. Квантовый насос на основе наноленты 10-ZGNR с дефектом на границе ($N_1 = 50$, $N_2 = 40$). (a) Зависимость электронного I_C (сплошная линия) и спинового I_S (пунктирная линия) токов от энергии Ферми. (b) Зависимость коэффициента прохождения T от энергии Ферми для спинов, направленных вверх (пунктирная линия) и вниз (сплошная линия). (c) Те же зависимости для дефекта другого типа

протекающий через систему, можно представить в виде

$$I_{s\alpha} = -\frac{e\omega}{2\pi^2}\int_A dU_1 dU_2\, \Pi_{s\alpha}(U_1,U_2),$$
$$\Pi_{s\alpha}(U_1,U_2) = \sum_k \sum_{i\in\alpha} \mathrm{Im}\,\frac{\partial S^*_{ik,s}}{\partial U_1}\frac{\partial S_{ik,s}}{\partial U_2}. \qquad (4)$$

Ввиду сохранения заряда $I_{sL} = -I_{sR}$, поэтому в дальнейшем будем рассматривать ток, втекающий, например, в правый контакт: $I_s \equiv I_{sR}$. Тогда полный электронный, I_C, и спиновый, I_S, токи равны, соответственно, $I_C = I_+ + I_-$ и $I_S = I_+ - I_-$.

Матрицу рассеяния S_{ik} можно вычислить, используя стандартный метод функций Грина [23]. Функция Грина устройства определяется следующим образом:

$$G^r(E) = \left[E - H_0 - \Sigma_L - \Sigma_R\right]^{-1}, \qquad (5)$$

где H_0 – гамильтониан устройства, а собственно-энергетические функции Σ_L и Σ_R учитывают полубесконечные контакты. Зная функцию Грина G^r, матрицу рассеяния можно найти из соотношений Фишера–Ли [24]. Поскольку для ее вычисления не требуется знание всех элементов G^r, для экономии вычислительных ресурсов вместо прямого вычисления обратной матрицы можно использовать рекурсивные алгоритмы [23].

Коэффициенты эмиссии dN_α/dU можно также найти и непосредственно из функции Грина, не прибегая к дифференцированию S_{ik} [25]:

$$\frac{dN_\alpha}{dU_i} = -\frac{1}{2\pi}\mathrm{Tr}\left[G^r\Gamma_\alpha G^a \Delta_i\right], \qquad (6)$$

где $G^a = G^{r\dagger}$, $\Gamma_\alpha = i(\Sigma_\alpha - \Sigma_\alpha^\dagger)$, а Δ_i – матрица профиля потенциала U_i с отличными от нуля элементами $\Delta_{i_{jj}} = 1$, если узел j находится под затвором U_i.

Коэффициент прохождения $T(E)$ можно выразить через матрицу рассеяния или через функцию Грина:

$$T(E) = \sum_{i\in R, k\in L} |S_{ik}|^2 = \mathrm{Tr}\left[G^r\Gamma_L G^a \Gamma_R\right]. \qquad (7)$$

Зонная структура идеальной наноленты 10-ZGNR (10 зигзагообразных линий атомов C на ширине ленты) показана на рис. 1c. Состояния вблизи $E = 0$ эВ являются краевыми (edge state) и локализованы на границах наноленты, причем состояния с противоположными проекциями спинов локализованы на противоположных границах (см. рис. 1d). Ток также оказывается локализованным на границе ленты, поэ-

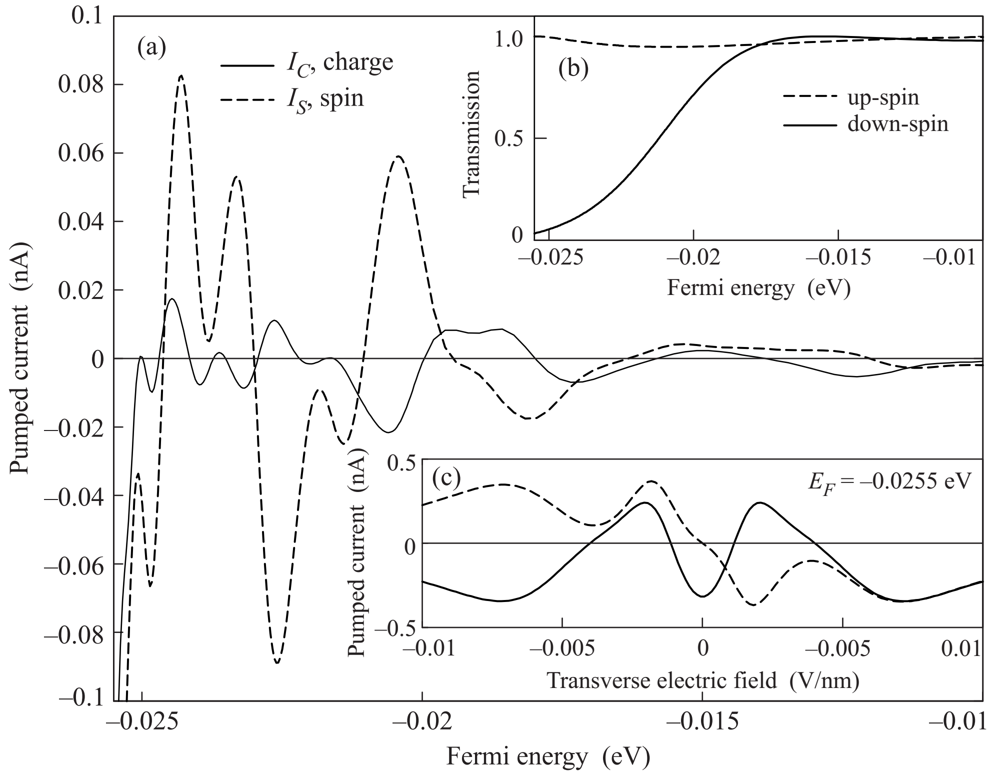

Рис. 3. Квантовый насос на основе наноленты 10-ZGNR с приложенным поперечным электрическим полем ($N_0 = 20$, $N_1 = 50$, $N_2 = 100$, $E_T = 5\,$мВ/нм). (a) Зависимость электронного I_C (сплошная линия) и спинового I_S (пунктирная линия) токов от энергии Ферми. (b) Зависимость коэффициента прохождения T от энергии Ферми для спинов, направленных вверх (пунктирная линия) и вниз (сплошная линия). (c) Зависимость электронного и спинового токов от напряженности поперечного электрического поля

тому, если энергия Ферми в контактах попадает в область краевых состояний, то дефект на одной из границ наноленты будет существенным образом влиять на коэффициент прохождения для электронов со спином лишь в одном направлении. Справедливость этого предположения подтверждается численными расчетами [22]. Таким образом, можно предположить, что эффект квантового наноса в наноленте с дефектами на границах позволит генерировать не только электронные, но и спиновые токи, причем за счет изменения энергии Ферми E_F в контактах можно добиться обращения электронного тока в нуль при конечном спиновом токе.

Будем считать, что управляющие потенциалы меняются во времени по гармоническому закону, $U_1 = U_{10}+\delta U_1 \cos(\omega t)$, $U_2 = U_{20}+\delta U_2 \cos(\omega t-\phi)$, с частотой ω и отличным от нуля сдвигом фаз ϕ. В расчетах использованы следующие параметры: $U_{10} = U_{20} = 0\,$эВ, $\delta U_1 = \delta U_2 = 1\,$мэВ, $\omega = 2\pi \cdot 5\,$ГГц и $\phi = \pi/2$.

На рис. 2a показана зависимость электронного, I_C, и спинового, I_S, токов для наноленты 10-ZGNR от энергии Ферми E_F для дефекта, показанного на рис. 1a. Видно, что при определенных значениях E_F устройство генерирует чисто спиновый ток. Значения генерируемых токов велики вблизи дна зоны, где в плотности состояний возникает особенность ван Хова, и уменьшаются по мере роста E_F. Коэффициент прохождения как функция E_F для различных направлений спина показан на рис. 2b. Легко заметить, что для электронов со спинами, направленными вверх, дефект существенно уменьшает коэффициент прохождения, который стремится к нулю при уменьшении E_F ввиду большей локализации состояния на границе ленты. Электроны с противоположными спинами дефект не “чувствуют”.

Тип дефекта оказывает существенное влияние на коэффициент прохождения и на амплитуду генерируемых токов, и в общем случае дефект приводит к резкому их уменьшению. Некоторые дефекты, однако, создают квазисвязанные состояния вблизи интересующих нас значений E_F, значительно увеличивая значения коэффициента прохождения и амплитуды токов за счет резонансного туннелирования через эти состояния (как это имеет место на рис. 2a). На рис. 2c показаны те же зависимости для дефекта другого типа. В этом случае $I_+ \approx 0$, так что $I_C \approx -I_S$.

Асимметрию между спиновыми каналами можно также создать, приложив к участку наноленты поперечное электрическое поле. Влияние этого поля учитывается добавлением к гамильтониану (1) слагаемого

$$\Delta H_E = \sum_{i,s} E_T \left(y_i - \frac{W}{2} \right) a_{is}^\dagger a_{is}, \qquad (8)$$

где W – ширина ленты, а суммирование проводится по узлам i с поперечными координатами y_i на участке наноленты, к которому приложено поперечное поле с напряженностью E_T.

Поскольку краевые состояния локализованы вблизи границ ленты, электроны со спином $s = \pm 1$ будут "чувствовать" дополнительный потенциал $sE_T W/2$ на участке ленты, к которому приложено поле E_T. На рис. 3a показана зависимость электронного и спинового токов от энергии Ферми в фиксированном поле E_T. Видно, что, как и в случае с дефектом на границе, возможна генерация спинового и чисто спинового токов. На рис. 3c показана зависимость токов от напряженности поля E_T при фиксированной энергии Ферми. Как и следовало ожидать, спиновый ток обращается в нуль в нулевом поле, поскольку в этом случае восстанавливается симметрия между противоположными направлениями спинов. Отметим также, что спиновый ток является нечетной функцией поля, а электронный – четной, так как в силу сказанного выше замена $E_T \to -E_T$ эквивалентна изменению направлений спинов на противоположные.

Таким образом, в работе в рамках простого приближения сильной связи с постоянной намагниченностью рассмотрен эффект адиабатического спин-поляризованного квантового насоса в графеновых нанолентах с границей "zigzag". Показано, что в такой системе возможна генерация спиновых токов в отсутствие внешних магнитных полей при условии нарушения симметрии между состояниями с противоположными спинами. Численно рассмотрено два способа такого нарушения: дефекты на границе ленты и внешнее поперечное электрическое поле, и показано, что в обоих случаях возможна генерация спинового и чисто спинового токов.

Рассмотренный эффект может найти применение в устройствах спинтроники на основе графена, например, в качестве одного из методов управляемой генерации спин-поляризованного тока. Хотя изготовление графеновых наноструктур с атомной точностью является весьма нетривиальной задачей, быстрый прогресс в этой области [26, 27] позволяет надеяться на возможность экспериментальной реализации подобных устройств в ближайшем будущем.

Работа выполнена при поддержке Федерального агентства по науке и инновациям (госконтракт #0 2.740.11.0433) и Российского фонда фундаментальных исследований (проект # 10-02-00399).

1. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., Science **306**, 666 (2004).
2. M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Nature **2**, 620 (2006).
3. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., Nature **438**, 197 (2005).
4. V. V. Cheianov, V. Fal'ko, and B. L. Altshuler, Science **315**, 1252 (2007).
5. T. Ando, Physica E **40**, 213 (2007).
6. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres et al., Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
7. N. M. R. Peres, Rev. Mod. Phys. **82**, 2673 (2010).
8. O. V. Yazyev, Rep. Prog. Phys. **73**, 056501 (2010).
9. N. Tombros, C. Józsa, M. Popinciuc et al., Nature **448**, 571 (2007).
10. M. Popinciuc, C. Józsa, P. J. Zomer et al., Phys. Rev. B **80**, 214427 (2009).
11. W. H. Wang, K. Pi, Y. Li et al., Phys. Rev. B **77**, 020402 (2008).
12. W. Y. Kim, K. S. Kim, Nature Nanotechnol. **3**, 408 (2008).
13. F. Muñoz-Rojas, J. Fernández-Rossier, and J. J. Palacios, Phys. Rev. Lett. **102**, 136810 (2009).
14. V. Hung Nguyen, V. Nam Do, A. Bournel et al., J. Appl. Phys. **106**, 053710 (2009).
15. A. Saffarzadeh and R. Farghadan, Appl. Phys. Lett. **98**, 023106 (2011).
16. P. W. Brouwer, Phys. Rev. B **58**, R10135 (1998).
17. M. Moskalets and M. Büttiker, Phys. Rev. B **66**, 205320 (2002).
18. E. Prada, P. San-Jose, and H. Schomerus, Phys. Rev. B **80** 245414 (2009).
19. R. Zhu and H. Chen, Appl. Phys. Lett. **95** 122111 (2009).
20. E. Grichuk and E. Manykin, EPL **92**, 47010 (2010).
21. M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada et al., J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 1920 (1996).
22. M. Wimmer, I. Adagideli, S. Berber et al., Phys. Rev. Lett. **100**, 177207 (2008).
23. D. K. Ferry, S. M. Goodnick, and J. Bird. *Transport in Nanostructures*, 2nd Ed. Cambridge University Press, Cambridge, 2009.
24. D. S. Fisher and P. A. Lee, Phys. Rev. B **23**, 6851 (1981).
25. Y. Wei and J. Wang, Phys. Rev. B **66**, 195419 (2002).
26. J. Cai, P. Ruffieux, R. Jaafar et al., Nature **466**, 470 (2010).
27. B. Song, G. F. Schneider, Q. Xu et al., arXiv:1102.0971, preprint (2011).