

栅极电势对强光场下石墨烯场效应管中 电子隧穿的影响*

刘江涛^{1)†} 黄接辉¹⁾ 肖文波^{2)‡} 胡爱荣¹⁾ 王建辉¹⁾

1) (南昌大学物理系, 南昌 330031)

2) (南昌航空大学无损检测技术教育部重点实验室, 南昌 330063)

(2012年2月8日收到; 2012年2月28日收到修改稿)

利用时域有限差分方法研究了强光场下石墨烯场效应管中栅极电势对电子隧穿的影响. 在强光场下由于光学 Stark 效应, 石墨烯场效应管的完美手征透射被抑制. 这种抑制除了可以利用光场来调控外, 也可以通过改变栅极电势的宽度、势垒高度等来调控. 研究了非方势垒中电子的隧穿. 研究发现, 当电势的倾斜较小时, 电子隧穿概率变化不大. 而当电势倾斜很大时, 电子隧穿概率急剧改变.

关键词: 石墨烯, 输运性质, 有限时域差分方法

PACS: 72.80.Vp, 42.50.Hz, 02.70.Bf

1 引言

自 2004 年 Geim 小组成功制备出单层石墨烯以来^[1], 这种由单层碳原子所构成的二维量子体系已成为当今凝聚态物理研究中的热点之一. 石墨烯中 Dirac 点附近的载流子可以用无静止质量的 Dirac 方程来描述, 从而具有极高的迁移率, 被认为是未来超高速电子器件的理想材料^[2-9].

但对于石墨烯, 其电子能带结构具有手征对称性. 正是由于这种手征对称性, 正入射的电子在势垒中的隧穿概率必定为 1, 与势垒高度无关^[2-4]. 这种效应使得单层石墨烯场效应管的制作存在一定的困难. 如要解决这个问题, 那么就需要破坏电子的手征对称性. 例如, 可以通过外加磁场、氢化饱和 p 电子、特殊边缘结构的石墨烯纳米带、或是采用双层石墨烯材料来破坏这种对称性并打开带隙^[3,10-13]. 但是, 这些方法都存在一定的缺陷, 其中外加磁场调控不利于集成化; 氢化石墨烯和双

层石墨烯材料中其电子的有效质量不再为零, 这时电子迁移率将显著下降; 而石墨烯纳米带边缘的定向刻蚀目前还极为困难. 对此, Liu 等^[14,15], Torres 小组^[16] 以及 Savel'ev 小组^[17] 分别研究了石墨烯中电子在外加光场下的输运行为, 研究发现, 在强光场中由于石墨烯中电子和光场的相互耦合, 导带中的电子和价带中的空穴混合从而破坏其手征对称性并打开一个带隙, 这时石墨烯中电子的完美透射将被抑制. 得益于超快激光的发展, 这种光控的电子场效应管的响应速度可以达到亚皮秒量级. 且由于光子能量和电子跃迁频率存在一定的失谐, 因而这个过程是一个虚过程, 没有光子的吸收. 这样, 这种光控的电子场效应管将具有极小的功耗.

但是, 在这些关于外加光场对石墨烯中电子输运行为影响的研究中, 绝大多数都着重于通过改变光场的频率、激光强度等来调控电子输运, 对外加电场电势的影响研究较少. 实际上, 在外加光场下通过调节外加电场特性, 也可以调控电子的

* 国家自然科学基金 (批准号: 10904059, 11174118, 11147200), 江西省自然科学基金 (批准号: 2009GQW0017), 航空科学基金 (批准号: 2010ZB56004), 江西省教育厅基金 (批准号: GJJ11176) 和无损检测技术教育部重点实验室开放基金 (批准号: ZD201029005) 资助的课题.

† E-mail: ljt-ljt@163.com

‡ E-mail: wbxiao@semi.ac.cn

输运. 例如, 可以通过外加电场电势的高低来改变光子能量和电子跃迁频率的失谐大小, 从而控制电子带间耦合的强度大小, 并改变电子的隧穿概率. 而电场调控较光场调控在目前的制造工艺水平下较有优势, 对此, 本文将研究栅极的势垒宽度、势垒高度、非方势垒对强光场下石墨烯中电子隧穿的影响.

2 理论模型和计算方法

我们研究了强光场照射下, 石墨烯中电子从 X 方向隧穿通过一个宽度为 D , 高度是 V_0 方势垒或是梯形势垒 (如图 1(a) 所示), Y 方向无限长. 入射电子的能量等于费米能 E_k , 照射光子偏振方向为 Y 方向, 频率为 ω , 其中 $E_b = 2V_0 - E_k > \omega$ 且 $2E_k \gg \omega$. 这时势垒外的光场对电子的影响可以完全忽略, 而势垒内可以允许的跃迁频率 E_b 和照射光子能量 $E_l = \hbar\omega$ 之间存在一定的失谐 $\Delta_0 = E_b - \hbar\omega$, 势垒内部也没有实光子吸收过程. 而且当失谐 Δ_0 很小或者很大时, 电子-空穴的库仑相互作用或是多体相互作用可以忽略. 这时忽略石墨烯中 K 和 K' 电子的散射, K 点电子的哈密顿量可以写为 [14,15]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = [\mathbf{H}_0 + V(x) \mathbf{I} + \mathbf{H}_{\text{int}}] \Psi(x, t), \quad (1)$$

其中 $\mathbf{H}_0 = -i\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla$ 是无扰动下石墨烯的狄拉克哈密顿量, $\boldsymbol{\sigma}$ 是泡利矩阵, v_F 是石墨烯的费米速度, $\Psi(x, t) = [C_A(x, t), C_B(x, t)]$ 是石墨烯的波函数, \mathbf{I} 是单位矩阵, $V(x)$ 是栅极电压, 在势垒外部 $V(x) = 0$, 而在势垒内部, 对于方势垒 $V(x) = V_0$, 而对于梯形势垒 $V(x) = V_0 + \xi(x - x_0)$, 其中 ξ 是与外加偏压有关的系数, x_0 是势垒右边缘的位置坐标, \mathbf{H}_{int} 是光子和石墨烯的相互作用哈密顿量, \mathbf{H}_{int} 可以写为 [18]

$$\begin{aligned} H_{\text{int}} &= ev_F \begin{pmatrix} 0 & A_x - iA_y \\ A_x + iA_y & 0 \end{pmatrix} \\ &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & V_{12}(t) \\ V_{21}(t) & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2)$$

其中 e 是电子电量, A_x, A_y 是光子的矢势并是时间的函数. 这样为了求解含时的狄拉克哈密顿量, 我们引入了时域有限差分方法 (FDTD) 来实时地演

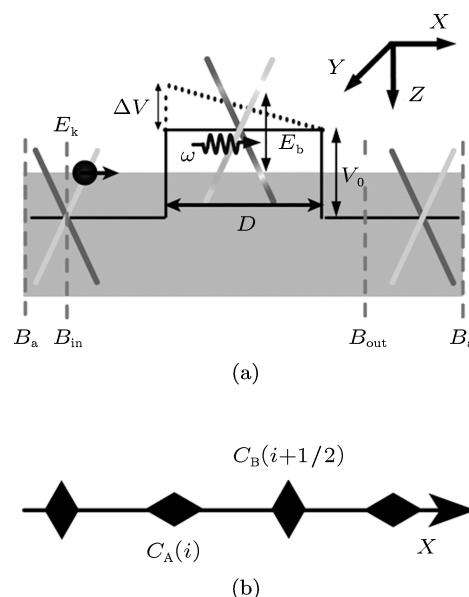


图 1 (a) 强光场照射下, 石墨烯中电子隧穿通过一个方势垒或梯形势垒的示意图; (b) 石墨烯中电子的一位 Yee 原胞

示石墨烯中电子的超快输运过程. FDTD 是一种成熟的数值计算方法, 是解决复杂电磁传播问题的有效方法之一, 可以实时的演示电磁波在复杂结构中的传播, 并被广泛的用于雷达、天线、波导、光子晶体的设计及仿真 [19-22]. 而石墨烯中电子在很多情况下表现类光的输运行为 [23-26], 正是基于这一考虑, 通过类比石墨烯的波函数 $C_A(x, t)$, $C_B(x, t)$ 和电磁波的电场分量 E 、磁场分量 H , 将 $C_A(x, t)$, $C_B(x, t)$ 在 Yee 原胞上差分 (见图 1(b)), 可以的到含时狄拉克哈密顿量 (方程 (1)) 的差分形式 [14,15]

$$\begin{aligned} & C_A(i, j, k + 1/2) \left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{V(i)}{2i} \right) \\ &= \frac{C_A(i, j, k - 1/2)}{\Delta t} \\ &+ V(i) \frac{C_A(i, j, k - 1/2)}{2i} \\ &- \left(\frac{v_F}{\Delta x} - \frac{V_{12}}{2i} \right) C_B(i + 1/2, j, k) \\ &+ \left(\frac{v_F}{\Delta x} + \frac{V_{12}}{2i} \right) C_B(i - 1/2, j, k), \quad (3a) \\ & C_B(i + 1/2, j, k + 1) \left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{V(i)}{2i} \right) \\ &= \frac{C_B(i + 1/2, j, k)}{\Delta t} \\ &+ V(i) \frac{C_B(i + 1/2, j, k)}{2i} \\ &- \left(\frac{v_F}{\Delta x} - \frac{V_{21}}{2i} \right) C_A(i + 1, j, k + 1/2) \end{aligned}$$

$$+ \left(\frac{v_F}{\Delta x} + \frac{V_{21}}{2i} \right) C_A(i, j, k + 1/2). \quad (3b)$$

通过设置相应吸收边界条件和入射边界条件就可以实时的演示石墨烯中电子的输运行为. 本文中采用 1 维的 Mur 吸收边界以及高斯波包电子入射^[27]. 这样入射电子的波函数可以写为

$$C_A = C_B = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp \left[-\frac{4\pi(t-t_0)^2}{\tau^2} \right] e^{iE_k t/\hbar}, \quad (4)$$

这样通过对比透射波包、反射波包和入射波包就可以得到石墨烯中电子的隧穿概率、反射率等.

3 计算结果及分析

我们首先计算了方势垒高度 V 对电子隧穿概率的影响. 计算参数如下: 空间步长和时间步长分布为 0.1 fs 和 0.2 nm 以确保计算精度. 入射电子能量 $E_k = 217.5$ meV, 势垒宽度 $D = 200$ nm, 光强 $I_1 = 300$ mW/ μm^2 , $V_0 = 400$ meV. 计算结果如图 2 所示, 透射率的变化情况如图中实线所示, 反射率如图中虚线所示. 当栅压高度增加时, 势垒内可以允许的跃迁频率 E_b 和照射光子能量 $E_1 = \hbar\omega$ 之间的失谐增大, 强光场所导致的带间耦合减弱、光致带隙减小, 光对石墨烯中电子的完美透射的抑制被减弱, 从而使得透射率增加. 例如, 当势垒高度从 402 meV 变化到 388 meV 时, 透射率从大约 0.035 增加到 0.8. 这正如我们前面所预期的那样, 可以通过改变栅极电压来方便的改变强光场下石墨烯场效应管的隧穿电流, 从而实现栅极电压控制. 而且这种场效应管对栅极电压极为敏感, 只要改变大约 15 meV, 隧穿电流变化将达到一个量级以上. 这种场效应管将具有极低的工作电压, 因而具有极低的功耗.

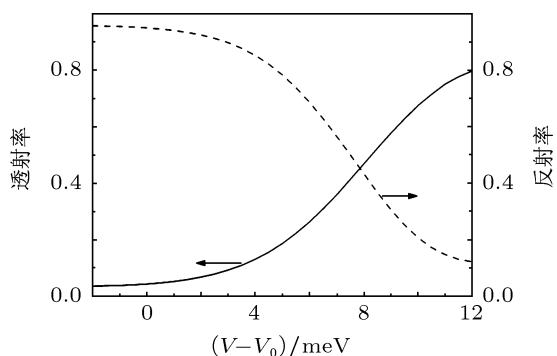


图 2 方势垒高度 V 对石墨烯电子隧穿的影响

势垒宽度对电子的隧穿概率也有较大影响. 具体的计算结果如图 3 所示. 由于外加光场的光学 Stark 效应, 石墨烯的导带和价带波函数混合, 其手征性被破坏. 这时, 石墨烯中电子的隧穿和非 Dirac 粒子的隧穿类似, 其隧穿概率不再始终为 1, 而是随着势垒宽度的增加指数衰减.

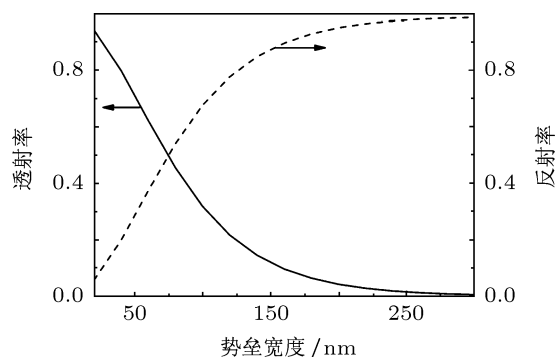


图 3 强光场下石墨烯电子隧穿随势垒宽度的变化情况

不过对于实际的场效应管, 其势能分布并不是严格的方势垒, 通常有一定的畸变. 例如, 在 x 方向上外加偏压时, 由于偏压和栅压的共同作用, 这时势垒近似为梯形 (如图 1(a) 中点线所示). 我们对石墨烯中电子在梯形势垒中的隧穿进行了研究.

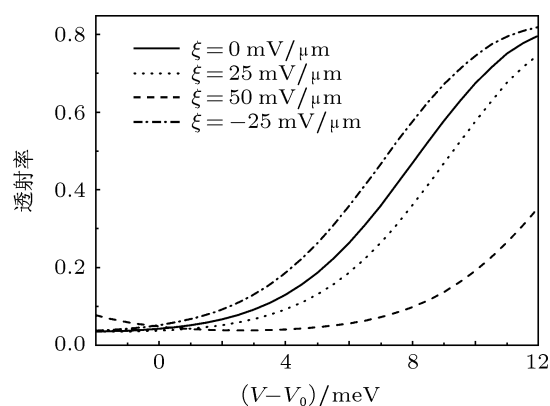


图 4 强光场下石墨烯电子在不同梯形势垒中的隧穿

对于梯形势垒, 势垒内部的电势可以表示为 $V(x) = V + \xi(x - x_0)$. 我们计算了不同梯度的梯形势垒随势垒高度的变化情况. 计算结果如图 4 所示. 首先, 和图 2 中的结果一样, 当势垒高度 V 增加时, 跃迁频率 E_b 和照射光子能量 $E_1 = \hbar\omega$ 之间的失谐 Δ_0 增大, 电子的隧穿概率增加. 而势垒的倾斜将进一步增大或者减小失谐 Δ_0 的大小, 并使得势垒内部各处的失谐不一样. 例如, 当 $\xi > 0$

时(如图4中虚线和点线所示),势垒向 $-x$ 方向倾斜,平均失谐减小,电子的隧穿概率降低;当 ξ 很大时(如图中虚线所示),这时在某些位置处,失谐为0从而出现共振情况,这时电子隧穿概率达到极小,但这次会出现实光子吸收过程,对光的吸收增加功耗增大.而当 $\xi < 0$ 时(如图4中虚点线所示),势垒向 $+x$ 方向倾斜,平均失谐增大,电子的隧穿概率增加.此外,从图4中也可以看出当电势的倾斜较小时,例如在 $V - V_0 = 7 \text{ meV}$ 处, $|\xi| < 25 \text{ mV}/\mu\text{m}$,电子隧穿概率变化不是很大($< 20\%$).而当电势倾斜很大时,例如 $|\xi| < 50 \text{ mV}/\mu\text{m}$,电子隧穿概率急剧改变($\sim 80\%$).

4 结论

利用FDTD方法研究了强光场下石墨烯场效应管中的栅极电势调控.在强光场下由于光学stark效应,石墨烯的导带和价带出现波函数混合并打开一个带隙,石墨烯场效应管的完美手征透射被抑制.这种抑制除了强烈依赖于光强的大小和光的频率外,也可以通过改变栅极电势的宽度、势垒高度等来调控.此外还研究了非方势垒电势中电子的隧穿.研究发现,当电势的倾斜较小时,电子隧穿概率变化不是很大.而当电势倾斜很大时,电子隧穿概率急剧改变.

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [2] Castro Neto A H, Guinea F, Peres N M R, Novoselov K, Geim A K 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 109
- [3] Sarma S D, Shaffique A, Hwang E H, Enrico R 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 407
- [4] Katsnelson M I, Novoselov K S, Geim A K 2006 *Nature Physics* **2** 620
- [5] Han M Y, Brant J C, Kim P 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 056801
- [6] Zhang Z Z, Chang K, Peeters F M 2008 *Phys. Rev. B* **77** 235411
- [7] Prada E, San-Jose P, Leo'n G, Fogler M M, Guinea F 2010 *Phys. Rev. B* **81** 161402
- [8] Li Q, Cheng Z G, Li Z J, Wang Z H, Fang Y 2010 *Chin. Phys. B* **19** 097307
- [9] Xiao S, Chen J H, Adam S, Williams E D, Fuhrer M S 2010 *Phys. Rev. B* **82** 041406
- [10] Abanin D A, Levitov L S 2007 *Science* **317** 641
- [11] Son Y W, Cohen M L, Louie S G 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 216803
- [12] Wang S X, Li Z W, Liu J J, Li Y X 2011 *Chin. Phys. B* **20** 077305
- [13] Wang X M, Liu H 2010 *Acta Phys. Sin.* **64** 097103 (in Chinese)
[王雪梅, 刘红 2010 物理学报 **64** 097103]
- [14] Liu J T, Su F H, Wang H, Deng X H 2011 *EPL* **95** 24003
- [15] Liu J T, Su F H, Wang H, Deng X H 2012 *NJP* **14** 013012
- [16] Calvo H L, Pastawski H M, Roche S, Torres L E F F 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 232103
- [17] Savel'ev S E, Alexandrov A S 2011 *Phys. Rev. B* **84** 035428
- [18] Mele E J, Kral P, Tomanek D 2000 *Phys. Rev. B* **61** 7669
- [19] Yee K S 1966 *IEEE Transactions on Antennas and Propagation* **14** 302
- [20] Sullivan D M 2000 *Electromagnetic Simulation Using the FDTD Method* (Hoes Lane: Wiley-IEEE Press)
- [21] Liu S B, Liu S Q 2004 *Chin. Phys.* **13** 1892
- [22] Wang H, Huang Z X, Wu X L, Ren X G 2011 *Chin. Phys. B* **20** 114701
- [23] Wu Z H, Zhai F, Peeters F M, Xu H Q, Chang K 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 176802
- [24] Cheianov V V, Fal'ko V, Altshuler B L 2007 *Science* **315** 1252
- [25] Park C H, Li Y, Son Y W, Cohen M L, Louie S G 2008 *Nature Physics* **4** 213
- [26] Wu Z H, Chang K, Liu J T, Li X J, Chan K S 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 043702
- [27] Mur G 1981 *IEEE Trans. Electromagn. Compat.* **EMC-23** 377

The influence of gate voltage on electron transport in the graphene field-effect transistor under strong laser field*

Liu Jiang-Tao^{1)†} Huang Jie-Hui¹⁾ Xiao Wen-Bo^{2)‡} Hu Ai-Rong¹⁾ Wang Jian-Hui¹⁾

1) (*Department of Physics, Nanchang University, Nanchang 330031, China*)

2) (*Key Laboratory of Nondestructive Testing (Ministry of Education), Nanchang Hangkong University, Nanchang 330063, China*)

(Received 8 February 2012; revised manuscript received 28 February 2012)

Abstract

The influence of gate voltage on electron transport in the graphene field-effect transistor under strong laser field is studied by using the finite-difference time-domain method. The perfect tunneling in graphene can be strongly suppressed by the strong laser field induced optical stark effect. This suppression depends not only on the laser field but also on the width and the height of the gate voltage. The electron transport through a non-square barrier is investigated. We find that a barrier with a small incline has little effect on the electron transport, but if the barrier has a large incline, the tunneling probability changes remarkably.

Keywords: graphene, transport properties, finite-difference time-domain (FDTD)

PACS: 72.80.Vp, 42.50.Hz, 02.70.Bf

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10904059, 11174118, 11147200), the Natural Science Foundation of Jiangxi Province (Grant No. 2009GQW0017), the Aeronautical Science Foundation of China (Grant No. 2010ZB56004), the Scientific Research Foundation of Jiangxi Provincial Department of Education (Grant No. GJJ11176), and the Open Fund of the Key Laboratory of Nondestructive Testing (Ministry of Education, Nanchang Hangkong University) (Grant No. ZD201029005).

† E-mail: ljt-ljt@163.com

‡ E-mail: wbxiao@semi.ac.cn