

有机自旋器件磁性渗透层中双极化子对自旋极化运输的影响

姜丽娜 张玉滨 董顺乐

Effect of bipolarons on spin polarized transport in magnetic permeated sublayer of organic spin device

Jiang Li-Na Zhang Yu-Bin Dong Shun-Le

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 147104 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.147104

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.147104>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I14>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

共轭聚合物中均匀无序对极化子输运动力学的影响

[Effects of uniform disorder on polaron dynamics in conjugated polymers](#)

物理学报.2015, 64(6): 067201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.067201>

基于电子顺磁共振的 ZnTPP 激发态及其 TEMPO 各向异性的研究

[Study on the excited states of zinc porphyrinogen and anisotropy of 2,2,6,6-tetramethylpiperidinoxy by the technology of electron paramagnetic resonance](#)

物理学报.2014, 63(9): 097201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.097201>

功能层厚度对叠层有机电致发光器件出光性能影响的数值研究

[Influence of the functional layer thickness on the light output property of tandem organic light emitting diode: a numerical study](#)

物理学报.2013, 62(24): 247201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.247201>

基于连续性掺杂的高效全荧光白色有机电致发光器件的研究

[Highly efficient all fluorescent white organic light-emitting devices made by sequential doping](#)

物理学报.2013, 62(19): 197204 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.197204>

链间耦合对极化子非弹性散射性质的影响

[The effect of interchain coupling on inelastic scattering of oppositely charged polarons](#)

物理学报.2013, 62(10): 107202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.107202>

有机自旋器件磁性渗透层中双极化子对自旋极化运输的影响*

姜丽娜 张玉滨[†] 董顺乐

(中国海洋大学信息科学与工程学院, 青岛 266100)

(2014年10月29日收到; 2015年3月4日收到修改稿)

根据实验发现的有机器件如Co/有机半导体/La_{0.7}Sr_{0.3}MnO₃中磁性原子渗透现象, 利用自旋漂移-扩散方程, 理论研究了磁性渗透层中极化子-双极化子的转化对自旋极化运输的影响. 研究发现: 磁性渗透层具有不同于纯净有机层的迁移率和自旋反转时间, 都将影响极化子-双极化子的转化, 进而影响自旋极化的运输; 在磁性渗透层中极化子自旋反转时间的劈裂是引起自旋弛豫的主要因素, 而极化子和双极化子之间的转化是重要因素.

关键词: 有机自旋电子学, 磁性渗透层, 双极化子, 自旋极化率

PACS: 71.38.Mx, 72.80.Le, 72.25.Dc, 85.75.-d

DOI: 10.7498/aps.64.147104

1 引言

自1988年Fert等^[1]在铁磁/金属/铁磁的薄膜结构中发现巨磁阻效应后, 自旋电子学越来越受到人们的关注^[2,3]. 电子自旋注入和运输过程已成为广泛研究的课题. 其中铁磁/非磁/铁磁的“三明治”结构成为研究自旋注入和运输性质最基本的构型. 近年来, 有机自旋电子学逐渐成为一个新的研究热点^[4-6]. 与无机半导体相比, 有机半导体(organic semiconductor, OSC)易于大面积处理、成本低廉且延展性好, 容易制成薄膜器件, 同时可与接触层形成良好的界面接触, 很大程度上减少了界面处的自旋散射. 特别是有机半导体内弱的自旋-轨道耦合和超精细相互作用, 使得有机半导体具有较长的自旋扩散时间^[7,8]. 与无机半导体中的载流子不同, 有机半导体中的载流子是电子-晶格相互作用形成的局域元激发, 如携带自旋的极化子和不携带自旋的双极化子, 这些已经从理论^[9-11]和实验^[12,13]上得到了证实.

2002年, Dediu研究组^[14]首次在La_{0.7}Sr_{0.3}MnO₃/T₆/La_{0.7}Sr_{0.3}MnO₃(LSMO)三明治纳米结构中观察到了负磁电阻, T₆是有机材料聚噻吩薄层, 表明有机体内存在电荷自旋极化现象. 随后, Ozbay等^[15]在此结构中也得到温度在25 K和300 K下的磁电阻大小为18%和0.3%, 并推算出自旋寿命和扩散长度约为7 ms和0.4 μm. 在理论上, Yu等^[16]研究了铁磁/聚合物/铁磁结构中弱磁场对自旋输运行为的影响. Xie等^[10,17]通过类SSH(Su-Schrieffer-Heeger)模型研究了铁磁/聚合物体系中电荷的自旋密度分布以及电荷自陷态的输运行为. 在以前的工作中, 我们基于自旋相关的电化学势扩散模型^[18]研究了铁磁/有机半导体异质结构和铁磁/有机半导体/铁磁三明治结构中的自旋极化注入和运输现象^[19,20]. 通过假设极化子和双极化子以一个给定的比例 $r = n_p / (n_p + n_{bp})$, 研究了极化子、双极化子在自旋极化运输中的作用^[21]. Harmon和Flatté^[22]提出了“自旋-阻塞”(spin-blocked)理论, 解释了有机固体材料渗透层中自旋反转引起的磁电阻具有位置相关性.

* 国家自然科学基金(批准号: 11475160)和山东省自然科学基金(批准号: ZR2014AM023)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: zhangyb@ouc.edu.cn

由于有机半导体的“软”性,人们在实验^[23,24]中发现,铁磁电极中的金属原子会渗透到有机半导体层中,从而在铁磁电极与有机半导体层之间形成一个“渗透层”,厚度甚至可达100 nm^[25].后来,人们也在有机自旋阀器件中的Co/有机半导体界面处观察到了磁性渗透层(magnetic permeated sublayer, MPS)的存在^[26,27]并且指出Co原子的掺杂将导致有机半导体材料呈现超顺磁性.如果杂质的浓度很高,那么有机材料会呈现铁磁性,所以磁性杂质的渗透对于自旋极化运输的影响是较复杂的.事实上,有机半导体层中的磁性杂质主要影响自旋载流子的迁移率和自旋反转时间.我们基于宏观动力学的漂移-扩散模型,讨论了Co渗透对自旋极化注入和运输的影响.但是为了简化问题,忽略了双极化子在运输过程中的作用^[28].不同于传统的非有机半导体中的情况,有机半导体中的自旋弛豫包括两方面的因素:一个因素是极化子的自旋反转效应;另一个因素是极化子和双极化子之间的转化^[29].虽然不携带自旋的双极化子对自旋极化没有贡献,但是双极化子的存在会影响极化子的分布,从而影响自旋极化运输.因此,本文重点关注磁性渗透层对双极化子产生的影响,继而关注双极化子对自旋极化运输的影响.

2 模型与方法

考虑一维Co/中间层/LSMO有机自旋器件,如图1所示, $x < 0$ 和 $x > x_0$ 的区域为铁磁(Co和LSMO)电极, $0 < x < x_0$ 的区域为中间层,包含磁性渗透层和纯净有机层.自旋极化的载流子从Co电极注入磁性渗透层后,在外场的驱动下经过纯净有机层,最后进入右边的磁性LSMO电极.本文主要研究载流子在磁性渗透层中的运输情况.载流子由Co电极注入到磁性渗透层,在Co电极中载流子为携带自旋的电子($e \uparrow$ 和 $e \downarrow$),当注入到磁性渗透层时,自旋极化的电子转化为自旋极化的极化子,并在渗透层运输的过程中一部分极化子会转化为双极化子.如图1所示,我们将磁性渗透层中的载流子分为三个部分:自旋向上的极化子($p \uparrow$)、自旋向下的极化子($p \downarrow$)和不携带自旋的双极化子(bp).

由于极化子、双极化子具有准粒子的特性^[9-13],可用宏观动力学自旋相关的漂移-扩散

模型^[30,31]来描述其输运行为:

$$\frac{\partial n_{\uparrow(\downarrow)}}{\partial t} = \frac{1}{e} \text{div} \mathbf{j}_{\uparrow(\downarrow)} \pm \left(\frac{n_{\downarrow}}{\tau_{\downarrow\uparrow}} - \frac{n_{\uparrow}}{\tau_{\uparrow\downarrow}} \right) + S_{\uparrow(\downarrow)}(\mathbf{r}, t), \quad (1a)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{1}{2e} \text{div} \mathbf{j}_N + S_N(\mathbf{r}, t), \quad (1b)$$

式中 e 是单位正电荷电量, $n_{\uparrow(\downarrow)}$ 为自旋向上(向下)极化子的浓度, N 为双极化子的浓度.自旋反转时间 $\tau_{\uparrow(\downarrow)\uparrow}$ 表示自旋向上(向下)的极化子反转其自旋的平均时间. $S_{\uparrow(\downarrow)}(\mathbf{r}, t)$ 表示携带自旋的极化子的源, $S_N(\mathbf{r}, t)$ 表示不携带自旋的双极化子的源,都来源于极化子和双极化子之间的转化. $\mathbf{j}_{\uparrow(\downarrow)}$ 为自旋向上(向下)的极化子的电流密度, \mathbf{j}_N 为双极化子形成的电流密度,通过系统的电流满足电流连续性方程:

$$\mathbf{j}_{\uparrow(\downarrow)} = \sigma_{\uparrow(\downarrow)} \mathbf{E} + eD_n \nabla n_{\uparrow(\downarrow)}, \quad (2a)$$

$$\mathbf{j}_N = \sigma_N \mathbf{E} + 2eD_N \nabla N, \quad (2b)$$

等式的右边两项分别对应漂移电流和扩散电流两部分.这里的 $\sigma_{\uparrow(\downarrow)} = en_{\uparrow(\downarrow)}\mu_n$ 和 $\sigma_N = 2eN\mu_N$ 分别是极化子和双极化子的电导率; \mathbf{E} 表示外加驱动电场; D_n, μ_n, D_N 和 μ_N 分别表示极化子和双极化子的扩散系数和迁移率,它们之间遵从爱因斯坦关系: $D_n/\mu_n = k_0T/e$ 和 $D_N/\mu_N = k_0T/2e$,其中 k_0 是玻尔兹曼常数, T 是温度.在本文中我们忽略了扩散系数和迁移率的自旋相关性.

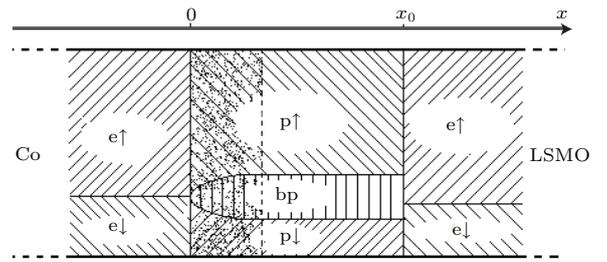


图1 Co/MPS/OSC/LSMO器件的原理图
Fig. 1. A schematic diagram of the device Co/MPS/OSC/LSMO.

将极化子和双极化子之间转化描述为^[29]

$$S_{\uparrow(\downarrow)} = -kn_{\uparrow}n_{\downarrow} + bN, \quad (3a)$$

$$S_N = kn_{\uparrow}n_{\downarrow} - bN, \quad (3b)$$

(3)式等号右边的第一项描述了两个携带相反自旋的极化子湮没成不携带自旋的双极化子的概率,第二项描述的是上述的反过程,参数 k 和 b 分别表示转化强度,它们与器件温度有关.

把方程(2)和(3)代入方程(1),最后得到沿一维 x 方向极化子和双极化子的输运方程:

$$\frac{\partial n_{\uparrow(\downarrow)}}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 n_{\uparrow(\downarrow)}}{\partial x^2} + \mu_n E \frac{\partial n_{\uparrow(\downarrow)}}{\partial x} + n_{\uparrow(\downarrow)} \mu_n \frac{\partial E}{\partial x} \pm \left(\frac{n_{\downarrow}}{\tau_{\downarrow\uparrow}} - \frac{n_{\uparrow}}{\tau_{\uparrow\downarrow}} \right) - kn_{\uparrow}n_{\downarrow} + bN, \quad (4a)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D_N \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} + \mu_N E \frac{\partial N}{\partial x} + N\mu_N \frac{\partial E}{\partial x} + kn_{\uparrow}n_{\downarrow} - bN. \quad (4b)$$

在磁性渗透层中,因为杂质原子的存在,使得极化子的输运性质不同于纯净有机半导体中的情况.首先,源自杂质原子的额外散射使极化子在磁性渗透层中的迁移率改变^[32],

$$\mu(x) = \frac{1}{a + dN_m(x)}, \quad (5)$$

这里 $N_m(x)$ 表示磁性杂质的浓度,参数 a 和 d 与温度和制作条件有关.其次,由于杂质原子的磁化效应,极化子在磁性渗透层中自旋反转时间 $\tau_{\uparrow\downarrow}$ (从自旋向上到自旋向下)将不同于 $\tau_{\downarrow\uparrow}$ (从自旋向下到自旋向上),这种行为依赖于杂质原子的浓度,

$$\tau_{\uparrow(\downarrow)\downarrow(\uparrow)}(x) = \tau_0 \pm cN_m(x), \quad (6)$$

这里 τ_0 表示极化子在纯净的有机层中的自旋反转时间, c 是一个常数参量.在纯净的有机半导体中,我们认为携带不同自旋的载流子的自旋反转时间是相等的.(6)式表明自旋多子(自旋向上)反转自己的自旋所花费的平均时间要比自旋少子(自旋向下)的长,这与磁性渗透层具有与紧邻的磁性电极(Co)相同的磁化方向的假设是一致的.从(5)和(6)式可以看出,极化子在磁性渗透层中的迁移率具有位置依赖性,这是因为可能存在的杂质原子具有非均匀性.

3 结果与讨论

基于方程(4)和磁性渗透层的特点,我们假设从铁磁电极注入到渗透层中的电子或空穴全部转化为极化子,所以采用数值方法求解时设定边界条件是 $n_{\uparrow}(x = 0^+, t = 0) = 3.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $n_{\downarrow}(x = 0^+, t = 0) = 1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 和 $N = 0$.忽略Co与有机半导体界面处的自旋反转^[33],初边值的选取对Co电极是适合的(Co在费米能级处的自旋极化率约为0.4).纯净有机层的参数是Alq₃的参数^[27]: $\mu_0 = 1.0 \times 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ 和 $\tau_0 = 2.7 \times 10^{-3} \text{ s}$.前面提到,在有Co原子渗透的有

机层(Alq₃)中,由于磁性杂质的影响,会导致极化子的迁移率和自旋反转时间不同于纯净有机层,与磁性杂质浓度($N_m(x)$)有关.这里假设磁性渗透层中的杂质浓度是均匀的: $N_m(x) = N_m(x \leq L_{\text{MPS}})$.所以设定磁性渗透层中常数的迁移率和自旋反转时间: $\mu_n(x) = r\mu_0$ 和 $\tau_{\uparrow(\downarrow)\downarrow(\uparrow)} = \tau_0 \pm \Delta\tau$, 其中 $0 \leq \Delta\tau \leq 0.4\tau_0$ (假设磁性渗透层的磁化强度小于Co电极的磁化强度).电极之间的驱动电场设定为一个常数 $E = 3.0 \times 10^4 \text{ V/cm}$,并假设驱动电场在整个磁性渗透层和纯净有机层是均匀的,所以有 $\partial E/\partial x = 0$.并且选取 $L_{\text{MPS}} = 100 \text{ nm}$ (L_{MPS} 为磁性渗透层的厚度)作为渗透层的厚度^[25].自旋极化率在器件中是位置相关的,可用极化子的浓度表示为 $p = (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})/(n_{\uparrow} + n_{\downarrow})$.另外,我们选取转化强度分别为: $k = 5.0 \times 10^{-15} \text{ cm}^3/\text{s}$, $b = 1.7 \times 10^2 \text{ s}^{-1}$.

如果有机层中不考虑双极化子的影响,如图2所示.自旋极化子在有机层输运过程中,随着极化子自旋反转,自旋向上的极化子浓度逐渐减少,自旋向下的极化子浓度逐渐增加,最后达到平衡,极化子浓度趋于饱和,伴随着的是自旋极化率的衰减.自旋极化率在纯净有机层中是指指数衰减的,但在磁性渗透层中,由于杂质原子的自旋相关的额外散射,自旋极化率在渗透层中的衰减比纯净有机层中缓慢得多.如果不考虑双极化子的影响,无论纯有机层还是磁性渗透层中,自旋向上极化子浓度的减少和自旋向下极化子浓度的增加变化是等速度的,图中表现为自旋向上极化子和自旋向下极化子的浓度分布具有对称性.但是有机层中的载流子不仅有携带自旋的极化子还有不携带自旋的双极化子^[9-13],一对自旋相反的极化子相遇后会湮没成一个不携带自旋的双极化子,所以有机层中的自旋输运既有极化子参与,又有双极化子参与.如果考虑双极化子参与磁性相关输运,基于本文中的自旋极化率的定义,磁性渗透层中自旋极化率的分布会受双极化子的影响.如图2所示,随着双极化子的创生,极化子的分布将发生变化,进而影响自旋极化率^[29],我们发现自旋极化率将偏离原来的分布.综上所述,在有机半导体中双极化子的介入使自旋输运比在传统非有机半导体中复杂得多.在传统的半导体中只有携带自旋的载流子:电子或空穴.在输运过程中,人们通过探测器都可以识别自旋向上和向下的载流子,进而计算出自旋极化率.但是在有机半导体中,人们只能通过自旋探测

器识别自旋向上和自旋向下的极化子,却不能识别不携带自旋的双极化子. 这使得有机层和磁性渗透层中自旋极化率的计算更复杂,我们必须考虑双极化子的影响.

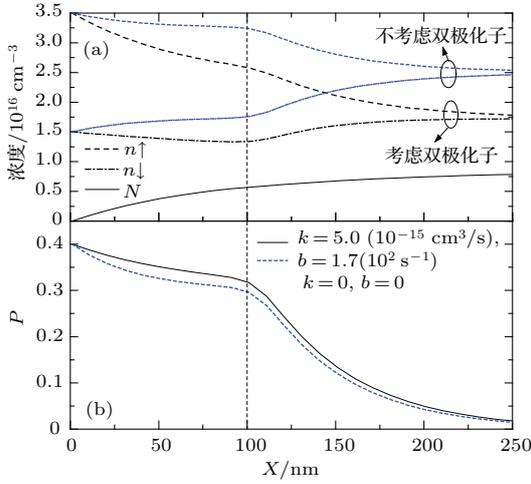


图2 有机层中载流子分布 (a)载流子浓度; (b) 自旋极化率; 磁性渗透层中载流子迁移率为 $\mu_n = 0.8\mu_0$, 自旋反转时间为 $\Delta\tau = 0.3\tau_0$; 其他参数为 $\mu_0 = 1.0 \times 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$, $\tau_0 = 2.7 \times 10^{-3} \text{ s}$, $k = 5.0 \times 10^{-15} \text{ cm}^3/\text{s}$, $b = 1.7 \times 10^2 \text{ s}^{-1}$, $L_{\text{MPS}} = 100 \text{ nm}$

Fig. 2. The distribution of carrier densities (a) and spin polarization (b) in the whole OSC layer. The carrier mobility is $\mu_n = 0.8\mu_0$, and the splitting of spin-flip time is $\Delta\tau = 0.3\tau_0$ in the MPS. The other parameters are $\mu_0 = 1.0 \times 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$, $\tau_0 = 2.7 \times 10^{-3} \text{ s}$, $k = 5.0 \times 10^{-15} \text{ cm}^3/\text{s}$, $b = 1.7 \times 10^2 \text{ s}^{-1}$, $L_{\text{MPS}} = 100 \text{ nm}$.

在磁性渗透层中, Co原子或团簇对载流子的影响主要有两个方面: 1) 源自杂质原子的额外散射使载流子在渗透层中的迁移率低于纯净有机层; 2) 磁性杂质的磁化使自旋向上的极化子反转其自旋所需要的时间不同于自旋向下的极化子. 这两方面的因素会影响极化子和双极化子之间的转化, 进而影响自旋极化率. 下面将对磁性渗透层中迁移率和自旋反转时间的影响进行详细的讨论.

首先, 我们考虑载流子迁移率对自旋极化率的影响. 由于渗透层中 Co 杂质原子对载流子的额外散射, 载流子的迁移率在磁性渗透层中要小于纯净有机层, 我们取极化子在渗透层中的迁移率分别为 $\mu_n = 0.3\mu_0, 0.6\mu_0$ 和 $0.9\mu_0$, 并假设双极化子的迁移率为极化子迁移率的 1/2, 即 $\mu_N = 0.5\mu_n$, 计算结果如图 3 所示. 我们发现在双极化子浓度曲线 $D(x)$ 上有一个拐点 x_0 , 在这一点极化子和双极化子之间的转化达到了动态平衡, 在 x_0 之后双极化子的浓度不再变化, 达到饱和. 这意味着在 x_0 点之

后双极化子不再影响自旋极化率 P 的衰减, 自旋极化率 P 以相同的类指数形式衰减, 如图 3 (b) 所示. 磁性渗透层中极化子迁移率取不同值, 对应着不同的 x_0 . 大的极化子迁移率意味着大的载流子输运速度, 这将导致拐点 x_0 的坐标更大, 即双极化子浓度达到饱和状态的位置坐标更大. 另外我们发现, 由于极化子和双极化子之间的转化效应, 双极化子浓度达到饱和状态的位置坐标越大, 越有利于极化子浓度的保持, 如图 3 (b) 所示, 即越有利于自旋极化率.

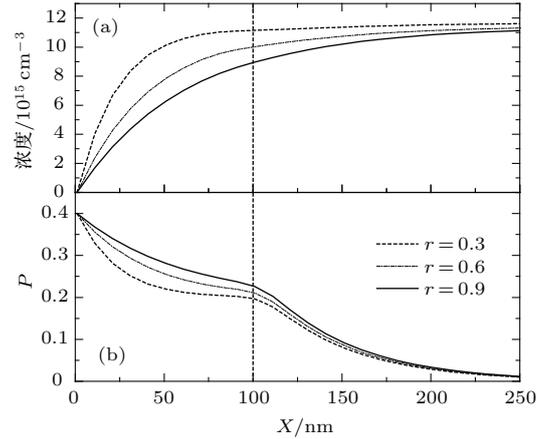


图3 极化子迁移率的影响 (a) 双极化子浓度; (b) 自旋极化率; 磁性渗透层中极化子迁移率分别取 $\mu_n = r\mu_0$, 其中 r 取 0.3, 0.6, 0.9, 分别对应图中的虚线、点虚线和实线, $\mu_N = 0.5\mu_n$, $\Delta\tau = 0.2\tau_0$; 其他参数与图 2 相同

Fig. 3. The effects of different polaron mobility in the MPS: (a) the bipolaron density; (b) the spin polarization; the dashed, dash-dotted and solid lines are for $\mu_n = r\mu_0 = 0.3\mu_0, 0.6\mu_0$ and $0.9\mu_0$, respectively; the parameters are $\mu_N = 0.5\mu_n$ and $\Delta\tau = 0.2\tau_0$; the other parameters are same as those in Fig. 2.

一般认为双极化子的迁移率比极化子小 [9,10,12], 所以我们讨论极化子迁移率对自旋极化率的影响时令双极化子迁移率是极化子的 1/2. 这里进一步讨论两者迁移率差异对自旋极化率的影响. 我们设极化子的迁移率不变, 双极化子迁移率分别取 $\mu_N = 0.2\mu_n, 0.5\mu_n, 1.0\mu_n$, 结果如图 4 所示. 在磁性渗透层中, 双极化子迁移率的取值越小, 其浓度饱和值越大, x_0 的位置坐标越小. 另外, 随着双极化子迁移率的取值越小, 自旋极化率 P 在磁性渗透层中的衰减越快. 这是因为载流子在输运过程中, 对于常数的总电流 $j = eE(n\mu_n + 2N\mu_N)$, 由于驱动电场和极化子迁移率为常数的假设, 载流子的浓度将随着双极化子迁移率的减小而增大. 对于携带自旋的极化子而言, 自旋向上与自旋向下的极化子浓度之和会随着双极化子迁移率的减小而增

大, 但是自旋向上与自旋向下的极化子浓度差则几乎没有变化, 如图 4 中内插图所示.

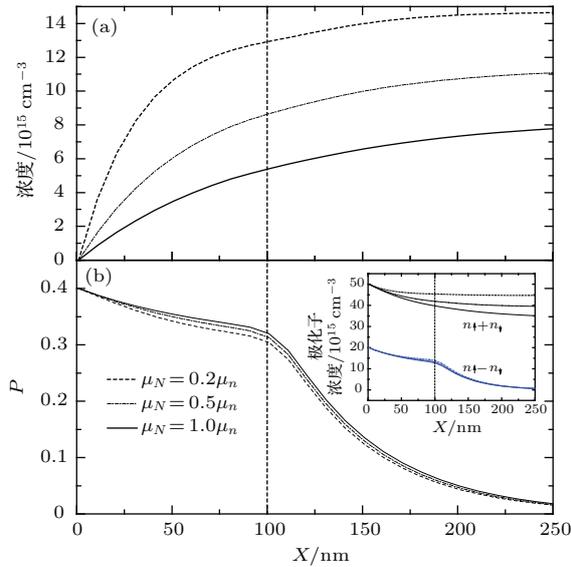


图4 双极化子迁移率的影响 (a) 双极化子浓度; (b) 自旋极化率; 双极化子的迁移率为 $\mu_N = 0.2\mu_n, 0.5\mu_n, 1.0\mu_n$, 分别对应图中虚线、点虚线和实线, 其中 $\mu_n = 0.9\mu_0, \Delta\tau = 0.3\tau_0$, 其他参数与图 2 相同; 内插图为极化子的浓度, 黑线表示自旋向上与自旋向下的极化子浓度和, 蓝线表示自旋向上与自旋向下的极化子浓度差

Fig. 4. The effects of different bipolaron mobility in the MPS: (a) the bipolaron density; (b) the spin polarization; the dashed, dash-dotted and solid lines are for $\mu_N = 0.2\mu_n, 0.5\mu_n$ and $1.0\mu_n$, respectively; the parameters are $\mu_n = 0.9\mu_0$ and $\Delta\tau = 0.3\tau_0$; the other parameters are same as those in Fig. 2.; the small figure for polaron densities, the black and blue lines are for the sum of density of polarons and density difference between spin-up polaron and spin-down polaron, respectively.

然后, 我们考虑了自旋反转时间劈裂对自旋运输的影响. 因为磁性渗透层的磁化来源于渗透的 Co 原子或团簇, 我们假设磁性渗透层的磁化强度小于 Co 电极的磁化强度, 这要求 $\Delta\tau \leq P_0\tau_0$ (这里 $P_0 = 0.4$ 是 Co 在费米能级处的自旋极化率), 所以我们选取磁性渗透层中的自旋反转时间为 $\Delta\tau = 0\tau_0, 0.2\tau_0, 0.3\tau_0$. $\Delta\tau = 0\tau_0$ 表示磁性渗透层中的 Co 的浓度为零, 即具有和纯净有机层相同的性质, $\Delta\tau$ 的值越大表示不同自旋的反转时间劈裂越大. 如图 5 所示, 磁性渗透层中, 随着自旋反转时间劈裂的增大, 双极化子的浓度呈现减小的趋势. 与磁性渗透层中不考虑双极化子影响的情况类似, 自旋反转时间劈裂越大, 自旋极化率在磁性渗透层中的衰减越缓慢, 越有利于自旋极化运输的保持. 值得一提的是, 我们发现与双极化子浓度的影响做

比较, 自旋反转时间的劈裂对自旋极化运输的影响更强烈, 是影响自旋极化运输的主要因素.

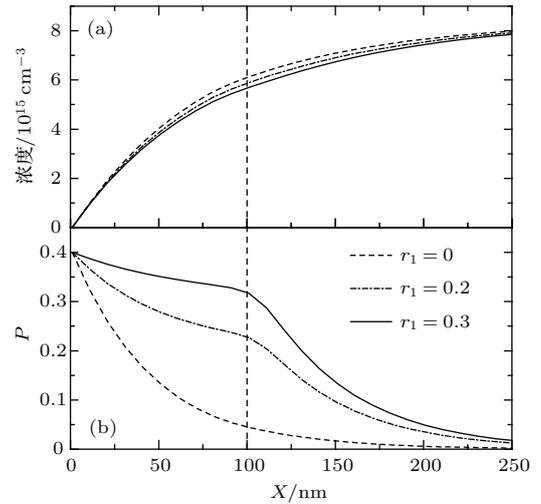


图5 自旋反转时间劈裂的影响 (a) 双极化子浓度; (b) 自旋极化率; 自旋反转时间为 $\Delta\tau = r_1\tau_0$, 其中 r_1 取 0, 0.2, 0.3, 分别对应图中的虚线、点虚线和实线, 其中 $\mu_n = 0.8\mu_0, \mu_N = \mu_n$; 其他参数与图 2 相同

Fig. 5. The effects of different splitting of spin-flip times: (a) the bipolaron density; (b) the spin polarization; the dashed, dash-dotted and solid lines are for $\Delta\tau = r_1\tau_0 = 0\tau_0, 0.2\tau_0$ and $0.3\tau_0$; the parameters are $\mu_n = 0.8\mu_0$ and $\mu_N = \mu_n$; the other parameters are same as those in Fig. 2.

4 结 论

本文基于自旋相关的极化子-双极化子转化模型, 从漂移-扩散方程出发, 理论上研究了 Co/有机半导体器件中可能存在的磁性渗透层中极化子和双极化子的转化对自旋极化运输的影响. 研究发现, 与纯净有机层中的情况类似, 在磁性渗透层中极化子的自旋反转效应是引起自旋弛豫的主要因素, 而极化子和双极化子之间的转化是重要因素. 由于磁性原子的渗透导致的磁性渗透层的出现, 作为自旋载流子的极化子的自旋反转时间和迁移率在渗透层中都会被调整. 这两个因素都影响极化子和双极化子之间的转化, 进而影响自旋极化率. 由于渗透层中的 Co 原子对载流子的附加散射, 极化子的迁移率在渗透层中将减小, 这将减弱渗透层中的自旋极化率, 而双极化子的介入使自旋极化率衰减进一步加快. 由于磁性渗透层的磁化, 自旋向上的极化子的自旋反转时间将不同于自旋向下的极化子, 这将导致渗透层中自旋极化率的衰减变慢, 有利于自旋运输.

参考文献

- [1] Baibich M N, Broto J M, Fert A, Nguyen F D V, Petroff F, Etienne P, Creuzet G, Friederich A, Chazelas J 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 2472
- [2] Wolf S A, Awschalom D D, Buhrman R A, Daughton J M, Molnár S V, Roukes M L, Chtchelkanova A Y, Treger D M 2001 *Science* **294** 1488
- [3] Žutić I, Fabian J, Sarma S D 2004 *Rev. Mod. Phys.* **76** 323
- [4] Dou Z T, Ren J F, Wang Y M, Yuan X B, Hu G C 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 088503 (in Chinese) [窦兆涛, 任俊峰, 王玉梅, 原晓波, 胡贵超 2012 物理学报 **61** 088503]
- [5] Koopmans B 2014 *Nature Phys.* **10** 249
- [6] Li W F, Liang Y X, Jin Y, Wei J H 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 8850 (in Chinese) [李维峰, 梁迎新, 金勇, 魏建华 2010 物理学报 **59** 8850]
- [7] Sanvito S 2011 *Chem. Soc. Rev.* **40** 3336
- [8] Zhang X, Mizukami S, Kubota T, Ma Q, Oogane M, Naganuma H, Ando Y, Miyazaki T 2013 *Nature Commun.* **4** 1392
- [9] Heeger A J, Kivelson S, Schrieffer J R, Su W P 1988 *Rev. Mod. Phys.* **60** 781
- [10] Xie S J, Ahn K H, Smith D L, Bishop A R, Saxena A 2003 *Phys. Rev. B* **67** 125202
- [11] Fu J Y, Ren J F, Liu X J, Liu D S, Xie S J 2006 *Phys. Rev. B* **73** 195401
- [12] Scott J C, Pfluger P, Krounbi M T, Street G B 1983 *Phys. Rev. B* **28** 2140
- [13] Genoud F, Guglielmi M, Nechtschein M, Genies E, Salmon M 1985 *Phys. Rev. Lett.* **55** 118
- [14] Dediu V, Murgia M, Maticotta F C, Taliani C, Barbanera S 2002 *Solid State Commun.* **122** 181
- [15] Ozbay A, Nowak E R, Yu Z G, Chu W, Shi Y, Krishnamurthy S, Tang Z, Newman N 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 232507
- [16] Yu Z G, Berding M A, Krishnamurthy S 2005 *Phys. Rev. B* **71** 060408R
- [17] Gao K, Xie S J, Li Y, Yin S, Liu D S, Zhao X 2009 *Chin. Phys. B* **18** 2961
- [18] Smith D L, Silver R N 2001 *Phys. Rev. B* **64** 045323
- [19] Ren J F, Fu J Y, Liu D S, Mei L M, Xie S J 2005 *J. Appl. Phys.* **98** 074503
- [20] Ren J F, Fu J Y, Liu D S, Mei L M, Xie S J 2005 *J. Phys.: Condens. Matter* **17** 2341
- [21] Ren J F, Zhang Y B, Xie S J 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4785 (in Chinese) [任俊峰, 张玉滨, 解士杰 2007 物理学报 **56** 4785]
- [22] Harmon N J, Flatté M E 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 186602
- [23] Lee S T, Gao Z Q, Hung L S 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 1404
- [24] Zhao J Q, Xie S J, Han S H, Yang Z W, Ye L N, Yang T L 2000 *Synth. Met.* **114** 251
- [25] Xiong Z H, Wu D, Vardeny Z V, Shi J 2004 *Nature* **427** 821
- [26] Wang F J, Yang C G, Vardeny Z V, Li X G 2007 *Phys. Rev. B* **75** 245324
- [27] Pramanik S, Stefanita C G, Patibandla S, Bandyopadhyay S, Garre K, Harth N, Cahay M 2007 *Nature Nanotech.* **2** 216
- [28] Zhang Y B, Ren J F, Lei J, Xie S J 2009 *Org. Electron.* **10** 568
- [29] Zhang Y B, Ren J F, Hu G C, Xie S J 2008 *Org. Electron.* **9** 687
- [30] Pershin Y V, Privman V 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 256602
- [31] Yu Z G, Flatté M E 2002 *Phys. Rev. B* **66** 235302
- [32] Prince M B 1953 *Phys. Rev.* **92** 681
- [33] Cinchetti M, Heimer K, Wüstenberg J P, Andreyev O, Bauer M, Lach S, Ziegler C, Gao Y, Aeschlimann M 2009 *Nature Mater.* **8** 115

Effect of bipolarons on spin polarized transport in magnetic permeated sublayer of organic spin device*

Jiang Li-Na Zhang Yu-Bin[†] Dong Shun-Le

(College of Information Science and Engineering, Ocean University of China, Qingdao 266100, China)

(Received 29 October 2014; revised manuscript received 4 March 2015)

Abstract

According to the permeation phenomenon of magnetic atoms in organic device, such as Co/organic semiconductor (OSC)/La_{0.7}Sr_{0.3}MnO₃, the evolution of spin polarons and spinless bipolarons are calculated with the drift-diffusion equations to investigate the effect of polaron-bipolaron interaction on spin polarized transport in a magnetic permeated sublayer (MPS). It is found that the MPS has different spin-flip time and mobility from those in pure organic semiconductor. The splitting of spin-flip time will be adjusted by the effect of the magnetization of the impurity atoms. Mobilities of spin carriers in the MPS will be reduced due to the scattering of the Co atoms. Both the spin-flip time and the mobility will affect the polaron-bipolaron interaction and further influence the spin polarized transport. It is found that the splitting of spin-flip time is the main factor responsible for the spin relaxation, while the polaron-bipolaron interaction is the secondary factor.

Keywords: organic spintronics, magnetic permeated sublayer, bipolarons, spin polarization

PACS: 71.38.Mx, 72.80.Le, 72.25.Dc, 85.75.-d

DOI: [10.7498/aps.64.147104](https://doi.org/10.7498/aps.64.147104)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11475160) and the Natural Science Foundation of Shandong Province, China(Grant No. ZR2014AM023).

[†] Corresponding author. E-mail: zhangyb@ouc.edu.cn