

自旋轨道耦合作用下石墨烯 pn 结的电子输运性质

陈东海 杨谋 段后建 王瑞强

Electronic transport properties of graphene pn junctions with spin-orbit coupling

Chen Dong-Hai Yang Mou Duan Hou-Jian Wang Rui-Qiang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 097201 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.097201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.097201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I9>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

硅烯中受电场调控的体能隙和朗道能级

Electric field controlled energy gap and Landau levels in silicene

物理学报.2015, 64(8): 087302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.087302>

一维石墨烯超晶格上的氢吸附

Hydrogen adsorption on one-dimensional graphene superlattices

物理学报.2014, 63(19): 197301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.197301>

单层与双层石墨烯的光学吸收性质研究

Optical absorptions in monolayer and bilayer graphene

物理学报.2013, 62(18): 187301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.187301>

栅极电势对强光场下石墨烯场效应管中电子隧穿的影响

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

物理学报.2012, 61(17): 177202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.177202>

锯齿型石墨纳米带叠层复合结的电子输运

Electronic transport in hybrid contact of doubly-stacked zigzag graphene nanoribbons

物理学报.2012, 61(7): 077201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.077201>

自旋轨道耦合作用下石墨烯pn结的电子输运性质*

陈东海 杨谋† 段后建 王瑞强

(广东省量子调控工程与材料重点实验室, 华南师范大学物理与电信工程学院, 广州 510006)

(2014年11月10日收到; 2014年12月19日收到修改稿)

本文研究了自旋轨道耦合作用下石墨烯纳米带pn结的电子输运性质. 当粒子的入射能量处于pn结两端势能之间时, 粒子将会以隧穿的形式通过石墨烯pn结, 同时伴随着电子空穴转换. 电导随费米能的变化曲线呈不等阶梯状, 并在费米能位于pn结两端能量中点时取得最大值. 随着石墨烯pn结长度的增加, 电导以指数形式衰减. 自旋轨道耦合作用导致的能隙会使电导显著减小, 而边缘态的粒子则可以几乎毫无阻碍地通过pn结. 本文用一个简单的子带隧穿模型解释了上述特征. 最后还研究了在pn转换区中掺入替位杂质的情况. 在弱杂质下, 电导随费米能变化的曲线将不再对称; 当杂质较强时, 仅边界态的形成的电导台阶能够保持.

关键词: 石墨烯, pn结, 自旋轨道耦合

PACS: 72.80.Vp, 73.22.Pr, 73.23.-b, 81.05.ue

DOI: 10.7498/aps.64.097201

1 引言

自2004年Geim等人在实验室中利用机械剥离的方法制备出单层石墨烯以来^[1,2], 石墨烯引起了研究者的广泛关注. 石墨烯是由单层碳原子以六角蜂巢晶格点阵结构排列的二维晶体, 纯净的石墨烯能谱在狄拉克点附近呈现出线性的色散关系^[3], 所以电子表现出一些奇异的电子性质, 如Klein隧穿效应^[4,5]和量子自旋霍尔效应^[6,7]等. 实验表明, 石墨烯的自旋轨道作用很微弱, 但是通过少量吸附氢原子的方法, 可以大幅提高石墨烯中的自旋轨道耦合作用强度到可观测量级^[8-12]. 石墨烯中的自旋轨道耦合作用可以用Kane-Mele模型来描述^[6], 在这样的自旋轨道耦合作用下, 石墨烯转变为拓扑绝缘体. 碳的同族原子, 如硅和锗, 也可以构成二维六角晶格, 与石墨烯有相似的能带结构, 并且有着更为显著的自旋轨道耦合效应^[13-15]. Kane-Mele模型不仅用来描述石墨烯的自旋轨道耦合, 还同样适用于二维硅和锗. 这种模型已经成为了研究各种拓扑异质结^[16-18]和拓扑相变的平台^[19,20].

在二维系统中, pn结是最简单最基本的结构. 现有的技术已经可以用门电极制备出高质量的石墨烯pn结^[21]. 以pn结为基本单元, 可以进一步构造超晶格^[22], 量子点^[23], 以及量子点接触等多种量子结构^[24]. 石墨烯pn结具有一系列有趣的物理性质. pn结界面对电子的折射是负的, 从而构成了一个Veselago透镜^[25,26]; 在强磁场下, 电子在pn结的界面附近会形成蛇行态, 并沿着界面运动^[27]; 在界面附近, 电子和空穴的朗道能级相互干扰, 导致非整数的电导量子化^[28]. 一个pn结既可以用一个突变势来描述以方便得到解析结果^[25,26], 也可以采用渐变势以更真实的反映实际系统^[29,30].

尽管已经有了大量关于石墨烯pn结的文献, 但是绝大多数都没有考虑自旋轨道耦合作用, 由自旋轨道耦合带来的能隙以及边界态对石墨烯pn结电子输运的影响还未可知, 还没有人提出一个简明清晰的, 能脱离具体繁琐数值计算的物理图景来说明在自旋轨道耦合影响下石墨烯pn结的电子输运特征. 因此本文研究自旋轨道耦合作用下石墨烯pn结的电导, 利用WKB近似建立了一个简明直观的图景来说明粒子在通过pn结时所经历的物理过

* 国家自然科学基金(批准号: 11274124, 11474106)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yang.mou@hotmail.com

程, 并且使用该方法计算电导的结果与使用非平衡格林函数方法的结果相吻合. 当粒子的入射能处于 pn 结两端势能之间时, 粒子以隧穿的形式通过石墨烯 pn 结, 同时伴随着电子空穴转换. 电导随费米能的变化曲线呈不等阶梯状, 并且费米能 $E_F = 0$ 时取得最大值, 以该能量为中心, 电导曲线左右对称. 自旋轨道耦合所导致的能隙使电子通过 pn 结的电导显著减小. pn 转变区域长度增加时, 电导以指数形式衰减. pn 转变区域在弱掺杂情况下, 电导随费米能得曲线将不再对称; 在强掺杂情况下, 仅有边界态的形成的电导台阶能够保持. 这些研究不仅对电子通过石墨烯 pn 结的电子输运性质有了进一步的了解, 而且对新型器件的设计和发展有着重要的意义.

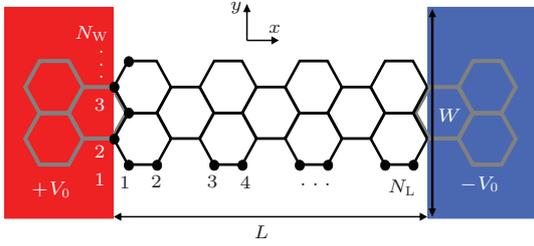


图1 (网刊彩色) 扶手型石墨烯 pn 结的示意图
Fig. 1. (color online) Sketch of armchair graphene pn junction.

2 理论模型和计算方法

2.1 紧束缚模型

本文研究的物理模型如图 1 所示, 在扶手型边界的石墨烯纳米带两端加上偏置电压, 从而使得纳米带左右两端的势能分别为 V_0 和 $-V_0$. 两端由长为 L 的 pn 转变区连接, 转变区的 pn 势 $V(x)$ 是连接 p 端和 n 端的光滑单调函数, 我们假设它的形式是

$$V(x) = V_0 \cos\left(\frac{x}{L}\pi\right), \quad 0 < x < L. \quad (1)$$

在紧束缚近似下, 系统的哈密顿量可以表示为

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \alpha} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha} + it_0 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle \alpha\beta} \nu_{ij} c_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^z c_{j\beta} + \sum_{i\alpha} V_i c_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha}, \quad (2)$$

其中 $c_{i\alpha}^\dagger$ 和 $c_{i\alpha}$ 分别表示在格点 i 处产生和湮没一个自旋为 α 的电子, $\langle i, j \rangle$ 和 $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ 分别表示求和要遍历所有最近邻和次近邻的跃迁. 系统哈密顿量中的第一项为最近邻格点之间的相互作用项, 最近邻格点间的跳跃能为 t . 第二项为自旋轨道耦合相互

作用项, 它是次近邻格点的相互作用, 次近邻相互作用能为 t_0 , σ^z 是 z 分量的泡利矩阵, 表示电子自旋. 如果次近邻格点之间的作用 (以最近邻为中介) 以逆时针方向旋转时, $\nu_{ij} = +1$; 以顺时针方向旋转时, $\nu_{ij} = -1$. 第三项表示在外加偏置电压情况下所导致的 pn 势, V_i 是 pn 势在格点 i 上的取值, 它仅体现在系统哈密顿量的对角项. 根据系统的紧束缚哈密顿量, 得出转换区的推迟格林函数 G^r 和超前格林函数 G^a , 算出左侧和右侧的线宽函数 Γ^L 和 Γ^R , 利用非平衡格林函数方法, 得到系统两端的电导

$$G = \frac{e^2}{h} \text{Tr}(\Gamma^L G^r \Gamma^R G^a), \quad (3)$$

其中 e 为电子电量, h 为普朗克常数.

2.2 WKB 子带隧穿模型

在不存在 pn 势的石墨烯纳米带中, 能量为 E 的电子所处的量子态可以用两个好量子数来描述, 即横向本征量子数 n 和与之对应的纵向波矢 k_n . 对每一个横向子带而言, 都有对应的能谱关系和带边 (导带的最低点或价带的最高点). 如果纳米带中存在随 x 变化的 pn 势 $V(x)$, 电子在传输的过程中, 横向本征量子数 n 仍然是一个好的量子数, 而纵向波矢 k_n 则是 x 的函数. 在狄拉克点附近, 横向本征量子数, 纵向波矢, 电子能量之间的关系为

$$E_n^2 + v_F^2 \hbar^2 k_n^2(x) = [E - V(x)]^2, \quad (4)$$

其中 E_n 是第 n 个横向子带本征能量 (n 的取值为正整数时表示电子型子带, 取负整数时表示空穴型子带), $v_F = 3a_0 t / 2\hbar$ 表示电子的费米速度 (a_0 是碳碳键的长度, \hbar 为约化普朗克常数). 此时对于每个子带而言, 子带的带边能量将不再是一个常数, 而是被沿 x 方向变化的 pn 势所调制, 即

$$E_n^{\text{ed}}(x) = E_n + V(x). \quad (5)$$

图 2(a) 显示了子带的带边随 x 的变化图, 在下面的分析过程中, 我们将借助其来展示粒子通过石墨烯纳米带 pn 结的物理过程. 假设能量为 E 的空穴型准粒子处于第 -1 个横向子带从左侧入射, 粒子将会沿着第 -1 个横向子带向右传播. 当准粒子还未进入 pn 转变区之前, 纵向波矢为实数并且在传输的过程中保持不变, 当准粒子进入 pn 转变区之后, 子带的带边能量开始降低, 纵向波矢逐渐减小, 此过程处于传导模式, 粒子几乎不发生散射. 当粒子到达 A 点时, 纵向波矢减小到零, 空穴的能量与带

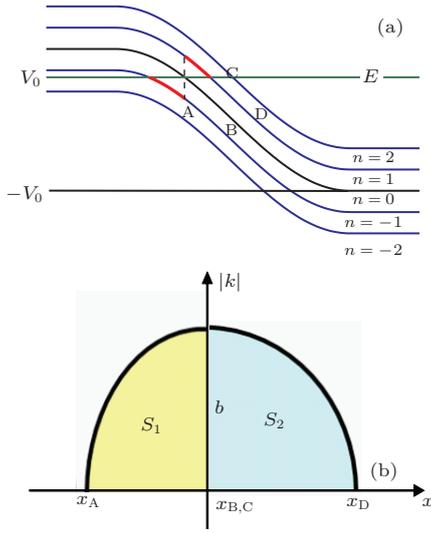


图2 (网刊彩色) (a) 石墨烯纳米带pn势 $V(x)$ 和各个子带的带边随 x 的变化图; (b) 近似积分原理图

Fig. 2. (color online) (a) Profile of pn potential $V(x)$ and the subband edges as functions of x ; (b) Sketch of the ellipse-quarters related to the integrations in Eq.(13).

带能相等, 即 $E = E_{-1} + V(x_A)$. 根据pn势的函数关系, 可以求得A点的位置坐标为

$$x_A = \frac{L}{\pi} \arccos \frac{E - E_{-1}}{V_0}. \quad (6)$$

粒子越过A点后, 对应的波矢 k_{-1} 变为虚数, 传输进入隧穿模式, 粒子沿着第-1个带边曲线向右移动的过程中, 虚波矢逐渐增大. 当粒子到达入射能与pn势曲线的交点B时, 空穴的能量恰好等于pn势, 即 $E = V(x_B)$. 求得B点的位置坐标为

$$x_B = \frac{L}{\pi} \arccos \frac{E}{V_0}. \quad (7)$$

这时横向子带的本征能量与纵向的波矢之间的关系满足 $E_{-1}^2 + v_F^2 \hbar^2 k_{-1}^2(x)^2 = 0$, 根据此关系可以求出粒子在到达B点时的波矢

$$k_{-1}(x_B) = i \left| \frac{E_{-1}}{\hbar v_F} \right|. \quad (8)$$

到达B点后, 如果粒子继续沿着第-1个带边曲线向右运动, 虚波矢将会继续增大, 这将导致非物理的结果

$$[E - V(x)]^2 = E_{-1}^2 + v_F^2 \hbar^2 k_{-1}^2(x) < 0. \quad (9)$$

所以粒子到达B点后, 必然要转移到其他的带边曲线上. 根据波函数的连接条件, 粒子只能从第-1个横向子带转移到第1个横向子带, 即发生空穴-电子转换, 对应于图2(a)中就是从B点转移到C点, 此时C点的位置坐标与B点的位置坐标相同. 粒

子到达C点时, 波矢仍然为虚数, 由于纯净的石墨烯中空穴能谱和电子能谱是对称的, 所以第-1个横向子带与第1个横向子带的本征能量相等. 粒子在B和C两点的纵向波矢相等, 即 $k_1(x_C) = k_{-1}(x_B)$. 然后粒子从C点开始, 沿着第1个带边曲线继续向右运动. 在C点, 电子的虚波矢取得最大值, 随着电子的右行, 虚波矢将不断减小. 当电子到达D点时, 虚波矢减小到零, D点是入射能和带边曲线的另一个交汇点, 电子的能量与带边能量相等, 即 $E = E_1 + V(x_D)$. 求得D的坐标为

$$x_D = \frac{L}{\pi} \arccos \frac{E - E_1}{V_0}. \quad (10)$$

电子越过D点后, 波矢变为实数, 电子由隧穿模式转变为传导模式. 如果石墨烯纳米带中的pn势变化比较缓慢, 上述过程, 即粒子从第-1个横向子带入射, 历经隧穿和空穴-电子转换, 最后从第1个子带出射的过程, 其透射率可以根据WKB准经典近似理论表示为

$$T_{-1} = \exp \left(-2 \int_{c_-} |k_{-1}(x) dx| \right) \times \exp \left(-2 \int_{c_+} |k_1(x) dx| \right), \quad (11)$$

其中 c_- , c_+ 分别表示粒子沿着第-1个带边曲线从A到B和沿着第1个带边曲线从C到D的积分路径. 根据(4)式, 求得波矢 $k_{\mp 1}$ 所满足的函数关系为

$$k_{\mp 1}(x) = \frac{1}{\hbar v_F} \sqrt{[E - V(x)]^2 - E_{\mp 1}^2}. \quad (12)$$

有了波矢 $k_{\mp 1}$ 的表达式后, 我们通过数值积分求出积分值, 得到电子通过石墨烯pn结的透射率. 由于波矢 $k_{\mp 1}$ 关于 x 的一阶导数在A点和D点为无穷, 在B点和C点为零, 所以该数值积分可以近似为求椭圆的面积, 如图2(b)所示. 波矢 $|k_{\mp 1}|$ 与 x 轴围成图形可以近似看做两个四分之一椭圆组合而成, 它们共用一个半长轴 $b = |E_1|/\hbar v_F = |E_{-1}|/\hbar v_F$, 但是另一个半长轴则不必相同. 积分的结果为

$$-2 \int_{c_-} |k_{-1}(x) dx| = S_1 = \frac{1}{4} \pi b (x_B - x_A),$$

$$-2 \int_{c_+} |k_1(x) dx| = S_2 = \frac{1}{4} \pi b (x_D - x_C). \quad (13)$$

将(13)式代入到(11)式中, 得到粒子通过第-1个和第1个横向子带的透射率为

$$T_1 = \exp \left[-\frac{1}{2} \pi b (x_B - x_A) \right] \exp \left[-\frac{1}{2} \pi b (x_D - x_C) \right]$$

$$= \exp \left(-\frac{1}{2} \pi b d \right), \quad (14)$$

式中 $d = x_D - x_A$ 是 A 点和 D 点之间的距离, 而 A 和 D 点的坐标已经在 (6) 和 (10) 式中得到. 到此我们得到了粒子从第一个隧穿通道穿过 pn 结的透射率, 使用同样的方法可以求得粒子通过其他隧穿通道的透射率. 最后, 根据 Landauer-Büttiker 公式, 求得电子通过石墨烯 pn 结的总电导为

$$G = \frac{e^2}{h} \sum_n T_n, \quad (15)$$

其中求和针对所有参与 pn 结隧穿的子带. 以上的推导与系统是否存在自旋轨道耦合无关, 仅仅要求 pn 势是缓变势. 对于我们研究的系统来说, 哈密顿量虽然是自旋相关的, 但各个子带带边是自旋简并的, 计入向上向下两种自旋时将上式的结果需要加倍.

3 结果与讨论

3.1 隧穿电导台阶

在讨论的过程中为了表述的方便, 我们选取最近邻的跳跃能 t 为能量单位, 用纵向格点数 N_L 和横向格点数 N_W 表示 pn 结的长度和纳米带的宽度. 图 3 (a) 给出了自旋轨道耦合强度 $t_0 = 0.01t$ 时石墨烯纳米带的能谱结构, 空穴能谱和电子能谱对称, 两者之间存在着能隙. 图 3 (b) 中实线和虚线分别表示用 WKB 近似和非平衡格林函数方法计算电子通过石墨烯 pn 结的电导, 从计算结果可以看出两种方法得到的电导随费米能变化的曲线基本吻合. 图中的电导随费米能的变化曲线呈不等高阶梯

状, 在费米能位于 pn 结两端能量中点时取得最大值, 以该能量为中心, 电导曲线左右对称. 我们设想一个费米能 E_F 从 V_0 缓慢减小到 $-V_0$ 的过程. 刚开始费米能还未到达第 -1 个横向子带的带边时, 费米能处于左侧的能隙之中, 粒子无法从横向子带的左端入射, 所以电导为零. 当费米能越过第 -1 个横向子带的带边时, 即 $E_F - V_0 = E_{-1}$ 时, 第一个隧穿通道打开, 粒子从第 -1 个横向子带入射, 向右运动的过程中历经隧穿和空穴-电子转换, 最后从第 1 个子带出射. 这个过程电导值将从 0 增大到 $(2e^2/h)T_1$. 随着费米能的逐渐降低, 更多的隧穿通道将会打开, 所以电导曲线继续呈阶梯式升高. 当费米能 $E_F = 0$ 时, 所有的隧穿通道全部打开, 电导达到最大值. 继续减小费米能, 隧穿通道将逐个关闭, 电导曲线也会逐渐降低. 当费米能减小到 $-V_0$ 时, 所有的隧穿通道全部关闭, 粒子无法通过石墨烯纳米带 pn 结, 此时对应的电导值为 0. 在电导台阶升高的过程中, 每个台阶的高度逐渐减小, 这是因为费米能从 V_0 到 0 的过程中, 横向子带的编号 $|n|$ 逐渐增大, 对应的本征能量 $|E_n|$ 也逐渐升高. 根据之前的讨论结果可知, 粒子对应横向子带的本征能量越高, 其通过 pn 结的透射率就越低, 所以费米能从 V_0 到 0 的过程中, 每个电导台阶的高度逐渐减小. 与非平衡格林函数方法计算电导相比, 子带隧穿模型所需要的计算时间少到可以忽略不计, 而又能得到与非平衡格林函数方法基本一致结果, 因此在以下的计算中, 我们将都采用子带隧穿模型, 除非特别指明采用了其他方法.

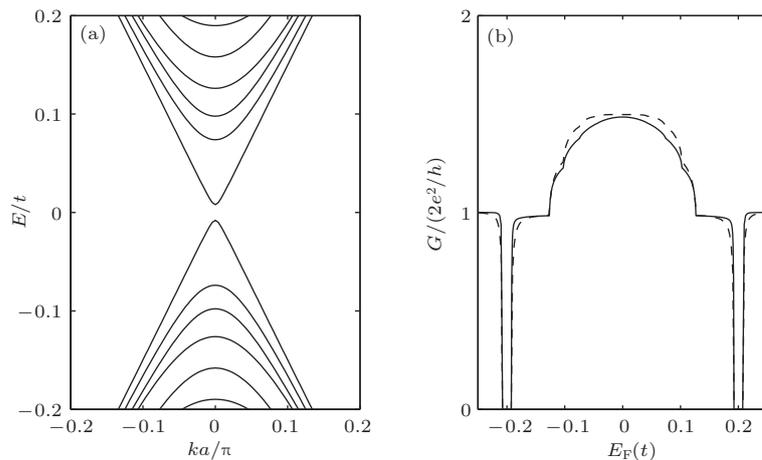


图 3 (a) 自旋轨道耦合作用下扶手型石墨烯纳米带的能谱图和 (b) 采用子带隧穿模型 (实线) 和非平衡格林函数 (虚线) 方法得到的 pn 结电导随费米能的变化曲线, 参数取为 $t_0 = 0.01t$, $V_0 = 0.2t$, $N_W = 81$, $N_L = 20$

Fig. 3. (a) Band structure of armchair graphene ribbon and (b) conductance of pn junction obtained from the subband tunneling model (solid line) and the non-equilibrium Green' function method (dashed line) versus the Fermi energy. Parameters are $t_0 = 0.01t$, $V_0 = 0.2t$, $N_W = 81$, and $N_L = 20$.

3.2 自旋轨道耦合对电导的影响

图 4(a), (b), (c) 分别是不同自旋轨道耦合强度下石墨烯纳米带的能谱结构. 可以看到, 在没有自旋轨道相互作用时导带和价带之间存在一个能隙, 这是由于石墨烯纳米带的横向限制所致. 随着自旋轨道耦合作用的引入并逐渐增大, 边界态将逐渐形成, 最高的空穴能带和最低的电子能带之间的能隙逐渐减小, 而其余空穴能带和电子能带相互远离. 当自旋轨道耦合强度增加至 $t_0 = 0.03t$ 时, 导带与价带间能隙闭合, 出现无能隙的边缘态, 电子将会在不同的边界以相反的方向运动. 图 4(d) 给出了不同自旋轨道耦合强度下的电导随费米能的变化情况. 从图中可以看出电导依然随费米能呈阶梯状变化, 费米能 $E_F = 0$ 时, 电导取得最大值.

自旋轨道相互作用逐渐增强的过程中, 第一个电导台阶的高度升高, 而其余的电导台阶的高度逐渐降低, 并且电子通过 pn 结总的电导减小. 这是因为自旋轨道作用增强时, 边缘态能带相互靠近, 对应的第一个子带的本征能量 $|E_1|$ 减小, 粒子通过第一个横向子带的透射率变大, 所以第一个电导台阶升高. 空穴能谱和电子能谱的其余子带相互远离, 对应子带的横向本征能量升高, 粒子通过石墨烯 pn 结的透射率减小, 所以电导台阶的高度降低. 当自旋轨道耦合强度增加到 $t_0/t = 0.03$ 时, 出现无能隙的边缘态, 并且其余子带的带边已不在 pn 势变化范围内, 电子只能从唯一的隧穿通道穿过石墨烯 pn 结, 对应的电导曲线中只有一个电导台阶, 并始终保持为 $2e^2/h$.

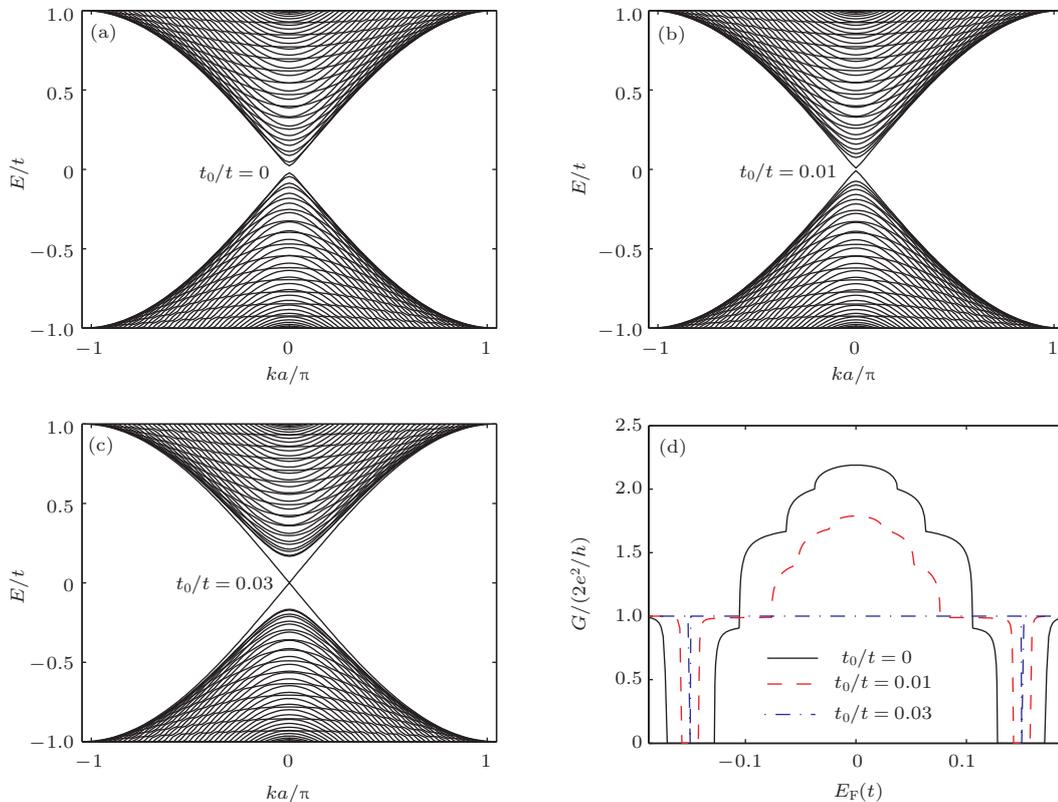


图 4 (网刊彩色) (a)—(c) 不同自旋轨道耦合参数下扶手型石墨烯纳米带的能谱图, 其中 $V_0 = 0.15t$, $N_W = 81$, $N_L = 20$; (d) 自旋轨道耦合下电导随费米能的变化曲线

Fig. 4. (color online) (a)—(c) Band structures of armchair graphene ribbon and (d) conductance versus Fermi energy for different spin-orbit coupling intensities. Parameters are $V_0 = 0.15t$, $N_W = 81$, and $N_L = 20$.

3.3 pn 结长度对电导的影响

图 5(a) 给出的四条曲线分别表示转变区域纳米带的长度为 $N_L = 10, 20, 40, 100$ 时电导随费米能变化的曲线, 电导曲线依然呈阶梯状变化, 费米能 $E_F = 0$ 时取得电导的最大值. 随着转变区域

长度的增加, 第一个电导台阶的高度几乎不发生变化, 而其余的电导台阶的高度将迅速减小. 这是因为第一个电导台阶对应于边缘态的电导, 边缘态能带的带边近乎为 0, 从而边缘态的粒子几乎可以毫无阻碍的通过 pn 结. 纳米带长度增大

时, 非边界态的电子在通过 pn 结时透射率更小, 所以每电导台阶的高度较低. 为了比较直观的了解 pn 结总电导的变化情况, 在图 5 (b) 中选取费米能 $E_F = 0$ 时, 电导随纳米带长度的变化曲线. 可以看出, 扣除了边界态的贡献之后, 电导随纳米带长度

的增加呈指数形式衰减. 转变区域长度越长时, 粒子在穿过 pn 结时所经历的隧穿距离也就越长, 因而透射率就越小, 电子通过石墨烯 pn 结的电导也就越小. 当转换区的长度非常大时, 电导几乎趋于 $2e^2/h$.

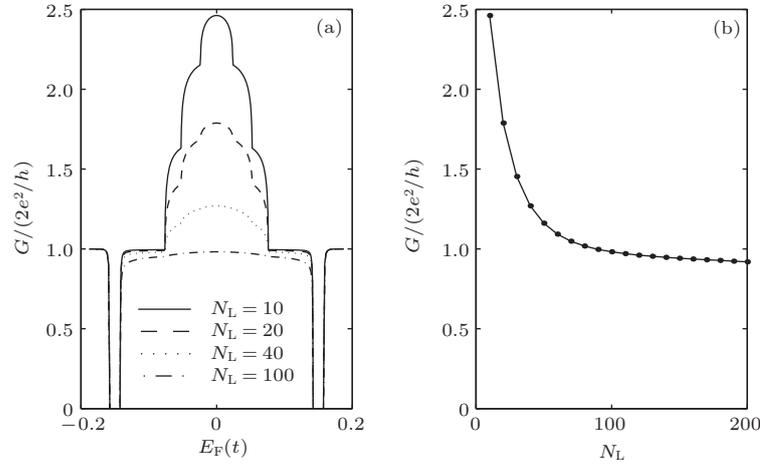


图 5 (a) 不同 pn 结长度下, 电导随费米能的变化曲线; (b) 在 $E_F = 0$ 处电导随 pn 结长度的变化曲线 (其他参数为 $t_0 = 0.01t$, $N_W = 81$)

Fig. 5. (a) Conductance versus Fermi energy for different junction lengths and (b) conductance at $E_F = 0$ as a function of junction length. Parameters are $t_0 = 0.01t$ and $N_W = 81$.

3.4 杂质对电导的影响

最后我们利用非平衡格林函数的方法计算了在 pn 结转变区域随机分布着某种替位型杂质情况下的电导, 每个杂质势相同但杂质出现的位置是随机的, 每条电导曲线是计算 100 次求平均值. 为了比较全面的了解杂质对石墨烯 pn 结电导的影响, 我们分两种情况进行讨论: 1) 掺入杂质的浓度 (比例) 一定, 改变杂质势的强度; 2) 掺入杂质的强度一

定, 改变杂质的浓度 (比例). 其中杂质的浓度为 P , 杂质势的强度为 D . 两种情况下电导的计算结果如图 6 所示. 当掺入杂质的浓度较小和杂质的强度较弱时, 电导曲线的阶梯状变化仍然得以保持, 并有以下几个特征: 1) 电导曲线将不再关于 $E_F = 0$ 对称, 并且电导的最大值将会出现在费米能 $E_F > 0$ 时的位置, 这是由于掺入正值能量的杂质, 使得整个 pn 结区域的势能, 包括 pn 势和杂质势, 不再关于 $E_F = 0$ 对称, 并将电导的峰值向正向推移.

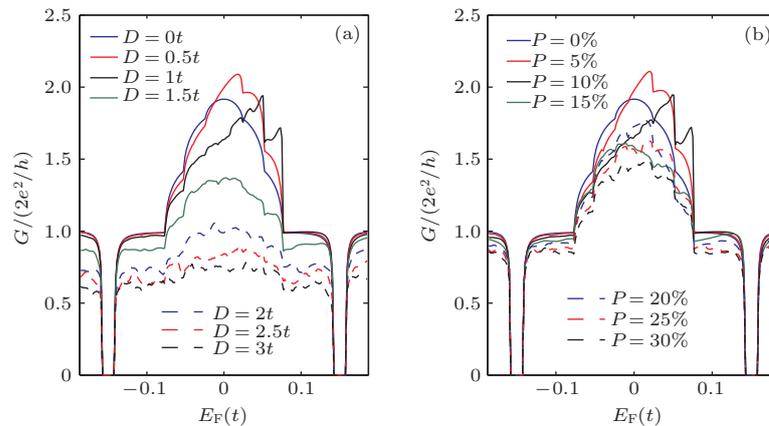


图 6 (网刊彩色) (a) 杂质浓度固定在 $P = 10\%$, 不同杂质强度下和 (b) 杂质强度固定为 $D = 2t$, 不同杂质浓度下, 电导随费米能的变化曲线. 其中 $t_0 = 0.01t$, $N_W = 81$, $N_L = 20$

Fig. 6. (color online) Conductance versus Fermi energy (a) for different impurity magnitudes when impurity concentration is fixed as $P = 10\%$ and (b) for concentrations when magnitude is set by $D = 2t$. Other parameters are $t_0 = 0.01t$, $N_W = 81$, $N_L = 20$.

2) 最低的电导台阶几乎完全不受影响, 这是因为这个台阶是由边界态导电形成的, 它具有对弱散射免疫的特性. 3) 如果我们用 $P \times D$ 来量度整个 pn 结区域的无序程度的话, 在相同无序度的情况下, 电导对增加杂质强度要比增加杂质浓度更为敏感. 当掺入杂质的浓度较大或者杂质的强度较强时, 整个电导曲线将会显著下降, 电导阶曲线的阶梯将被破坏, 电导曲线关于 $E_F = 0$ 的不对称性不再明显, 整个电导曲线几乎都由边界态的电导贡献, 并且边界态的电导也显著降低.

4 结 论

本文利用 WKB 子带隧穿模型和非平衡格林函数方法对自旋轨道相互作用下石墨烯纳米带 pn 结的电子输运性质进行了一些研究, 重点研究了自旋轨道耦合强度, pn 转变区域长度, 替位杂质对石墨烯 pn 结电导的影响. 计算结果表明当粒子的入射能处于 pn 结两端势能之间时, 电导随费米能的变化曲线呈不等阶梯状, 并在费米能位于 pn 结两端能量中点时取得最大值. 自旋轨道耦合作用增强时, 石墨烯纳米带能谱结构中能隙消失, 出现无能隙的边缘态, 电子可以沿着纳米带的边缘几乎毫无阻碍的通过 pn 结. 随着石墨烯 pn 结长度的增加, 电导以指数形式衰减. 我们用一个简明直观的物理图景来说明粒子穿过 pn 结时所经历的物理过程, 用 WKB 近似来计算电导, 并且计算结果与格林函数方法吻合. 当 pn 转换区中存在随机分布的较弱的替位型杂质时, 电导在费米能取正值时取得最大值, 电导曲线将不再左右对称; 在强杂质下, 仅边界态的形成的电导台阶能够保持. 这些计算结果将为利用石墨烯制造自旋相关的 pn 结器件提供一定的理论基础.

参考文献

- [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] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Katsnelson M I, Grigorieva I V, Dubonos S V, Firsov A A 2005 *Nature* **438** 197
- [3] Neto C A H, Guinea F, Peres N M R, Novoselov K S, Geim A K 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 109

- [4] Katsnelson M I, Novoselov K S, Geim A K 2006 *Nat. Phys.* **2** 620
- [5] Stander N, Huard B, Gordon C D 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 026807
- [6] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 226801
- [7] He W Y, He L 2013 *Phys. Rev. B* **88** 085411
- [8] Jiang H, Qiao Z H, Liu H W, Shi J R, Niu Q 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 116803
- [9] Balakrishnan J, Koon G K W, Jaiswal M, Neto C A H, Ozyilmaz B 2013 *Nat. Phys.* **9** 284
- [10] Hu J, Alicea J, Wu R Q, Franz M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 266801
- [11] Liu Y, Yao J, Chen C, Miao L, Jiang J J 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 63601 (in Chinese) [刘源, 姚洁, 陈驰, 缪灵, 江建军 2013 物理学报 **62** 63601]
- [12] Huang X Q, Lin C F, Yin X L, Zhao R G, Wang E G, Hu Z H 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 197301 (in Chinese) [黄向前, 林陈昉, 尹秀丽, 赵汝光, 王恩哥, 胡宗海 2014 物理学报 **63** 197301]
- [13] Chen L, Liu C C, Feng B J, He X Y, Cheng P, Ding Z J, Meng S, Yao Y G, Wu K H 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 056804
- [14] Liu C C, Feng W X, Yao Y G 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 076802
- [15] Cai Y, Chuu C P, Wei C M, Chou M Y 2013 *Phys. Rev. B* **88** 245408
- [16] Kim Y, Choi K, Ihm J, Jin H 2014 *Phys. Rev. B* **89** 085429
- [17] Yokoyama T 2014 *New J. Phys.* **16** 085005
- [18] Rachel S, Ezawa M 2014 *Phys. Rev. B* **89** 195303
- [19] Wang S K, Wang J, Chan K S 2014 *New J. Phys.* **16** 045015
- [20] Liu C C, Jiang H, Yao Y G 2011 *Phys. Rev. B* **84** 195430
- [21] Chiu H Y, Perebeinos V, Lin Y M, Avouris P 2010 *Nano Lett.* **10** 4634
- [22] Woszczyna M, Friedemann M, Dziomba T, Weimann T, Ahlers F J 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 022112
- [23] Silvestrov P G, Efetov K B 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 016802
- [24] Nakaharai S, Williams J R, Marcus C M 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 036602
- [25] Cheianov V V, Fal'ko V, Altshuler B L 2007 *Science* **315** 1252
- [26] Gómez S, Bursset P, Herrera W J, Yeyati L A 2012 *Phys. Rev. B* **85** 115411
- [27] Williams J R, Marcus C M 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 046602
- [28] Williams J R, DiCarlo L, Marcus C M 2007 *Science* **317** 638
- [29] Cheianov V V, Falko V I 2006 *Phys. Rev. B* **74** 041403
- [30] Yang M, Ran X J, Cui Y, Wang R Q 2012 *J. Appl. Phys.* **111** 083708

Electronic transport properties of graphene pn junctions with spin-orbit coupling*

Chen Dong-Hai Yang Mou[†] Duan Hou-Jian Wang Rui-Qiang

(Laboratory of Quantum Engineering and Quantum Materials, School of Physics and Telecommunication Engineering, South China Normal University, Guangzhou 510006, China)

(Received 10 November 2014; revised manuscript received 19 December 2014)

Abstract

We have investigated the electronic transport properties of graphene pn junction with spin-orbit coupling. If the incident energy lies between the potentials of the two ends of the pn junction, a particle can penetrate the graphene pn junction by tunneling accompanied by the electron-hole transition. The curve of conductance versus Fermi energy shows steps and reaches its maximum when the Fermi energy lies at the middle of the potentials of the p and n areas. As the length of graphene pn junction increases, the conductance decays exponentially. The spin-orbit coupling leads to a bulk energy gap and edge states; the gap reduces the conductance dramatically and the edge states result in an almost perfect conductance plateau. When the pn region is influenced by randomly doped impurities, the conductance curves are no longer symmetrical in the case of weak doping, while in the strong doping case, the step structures are destroyed but the conductance plateau contributed by the edge states survives well.

Keywords: graphene, pn junction, spin-orbit coupling

PACS: 72.80.Vp, 73.22.Pr, 73.23.-b, 81.05.ue

DOI: [10.7498/aps.64.097201](https://doi.org/10.7498/aps.64.097201)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11274124, 11474106).

[†] Corresponding author. E-mail: yang.mou@hotmail.com