

石墨烯线缺陷局域形变对谷输运性质的影响*

崔磊¹⁾ 刘洪梅²⁾ 任重丹³⁾ 杨柳²⁾ 田宏玉^{2)†} 汪萨克^{4)‡}

1) (宿迁学院信息工程学院, 宿迁 223800)

2) (临沂大学物理与电子工程学院, 临沂 276005)

3) (遵义师范学院物理与电子科学学院, 遵义 563006)

4) (金陵科技学院理学院, 南京 211169)

(2023 年 5 月 6 日收到; 2023 年 6 月 8 日收到修改稿)

石墨烯线缺陷在谷电子学中有非常重要的应用. 实验发现, 线缺陷附近存在局域形变. 当前研究普遍认为, 由于形变较小, 对近邻跳跃能的影响小于 5%, 局域形变对谷输运性质的影响可以忽略不计. 基于第一性原理计算和非平衡格林函数方法, 本文研究了局域形变对两种不同构型线缺陷谷输运性质的影响. 结果发现, 对于 58 环线缺陷, 在较低能量下, 局域形变对谷隧穿系数的影响并不明显, 然而, 在较高能量下局域形变的影响非常明显, 谷隧穿系数最大值并没有随着能量升高而减小, 而是在很大能量范围内都保持不变. 进一步研究表明, 该效应是由与线缺陷相连的 C—C 键长发生改变造成的. 通过构建两个平行线缺陷, 可以在很大的角度范围内都实现 100% 谷过滤效果. 相比之下, 局域形变对 57 环线缺陷谷隧穿系数的影响非常小.

关键词: 石墨烯, 线缺陷, 第一性原理计算, 局域形变, 谷过滤**PACS:** 61.48.Gh, 61.72.Lk, 62.20.F-, 68.35.Gy**DOI:** 10.7498/aps.72.20230736

1 引言

单层石墨烯由碳原子按平面六角蜂窝状结构排列而成, 由于具有奇特的能带结构和电子性质, 近年来受到大量关注^[1,2]. 理论研究表明, 石墨烯是零带隙半金属, 价带和导带相交于 Dirac 点, 且在 Dirac 点附近具有线性色散关系^[3]. 石墨烯具有很高的载流子迁移率^[4], 常温下即便存在杂质散射时也能达到 $10^5 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ 量级, 虽然有些半导体中报道的载流子迁移率可达到 $7.7 \times 10^5 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ (如 InSb), 但这是干净样品得到的结果. 所以, 石墨烯是优良的导电材料. 石墨烯布里渊区顶点上有

两个简并但不等价的 Dirac 点, 也称为 K 和 K' 谷^[5], 它们具有相同的能量但是在动量空间的位置并不重合, 两个谷态的波函数互为共轭^[6]. 类似于自旋电子学中的自旋自由度, 谷自由度也可以作为信息载体, 并产生了谷电子学^[5]. 石墨烯是非常优秀的谷电子学材料, 研究人员构建了各种理论模型, 比如施加应力^[7–9]、磁场^[10,11]、极化光^[12–14]等手段来实现谷极化和分离.

大块二维材料 (石墨烯、硅烯、过渡金属硫化物等) 在生长的过程中通常会出现多晶结构^[15–20]. 多晶二维材料由晶粒和连接晶粒的晶界构成. 不同于原始构型, 它们晶界两侧晶粒的晶格基矢不再相同, 而是有一定夹角, 导致晶界两侧特定谷在动量

* 宿迁市重点实验室项目 (批准号: M202109)、宿迁学院科研平台 (批准号: 2021pt04)、国家自然科学基金 (批准号: 12264059, 12004149)、山东省自然科学基金 (批准号: ZR2022MA026, ZR2020QA062, ZR2023MA027)、江苏省自然科学基金 (批准号: BK20211002) 和江苏省“青蓝工程”资助的课题.

† 通信作者. E-mail: tianhongyu@lyu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: IsaacWang@jit.edu.cn

空间的位置发生偏离, 所以, 谷电子在穿过晶界时会呈现出奇特的散射现象^[21–23]. 通常, 在晶界附近, 晶格结构会发生变形. 石墨烯线缺陷是一种典型的多晶结构, 线缺陷两侧 A/B 子格互换, 晶格基矢反向, 两侧谷序数也发生调换. 实验上, 57 环线缺陷^[16] 和 58 环线缺陷^[18] 已经在特定金属衬底上成功制备出来. 通过第一性原理研究发现, 即便不需要金属衬底, 也可以生长出石墨烯 58 环线缺陷^[24]. 线缺陷在谷电子学上有重要应用, 但是当前研究都集中在 58 环线缺陷, 没有特别说明, 以下线缺陷都是指 58 环线缺陷. 石墨烯线缺陷对谷电子散射具有角度选择性^[22,24], 大散射角下只有一个谷的电子可以隧穿, 而另一个谷的电子不能隧穿, 所以大散射角下是完全谷极化的, 但是随着散射角变化, 谷极化度减小甚至在正入射时为零. 所以, 应用线缺陷实现可探测的谷电流, 仍然面临很大挑战, 因为只有让电子沿着线缺陷方向入射才能观察到谷电流. 为了克服这一困难, 研究人员从理论上对石墨烯线缺陷进行了大量研究. Liu 等^[25] 发现, 存在多个平行线缺陷时, 可以在更大的散射角范围内都出现谷极化效应, 而且由于电子在两个相邻线缺陷之间发生共振隧穿, 谷隧穿系数会增强. Ren 等^[26] 发现, 存在局域磁场时, 一个谷的隧穿被强烈抑制, 而另一个谷隧穿系数最大值 ($T = 1$) 并没有减小, 只是随着磁场改变 $T = 1$ 对应的散射角不同, 因此可以在任意角度下都可以实现谷极化, 而且可以通过调控磁场大小来调节谷电子入射方向. 最近, Du 等^[27] 发现, 在线缺陷中加入局域应力, 可以实现比较好的谷过滤效应, 而且由于电子干涉效应谷隧穿系数会增强.

近年来, 尽管研究人员对石墨烯线缺陷中的谷输运性质进行了大量的研究, 然而, 当前的研究并没有充分考虑石墨烯线缺陷附近局域形变带来的影响. 实验上发现, 石墨烯中嵌入线缺陷之后, 线缺陷附近的 C—C 键长会发生变化, 且形变量有增加也有减少^[18]. 由于形变导致的最近邻跃迁能变化量小于 5%, 且研究体系能量较低, 普遍认为, 线缺陷附近的局域形变不会对谷输运性质产生太大影响^[25,26]. Jiang 等^[28] 定性研究了线缺陷上的碳原子与最近邻碳原子近邻耦合能对谷隧穿系数的影响, 我们希望能考虑真实的实验环境下键长变化带来的影响. 键长改变, 会产生应力^[29], 进而导致赝磁场, 赝磁场对两个谷的符号相反, 势必对谷电子隧穿性质产生影响. 首先, 根据第一性原理计算方

法计算出线缺陷附近 C—C 键长参数, 然后采用紧束缚近似格点模型和非平衡格林函数方法^[30] 计算两种不同构型线缺陷谷隧穿系数, 考察局域形变对谷输运性质的影响. 结果发现, 局域形变对 58 环线缺陷和 57 环线缺陷谷隧穿系数的影响不同. 对于 58 环线缺陷, 在能量较低时, 局域形变带来的影响并不明显, 但是在较高能量下, 这种影响非常明显, 谷隧穿系数会显著增强, 通过构建两个平行线缺陷, 可以实现很好的谷过滤效应. 对于 57 环线缺陷, 局域形变对谷隧穿系数的影响不明显.

2 理论模型

图 1 为研究的石墨烯线缺陷模型, 其中线缺陷沿着 y 方向无限延伸. 采用第一性原理计算方法计算了两种不同构型线缺陷附近的 C—C 键长, 分别是 58 环线缺陷 (图 1(a)) 和 57 环线缺陷 (图 1(b)).

利用维也纳从头计算软件包 (Vienna *ab initio* simulation package, VASP)^[31] 进行第一性原理计算, 采用投影缀加波方法准确有效地计算材料的电子性质. 交换相关泛函采用广义梯度近似的 Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE)^[32] 方法. 采用的平面波截断能是 500 eV, k 点网格为 $3 \times 9 \times 1$. 为了防止相邻层间的相互作用, 设置了 20 Å ($1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$) 的真空层. 结构弛豫过程中, 能量收敛标准为 10^{-5} eV , 每个原子受力小于 0.01 eV/Å . 图 1 中的虚线长方形作为第一性原理计算的原胞, 含有 58 元环缺陷的模型包含 34 个碳原子, 含有 57 元环缺陷的模型包含 40 个碳原子. 经过结构弛豫, 58 元环缺陷和 57 元环缺陷键长参数分别如图 1(a) 和图 1(b) 所示.

紧束缚近似下, 石墨烯线缺陷哈密顿量为^[25,26]

$$H = \sum_{i,j} t_{ij} c_i^\dagger c_j, \quad (1)$$

其中 $c_i^\dagger (c_i)$ 是格点 i 电子产生 (湮灭) 算符, t_{ij} 是格点 i 和 j 之间近邻跃迁能. 线缺陷附近, 由于键长发生改变, 最近邻跃迁能作如下改变^[29]:

$$t_{ij} = t e^{-\beta(d_{ij}/a_{C-C}-1)}, \quad (2)$$

式中, $t = 2.7 \text{ eV}$ 是原始石墨烯中最近邻跳跃能, 在计算中令 $t = 1$ 作为能量单位. $a_{C-C} = 1.426 \text{ Å}$ 是原始石墨烯 C—C 键长, 衰减因子 $\beta = 3.37$ 表明最近邻跃迁能 t_{ij} 随 C—C 键长 d_{ij} 呈指数变化. 根据图 1 中键长参数, 相邻格点间的最近邻跃迁能需要根据 (2) 式进行修正. 在没有发生形变区域, 最近邻

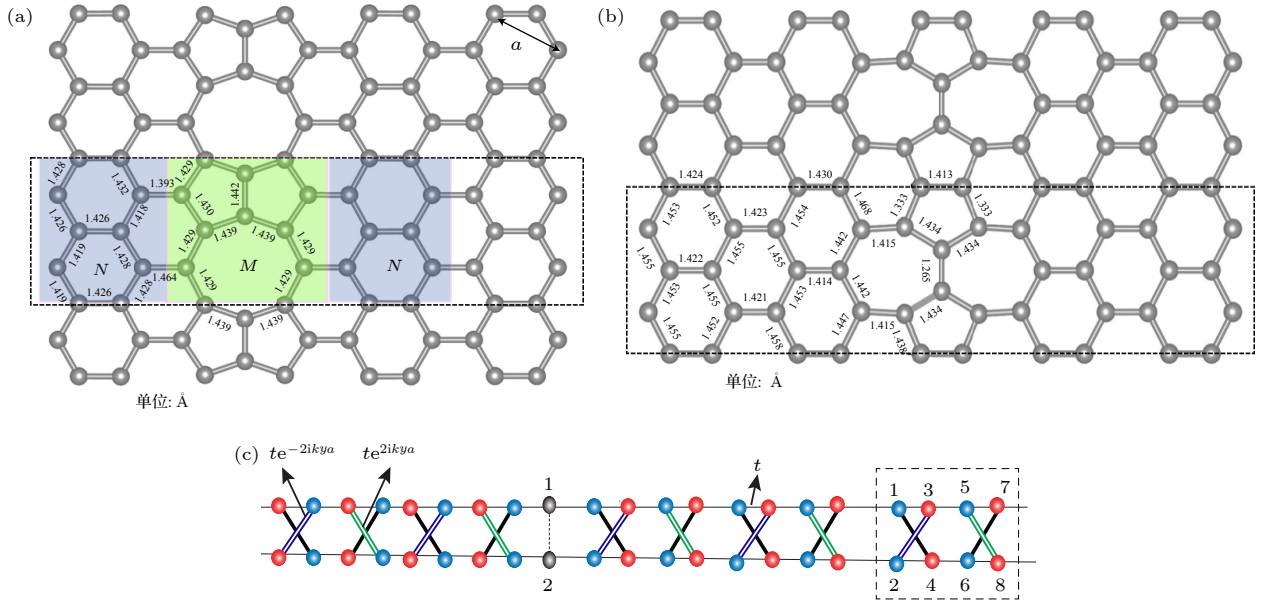


图 1 (a) 石墨烯 58 环线缺陷结构示意图, M 和 N 分别表示离线缺陷最近邻和次近邻形变区域. (b) 石墨烯 57 环线缺陷结构示意图, 两条虚线之间区域是最小周期性单元, 图中 C—C 键长是通过第一性原理计算得到的, 线缺陷左右两侧键长关于对称轴对称. (c) 无限大石墨烯 58 环线缺陷简化晶格模型, 虚线框表示一个超胞

Fig. 1. (a) Diagrammatic sketch for the 58 ring line defect of graphene, where M and N represent the nearest neighbor and next nearest neighbor deformation regions away from the line defect, respectively. (b) Diagrammatic sketch for the 57 ring line defect of graphene. The region between two neighbouring dotted lines is a unit cell. The C—C bond lengths were calculated using first-principles theory, they are symmetric with respect to the symmetry axis. (c) The simplified lattice model of the infinite graphene with 58 ring line defect, and the dashed box denotes a supercell.

跳跃能仍然是 t . 局域形变会产生应力, 应力作用下, 两个谷的费米环在动量空间向相对方向移动, 而且应力导致的赝磁场对两个谷有不同的符号 [29], 必然对谷电子隧穿性质产生影响.

从线缺陷晶格结构不难发现, 它在 y 方向具有平移对称性, 因此 k_y 是守恒量. 根据傅里叶变换, 产生算符和湮灭算符可以写成:

$$\begin{aligned} c_j^\dagger &= \sum_{k_y} c_{k_y, j_x}^\dagger e^{-2ik_y j_y a}, \\ c_j &= \sum_{k_y} c_{k_y, j_x} e^{2ik_y j_y a}. \end{aligned} \quad (3)$$

下面以 58 环线缺陷为例, 介绍谷隧穿系数计算方法. 对于 57 环线缺陷, 可以采用相同的处理方法, 只是哈密顿矩阵不同. 在动量空间, 哈密顿矩阵可以写成如下形式:

$$\begin{aligned} H_0 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-2ik_y a} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & e^{2ik_y a} & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & e^{2ik_y a} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-2ik_y a} & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad H_R = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ H_D &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad H_{DR} = \begin{pmatrix} t_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad H_{DL} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4)$$

其中石墨烯的晶格常数 $a = \sqrt{3}a_{C-C}$; \mathbf{H}_0 是单个超胞的哈密顿矩阵; $\mathbf{H}_R(\mathbf{H}_R^\dagger)$ 表示与右侧 (左侧) 超胞相互作用的哈密顿矩阵; \mathbf{H}_D 是线缺陷自身哈密顿矩阵; $\mathbf{H}_{DR}(\mathbf{H}_{DL})$ 是线缺陷与右侧 (左侧) 超胞相互作用的哈密顿矩阵; t_1 是根据图 1 修正后的最近邻跃迁能. 如前所述, 线缺陷附近的超胞哈密顿矩阵以及它们之间的相互作用要根据键长做出相应修正. 根据 (4) 式, 可以得到动量空间石墨烯线缺陷哈密顿矩阵:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{k_y} = & - \sum_i \varphi_i^\dagger \mathbf{H}_0 \varphi_i - \sum_i \varphi_i^\dagger \mathbf{H}_R \varphi_{i+1} \\ & - \varphi_{-1}^\dagger \mathbf{H}_{DL}^\dagger \varphi_0 - \varphi_0^\dagger \mathbf{H}_D \varphi_0 \\ & - \varphi_0^\dagger \mathbf{H}_{DR} \varphi_1 + \text{h.c.}, \end{aligned} \quad (5)$$

其中, $\varphi_i^\dagger = [\varphi_{k_y, i, 1}^\dagger, \varphi_{k_y, i, 2}^\dagger, \dots, \varphi_{k_y, i, 8}^\dagger]$, i 表示原胞的位置.

应用非平衡格林函数方法计算具有能量 E 和动量 k_y 的电子穿过线缺陷的隧穿系数:

$$T_{k_y}(E) = \text{Tr} [\Gamma_L(E) G^r(E) \Gamma_R(E) G^a(E)]_{k_y}, \quad (6)$$

其中 G^r 和 G^a 分别是推迟和超前格林函数, 线宽函数 $\Gamma_{L,R}(E) = i[\Sigma_{L,R}^<(E) - \Sigma_{L,R}^>(E)]$, $\Sigma_{L,R}^<(E)$ 和 $\Sigma_{L,R}^>(E)$ 分别是左侧/右侧电极推迟自能和超前自能, 用半无限大准一维石墨烯格子表示左右电极, 可应用迭代算法计算电极自能以及格林函数 $G^r(E)$. 得到隧

穿系数后, 就能用 Landauer-Büttiker 公式计算电导或电流. 在线缺陷中, 两个谷在动量空间的位置为 $[0, \pm\pi/3a]$. 所以, 两个谷的电子满足关系 $k_x = q_x$ 和 $k_y = q_y \pm \pi/(3a)$, 其中 q_x/q_y 表示电子在 x/y 方向的群速度. 结合 $E = \sqrt{3}aq_t/2$, 可得谷隧穿 $T_{K/K'}$ 与散射角 α ($\alpha = \arctan(q_y/q_x)$) 之间的关系, 进而得到谷极化度 $P = (T_K - T_{K'})/(T_K + T_{K'})$.

3 计算结果

根据 (6) 式, 可以得到不同费米能下 K 谷隧穿系数 T_K 随散射角 α 的变化关系, 其中图 2(a) 是没有考虑线缺陷附近局域形变的结果, 而图 2(b) 则是考虑了线缺陷附近局域形变的结果. 可以发现, 没有考虑局域形变时, 随着能量升高, T_K 最大值逐渐减小, 比如 $E = 0.01t$, T_K 最大值约为 1, 而 $E = 0.05t$ 时该值为 0.85, $E = 0.1t$ 时减小到 0.7, $E = 0.15t$ 时甚至减小到 0.55. 这一结果与文献 [21] 结果一致. 隧穿系数随能量升高而减小与高能线性色散关系的破坏有关. 谷隧穿系数减小, 对于观察纯谷电流是非常不利的. 然而, 在考虑线缺陷附近的局域形变时, 发现 T_K 最大值在很大能量范围内都能保持在 1, 甚至在 $E = 0.15t$ 时还能保持 1, 在 $E = 0.2t$ 时也能达到 0.85. 另外还发现, 考虑局域形变时, $T_K = 1$ 所对应的散射角 α 随着能量增

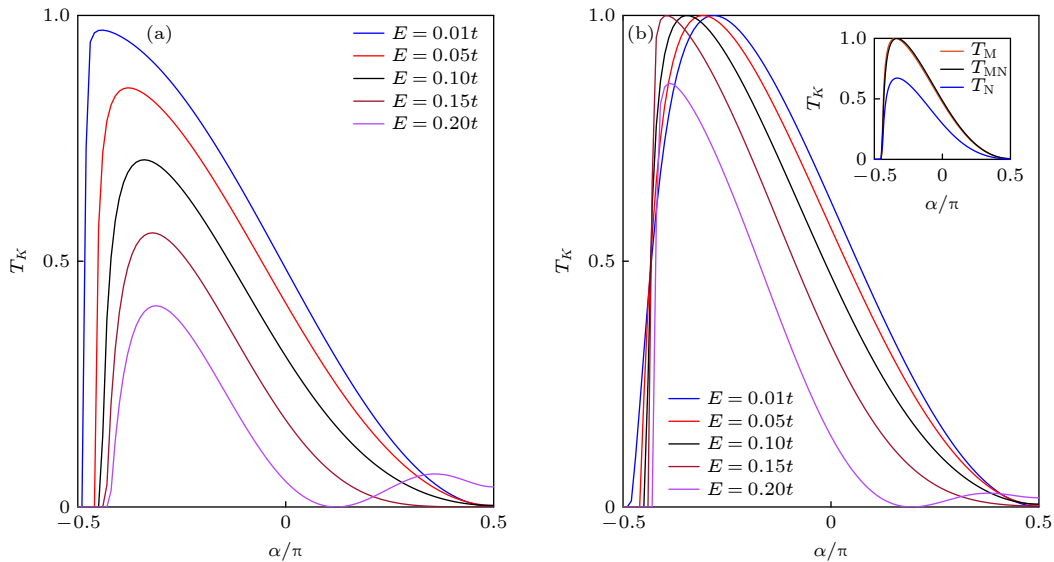


图 2 不同费米能下 K 谷隧穿系数 T_K 随散射角 α 变化关系 (a) 未考虑局域形变的影响; (b) 考虑局域形变的影响. 右上角插图 T_M , T_N 和 T_{MN} 分别表示 $E = 0.1t$ 时只考虑图 1(a) 中 M 区域, N 区域以及 MN 区域形变的结果

Fig. 2. Transmission coefficient T_K as a function of α for different Fermi energies: (a) Local deformations are not taken into account; (b) local deformations are taken into account. In the inset, T_M , T_N and T_{MN} respectively represent the results of considering only the deformation in the M region, the N region and MN regions in Fig. 1(a) when $E = 0.1t$.

加沿着散射角轴移动, 由 $E = 0.01t$ 时的 $\alpha = -0.27\pi$ 移动到 $E = 0.15t$ 时的 $\alpha = -0.4\pi$. 这种移动与应力导致的费米环移动有关. 值得一提的是, K' 谷隧穿系数 $T_{K'}$ 与 T_K 关于 $\alpha = 0$ 对称, 即 $T_K(\alpha) = T_{K'}(-\alpha)$.

为了探索局域形变对谷隧穿的影响机制, 如图 1(a) 所示, 将局域形变分成两个区域, M 区域和 N 区域, M 区域紧靠线缺陷上的两个原子, N 区域紧靠 M 区域. 可以发现, 谷隧穿系数的增强主要是由 M 区域的形变导致的, 如图 2(b) 中右上角小图所示. 只考虑 N 区域形变时, 谷隧穿系数 T_N 与不加形变相差不大; 只考虑 M 区域形变时, 谷隧穿系数 T_M 最大值为 1; 同时考虑 MN 区域形变时, T_{MN} 与 T_M 一样. 这说明与线缺陷上两个原子相邻的 C—C 键长的变化导致了谷隧穿系数的增强.

由图 2(b) 不难看出, 单个线缺陷并不能实现很好的谷极化效应, 因为在 $\alpha = 0$ 时谷隧穿系数仍

然达到 0.5 量级. 为了得到好的谷极化效果, 本文研究了存在两个平行线缺陷时谷隧穿系数以及谷极化度, 并探讨了局域形变对谷隧穿系数以及谷极化度的影响, 如图 3 所示. 从图 3(a) 可以看出, 存在两个平行线缺陷时, 两个谷的隧穿系数 $T_{K/K'}$ 仍然具有角度依赖性, $T_{K/K'}$ 在大散射角取最大值, 随着角度改变逐渐减小. 不考虑局域形变时 (实线), 随着能量升高, $T_{K/K'}$ 最大值衰减得很快, $E = 0.05t$ 时为 0.55, $E = 0.1t$ 时减小到 0.40. 考虑局域形变时 (虚线), $T_{K/K'}$ 最大值变化不大, $E = 0.05t$ 时该值仍为 1, 而 $E = 0.1t$ 时仍有较大值 (0.65). 在垂直入射时 ($\alpha = 0$), 两种不同情况下 $T_{K/K'}$ 差别很小, 但是随着能量升高差别也在减小, $E = 0.01t/0.05t$ 时, $T_{K/K'} \approx 0.17/0.08$, 而 $E = 0.1t$ 时已经减小到 0.05, 从图 3(c) 可以看出, $E = 0.01t$ 时谷极化效果并不好, $P = \pm 1$ 对应的散射角范围为

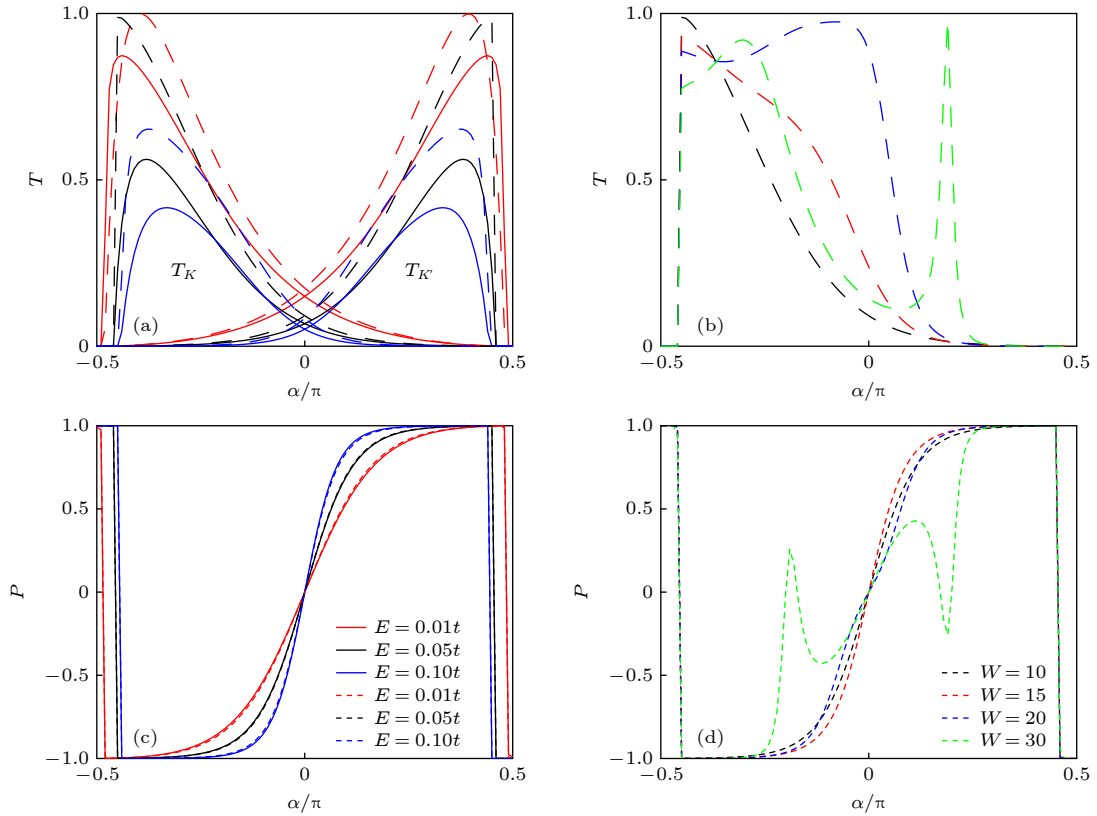


图 3 (a), (c) 存在两个平行线缺陷时, 不同费米能下 K/K' 谷隧穿系数 $T_{K/K'}$ 以及谷极化度 P 随散射角 α 变化关系; (b), (d) 存在两个平行线缺陷时, 线缺陷之间距离 W 不同时 T_K 以及谷极化度 P 随散射角 α 的变化关系. 其中 (a), (c) 中两个线缺陷之间的距离为 $W = 10$, (b), (d) 中费米能为 $E = 0.05t$. 虚线/实线表示考虑/未考虑局域形变影响的结果. 两个线缺陷之间的距离 W 以 $\sqrt{3}a$ 为单位

Fig. 3. (a), (c) Transmission coefficients $T_{K/K'}$ and the valley polarization P as a function of α for different Fermi energies in the presence of two parallel line defects; (b), (d) transmission coefficients T_K and the valley polarization P as a function of α for different width between the two line defects in the presence of two parallel line defects. The width between two line defects in panels (a) and (c) is $W = 10$ and the Fermi energy in panels (b) and (d) is $E = 0.05t$. Dotted/solid lines correspond to the results of considering/without considering the influence of local deformations. The distance between the two line defects W is in units of $\sqrt{3}a$.

$[-0.5\pi, -0.35\pi]$ ($[0.35\pi, 0.5\pi]$), 但是随着能量升高, 谷极化效果增强, $E = 0.05t$ 时, $P = \pm 1$ 对应的散射角范围为 $[-0.5\pi, -0.25\pi]$ ($[0.25\pi, 0.5\pi]$). $E = 0.1t$ 时, 谷过滤效果会进一步提升, $P = \pm 1$ 对应的散射角范围为 $[-0.5\pi, -0.18\pi]$ ($[0.18\pi, 0.5\pi]$). $E = 0.05t$ 时, 虽然 $\alpha = 0$ 时谷极化度不理想, 但是此时谷隧穿系数很低 ($T_{K/K'} = 0.08$), $\alpha < 0$ 时, $T_{K'}$ 随着角度减小进一步减小而 T_K 最大值可以达到 1, 所以在 $\alpha \in [-0.5\pi, 0]$ 内 K' 谷隧穿很少. 因此, $\alpha < 0$ 时几乎只有 K 谷电子可以隧穿, 而在另一个方向 ($\alpha > 0$) 几乎只有 K' 谷可以隧穿, 已经实现了很好的谷过滤效果. 实验上, 能通过测量器件电导来分析由左侧电极流入右侧电极的谷电流^[33].

根据 Landauer-Büttiker 公式得到谷电导^[21]:

$$G_{K/K'} = \frac{e^2}{h} \int_{-k_F}^{k_F} T_{K/K'} \frac{dk_y}{2\pi/L_y} \\ = \frac{L_y E e^2}{2h\pi\hbar v_F} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} T_{K/K'} \cos \alpha d\alpha, \quad (7)$$

其中 E 是费米能, L_y 是器件在 y 方向的宽度, $v_F = 1.0 \times 10^6$ m/s 是费米速度. 不难发现, 谷电导与隧穿系数 $T_{K/K'}$, 费米能 E 以及器件宽度 L_y 有关. 相同条件下, E 和 $T_{K/K'}$ 越大获得的电导越大. 根据图 3, 虽然 $E = 0.05t$ 时考虑局域形变与不考虑局域形变得到的谷极化度相同, 但是考虑局域形变时谷隧穿系数增强, 会得到更大的电导, 如考虑局域形变时积分号里面结果为 0.68, 不考虑局域形变时为 0.29, 实验上也希望得到可观的电导.

图 3(b), (d) 给出了两个线缺陷之间距离 W 不同时, T_K 和 P 随散射角的变化关系 ($T_{K'}(\alpha) = T_K(-\alpha)$). 可以发现, 在 $\alpha \approx -\pi/2$ 时 T_K 变化不大,

但在 $\alpha \approx 0$ 附近随 W 增加 T_K 在增强, 在 $W = 20$ 时已经接近 1, $W = 30$ 时在 $\alpha \approx 0.2\pi$ 出现尖峰. 这是由于发生 Fabry-Pérot 干涉效应^[25] 造成. $W = 20$ 时, 虽然谷极化效果与 $W = 10$ 相差不大, 但 $\alpha = 0$ 时 $T_K \approx 1$ 且 $\alpha > 0$ 仍有较强隧穿, 所以 $\alpha > 0$ 时 G_K 有一定的大小, 不像 $W = 10$ 时可忽略不计, 因此 $\alpha > 0$ 谷过滤效果降低. $W = 30$ 时, 由于存在隧穿尖峰, 谷极化效果不好. 这时候需要构建多个平行线缺陷 (例如 6 个) 才能实现好的谷极化效应^[25], 但是实现起来并不容易. 在考虑线缺陷附近局域形变时, 在较高能量下 (例如 $E = 0.05t$), 通过构建两个平行线缺陷就能实现很好的谷极化效果.

作为对比, 还研究了 57 环线缺陷局域形变对谷隧穿系数的影响, 如图 4 所示. 可以发现, 不同于 58 环线缺陷, 不考虑局域形变时, 57 环中的谷隧穿系数几乎与能量无关. 能量 E 从 $0.01t$ 变化到 $0.2t$, T_K 曲线几乎重合且最大值 1 一直在 $\alpha = -0.1\pi$ 附近, 如图 4(a) 所示. 考虑局域形变时, T_K 最大值沿着 α 轴偏移且保持不变, 直到 $E = 0.2t$ 才发生衰减. 这种差别应该与 57 环和 58 环线缺陷的结构差异有关. 石墨烯中的谷来自石墨烯中不等价的 AB 子格, 对于 58 环线缺陷, 除了线缺陷上的两个原子, 其他区域仍然保持了很好的 AB 子格对称性, 谷电荷由线缺陷左侧经线缺陷上的两个原子进入右侧. 但是对于 57 环线缺陷, 构成 5 环和 7 环的原子已经丧失 AB 子格对称性, 线缺陷左侧谷电荷经过一段区域才能进入右侧区域. 所以, 对于 58 环线缺陷, 与线缺陷上两个原子相连的 C—C 键长的变化对谷隧穿系数的影响非常大, 57 环不存在这种特殊结构所以影响较小.

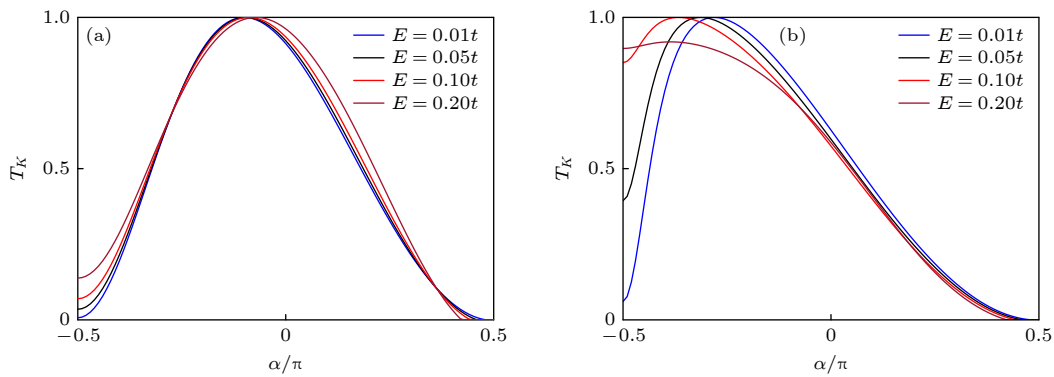


图 4 不同费米能下 57 环线缺陷 K 谷隧穿系数 T_K 随散射角 α 变化关系 (a) 未考虑局域形变的影响; (b) 考虑局域形变的影响

Fig. 4. Transmission coefficient T_K in 57 ring line defect as a function of α for different Fermi energies: (a) Local deformations are not taken into account; (b) local deformations are taken into account.

4 结 论

基于第一性原理计算和非平衡格林函数方法, 本文研究了石墨烯线缺陷中线缺陷附近局域形变对谷隧穿系数和谷极化度的影响. 结果表明, 由于结构差异, 局域形变对 58 环线缺陷谷隧穿系数的影响很明显, 但是对 57 环线缺陷谷隧穿系数的影响并不明显. 对于 58 环线缺陷, 较低能量下, 局域形变的影响很小, 但是较高能量下, 谷隧穿系数并没有随着能量升高而减小, 其最大值在很大能量范围内都为 1. 在较高能量下, 通过构建两个平行线缺陷就能实现很好的谷极化效应. 通过计算发现, 58 环线缺陷局域形变的影响主要来自与线缺陷相连的 C—C 键长的变化. 在实验上, 可通过施加门压调节系统费米能, 而且石墨烯^[34]及其线缺陷^[18]制备手段比较成熟, 我们希望该研究结果能为设计基于石墨烯线缺陷的谷过滤器件带来理论指导.

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] Liao T J, Yang Z M, Lin B H 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 227901 (in Chinese) [廖天军, 杨智敏, 林比宏 2021 物理学报 **70** 227901]
- [3] Avouris P, Chen Z, Perebeinos V 2007 *Nat. Nanotechnol.* **2** 605
- [4] Geim A, Novoselov K S 2007 *Nat. Mater.* **6** 183
- [5] Rycerz A, Tworzydło J, Beenakker C 2007 *Nat. Phys.* **3** 172
- [6] Enoki T, Ando T 2020 *Physics and Chemistry of Graphene (Graphene to Nanographene)* (2nd Ed.) (Singapore: Jenny Stanford Publishing)
- [7] Deng F S, Sun Y, Liu Y H, Dong L J, Shi Y L 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 144204 (in Chinese) [邓富胜, 孙勇, 刘艳红, 董丽娟, 石云龙 2017 物理学报 **66** 144204]
- [8] Fujita T, Jalil M B A, Tan S G 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 043508
- [9] Wang S K, Tian H Y, Sun M L 2023 *J. Phys.: Condens. Matter* **35** 304002
- [10] Recher P, Nilsson J, Burkard G, Trauzettel B 2009 *Phys. Rev. B* **79** 085407
- [11] Sekera T, Bruder C, Mele E J, Tiwari R P 2017 *Phys. Rev. B* **95** 205431
- [12] Golub L E, Tarasenko S A, Entin M V, Magarill L I 2011 *Phys. Rev. B* **84** 195408
- [13] Kelardeh H K, Saalman U, Rost Jan M 2022 *Phys. Rev. Res.* **4** L022014
- [14] Wang S, Pratama F R, Ukhtary M S 2020 *Phys. Rev. B* **101** 081414(R)
- [15] Yazyev O V, Chen Y P 2014 *Nat. Nanotechnol.* **9** 755
- [16] Huang P Y, Ruiz-Vargas C S, van der Zande A M, Whitney W S, Levendorf M P, Kevek J W, Garg S, Alden J S, Hustedt C J, Zhu Y, Park J, McEuen P L, Muller D A 2011 *Nature* **469** 389
- [17] Komsa H P, Krashenninnikov A 2017 *Adv. Electron. Mater.* **3** 1600468
- [18] Lahiri J, Lin Y, Bozkurt P, Oleynik Ivan I, Batzill M 2010 *Nat. Nanotechnol.* **5** 326
- [19] Jolie W, Murray C, Weiß P S, et al. 2019 *Phys. Rev. X* **9** 011055
- [20] Lasek K, Li J F, Kolekar S, et al. 2021 *Surf. Sci. Rep.* **76** 100523
- [21] Tian H Y, Ren C D, Wang S K 2022 *Nanotechnology* **33** 212001
- [22] Gunlycke D, White C T 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 136806
- [23] Pulkin A, Yazyev O V 2016 *Phys. Rev. B* **93** 041419
- [24] Chen J H, Autes G, Alem N, Gargiulo F, Gautam A, Linck M, Kisielowski C, Yazyev O V, Louie S G, Zettl A 2014 *Phys. Rev. B* **89** 121407(R)
- [25] Liu Y, Song J, Li Y, Liu Y, Sun Q F 2013 *Phys. Rev. B* **87** 195445
- [26] Ren C D, Lu W T, Zhou B H, Li Y F, Li D Y, Wang S K, Tian H Y 2020 *J. Phys.: Condens. Matter* **32** 365302
- [27] Du L, Ren C D, Cui L, Lu W T, Tian H Y, Wang S K 2022 *Phys. Scr.* **97** 125825
- [28] Jiang L W, Lü X L, Zheng Y S 2011 *Phys. Lett. A* **376** 136
- [29] Pereira V M, Castro Neto A H, Peres N M R 2009 *Phys. Rev. B* **80** 045401
- [30] Wang S, Hung N T, Tian H, Islam M S, Saito R 2021 *Phys. Rev. Appl.* **16** 024030
- [31] Kresse G, Hafner J 1993 *Phys. Rev. B* **47** 558(R)
- [32] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [33] Hao Y F, Wang L, Liu Y Y, Chen H, Wang X H, Tan C, Nie S, Suk J W, Jiang T F, Liang T F, Xiao J F, Ye W J, Dean C R, Yakobson B I, McCarty K F, Kim P, Hone J, Colombo L, Ruoff R S 2016 *Nat. Nanotechnol.* **11** 426
- [34] Bharathi M S, Hao Y F, Ramanarayan H, Rywkin S, Hone J, Colombo L, Ruoff R S, Zhang Y W 2018 *ACS Nano* **12** 9372

Influence of local deformation on valley transport properties in the line defect of graphene^{*}

Cui Lei¹⁾ Liu Hong-Mei²⁾ Ren Chong-Dan³⁾ Yang Liu²⁾Tian Hong-Yu²⁾† Wang Sa-Ke⁴⁾‡1) (*College of Information Engineering, Suqian University, Suqian 223800, China*)2) (*School of Physics and Electronic Engineering, Linyi University, Linyi 276005, China*)3) (*Department of Physics, Zunyi Normal College, Zunyi 563006, China*)4) (*College of Science, Jinling Institute of Technology, Nanjing 211169, China*)

(Received 6 May 2023; revised manuscript received 8 June 2023)

Abstract

The line defect of graphene has significant applications in valleytronics, which has received extensive attention in recent years. It is found experimentally that there exists local deformation around the line defect. Current studies generally believe that the influence of local deformation on the valley transport properties can be negligible, because the modifications to the nearest neighbour hopping energy is less than 5% under the small deformation. Based on the first-principles calculations and the non-equilibrium Green's function method, we investigated the effect of local deformation on the valley transport properties of two different kinds of line defects, the 58 ring line defect and the 57 ring line defect. It is found that for the 58 ring line defect, the effect of local deformation on the valley transmission coefficient is not evident at lower energies. However, at higher energies, the impact of local deformation is obvious, and the maximum valley transmission coefficient does not decrease with increasing energy, but can be maintained 1 within a large energy range. In contrast, the influence of local deformation on the valley transmission coefficient of the 57 ring line defect indeed can be negligible, regardless of the level of energy. Further investigation indicates that the change of the C—C bond length connected to the two defect atoms in the 58 ring plays a key role in the transmission of the valley states across the line defect. If this part of the influence is not taken into account, the valley transmission coefficient is nearly unaffected by the local deformation. The valley state enters the right side of the line defect directly through the bond connected to the line defect, so the change in bond length connected to the line defect has a significant impact on the valley transmission. This special structure does not exist in the 57 ring, where the valley states will have to pass through a narrow region containing 57 ring to enter the right side of the line defect, resulting in different valley scattering phenomena. By constructing two parallel line defects, the 100% valley polarization can be achieved in a large angular range with the 58 ring line defect. The finding has important implications for the design of graphene line defect based valley filters.

Keywords: graphene, line defect, first-principles calculations, local deformation, valley filter

PACS: 61.48.Gh, 61.72.Lk, 62.20.F-, 68.35.Gy

DOI: 10.7498/aps.72.20230736

* Project supported by the Key Laboratory Project of Suqian City, China (Grant No. M202109), the Scientific Research Platform of Suqian University, China (Grant No. 2021pt04), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12264059, 12004149), the Natural Science Foundation of Shandong Province, China (Grant Nos. ZR2022MA026, ZR2020QA062, ZR2023MA027), the Natural Science Foundation of Jiangsu Province, China (Grant No. BK20211002), and the "Qinglan Project" of Jiangsu Province, China.

† Corresponding author. E-mail: tianhongyu@lyu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: IsaacWang@jit.edu.cn

石墨烯线缺陷局域形变对谷输运性质的影响

崔磊 刘洪梅 任重丹 杨柳 田宏玉 汪萨克

Influence of local deformation on valley transport properties in the line defect of graphene

Cui Lei Liu Hong-Mei Ren Chong-Dan Yang Liu Tian Hong-Yu Wang Sa-Ke

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 166101 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230736

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230736>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

变形及电场作用对石墨烯电学特性影响的第一性原理计算

First-principles calculation of effects of deformation and electric field action on electrical properties of Graphene

物理学报. 2018, 67(7): 076301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172491>

石墨烯过渡层对金属/SiC接触肖特基势垒调控的第一性原理研究

First principle study on modulating of Schottky barrier at metal/4H-SiC interface by graphene intercalation

物理学报. 2022, 71(5): 058102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211796>

镍层间掺杂多层石墨烯的电子结构及光吸收特性研究

First-principles study of electronic structure and optical properties of nickel-doped multilayer graphene

物理学报. 2019, 68(18): 187301 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190523>

Er^{3+} 掺杂 TiO_2 的局域结构及电子性质的第一性原理研究

First-principles calculations of local structure and electronic properties of Er^{3+} -doped TiO_2

物理学报. 2022, 71(24): 246102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221847>

Si_n 团簇/石墨烯($n \leq 6$)结构稳定性和储锂性能的第一性原理计算

First-principles study of structural stability and lithium storage property of Si_n clusters ($n \leq 6$) adsorbed on graphene

物理学报. 2021, 70(19): 198101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210521>

石墨炔/石墨烯异质结纳米共振隧穿晶体管第一原理研究

First-principles study of graphyne/graphene heterostructure resonant tunneling nano-transistors

物理学报. 2019, 68(18): 187102 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190859>