

На правах рукописи

Гричук Евгений Сергеевич

**Эффект адиабатического квантового насоса
в графеновых наноструктурах**

Специальность:

01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Автор:

Москва – 2011

Работа выполнена в Национальном исследовательском ядерном университете «МИФИ».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Манькин Эдуард Анатольевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
член-корреспондент РАН, профессор
Максимов Леонид Александрович

доктор физико-математических наук,
профессор Полуэктов Павел Петрович

Ведущая организация: Московский физико-технический институт
(государственный университет)

Защита состоится «14» декабря 2011 г. в 15⁰⁰ на заседании диссертационного совета Д 212.130.06 при НИЯУ МИФИ по адресу:
115409, г. Москва, Каширское ш., д. 31, конференц-зал К-608.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЯУ МИФИ.

Автореферат разослан « » ноября 2011 г.

Ученый секретарь диссертационного совета



Яковлев В. П.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследований. Графен представляет собой слой атомов углерода, соединённых в двумерную гексагональную решётку. Долгое время этот материал представлял по существу лишь академический интерес, поскольку считалось, что двумерные кристаллы невозможно получить экспериментально ввиду их термодинамической неустойчивости. Экспериментальное выделение монослоя графена в 2004 году группой А. Гейма и К. Новосёлова кардинальным образом изменило ситуацию и привело к огромному всплеску интереса к этому материалу ввиду его необычных электронных, оптических и механических свойств.

Внимание исследователей к графену имеет как фундаментальный, так и прикладной характер. Как известно, низкоэнергетические электронные возбуждения в графене имеют линейный спектр и описываются уравнением, по своей форме совпадающим с релятивистским уравнением Дирака для безмассовой частицы. Это приводит к ряду интересных аналогий между такими столь различными областями физики, как физика конденсированных сред и физика элементарных частиц. В этом смысле о графене иногда говорят как о материале, который позволяет изучать поведение релятивистских фермионов «на столе в лаборатории». Кроме многих хорошо известных в физике конденсированного состояния эффектов (эффект поля, целый и дробный квантовые эффекты Холла и т. п.), которые имеют в графене свои особенности, возникают также и принципиально новые явления. Их анализ привёл к огромному количеству теоретических и экспериментальных работ. Несмотря на то, что графен, по-видимому, можно считать одной из наиболее хорошо изученных низкоразмерных систем, многие вопросы до сих пор остаются открытыми.

Активно ведутся также и прикладные исследования графена. Это связано, прежде всего, с поиском новых перспективных материалов для микро- и наноэлектроники, спинтроники, оптоэлектроники и т.д. Как известно, развитие микроэлектроники хорошо подчиняется эмпирическому закону Мура, согласно которому количество транзисторов в интегральных схемах растёт во времени экспоненциально, удваиваясь примерно каждые два года. Если, например, в 1970-ых годах характерный размер затвора полевого транзистора в интегральных схемах был порядка 10 микрон, то сейчас эта величина составляет лишь несколько десятков нанометров. Очевидно, что этот

тренд не может продолжаться бесконечно, и закончится он, по-видимому, в районе 2015–2020 гг. Кроме технологических причин, есть и фундаментальные причины, связанные с тем, что миниатюризация транзисторов выводит на первый план квантовые эффекты, которые негативно влияют на их характеристики. В этой связи всё более актуальной становится задача анализа электронных транспортных свойств систем на атомных масштабах. Активно ведутся поиски новых материалов, которые бы позволили «отодвинуть» границу закона Мура.

Такие привлекательные свойства графена, как его двумерная структура, высокая подвижность носителей, высокая скорость насыщения, хорошая прозрачность в оптическом диапазоне, амбиполярная проводимость, возможность управления шириной запрещённой зоны и т. д., делают его крайне привлекательным для микроэлектроники. При этом речь идёт не только о графене как о замене кремния в полевых транзисторах, но и как о материале для создания иных устройств, в том числе и принципиально новых. Среди возможных применений графена можно отметить полевые транзисторы для цифровых и аналоговых схем, газовые и оптические сенсоры, электромеханические резонаторы, различные устройства спинтроники, а также устройства для создания и детектирования излучения терагерцового диапазона. Особый интерес представляют устройства, использующие всю совокупность необычных свойств графена.

Изучение графена как перспективного материала для спинтроники связано с тем, что некоторые его производные (квантовые точки, наноленты, nanoостровки и т. п.), проявляют магнетизм. Теоретический анализ механизмов спиновой релаксации показывает, что в этом материале должны наблюдаться большие значения времён и длин спиновой релаксации. Это связано со слабостью сверхтонкого и спин-орбитального взаимодействий. Экспериментально наблюдались длины спиновой релаксации до нескольких микрометров при комнатной температуре. Магнитные свойства графеновых наноструктур активно изучаются в настоящее время, и ожидается, что графеновые устройства могут найти многочисленные применения в спинтронике. Следует также отметить ряд работ, в которых предлагается использовать графен в схемах квантовых вычислений. Одна из важных задач в этой области — поиск системы, физически реализующей кубит. Большое внимание уделяется анализу

твердотельного кубита, роль которого в графене может играть спин электрона, локализованного в графеновой квантовой точке.

Большинство работ, в которых изучается электронный транспорт в мезоскопических системах, направлено на исследование стационарных систем, параметры которых не меняются во времени. Внимание исследователей привлекает также и анализ нестационарных явлений. Один из возникающих тут эффектов — эффект квантового насоса — активно изучается в литературе. Явление заключается в возникновении среднего тока через систему в отсутствии приложенной разности потенциалов при периодическом изменении её параметров. Частным случаем, если частота изменения параметров системы мала, является эффект адиабатического квантового насоса. Кроме вычисления среднего электронного тока, существенный интерес представляет анализ его флуктуаций, шума, симметрии относительного магнитного поля, анализ потоков тепла и т. д. Анализ эффекта адиабатического спинового квантового насоса в графеновых структурах представляет существенный интерес, поскольку это явление может использоваться, в частности, для генерирования спиновых токов.

Цель работы состоит в изучении эффекта адиабатического квантового насоса в графеновых нанолентах с различными типами границ («armchair» и «zigzag»), а также в более сложных графеновых структурах на их основе. В соответствии с поставленной целью были сформулированы следующие задачи исследований:

1. Изучение возможности генерирования электронных токов с помощью эффекта адиабатического квантового насоса в графеновых нанолентах с различными типами границ, а также Z-образных графеновых наноструктурах в режиме билинейного отклика.
2. Анализ особенностей эффекта адиабатического квантового насоса в графеновых нанолентах с различными типами границ в режиме резонансного туннелирования.
3. Изучение возможности генерирования спиновых и чисто спиновых токов в графеновых нанолентах и Z-образных структурах с помощью эффекта адиабатического квантового насоса в различных режимах.

Научная новизна и практическая ценность работы. В работе рассмотрена реализация эффекта адиабатического квантового насоса в графеновых нанолентах и наноструктурах в билинейном режиме, а также в режиме резонансного туннелирования. Обнаружены качественные различия в поведении нанолент с границами типов «armchair» и «zigzag». В работе показано, что в таких системах возможно также генерирование спиновых и чисто спиновых токов.

Устройства, рассмотренные в диссертационной работе, могут найти применения в микро- и наноэлектронике, а также спинтронике. В частности, эффект квантового насоса может использоваться для создания преобразователей частота-ток и частота-напряжение, а также в метрологических приложениях как квантовый стандарт тока (что позволило бы «замкнуть» треугольник стандартов напряжение-сопротивление-ток). Рассмотренный в работе эффект спинового квантового насоса помимо отмеченных приложений может быть использован как управляемый механизм генерирования спиновых и чисто спиновых токов в графеновых наноструктурах.

На защиту выносятся следующие результаты:

1. Рассчитаны зависимости прошедшего заряда (среднего тока) и спина от энергии Ферми в эффекте адиабатического квантового насоса в графеновых нанолентах в режиме билинейного отклика и в режиме резонансного туннелирования.
2. Обнаружены качественные различия в зависимости прошедшего через систему заряда и спина от энергии Ферми для нанолент типов «armchair» и «zigzag» в режиме резонансного туннелирования.
3. Предсказан эффект генерации спиновых и чисто спиновых токов в нанолентах типа «armchair» и «zigzag».
4. Установлено, что в графеновых структурах типа «armchair-zigzag-armchair» возможно генерирование спиновых и чисто спиновых токов.

Степень обоснованности. Высокая степень обоснованности полученных в работе результатов обусловлена использованием общепризнанных методов и приближений физики нано- и мезоскопических систем. Достоверность

численных результатов подтверждается их согласием с аналитическими расчётами в различных предельных случаях.

Апробация работы. Основные результаты работы были представлены на 17-ой Всероссийской научной конференции студентов-физиков «ВНКСФ-17» (Екатеринбург, 2011 г.), Международной конференции «Graphene 2011» (Бильбао, Испания, 2011 г.), Международной объединенной конференции «Advanced Carbon Nanostructures (ACN 2011)» (Санкт-Петербург, 2011 г.), Азиатско-Тихоокеанской конференции «Fundamental Problems of Opto- and Microelectronics (APCOM 2011)» (Москва, Самара, 2011 г.), 14-ой Международной телекоммуникационной конференции «Молодежь и наука» (Москва, 2011 г.), на Научной сессии НИЯУ МИФИ 2011 (Москва, 2011 г.), а также на семинаре акад. Ю. М. Кагана в НИЦ «Курчатовский институт» и семинаре кафедры теоретической физики МФТИ.

Вклад автора. Все результаты, представленные в работе, получены автором лично, либо в соавторстве при его непосредственном участии.

Публикации по теме работы. По теме диссертации опубликовано 10 печатных работ в научных журналах и сборниках трудов Международных и Российских конференций, в том числе, 4 статьи в журналах, включенных ВАК РФ в перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий. Список работ приведён в конце автореферата.

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, трёх глав, заключения, трёх приложений и списка литературы. Общий объём диссертации составляет 108 страниц машинописного текста, включая 43 рисунка и список литературы из 153 наименований.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении приводится обоснование актуальности темы исследований, сформулирована цель работы, отмечена её научная новизна, а также перечислены основные защищаемые положения.

В первой главе «*Электронный транспорт в наносистемах и свойства графена*», являющейся вводной, кратко рассматриваются основные понятия, используемые в дальнейших главах, а также даётся краткий обзор основных экспериментальных и теоретических работ, имеющих непосредственное отношение к настоящей работе.

Для описания электронного транспорта в мезоскопических системах давно и успешно применяется метод Ландауэра–Бюттикера [1]. В этом подходе транспорт рассматривается как процесс рассеяния на мезоскопическом образце электронов из/в резервуары, с которым образец соединён посредством контактов. Процесс рассеяния характеризуется (стационарной) матрицей рассеяния $S(E)$, которую в типичном случае двух резервуаров можно представить в виде:

$$S(E) = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где r и r' — амплитуды отражения электронов, падающих на образец, соответственно, слева и справа, а t и t' — амплитуды прохождения. Эти величины сами являются матрицами, если в контактах существует несколько открытых каналов. Зная матрицу рассеяния, можно определить кондактанс системы

$$G = \frac{\delta I}{\delta V} = G_0 \operatorname{tr}(tt^\dagger), \quad G_0 = (2) \frac{e^2}{h}, \quad (2)$$

где множитель 2 появляется, если имеет место двукратное вырождение по спину. Величина G_0 называется квантом кондактанса.

Для описания нестационарного транспорта (например, когда параметры системы зависят от времени) можно также использовать метод матрицы рассеяния, которая теперь зависит от двух энергий — энергии падающей и рассеянной частицы: $S(E, E')$. Анализ показывает, что в нестационарном случае при определённых условиях возможно протекание конечного среднего тока через систему даже при одинаковых химических потенциалах резервуаров. В частности, если ток возникает за счёт (периодического) изменения пара-

метров самого рассеивателя, это явление называется эффектом квантового насоса [2, 3].

В общем случае ток выражается через нестационарную матрицу рассеяния $S(E, E')$. Если параметры меняются медленно по сравнению с характерным временем пролёта электрона через систему (адиабатический эффект насоса), средний ток может быть вычислен из стационарной матрицы $S(E, t)$, которая описывает «замороженный» рассеиватель в момент времени t . В частном случае, когда имеется два параметра $p_1(t)$ и $p_2(t)$, меняющихся периодически с частотой $\omega = 2\pi/T$ так, что точка $(p_1(t), p_2(t))$ описывает на плоскости (p_1, p_2) замкнутый контур ∂A , выражение для среднего тока I_α , втекающего в контакт α , можно записать в виде [2, 3]:

$$I_\alpha = \frac{Q_\alpha}{T} = -i \frac{e\omega}{4\pi^2} \oint_{\partial A} (S dS^\dagger)_{\alpha\alpha} = \frac{e\omega}{2\pi^2} \int_A dp_1 dp_2 \Pi_\alpha(p_1, p_2), \quad (3)$$

$$\Pi_\alpha(p_1, p_2) = \text{Im} \left(\frac{\partial S}{\partial p_1} \frac{\partial S^\dagger}{\partial p_2} \right)_{\alpha\alpha}.$$

Здесь предполагается что, в контакте α открыт лишь один канал (этот случай рассматривается везде ниже). В записи матричных элементов $(\cdot)_{\alpha\alpha}$ левому контакту соответствует $\alpha = 1$, а правому — $\alpha = 2$. В третьем равенстве выполнен переход к поверхностному интегралу по области A , ограничиваемой контуром ∂A .

При малых (по сравнению с характерными значениями энергий для данной системы) амплитудах управляющих потенциалов квантовый насос работает в режиме билинейного отклика. В этом случае в области A функция $\Pi_\alpha(p_1, p_2)$ постоянна, а генерируемый ток пропорционален амплитудам управляющих параметров:

$$I_\alpha = \frac{e\omega}{2\pi^2} \Pi_\alpha(p_{10}, p_{20}) S_A, \quad (4)$$

где S_A — площадь области A , а (p_{10}, p_{20}) — точка внутри этой области.

В общем случае заряд Q_α , проходящий через систему за один цикл изменения управляющих параметров, не квантуется (не является кратным элементарному заряду). В работах [4, 5] было показано, что квантование заряда возможно в режиме резонансного туннелирования. В работе [5] была предложена простая физическая модель (модель «турникета»), объясняющая квантование. Согласно этой модели в течение каждого цикла квазисвязанное

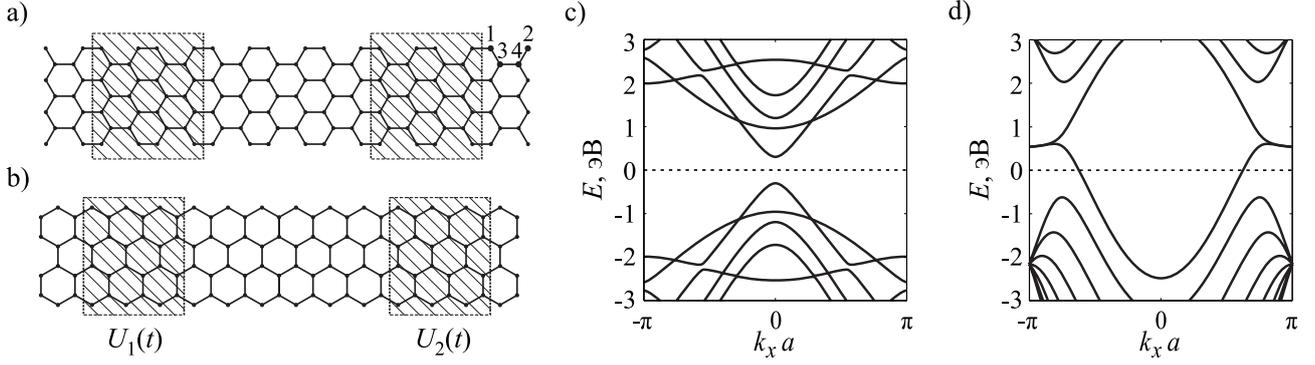


Рис. 1. Схематическое изображение рассматриваемых устройств на основе нанолент: а) типа «armchair» и б) типа «zigzag». Перекачка заряда осуществляется периодическим изменением управляющих потенциалов на затворах $U_1(t)$ и $U_2(t)$. Зонная структура нанолент: с) 9-AGNR ($t_1 = 0$, $t_2 = 0.1t$) и д) 8-ZGNR ($t_1 = 0.1t$, $t_2 = 0$).

состояние сначала заполняется электроном из одного контакта, а затем опустошается в другой.

Отметим, что необходимым условием для возникновения конечного среднего тока через систему в адиабатическом режиме является (динамическое) нарушение пространственной симметрии структуры, а также симметрии относительно обращения времени [3]. Поэтому необходимо минимум два управляющих параметра. Такими параметрами могут служить, например, потенциалы, прикладываемые к металлическим затворам, которые формируют квантовую точку в гетероструктуре.

С помощью соотношений Фишера–Ли [6] матрица рассеяния может быть выражена через функцию Грина, для численного нахождения которой существуют эффективные рекуррентные алгоритмы. Средний ток I_α (или заряд Q_α) можно выразить и непосредственно через функцию Грина.

Во второй главе «Эффект электронного квантового насоса в нанолентах» изучается эффект адиабатического квантового насоса в графеновых нанолентах. Рассматриваемые устройства на основе графеновых нанолент типов «armchair» (AGNR) и «zigzag» (ZGNR) схематически показаны на рис. 1a,b. Они представляют собой бесконечную наноленту с двумя потенциальными барьерами U_1 и U_2 , которые создаются, например, металлическими затворами. Высоты барьеров служат управляющими параметрами квантового насоса. Ширина потенциальных барьеров — N_1 элементарных ячеек, расстояние между ними — N_0 элементарных ячеек.

Для моделирования устройства использовалось приближение сильной связи. Известно, что даже простое приближение, включающее лишь p_z -электроны и учитывающее перескоки между ближайшими, вторыми ближайшими и третьими ближайшими соседями, даёт правильное качественное описание зонной структуры нанолент, согласующееся с вычислениями «из первых принципов», например, с помощью методов функционала плотности. Для расчёта интересующих нас величин (локальная плотность состояний, коэффициент прохождения, матрица рассеяния и т. п.) использовался формализм функций Грина. Контакты устройства моделировались полубесконечными нанолентами.

Гамильтониан наноленты с потенциальными барьерами можно записать в виде:

$$H = - \sum_{ij} t_{ij} a_i^\dagger a_j + \sum_i \sum_k U_k \Delta_{ii}^k a_i^\dagger a_i, \quad (5)$$

где суммирование производится по ближайшим соседям с матричным элементом перескока $t_{ij} = t$ (для графена $t = 2.7$ эВ), а также, в зависимости от выбираемой модели, по вторым ближайшим соседям с $t_{ij} = t_1$ и третьим ближайшим с $t_{ij} = t_2$. Диагональная матрица Δ^k задаёт профиль потенциального барьера U_k . В частности, для прямоугольных барьеров $\Delta_{ii}^k = 1$, если узел i находится под барьером U_k , в противном случае этот матричный элемент равен нулю. Анализ показал, что форма потенциальных барьеров не влияет качественно на результаты, поэтому мы используем простое и широко распространённое приближение прямоугольных барьеров.

Все наноленты типа «armchair» являются полупроводниками с конечной запрещённой зоной, ширина которой обратно пропорциональна ширине ленты. На рис. 1с показана зонная структура наноленты 9-AGNR (9 димеров C–C на ширине ленты).

На рис. 2а показана локальная плотность состояний и коэффициент прохождения как функция энергии в двухбарьерной структуре на основе наноленты 9-AGNR. В такой структуре возникают квазисвязанные состояния, конечная ширина которых обусловлена возможностью туннелирования электронов через потенциальные барьеры. В устройстве реализуется хорошо известный эффект резонансного туннелирования: электрон проходит через устройство без отражения всякий раз, когда его энергия совпадает с энергией квазисвязанного состояния в центральной области устройства.

Зонная структура наноленты 8-ZGNR (8 зигзагообразных линий атомов C) показана на рис. 1d. В нанолентах этого типа существуют краевые состояния, локализованные на границе ленты и отсутствующие у бесконечного графена [7, 8]. При $t_1 = t_2 = 0$ краевым состояниям соответствуют практически бездисперсионные решения вблизи $E = 0$. Эти состояния локализованы (с одинаковыми весами) на противоположных границах ленты на разных подрешётках: на одной подрешётке на верхней границе и на другой — на нижней. Степень локализации этих состояний увеличивается при приближении волнового вектора к границе зоны Бриллюэна.

Важной особенностью нанолент типа «zigzag» является эффект чётности, проявляющийся в существенно различном характере прохождения электрона через p - n переход в наноленте N -ZGNR в зависимости от N [9, 10]. Если N чётно, лента симметрична относительно центра, и моды классифицируются по чётности. Если с одной стороны перехода есть только чётные моды, а с другой — только нечётные, то коэффициент прохождения обращается в ноль. Если барьер имеет конечную ширину, коэффициент прохождения экспоненциально мал в соответствии с тем, что электрон туннелирует через классически запрещённую область. В случае нечётных N симметрии относительно центра ленты нет, и подобный эффект отсутствует.

Особенности зонной структуры нанолент типа «zigzag» приводят к наличию квазисвязанных состояний под барьером, от которых электрон резонансно отражается при определённых значениях энергии [11, 12]. Отмеченные особенности можно наблюдать на рис. 2b, где показано прохождение электрона через одиночный потенциальный барьер, а также поведение электрона в двухбарьерной структуре.

Перейдём к рассмотрению эффекта адиабатического квантового насоса. Будем считать, что управляющие потенциалы периодически меняются во времени по гармоническому закону с частотой ω , постоянным сдвигом фаз ϕ и амплитудой U_0 :

$$U_1(t) = U_{10} + U_0 \cos(\omega t), \quad U_2(t) = U_{20} + U_0 \cos(\omega t - \phi). \quad (6)$$

В нанолентах типа «armchair» поперечный профиль не зависит от продольного волнового вектора, и на границе потенциального барьера не происходит смешивания мод. Поэтому задача о прохождении электрона через потенциальный барьер в этом случае имеет аналитическое решение [13]. Удаётся также получить аналитическое выражение для билинейного отклика,

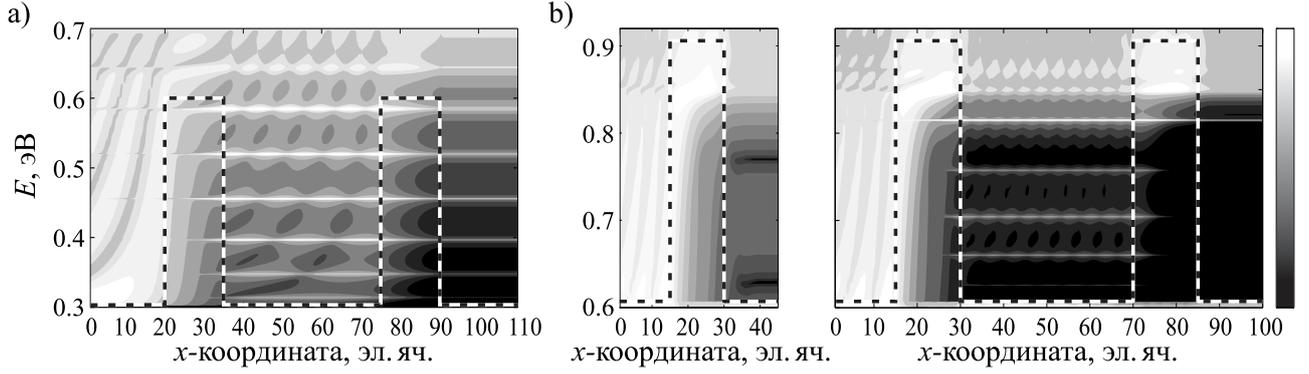


Рис. 2. а) Локальная плотность состояний электронов в двухбарьерной структуре на основе наноленты 9-AGNR; б) Локальная плотность состояний электронов в однобарьерной и двухбарьерной структурах на основе наноленты 8-ZGNR. Пунктирной линией показан профиль потенциальных барьеров. Во всех случаях электрон падает на систему слева.

которое в пределе $U_{10} \rightarrow 0, U_{20} \rightarrow 0$ имеет вид:

$$Q_b = -e \frac{E^2 \sin^2(kN_1) \sin(2k(N_1 + N_0))}{4 \cos^2(k_{\perp}/2) \sin^2(k/2)} \left| \frac{\partial e^{i\theta}}{\partial U} \right|^2 U_0^2 \sin \phi. \quad (7)$$

где k и k_{\perp} — продольный и поперечный волновые векторы, соответственно, а θ — набег фазы электронной волны между узлами типов «1» и «2» соседних элементарных ячеек (см. рис. 1а). Функция $|\partial e^{i\theta}/\partial U|^2$ в пределе $k \rightarrow 0$ ведёт себя как $|\partial e^{i\theta}/\partial U|^2 = 4/k^2 + O(1/k)$. Функция $Q_b(k)$ (или $Q_b(E)$) является знакопеременной, причём осцилляции возникают за счёт синусоидальных множителей.

На рис. 3 показаны зависимости прошедшего через систему заряда $Q(k)$, полученные из выражения (7), а также путём численного интегрирования в (3). На этом же рисунке показаны соответствующие зависимости $I(E_F)$ от энергии Ферми в контактах. При больших k и E_F обе кривые совпадают, тогда как при малых k и E_F наблюдаются существенные различия. Это связано с тем, что в этом случае функция $\Pi(U_1, U_2)$ уже не является постоянной внутри выбранного контура управляющих потенциалов.

Если амплитуда изменения потенциалов U_1 и U_2 не мала, то интеграл в (3) можно найти лишь численно. Такая ситуация имеет место, в частности, при рассмотрении работы квантового насоса в режиме резонансного туннелирования. На рис. 4а показана зависимость коэффициента прохождения $T(U_1, U_2)$ от высот потенциальных барьеров U_1 и U_2 при фиксированной энергии Ферми E_F в контактах. Виден резонансный пик, вдоль которого энергия падающего электрона равна энергии квазисвязанного состояния в центральной

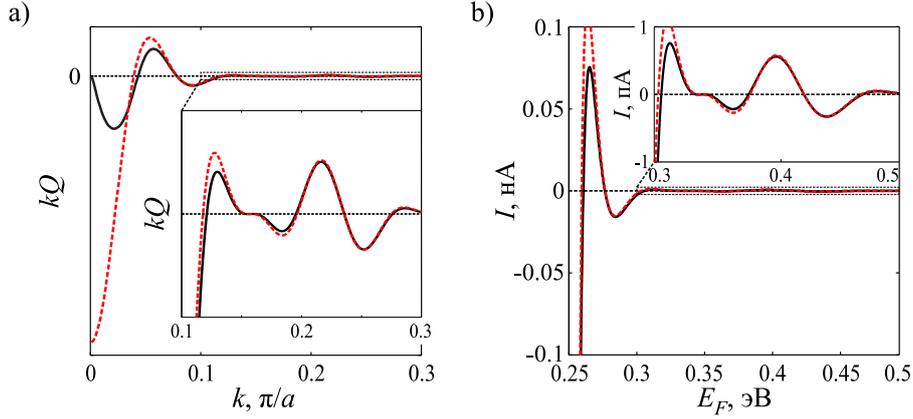


Рис. 3. Квантовый насос на основе наноленты 18-AGNR. а) Зависимость $kQ(k)$ от волнового вектора Ферми k в контактах. б) Соответствующая зависимость $I(E_F)$ от энергии Ферми. Чёрная сплошная линия — результат численного интегрирования в (3), красная пунктирная линия — результат расчёта согласно выражению (7). $N_0 = 20$, $N_1 = 20$, $U_0 = 0.01$, $\phi = \pi/2$.

области. Вдоль резонансной линии коэффициент прохождения достигает единицы, когда структура симметрична ($U_1 = U_2$), и резко уменьшается к краям пика. Если контур управляющих потенциалов охватывает резонансный пик, проходя на удалении от его центра, всюду на этом контуре прозрачность системы мала. На плоскости (U_1, U_2) функция $\Pi(U_1, U_2)$ также имеет резонансный пик, достигая максимума на резонансной линии (см. рис. 4b).

Пусть контур AB управляющих потенциалов на рис. 4b обходится против часовой стрелки. Предположим, что в начальный момент времени система находится в точке F . Квазисвязанный уровень в центральной области устройства (отвечающий данному резонансному пику) расположен выше уровня Ферми в контактах и потому является пустым. Когда этот контур пересекает точку A , квазисвязанное состояние опускается ниже уровня Ферми, и электрон туннелирует из контактов в устройство. Вероятность туннелирования через левый барьер намного больше, чем через правый, поскольку высота левого барьера меньше высоты правого. В точке B ситуация оказывается противоположной. За один цикл изменения потенциалов через систему слева направо проходит один электрон (без учёта двукратного вырождения по спину), что при частоте $\omega = 2\pi \cdot 10$ ГГц соответствует току $I = e\omega/2\pi = 1.6$ нА.

На рис. 4d показаны зависимости прошедшего заряда Q от энергии Ферми E_F . При изменении E_F резонансная кривая на плоскости (U_1, U_2) является всякий раз, когда E_F равна энергии квазисвязанного состояния. В

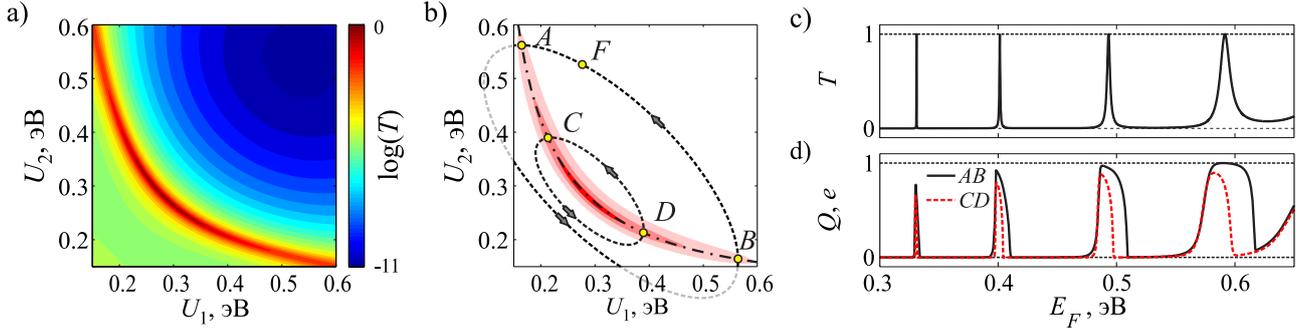


Рис. 4. Квантовый насос на основе наноленты 9-AGNR. а) Зависимость коэффициента прохождения $T(U_1, U_2)$ при фиксированной энергии Ферми. б) Зависимость $\Pi(U_1, U_2)$ при фиксированной энергии Ферми. Резонансная линия пересекается с контурами управляющих потенциалов в резонансных точках A , B , C и D . $E_F = 0.4$ эВ. в) Зависимость коэффициента прохождения $T(E_F)$ для двойного барьера $U_1 = U_2 = 0.28$ эВ. д) Зависимость прошедшего заряда $Q(E_F)$ для контуров AB и CD . $N_0 = 25$, $N_1 = 12$.

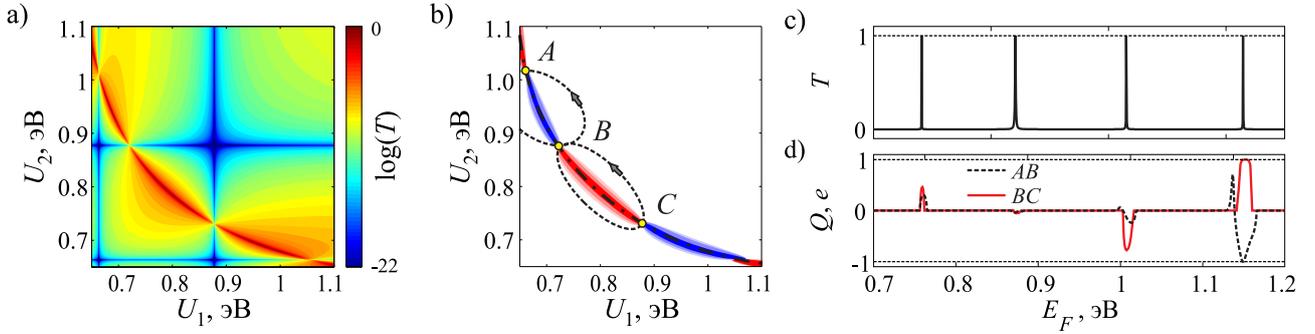


Рис. 5. Квантовый насос на основе наноленты 10-ZGNR. а) Зависимость коэффициента прохождения $T(U_1, U_2)$ при фиксированной энергии Ферми. б) Зависимость $\Pi(U_1, U_2)$ при фиксированной энергии Ферми. Резонансная линия пересекается с контурами управляющих потенциалов в резонансных точках A , B и C . $E_F = 1.15$ эВ. в) Зависимость коэффициента прохождения $T(E_F)$ для двойного барьера $U_1 = U_2 = 0.79$ эВ. д) Зависимость прошедшего заряда $Q(E_F)$ для контуров AB и BC . $N_0 = 25$, $N_1 = 7$.

соответствии с этим на зависимости $Q(E_F)$ наблюдаются пики, соответствующие пикам резонансного туннелирования. Точность квантования определяется тем, какая часть резонансной кривой $\Pi(U_1, U_2)$ охватывается контуром потенциалов.

В случае нанолент типа «zigzag» поперечный профиль моды оказывается зависящим от продольного волнового вектора, поэтому на границе потенциального барьера происходит смешивание мод, что не позволяет получить простое аналитическое решение в данном случае.

Рассмотрим эффект квантового насоса в устройстве на основе наноленты 10-ZGNR в режиме резонансного туннелирования. На рис. 5а,b показаны зависимости коэффициента прохождения $T(U_1, U_2)$ и функции $\Pi(U_1, U_2)$ от высот потенциальных барьеров при фиксированной энергии Ферми E_F . Аналогично предыдущему случаю можно наблюдать резонансную кривую. Коэффициент прохождения обращается в ноль на вертикальных ($U_1 = \text{const}$) и горизонтальных ($U_2 = \text{const}$) линиях. Вертикальные линии соответствуют условию равенства энергии Ферми и энергии квазисвязанного состояния под первым барьером, а горизонтальные линии — под вторым барьером. Вблизи точек пересечения вертикальных и горизонтальных линий происходит характерное отталкивание уровней. Вдоль резонансной линии функция $\Pi(U_1, U_2)$ также имеет серию пиков, знаки которых чередуются. Поскольку заряд даётся поверхностным интегралом от этой функции, пики разных знаков соответствуют прохождению заряда через систему в противоположных направлениях.

Подобное поведение также можно объяснить с помощью модели «турникета» с учётом антирезонансов. Рассмотрим контур BC , охватывающий положительный пик. Контур обходится против часовой стрелки. Когда он пересекает точку B , состояние в центральной области устройства опускается ниже уровня Ферми, и, аналогично предыдущему случаю, электрон туннелирует из левого контакта в центральную область. На правом барьере выполняется условие резонансного отражения. В точке C ситуация противоположная. Таким образом, за один цикл изменения потенциалов через систему слева направо проходит один электрон. Рассмотрим контур AB , охватывающий отрицательный пик. В точке A высота левого барьера меньше высоты правого. Однако при пересечении точки A электрон туннелирует из правого контакта, поскольку на левом барьере выполнено условие резонансного отражения. В точке B электрон уходит в левый контакт и, таким образом, электрон проходит через систему в противоположном направлении — справа налево.

На рис. 5с показаны зависимости прошедшего заряда Q от энергии Ферми E_F для контуров AB и BC . В соответствии со сказанным выше при $E_F = 1.15$ эВ заряд $Q = +e$ для контура BC и $Q = -e$ для контура AB . Пикам на зависимости $Q(E_F)$ соответствуют пики резонансного туннелирования $T(E_F)$.

Были также проанализированы графеновые наноленты типа «armchair» с дефектами на границе ленты под барьерами. В этом случае также возможно возникновение антирезонансов [14], и поведение насоса оказывается качественно аналогичным случаю нанолент типа «zigzag».

В работе сделана оценка справедливости адиабатического приближения. С физической точки зрения его справедливость основана на том, что если период T изменения параметром системы много больше характерного времени τ_d нахождения электрона в системе, $\tau_d \ll T$, электрон фактически рассеивается на «замороженном» рассеивателе, который описывается стационарной матрицей рассеяния. Для оценки времени нахождения электрона в системе используется вигнеровское время задержки

$$\tau_W(E) = \frac{i\hbar}{2} \text{tr} \left(S^\dagger \frac{\partial S}{\partial U} \right). \quad (8)$$

Анализ показал, что для рассматриваемых устройств времена не превышают нескольких пикосекунд. Этим временам соответствуют частоты порядка десятков терагерц, многократно превосходящие частоты порядка мегагерц и гигагерц, типичные для подобных экспериментов.

Во третьей главе «Эффект спинового квантового насоса в нанолентах» исследуется эффект спинового квантового насоса в графеновых нанолентах. Более детальный анализ электронной структуры графеновых нанолент показывает, что в нанолентах типа «zigzag» возникает магнитная структура — при не очень сильном допировании спины электронов, локализованных на разных границах ленты направлены противоположно друг другу [7, 8, 15]. Для описания антиферромагнитной структуры в работе использована простая модель [16]:

$$H = - \sum_{ij,s} t_{ij} a_{is}^\dagger a_{js} + \sum_{i,ss'} \frac{m_i}{2} a_{is}^\dagger \sigma_{ss'}^z a_{is'}, \quad (9)$$

где m_i — локальная намагниченность на узле i . Величина m_i полагается равной m_0 для узлов i в одной подрешётке и $-m_0$ для узлов в другой подрешётке. Зонная структура наноленты 10-ZGNR в этой модели показана на рис. 6а,б. К качественно такой же зонной структуре приводит и более сложная самосогласованная модель (12)–(13).

Поскольку состояния с противоположными спинами локализованы на противоположных границах ленты, т. е. являются пространственно разделёнными, существует два простых способа нарушить симметрию между ними.

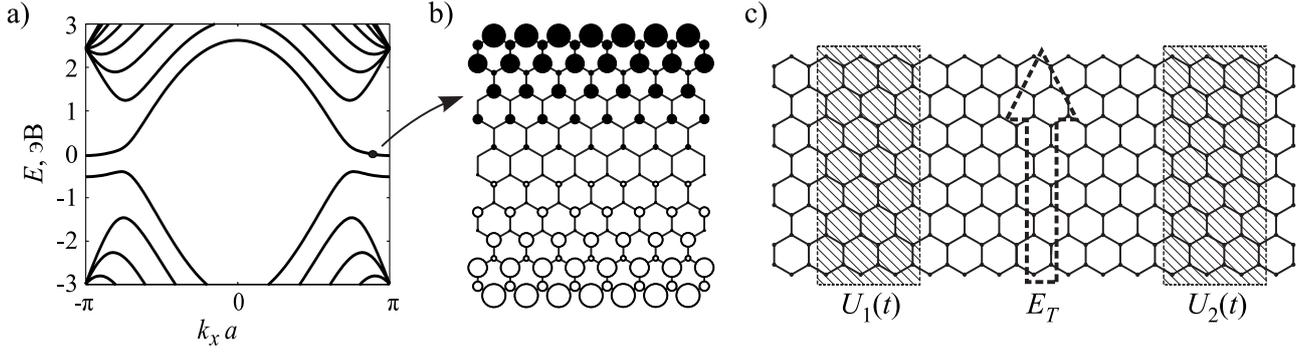


Рис. 6. а) Зонная структура наноленты 10-ZGNR с учётом намагниченности ($t_1 = 0.1t$, $t_2 = 0$, $m_0 = 0.18t$); б) Распределение амплитуды волновой функции состояния с $E = 0$: черный (белый) кружок — спин вверх (вниз), радиус пропорционален логарифму модуля амплитуды волновой функции. в) Схематическое изображение устройства с приложенным поперечным электрическим полем E_T . Ширина области с поперечным полем составляет N_0 элементарных ячеек, расстояние до потенциальных барьеров — N_2 элементарных ячеек, ширина барьеров — N_1 элементарных ячеек.

В устройствах первого типа к центральной области устройства прикладывается поперечное электрическое поле (см. рис. 6б), а в устройствах второго типа в центральной области создаётся дефект на границе ленты. Поперечное электрическое поле можно учесть с помощью дополнительного слагаемого

$$H_E = e \sum_{i,s} E_T \left(y_i - \frac{W}{2} \right) a_{is}^\dagger a_{is}, \quad (10)$$

где E_T — напряжённость приложенного поля, y_i — поперечная координата узла i , а W — ширина ленты. Считая, что направление спина электрона при прохождении его через устройство сохраняется, оба спиновых канала можно рассматривать независимо. Вычислив ток электронов со спином «вверх», I_\uparrow , и со спином «вниз», I_\downarrow , можно найти полный электронный ток $I_C = I_\uparrow + I_\downarrow$ и спиновый ток $I_S = I_\uparrow - I_\downarrow$.

В рассматриваемом диапазоне энергий Ферми вклад дают только краевые состояния, локализованные вблизи границ ленты. Поэтому электроны с противоположными спинами будут «чувствовать» дополнительный потенциал $\pm E_T W/2$ на участке ленты, к которому приложено поперечное электрическое поле, и при распространении между барьерами U_1 и U_2 будут получать разные набегии фаз. Эффект квантового насоса чувствителен к фазам, поэтому для электронов с противоположными спинами будут наблюдаться различные зависимости генерируемого тока от энергии Ферми.

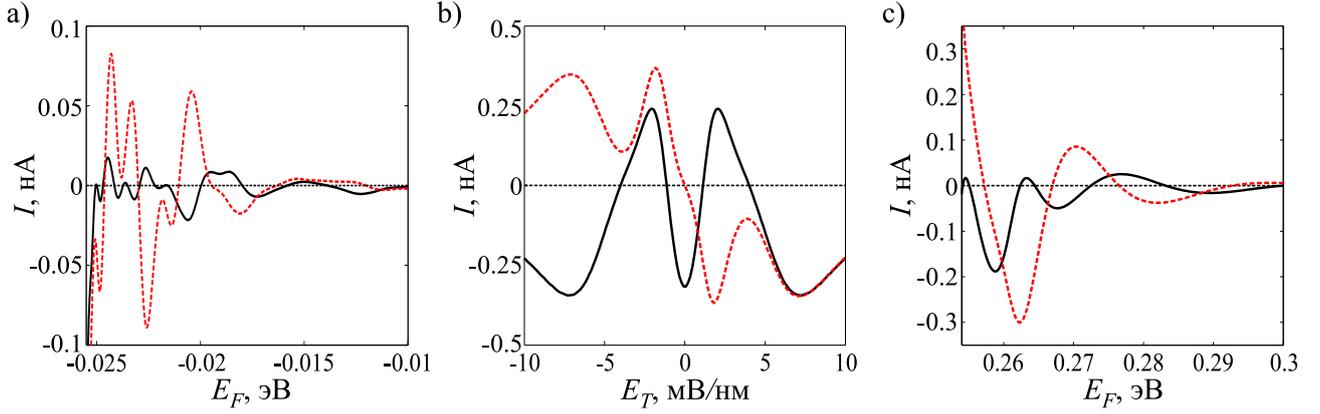


Рис. 7. а) Зависимость электронного I_C (чёрная сплошная линия) и спинового I_S (красная пунктирная линия) токов от энергии Ферми и б) зависимость электронного (чёрная сплошная линия) и спинового (красная пунктирная линия) токов от напряжённости поперечного электрического поля при фиксированной энергии Ферми $E_F = -0.0255$ эВ в квантовом насосе на основе наноленты 10-ZGNR. в) Зависимость электронного I_C (чёрная сплошная линия) и спинового I_S (красная пунктирная линия) токов от энергии Ферми в квантовом насосе на основе наноленты 18-AGNR (ферромагнитный диэлектрик находится между затворами).

Зависимости электронного и спинового токов от энергии Ферми E_F в фиксированном поле E_T для устройства на основе наноленты 10-ZGNR показана на рис. 7а. При некоторых значениях E_F полный электронный ток обращается в ноль, тогда как спиновый ток остается конечным, т. е. генерируется чисто спиновый ток. Амплитуда тока возрастает при уменьшении E_F , что связано с ростом плотности состояний ввиду наличия особенности ван Хова у дна зоны. На рис. 7б показана зависимость токов от напряжённости поля E_T при фиксированной энергии Ферми. Как и следовало ожидать, спиновый ток обращается в ноль в нулевом поле, поскольку в этом случае восстанавливается симметрия между противоположными направлениями спинов. В работе также рассмотрен случай, когда асимметрия между спиновыми каналами создаётся с помощью дефекта на одной из границ ленты. Здесь также оказывается возможным генерирование спиновых и чисто спиновых токов. В работе проанализирован эффект спинового квантового насоса в режиме резонансного туннелирования. В этом случае можно получить квантованный спиновый и чисто спиновый токи.

Анализ показывает, что наноленты типа «armchair» не обладают магнитным порядком. Спиновый ток можно получить за счёт использования эффекта близости с ферромагнитным диэлектриком (например, EuO). Эффект за-

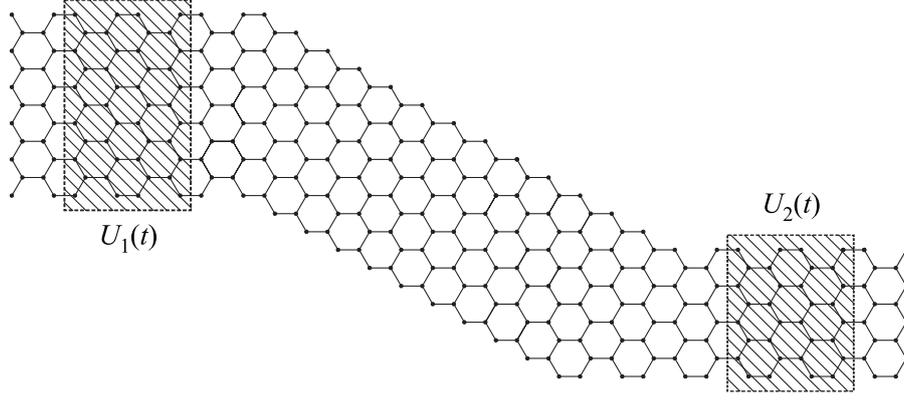


Рис. 8. Схематическое изображение рассматриваемого устройства. Ширина потенциальных барьеров составляет N_1 элементарных ячеек, расстояние до центральной области — N_0 элементарных ячеек, ширина центральной области — N_2 элементарных ячеек. Левый и правый контакты являются нанолентами N_L -AGNR и N_R -AGNR, соответственно.

ключается в возникновении обменного расщепления за счёт взаимодействия с нанесённым на графен слоем диэлектрика, при этом в соответствующей области для электронов с противоположными спинами возникают потенциальные барьеры разной высоты:

$$H_{es} = \sum_{i,ss'} h a_{is}^\dagger \sigma_{ss'}^z a_{is'}, \quad (11)$$

где h — величина обменного расщепления, в численных расчётах принимаемая равной $h = 5$ мэВ [17].

На рис. 7с показана зависимость генерируемого электронного и спинового токов от энергии Ферми в случае, когда слой EuO нанесён между барьерами. Видно, что при определённых энергиях Ферми возникает чисто спиновый ток. Как и в предыдущих случаях, амплитуда тока уменьшается с ростом энергии Ферми ввиду уменьшения плотности состояний. В режиме резонансного туннелирования также возможно генерирование квантованного спинового тока. Используя дефекты, можно получить чисто спиновый ток и в этом случае.

В главе также рассмотрен эффект насоса в графеновых Z-образных наноструктурах, представляющих собой участок наноленты типа «zigzag», включенный между нанолентами типа «armchair», играющими роль полубесконечных контактов. Поскольку на этом участке возникает намагниченность, в устройстве можно получить спиновый ток при нарушении симметрии между противоположными направлениями спинов, если, например, левый и правый контакты имеют различную ширину.

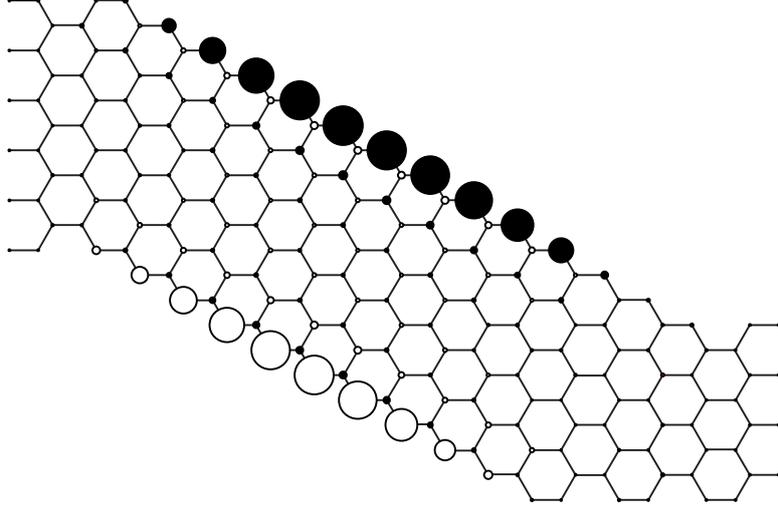


Рис. 9. Распределение намагниченности m_i в устройстве при энергии Ферми в контактах $E_F = 2.2$ эВ. Радиус кружка пропорционален $|m_i|$, чёрный (белый) кружок соответствует $m_i > 0$ ($m_i < 0$).

Схематически устройство показано на рис. 8. Для моделирования устройства используется модель сильной связи в приближении среднего поля [7, 8]:

$$H = - \sum_{ij,s} t_{ij} a_{is}^\dagger a_{js} + U \sum_{is} \langle n_{is} \rangle n_{i,-s}, \quad (12)$$

где $n_{is} = a_{is}^\dagger a_{is}$ — операторы числа электронов со спином s на узле i . Второе слагаемое учитывает кулоновское отталкивание на узлах с параметром внутриузельного отталкивания U . Анализ показывает, что данная модель адекватно описывает намагниченность в графеновых структурах при величине $U \sim t$ [7, 8].

Средние числа заполнения на узлах $\langle n_{i\uparrow} \rangle$ и $\langle n_{i\downarrow} \rangle$ определяются диагональными элементами спектральной функции $A_s(E)$:

$$\langle n_{is} \rangle = \int_{-\infty}^{E_F} \frac{dE}{2\pi} A_{iis}(E) = - \int_{-\infty}^{E_F} \frac{dE}{\pi} \text{Im} G_{iis}(E). \quad (13)$$

Поскольку функция Грина $G(E)$ является сильно нерегулярной из-за особенностей ван Хова, непосредственное интегрирование по энергии оказывается весьма затруднительным. Чтобы обойти эту трудность, можно сместить контур интегрирования с действительной оси в комплексную плоскость, где функция $G(E)$ является достаточно гладкой [18]. Уравнения (12)–(13) составляющие самосогласованную задачу, решаются численно методом итераций.

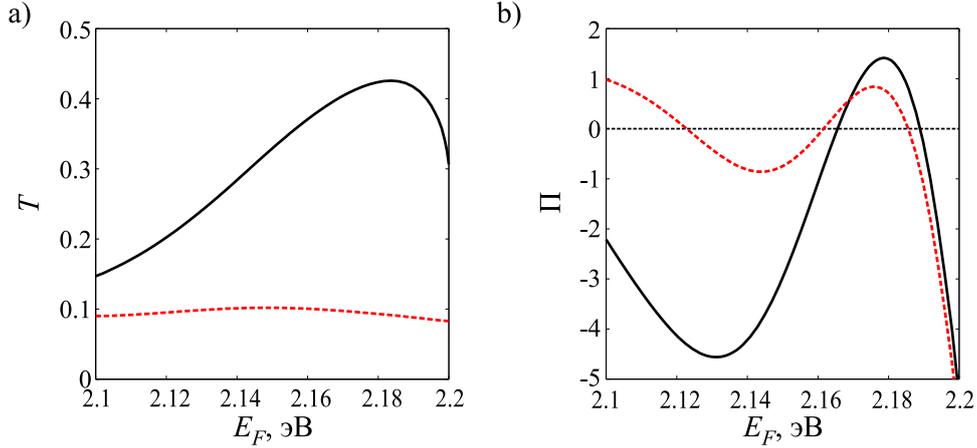


Рис. 10. а) Зависимость коэффициента прохождения от энергии Ферми: $T_{\uparrow}(E_F)$ (чёрная сплошная линия) и $T_{\downarrow}(E_F)$ (красная пунктирная линия). б) Зависимости Π_C (чёрная сплошная линия) и от Π_S (красная пунктирная линия).

Типичное распределение намагниченности

$$m_i = \frac{\langle n_{i\uparrow} \rangle - \langle n_{i\downarrow} \rangle}{2} \quad (14)$$

на узлах i в устройстве показано на рис. 9. Легко заметить, что намагниченность возникает преимущественно в центральной области устройства, имеющей конфигурацию «zigzag», и быстро уменьшается при удалении от центральной области. Подобное поведение находится в согласии с тем, в бесконечных нанолентах намагниченность возникает только в случае границы «zigzag».

На рис. 10а показаны зависимости коэффициента прохождения от энергии Ферми для противоположных направлений спинов. Видно, что в рассматриваемом диапазоне энергий Ферми (вблизи дна первой подзоны в контактах) прозрачность системы для электронов со спином «вверх» выше, чем для электронов со спином «вниз». Поэтому при приложении небольшой разности потенциалов возникнет конечный спиновый ток.

Зависимости билинейного отклика $\Pi_C = \Pi_{\uparrow} + \Pi_{\downarrow}$ и $\Pi_S = \Pi_{\uparrow} - \Pi_{\downarrow}$ от энергии Ферми показаны на рис. 10б. Как и ожидалось, в системе возможно генерирование спинового и чисто спинового тока. Характерная величина $\Pi = 2 \text{ эВ}^{-2}$, что при частоте 50 ГГц и амплитуде управляющих потенциалов $U_0^2 = 10^{-3} \text{ эВ}^2$ соответствует току $I = 16 \text{ пА}$.

В заключении кратко сформулированы полученные в диссертации результаты, а также отмечены возможные направления дальнейших исследований по теме диссертации.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

1. Рассмотрен эффект адиабатического квантового насоса в графеновых нанолентах в режиме билинейного отклика и в режиме резонансного туннелирования и численно рассчитаны зависимости прошедшего заряда (среднего тока) от энергии Ферми в контактах.
2. Показано, что возможна генерация не только электронных, но также спиновых и чисто спиновых токов при нарушении симметрии между спиновыми каналами, что в нанолентах типа «armchair» достигается за счёт эффекта близости с ферромагнитным диэлектриком, в нанолентах типа «zigzag» — за счёт приложения поперечного электрического поля или создания дефектов на границе ленты.
3. Показано, что возможно создание спиновых и чисто спиновых токов в графеновых структурах типа «armchair–zigzag–armchair», в которых симметрия между спиновыми каналами нарушается за счёт пространственной асимметрии структуры.
4. В режиме резонансного туннелирования обнаружены качественные различия в зависимости прошедшего через систему заряда и спина от энергии Ферми для нанолент типов «armchair» и «zigzag»: при фиксированном направлении контура потенциалов в первом случае перенос заряда возможен лишь в одном направлении, а во втором — в обоих направлениях. Подобное поведение связано с наличием антирезонансов и наблюдается также в нанолентах с дефектами.

ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Grichuk E., Manykin E. Quantum pumping in graphene nanoribbons at resonant transmission // EPL. 2010. Vol. 92. P. 47010-1–47010-6.
2. Гричук Е. С., Манькин Э. А. Эффект спин-поляризованного квантового насоса в графеновых нанолентах с границей «zigzag» // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т. 93. С. 414–418.
3. Гричук Е. С., Манькин Э. А. Транспорт электронов и спинов в адиабатическом квантовом насосе на основе графеновых нанолент // ЖЭТФ. 2011. Т. 140. С. 801–813.
4. Гричук Е. С., Манькин Э. А. Электронный и спиновый транспорт в адиабатическом квантовом насосе на основе графеновых нанолент типа «armchair» // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37. С. 69–77.
5. Гричук Е. С., Манькин Э. А. Эффект квантового насоса в графеновых нанолентах при резонансном туннелировании // В сб. трудов XIV Международной телекоммуникационной конференции «Молодежь и наука 2011» (1–5 июля, Москва). 2011. Т. 2. С. 13–14.
6. Grichuk E., Manykin E. Quantum pumping in graphene nanoribbons at resonant transmission // В сб. трудов (постеры) Международной конференции «Graphene 2011» (11–14 апреля, Бильбао, Испания). 2011. С. 151–152.
7. Grichuk E., Manykin E. Spin-polarized quantum pumping in zigzag graphene nanoribbons // В сб. трудов (постеры) Объединённой международной конференции «Advanced Carbon Nanostructures 2011» (4–8 июля, Санкт-Петербург). 2011. С. 81.
8. Grichuk E., Manykin E. Adiabatic quantum spin pumping in graphene nanostructures // В сб. трудов (на CD) Азиатско-тихоокеанской конференции по фундаментальным проблемам опто- и наноэлектроники (4–8 июля, Москва, Самара). 2011. С. 9.
9. Гричук Е. С., Манькин Э. А. Эффект адиабатического квантового насоса в графеновых нанолентах при резонансном туннелировании // В сб.

трудов конференции «ВНКСФ-17» (25 марта–1 апреля, Екатеринбург). 2011. С. 177–178.

10. Гричук Е. С., Манькин Э. А. Спин-поляризованный квантовый насос в графеновых нанолентах с границей «zigzag» // В сб. трудов конференции «ВНКСФ-17» (25 марта–1 апреля, Екатеринбург). 2011. С. 179–180.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Büttiker M. Scattering theory of current and intensity noise correlations in conductors and wave guides // Phys. Rev. B. 1992. Vol. 46. P. 12485.
2. Brouwer P. W. Scattering approach to parametric pumping // Phys. Rev. B. 1998. Vol. 58. P. R10135.
3. Moskalets M., Büttiker M. Floquet scattering theory of quantum pumps // Phys. Rev. B. 2002. Vol. 66. P. 205320.
4. Levinson Y., Entin-Wohlman O., Wölfle P. Pumping at resonant transmission and transferred charge quantization // Physica A. 2001. Vol. 302. P. 335.
5. Kashcheyevs V., Aharony A., Entin-Wohlman O. Resonance approximation and charge loading and unloading in adiabatic quantum pumping // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 69. P. 195301.
6. Fisher D. S., Lee P. A. Relation between conductivity and transmission matrix // Phys. Rev. B. 1981. Vol. 23. P. 6851.
7. Fujita M., Wakabayashi K., Nakada K., Kusakabe K. Peculiar localized state at zigzag graphite edge // J. Phys. Soc. Jpn. 1996. Vol. 65. P. 1920.
8. Yazyev O. V. Emergence of magnetism in graphene materials and nanostructures // Rep. Prog. Phys. 2010. Vol. 73. P. 056501.
9. Akhmerov A. R., Bardarson J. H., Rycerz A., Beenakker C. W. J. Theory of the valley-valve effect in graphene nanoribbons // Phys. Rev. B. 2008. Vol. 77. P. 205416.

10. Cresti A., Grosso G., Parravicini G. P. Valley-valve effect and even-odd chain parity in p - n graphene junctions // Phys. Rev. B. 2008. Vol. 77. P. 233402.
11. Wakabayashi K., Sigrist M. Zero-conductance resonances due to flux states in nanographite ribbon junctions // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 84. P. 3390.
12. Wakabayashi K., Aoki T. Electrical conductance of the zigzag nanographite ribbons locally applied gate voltage // Int. J. Mod. Phys. B. 2002. Vol. 16. P. 4897.
13. Klymenko Y. O., Shevtsov O. Quantum transport in armchair graphene ribbons: analytical tight-binding solutions for propagation through step-like and barrier-like potentials // Eur. Phys. J. B. 2009. Vol. 69. P. 383.
14. Li T. C., Lu S.-P. Quantum conductance of graphene nanoribbons with edge defects // Phys. Rev. B. 2008. Vol. 77. P. 085408.
15. Son Y.-W., Cohen M. L., Louie S. G. Half-metallic graphene nanoribbons // Nature. 2006. Vol. 444. P. 347.
16. Wimmer M., Adagideli I., Berber S., Tománek D., Richter K. Spin currents in rough graphene nanoribbons: universal fluctuations and spin injection // Phys. Rev. Lett. 2008. Vol. 100. P. 177207.
17. Haugen H., Huertas-Hernando D., Brataas A. Spin transport in proximity-induced ferromagnetic graphene // Phys. Rev. B. 2008. Vol. 77. P. 115406.
18. Wildberger K., Lang P., Zeller R., Dederichs P. H. Fermi-Dirac distribution in ab initio Green's-function calculations // Phys. Rev. B. 1995. Vol. 52. P. 11502.