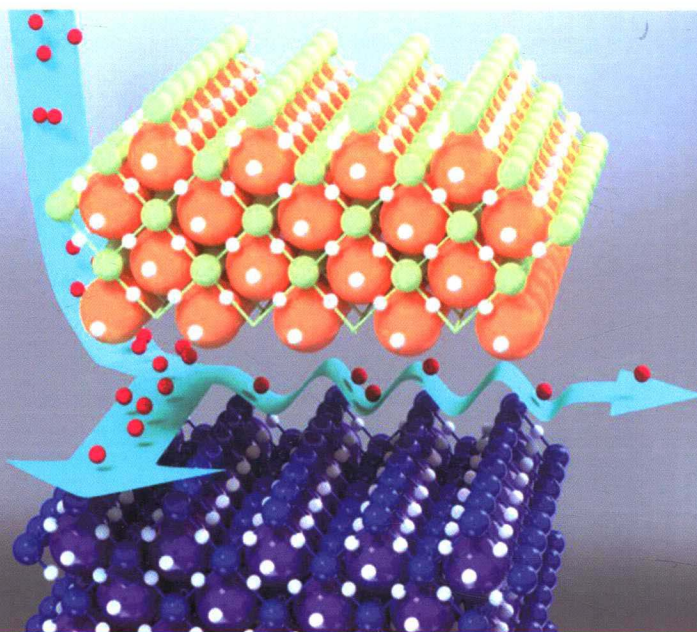


铁磁近邻作用下二维电子气体体系的 自旋相关输运研究

王海艳 著



科学技术文献出版社
SCIENTIFIC AND TECHNICAL DOCUMENTATION PRESS

铁磁近邻作用下二维电子气体体系的 自旋相关输运研究

王海艳 著



科学技术文献出版社
SCIENTIFIC AND TECHNICAL DOCUMENTATION PRESS

· 北京 ·

图书在版编目 (CIP) 数据

铁磁近邻作用下二维电子气体体系的自旋相关输运研究 / 王海艳著. —北京: 科学技术文献出版社, 2018. 10
ISBN 978-7-5189-4680-8

I. ①铁… II. ①王… III. ①凝聚态—物理学—研究 IV. ①O469

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2018) 第 162841 号

铁磁近邻作用下二维电子气体体系的自旋相关输运研究

策划编辑: 张 丹 责任编辑: 赵 斌 责任校对: 文 浩 责任出版: 张志平

出 版 者 科学技术文献出版社
地 址 北京市复兴路15号 邮编 100038
编 务 部 (010) 58882938, 58882087 (传真)
发 行 部 (010) 58882868, 58882870 (传真)
邮 购 部 (010) 58882873
官 方 网 址 www.stdp.com.cn
发 行 者 科学技术文献出版社发行 全国各地新华书店经销
印 刷 者 北京虎彩文化传播有限公司
版 次 2018 年 10 月第 1 版 2018 年 10 月第 1 次印刷
开 本 710 × 1000 1/16
字 数 101 千
印 张 6.75
书 号 ISBN 978-7-5189-4680-8
定 价 28.00 元



版权所有 违法必究

购买本社图书, 凡字迹不清、缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责调换

前 言

二维电子气是在二维平面内能自由运动，而垂直于该平面方向运动受限的电子系统，它的独特性质使其成为凝聚态物理领域的研究热点之一。本书采用转移矩阵方法，分别对半导体异质结、石墨烯和拓扑绝缘体表面几种典型二维电子气体在铁磁近邻作用下的自旋相关输运问题进行了较系统的研究，旨在为纳米电子器件和自旋量子器件的设计提供物理基础。

全书共分为六章：

第一章简要介绍了几种典型二维电子气体体系的实现及实验制备，以及它们的物理性质和应用背景。

第二章详细介绍了介观输运研究中常用的转移矩阵方法。

第三章根据薛定谔方程，研究半导体异质结二维电子气在外加两个不对称磁垒作用下的自旋相关输运性质。结果表明：不一致的磁垒可以使体系电导自旋分离，进而导致隧穿磁阻的自旋分离；磁垒间隔越小，不对称性越明显，自旋分离也越明显。因此，通过适当调节外加磁垒的结构参数，可以获得自旋明显分离的电导和磁阻。

第四章从 Dirac 方程出发，分别研究了石墨烯和扶手椅型边缘石墨烯纳米条带在两个可调磁垒作用下的自旋相关输运性质。结果表明：当两磁垒相对高度差较大时，体系低能量区域禁止导通，且反平行情况下的透射谱不再关于入射角对称；当

两磁垒间隔增大时,中间区域左行波和右行波的干涉增强,使透射谱更加离散化。当磁垒宽度变大时,由于衰减态的存在,凡是衰减长度小于势垒宽度的电子波将不能透过势垒。相应地,体系的隧穿电导和磁阻随结构参数变化的特征与透射谱一致,磁垒绝对和相对高度的增强或磁垒宽度变大都会使得电导减小,磁阻增大,而磁垒间隔增大只是导致电导和磁阻振荡加强。扶手椅型石墨烯纳米条带在磁垒作用下的输运特性是:横向受限导致横向波矢离散化,所以磁化平行和反平行构型下体系都呈现平台电导,由此导致了平台磁阻。同时,条带宽度不同,其能带结构和输运电导的特征也不相同。

第五章是我们研究的重点内容。利用转移矩阵方法,研究了电磁复合超晶格作用下三维拓扑绝缘体表面的能带结构和输运性质,以及电子自旋极化的分布。结果表明:由于磁化方向从平行到反平行造成势垒的结构差异,在同样的能量窗口,反平行构型下子能级的数目多于平行情况。当磁垒足够强时,平行和反平行构型下低能量区域子能带都几乎平行于坐标轴,这意味着传输速度趋于零,所以电子的传输将被禁止,而电垒的变化对体系能带结构影响不大。体系的透射通道数目与能带结构是一致的,磁垒增强时反平行情况下存在更宽的禁止导通区域。电垒增强时,当能量与电垒高度匹配时,只存在小角度入射的透射通道。此外,我们还研究了表面电子的自旋极化分布。在动量空间,其自旋极化分布表明反射电子和透射电子出现的能量区域与透射谱都是相对应的。由于自旋与动量的锁定,反射电子自旋极化取向相对于入射电子旋转一个角度,而透射电子与入射电子一致。但在坐标空间,入射区域电子平面

内自旋极化只随纵坐标周期性变化，但 z 分量不为零，打破了自旋平面的锁定。在透射区只有透射波，因此该区域内电子自旋极化取向与坐标无关，只随入射电子取向而变化。

第六章对本书相关研究工作进行了总结和归纳，并对二维电子气体在铁磁近邻作用下的输运研究进行了展望。

目 录

第一章 绪 论	1
1.1 几种典型的二维电子气体系	1
1.1.1 半导体异质结量子阱	1
1.1.2 单层石墨片——石墨烯	3
1.1.3 三维拓扑绝缘体表面	7
1.2 二维电子气体系的物理性质	11
1.3 二维电子气的应用背景	18
1.4 本书选题与主要研究内容	20
第二章 介观输运理论中的转移矩阵方法	22
2.1 介观输运理论	22
2.2 转移矩阵	23
2.3 Landauer-Büttiker 公式	27
第三章 半导体异质结二维电子气	29
3.1 研究背景	29
3.2 磁垒调节下自旋相关电导与磁阻	30
3.2.1 模型描述与公式推导	30
3.2.2 结果与讨论	33
3.3 本章小结	37
第四章 石墨烯及其纳米条带	38
4.1 研究背景	38

4.2	石墨烯及其纳米条带电子能带结构·····	39
4.3	磁垒调节下石墨烯的电导与磁阻·····	47
4.3.1	模型描述与公式推导·····	47
4.3.2	结果与讨论·····	50
4.4	磁垒调节下扶手椅型边缘石墨烯纳米条带的电导·····	58
4.4.1	模型描述与公式推导·····	58
4.4.2	结果与讨论·····	61
4.5	本章小结·····	68
第五章	三维拓扑绝缘体表面·····	69
5.1	研究背景·····	69
5.2	电磁超晶格作用下的电导与自旋极化分布·····	70
5.2.1	模型描述与公式推导·····	70
5.2.2	透射谱及电导与电垒和磁垒高度的关系·····	75
5.2.3	电子自旋极化分布·····	80
5.3	本章小结·····	83
第六章	总结和展望·····	85
6.1	全书总结·····	85
6.2	主要创新点及科学意义·····	86
6.3	后续工作展望·····	88
参考文献	·····	89

第一章 绪 论

1.1 几种典型的二维电子气体体系

1966 年, Fowler、Fang、Howard 和 Stiles 在第 8 次国际半导体会议上首先提出了二维电子气 (2DEG) 这个概念^[1]: 电子被约束在二维平面内自由运动的物理系统统称为二维电子气。随着理论和实验上的发展, 研究二维电子气中各种独特的电子性质成为凝聚态物理中重要的一个领域。随着纳米技术的发展和新材料的不断涌现, 不同种类的二维电子气体被相继开发, 如半导体异质结量子阱^[2]、单层石墨^[3]、三维拓扑绝缘体表面^[4]。下面就本书涉及的这几种二维电子气的制备及其基本性质进行简单介绍。

1.1.1 半导体异质结量子阱

传统二维电子气主要有三种^[1,5]: 第一种是液氦表面; 第二种是金属/氧化物/半导体场效应管中的反型层, 整数量子霍尔效应^[6]就是在这种材料中发现的; 第三种是半导体异质结量子阱, 在此种材料中又发现了分数量子霍尔效应^[7,8]。半导体异质结量子阱易于实现且品质良好, 因此, 它成为人们广泛研究的对象。所谓半导体异质结量子阱, 是由两种不同的半导体材料相间排列形成的, 具有明显量子限制效应的电子或空穴的势阱。由于量子阱宽度 (当阱宽尺度足够小时才能形成量子阱) 的限制, 载流子波函数在垂直界面的方向上是局域的, 即载流子只能在平行于界面的平面内自由运动。由两种不同半导体材料薄层交替生长的多层结构可以形成许多有序排列的分离量子阱, 称为多量子阱。如果势垒层很薄, 相邻势阱之间的耦合很强, 且阱的个数众多, 那

么各量子阱中分立的能级将扩展成能带（微带），这样的多量子阱叫作超晶格。

半导体异质结量子阱的制备通常是将一种材料夹在两种材料（通常是宽禁带材料）之间形成。例如，砷化铝/砷化镓/砷化铝异质结^[2]，其可以通过分子束外延（MBE）或化学气相沉积（MOCVD）的方法来制备。分子束外延生长法^[9]是一种可在原子尺度精确控制厚度、掺杂和界面平整度的外延薄膜生长技术。如图 1-1 所示，在超高真空环境下，加热坩埚，使其产生具有各种所需组分的蒸汽，按每层所需成分精确控制阀门，使蒸汽经小孔准直后形成分子束或原子束，直接喷射到加热的衬底上。这样，分子或原子就按晶体排列一层层地“长”在基片上，形成薄膜。对于砷化镓来说，使用分子束外延生长时所需的温度是 500 ~ 600 ℃。该技术的优点是：束流强度便于精确控制，可随源的变化而迅速调整膜层组分和掺杂浓度；衬底温度要求不高，膜层生长速率慢。用这种技术已能制备出交替生长不同组分、不同掺杂的薄膜而形成的超薄层量子阱微结构材料。化学气相沉积法是传统的制备薄膜的技术，其原理是利用气相反应，在高温、等离子或激光辅助等条件下控制反应气压、气流速度、基片材料温度等因素，从而控制纳米微粒薄膜的成核生长过程；或者通过薄膜后处理，控制非晶薄膜的晶化过程，从而获得纳米结构的薄膜材料。

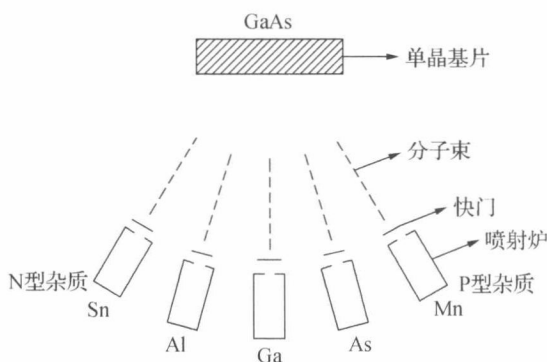


图 1-1 分子束外延装置示意

砷化镓半导体异质结是一个在 GaAs 和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的界面处形成的二维导电薄层,如图 1-2a 所示。由于宽带隙 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 层的费米能比窄带隙的 GaAs 层要高,形成弯曲势阱(图 1-2b),导致电子从 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 层转移到 GaAs 层的阱内,从而消除了低温下的电离杂质散射,使其迁移率显著提高。

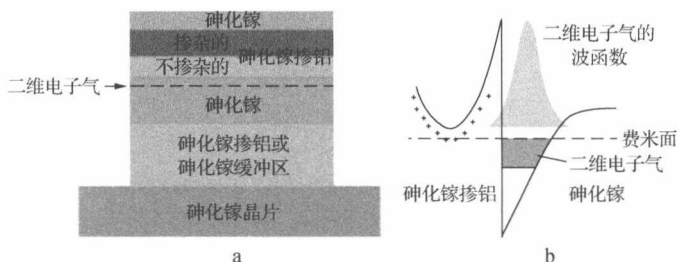


图 1-2 砷化镓半导体异质结

a: 异质结生长方向示意; b: 二维电子气被局域在 GaAs 底质层和

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 层的交界面处,对应的势是非镜面对称的

当结构处于平衡状态时,费米能处处相同并位于导带之内,此时靠 GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 界面的电子密度最大,从而形成一个超薄的导电层,其中的电子只能紧贴着异质结界面运动,通常叫作二维电子气,也称量子阱。在二维电子气中,为了减少施主杂质对电子的散射,一般在界面处设置一不掺杂的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 间隔层。同时,由于 GaAs 和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 具有几乎相同的晶格常数,界面的出现并不破坏晶格的周期性,所以界面处边界散射的降低使电子的迁移率大大提高。

1.1.2 单层石墨片——石墨烯

随着科技的发展,电子器件的高度集成化和微尺度化成为必然趋势,导致利用传统的宏观硅基半导体材料设计电子器件的技术终将被淘汰^[10]。因此,探索和研发各种受量子力学支配的新材料激起了人们广泛的兴趣。

碳是自然界非常丰富的元素,它可以形成原子结构各异、物理性质

千差万别的同素异形体,如石墨、金刚石、富勒烯、无定形碳、卡宾碳、碳纳米管、碳纳米葱、纳米泡沫等碳纳米材料。碳材料的特性由其成键结构、手性结构、卷曲、层间相互作用等因素决定。基于 sp^2 轨道杂化形成的各种碳纳米结构具有良好的导电性,对外加电磁场或应变作用也非常敏感。通过纳米尺度的局域场与外场的耦合可以实现多种方式调控碳材料的能带,这使其在新一代电子器件设计领域有光明的应用前景。特别是石墨烯及其纳米条带,因其优良的物理化学性质而成为纳米材料中的“明星”。

自从 1985 年富勒烯^[11,12]和 1991 年碳纳米管^[13,14]相继被科学家发现,碳材料从三维的石墨和金刚石扩充到了零维的富勒烯、一维的碳纳米管。这些材料已经被实验证实是可以稳定存在的,但是二维单层石墨片是否可以稳定存在,一直是个疑问。在早期的研究中,Peierls 曾指出准二维晶体材料因其本身的热力学不稳定性,会在室温环境下迅速分解或拆解。Mermin-Wagner 理论也指出,长程有序的二维晶体会因长的波长起伏而受到破坏。因此,二维单层石墨一直被认为是假设性的结构,未受到广泛关注。直到 2004 年,英国曼彻斯特大学的物理学家 Geim 和 Novoselov 小组首先成功制备出稳定的单层石墨片^[15]。他们采用的方法非常简单,把石墨薄片的两面粘在特制的塑料胶带上,再把胶带撕开,薄片也随之分为二。不断地重复这个过程,得到的片状石墨就会越来越薄,最终得到了部分样品仅有一层碳原子构成,即石墨烯。石墨烯的发现使其迅速成为凝聚态物理、材料科学、纳米科学及生物技术等前沿学科的交叉研究热点,Geim 和 Novoselov 也因此获得了 2010 年度的诺贝尔物理学奖。

理想的石墨烯结构是二维平面蜂窝状晶格结构,可以看作是一种从石墨材料中剥离出的单层石墨片,每个碳原子经 sp^2 轨道杂化后剩余一个垂直其平面的 p 轨道上的电子形成大 π 键, π 电子可以自由移动,使石墨烯具有良好的导电性^[16]。二维石墨烯结构可以看作是构建多维碳质材料的基本单元。例如,石墨可以看成是多层石墨片堆积形成,而石墨烯卷成圆筒状可以形成碳纳米管。但是,实际的石墨烯并不是完美的平面结构,Meyer 等^[17]根据实验中观察到的现象,提出了一个理论

模型：石墨烯平面上存在着一些小山丘似的起伏褶皱，如图 1-3 所示。随后，他们又发现褶皱程度随着石墨烯层数增大而减小，Fasolino 等^[18]推测这是单层石墨烯为降低其表面能，由二维向三维形貌转换的表现。

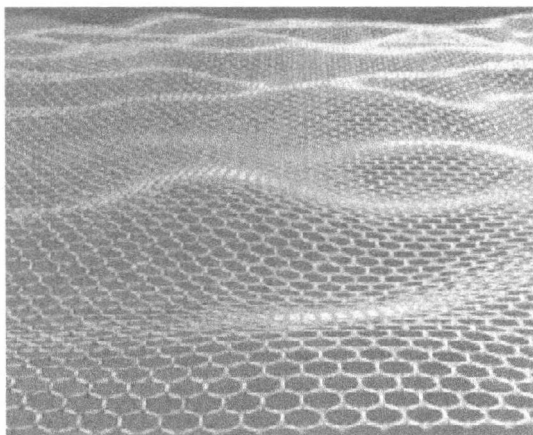


图 1-3 石墨烯晶体结构示意图

目前，实验上可以制备出石墨烯的方法很多，如微机械剥离法^[15]、高温热解外延法^[19]、模具挤压法^[20]、化学分离法^[21]、气相沉积法^[22]等。

Novoselov 等^[15]用微机械剥离法得到了放在二氧化硅氧化层的硅片上的石墨烯样品。利用扫描电子显微镜（SEM）或原子力显微镜（AFM）即可观察和筛选出单层的石墨碎片，即石墨烯，如图 1-4 所示。这样得到的石墨烯在室温下呈晶体状，非常稳定，其载流子浓度达到了 10^8 A/cm^2 ，具有非常好的导电能力。这种方法简单，不易产生缺陷，但用此方法获得的单层石墨烯面积小，尺寸不易控制，并且难以大规模制备。

2006 年，美国工程研究所的 Berger 等^[19]利用碳化硅高温热解外延法在 4H-SiC (0001) 和 6H-SiC ($\overline{0001}$) 表面成功制备出单层和多层石墨烯薄片。具体是在高真空下通过电子轰击经过 O_2 刻蚀的 SiC 氧化表面，直至氧化物被完全清除，再升温至 1300°C 左右并保持 20 min，即可形成石墨烯薄片。根据加热温度的不同，厚度可达 5 ~ 100 层。此方

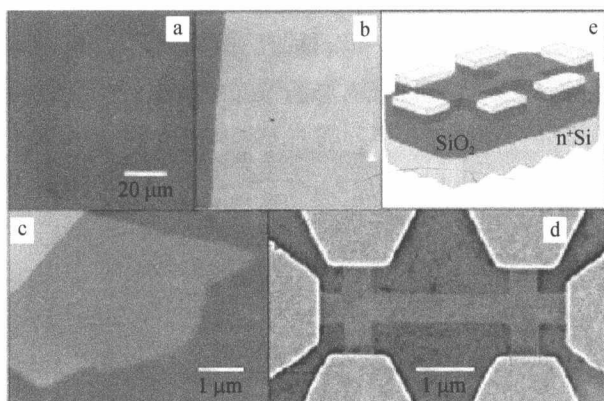


图 1-4 机械剥离方法制备的石墨烯片示意^[15]

a: 附于衬底上的一块约 3 nm 厚的石墨片; b: 用 AFM 观测同一块材料边缘部分 ($2\ \mu\text{m} \times 2\ \mu\text{m}$) 得到的图像; c: 石墨烯的 AFM 图像; d: 实验电路的 SEM 图像; e: 实验电路的示意

法可得到生长在不同衬底上的两种石墨烯,一种是长在 Si 表面的石墨烯,与 Si 接触导致其导电性减弱;另一种是长在 C 表面的石墨烯,导电能力较强。用此方法制备出的石墨烯是单原子层的六角蜂窝状晶体,它具有二维电子气的基本性质,如高迁移率、各向异性和局域化等^[23]。图 1-5a 是他们通过角分辨反光电子能谱 (KR IPES)^[24]、原位的低能电子显微镜 (LEEM)^[25] 及扫描隧道显微镜 (STM)^[26,27] 观察到的外延生长的石墨烯和石墨烯加工成器件后的图像。该方法是典型的范德瓦尔斯外延生长方式,其具体生长过程如图 1-5b 所示。

另外, Liang 等^[20] 用模具挤压法制做出石墨烯场效应晶体管。澳大利亚伍伦贡大学的 Li 等^[21] 还提出一种制备石墨烯薄膜常用的化学分离方法。具体操作如下,通过化学氧化,首先将膨胀的石墨氧化成亲水性的石墨氧化物,这样可以扩大石墨原子层间的距离,然后经适当的超声波振荡处理,得到胶体状的石墨氧化物,由于静电排斥作用石墨氧化物变得十分稳定,最后利用联氨等还原去除石墨氧化物的羧基,即可得到稳定的石墨烯导电薄膜。Stankovich 等^[22] 利用微波增强化学气相沉积法也得到了石墨烯薄片。

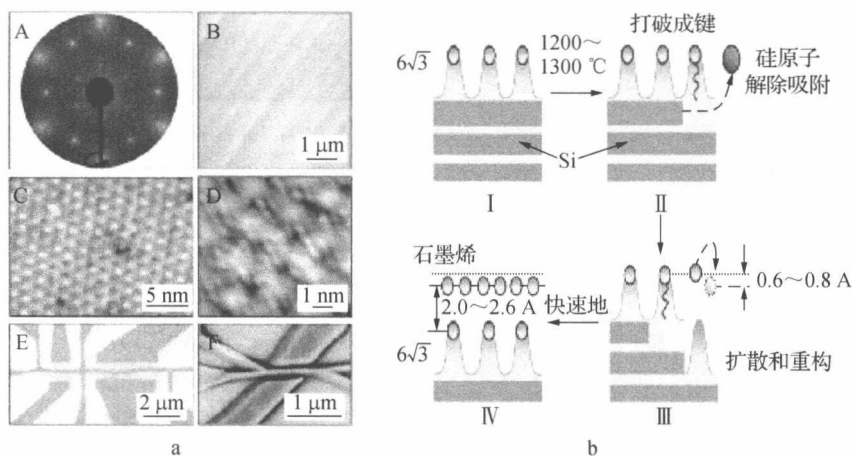


图 1-5 外延生长的石墨烯及其器件构型^[19,27]

a: SiC 在 (0001) 方向上外延生长石墨烯的 LEED、AFM 和 STM 图像及加工成器件后的 SEM 与 EEM 图像; b: 石墨烯的外延生长过程示意

1.1.3 三维拓扑绝缘体表面

自从在磁场下的二维电子气系统中发现整数^[6]和分数^[7]量子霍尔效应以来,对量子霍尔态的研究在凝聚态物理领域产生了深远影响,出现了一大批新概念、新现象和新效应。因此,整数和分数量子霍尔效应的发现者分别获得了 1985 年度与 1998 年度的诺贝尔物理学奖,并且 2010 年度诺贝尔物理学奖也与石墨烯中的反量子霍尔效应有关。

近年来,这方面的研究又取得重要突破,出现了量子自旋霍尔效应和新的量子物质态——拓扑绝缘体^[28]。传统意义上的绝缘体^[29]电子是惰性的,它等价于原子绝缘体,其所有电子以离子芯为中心沿着局域轨道运动,不受边界条件的影响,如图 1-6a 所示。

在量子霍尔效应体态,电子填充在不同的朗道能级,填充的朗道能级和未填充的朗道能级分别构成价带和导带,价带和导带之间有一个带隙,因此量子霍尔样品应该是绝缘体,导电性应该比较差。但实践证明,它具有良好的导电性,甚至优于金属。量子霍尔体系^[31]中导带和

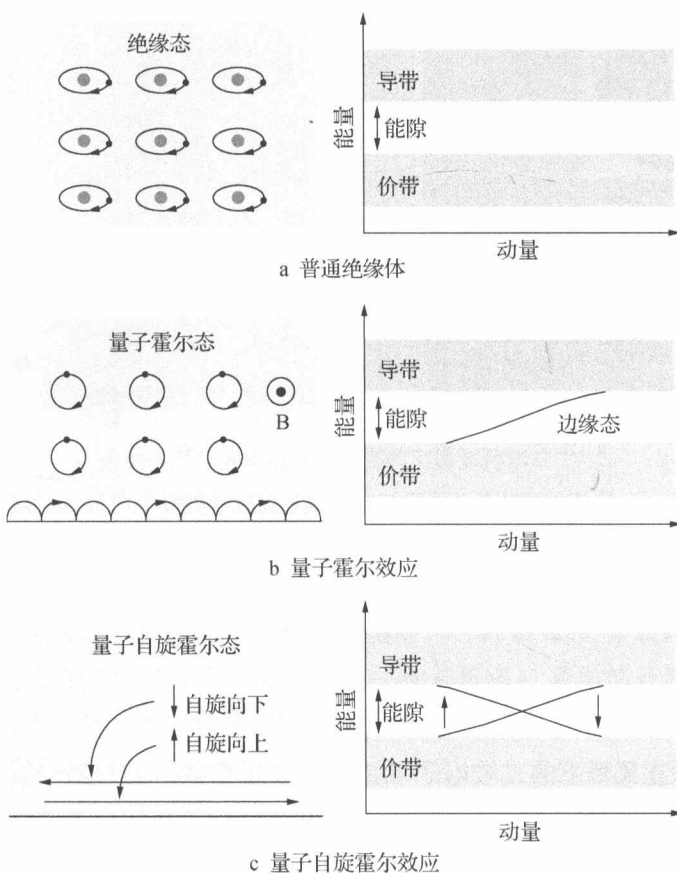


图 1-6 量子自旋霍尔效应示意^[30]

左图为电子结构，右图为能带图。这里给出的是样品某一条边的边缘态能带。尽管这 3 种态从体能带上看都是绝缘态，它们是拓扑不等价的，没有一个微扰能够把体系从一个绝缘态变为另一个绝缘态，除非它能够强大到使体带隙发生闭合并重新打开

价带的带隙之间存在边缘态能带，而且该边缘态存在手征特点，即样品某一条边上的边缘态的电子只能向同一个方向传播，相对的两条边边缘态的电子传播方向相反，如图 1-6b 所示。这说明量子霍尔体系不再是传统意义上的绝缘体，它具有和普通绝缘体不同的拓扑特征，人们把这种必须用体态和边缘态一起描述的绝缘体叫作拓扑绝缘体。

随后，科学家们陆续发现了一些二维材料能形成全新的拓扑绝缘

态^[32-37]。在这类材料中,其自身的自旋轨道相互作用使体能带打开一个带隙,将完全占据的价带和导带分开,并且在带隙里面建立起螺旋的(helical)边缘态能带,即样品同一条边不同自旋的电子传播方向相反,如图1-6c所示。而且同一条边上的边缘态与时间反演算符是相关的,不会被保持体系时间反演对称性的非磁性杂质破坏,这种拓扑绝缘态通常被称为量子自旋霍尔态。此后不久,其概念很快被推广到了三维^[38-40]。2009年,方忠、戴希小组与张守晟小组^[4]合作预言了 Bi_2Se_3 、 Bi_2Te_3 等三维强拓扑绝缘体材料,他们发现这类三维材料中自旋轨道也会在体能带打开带隙,并在表面建立起无能隙的金属态。这些表面金属态是由体能带的拓扑性质决定的,对非磁性杂质有较强的稳定性,这是第一次在三维材料中找到拓扑绝缘态。几乎同时,Hasan小组^[41]在实验上也观察到了 Bi_2Se_3 (Bi_2Te_3)的表面态及其线性色散的Dirac锥结构。所以,有这样特征的材料叫作三维拓扑绝缘体。

目前,研究最多的是 Bi_2Se_3 家族材料的三维拓扑绝缘体^[4,42]: Bi_2Se_3 、 Bi_2Te_3 和 Sb_2Te_3 。这类材料的体电子态是有能隙的绝缘体,在费米能处存在着能隙,并且体带隙中只有一个Dirac点,即其表面是受时间反演对称性保护的无能隙金属态。它的存在非常稳定,基本不受杂质和无序的影响。以 Bi_2Se_3 为例,角分辨光电子能谱测量结果可以看到在Dirac点附近电子态能量与动量之间满足线性色散关系,如图1-7a所示。此外,在Dirac锥上形成自旋螺旋结构,如图1-7b所示。这种三维拓扑绝缘体表面态形成一种无有效质量的二维电子气,需要用Dirac方程来描述。正是由于这些新奇的重要特征使得拓扑绝缘体将有可能应用于未来的电子技术发展中,并且已经广泛引起了凝聚态物理和材料科学工作者的兴趣。

自2009年以来,针对具有极大应用价值的拓扑绝缘体研究的需要,人们开始从单晶体材料和薄膜两方面研究材料的制备。以 Bi_2Se_3 为例,如图1-8a所示,因其是V-VI族化合物半导体,具有斜方六面体结构,并且是一种层状材料,每个原胞都是由五层原子沿三重轴按Se-Bi-Se-Bi-Se交替密排的方式堆叠而成。其中,Bi和Se原子以共价键结合,每两个原胞之间的Se原子层以范德瓦尔斯力结合,使得晶体容易沿两