

文章编号: 1005-5630(2015)04-0334-05

石墨烯纳米结构中负微分电阻效应研究

徐公杰^{1,2}, 李 娜^{1,2}, 陈 镜^{1,2}

(1. 上海理工大学 上海市现代光学系统重点实验室, 上海 200093;

2. 上海理工大学 光电信息与计算机工程学院, 上海 200093)

摘要: 由于石墨烯具有高电子迁移率的特性, 可以用来制备高频电子器件。利用传输矩阵方法, 对石墨烯 p-n 结及方形势垒纳米结构中的负微分电阻效应进行了研究。证实了石墨烯 p-n 结中负微分电阻现象比传统半导体中的幅度要小, 石墨烯中 Klein 隧穿过程的存在使负能量范围内的空穴对电流产生影响。石墨烯纳米方形势垒中发生负微分电阻效应的位置在费米面附近, 势垒宽度越大, 对载流子的阻挡越大, 负微分电阻效应越明显。

关键词: 石墨烯; 负微分电阻; 传输矩阵

中图分类号: TN 361 **文献标志码:** A **doi:** 10.3969/j.issn.1005-5630.2015.04.011

Study on negative differential resistance in graphene nanostructures

XU Gongjie^{1,2}, LI Na^{1,2}, CHEN Jing^{1,2}

(1. Shanghai Key Laboratory of Modern Optical System, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China

2. School of Optical-Electrical and Computer Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China)

Abstract: The negative differential resistance (NDR) effect of graphene in the p-n junctions and nanoscale barriers is investigated by using transfer-matrix method. The NDR phenomenon in the graphene p-n junctions is not so obvious as that in the conventional semiconductors, because the holes in the negative energy range also contribute to the current due to the Klein tunneling. The NDR location of graphene nanoscale barriers lies on the Fermi energy level. The block of the barrier to the current is more apparent with increasing barrier width, and the NDR effect becomes more obvious.

Keywords: graphene; negative differential resistance (NDR); transfer matrix

引 言

石墨烯(graphene)^[1-2]是由单层碳原子按六角晶格结构排列而成,它是一种真正意义的二维体系。由于石墨烯在电学、力学、光学、热学等各方面都具有优异的物理性质^[3-4],所以自2004年英国曼彻斯特大学的Novoselov与Geim成功制取以来,特别是这2位获得2010年诺贝尔物理学奖以后,石墨烯更是引起物理、材料、化学等各领域极大关注,并使之迅速成为基础理论与应用的研究热点之一。

负微分电阻(negative differential resistance, NDR)效应^[5]一般是指在n型的GaAs和InP等双能谷半导体中,由于电子转移效应(transferred-electron effect)而产生的一种效应,即随着电压增大而电流呈

收稿日期: 2014-12-03

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(61306118);上海高校青年教师培养资助计划(slg12006)

作者简介: 徐公杰(1983—)男,讲师,主要从事石墨烯和太赫兹器件的研究, E-mail: gjxu@usst.edu.cn

现减小的现象。在负阻区,半导体中载流子浓度局部的微小涨落即可引起非平衡多数载流子的大量积累而产生空间电荷,这种现象就是负微分电阻效应。它是耿氏(Gunn)二极管工作的物理基础,是现阶段制备高频电子器件的重要技术途径。本文利用传输矩阵的方法,针对典型的 p-n 结和方形势垒结构分别研究其中的负微分电阻效应,并讨论影响因素及物理原因。

1 原理与公式

1.1 原理

石墨烯的每一个碳原子最外层 4 个电子与周围的 3 个最近邻原子进行 sp^2 杂化,形成 3 个 σ 键,剩余 1 个电子在 p_z 轨道上与周围电子形成 π 键。石墨烯每个原胞中含有 2 个不等价的原子,对应于布里渊区的 K 与 K' 点(k 空间中高对称点),又叫 Dirac 点。Dirac 点附近(小于 1eV 范围)的电子遵循着无质量费米子的 Dirac 方程,它有线性的色散关系 $E(k) = \pm v_F \hbar k$ ^[4],其中 E 代表载流子能量, v_F 代表费米速度 $10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, k 代表波矢, \hbar 代表简约普朗克常数。而且导带底与价带顶是直接相连,属于一种无带隙的材料体系。石墨烯的色散关系与传统出现负微分电阻效应的材料如 GaAs 或 InP 的双能谷完全不同,但研究发现其中有负微分电阻效应^[6-7]。由于石墨烯中电子迁移率高达 $10^6 \text{ cm}^2 \cdot (\text{V} \cdot \text{s})^{-1}$ ^[8],而 GaAs 的这一数值为 $8\,000 \text{ cm}^2 \cdot (\text{V} \cdot \text{s})^{-1}$,Si 中为 $1\,450 \text{ cm}^2 \cdot (\text{V} \cdot \text{s})^{-1}$ ^[5]。人们利用石墨烯高电子迁移率这一特性,制备高频电子器件,如毫米波及太赫兹($1 \text{ THz} = 10^{12} \text{ Hz}$)波器件,而负微分电阻效应是这些器件的物理基础。

1.2 传输矩阵方法

在石墨烯中,电掺杂^[9]或化学掺杂^[10]均可使其表现出 p 型或 n 型特性,而这种掺杂本身会形成一个势场。在此讨论一维势场 $U(x)$ 情形,且假设处于零温近似下,暂时不考虑载流子-声子相互作用、自旋-轨道相互作用,且假设样品足够宽可以忽略边界效应。此时 Dirac 方程可写成^[6,11-12]

$$[v_F(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) + U(x)]\Psi = E\Psi \quad (1)$$

式中: $\boldsymbol{\sigma}$ 为赝自旋矩阵即 Pauli 矩阵; \mathbf{p} 为动量算符; $U(x)$ 为势场分布, x 为电子传输方向;波函数 Ψ 可写成 $\Psi = \Phi(x)e^{ik_y y}$,其中 $k_y = (E - U_L)\sin\beta/\hbar v_F$ 是横向波矢(β 为入射角, U_L 为左端势场, y 代表的是垂直于传播方向),而纵向波函数 $\Phi(x) = [\varphi_A, \varphi_B]^T$ (2 个分量 φ_A 与 φ_B 分别描述的是 2 套子格子 A 与 B 的波函数)。因此,式(1)可改写成

$$\begin{pmatrix} U(x) - E & -i\hbar v_F \left(\frac{\partial}{\partial x} + k_y \right) \\ -i\hbar v_F \left(\frac{\partial}{\partial x} - k_y \right) & U(x) - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_A \\ \varphi_B \end{pmatrix} = 0 \quad (2)$$

在式(2)中,只有当 $U(x)$ 是常数势时,才能得到方程的解。

传输矩阵(transfer matrix)方法是一种解一维势场的有效方法^[6,11-12],其基本原理如图 1 所示。首先把中间区域(势场变化区域)分成很多的细条,每条薄到其势场可以看成是常数的程度,利用常数势场的波函数可对这一特点进行处理;然后利用相邻细条间波函数连续性条件要求,构造波函数相联系的传输矩阵;最终,把从最左端到最右端的传输矩阵依次相乘可以得到总的传输矩阵。图中 x 表示传输方向, U_L 为左端势场, U_R 为右端势场。

对于一个具体实例来说,第 j 条处的势场 $U(x)$ 可以用常数 U_j 代替,则式(2)可写成

$$\begin{cases} \varphi_A(x) = A_j e^{ik_j x} + B_j e^{-ik_j x} \\ \varphi_B(x) = \frac{\hbar v_F}{E - U_j} [(k_j + ik_y)A_j e^{ik_j x} - (k_j - ik_y)B_j e^{-ik_j x}] \end{cases} \quad (3)$$

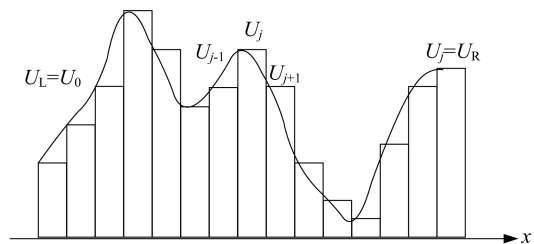


图 1 一维势场 $U(x)$ 中构造传输矩阵示意图

Fig. 1 Schematic diagram of the transfer matrix in the one-dimensional potential profile $U(x)$

式中: A_j, B_j 分别为 2 套子格子波函数振幅; $k_j = \sqrt{[(E-U_j)/\hbar v_F]^2 - k_y^2}$ 。可以把式(3)改写成矩阵形式

$$\begin{pmatrix} \varphi_A(x) \\ \varphi_B(x) \end{pmatrix} = \mathbf{M}_j \cdot \mathbf{R}_j(x) \cdot \mathbf{C}_j \quad (4)$$

式中 $\mathbf{M}_j, \mathbf{R}_j(x), \mathbf{C}_j$ 分别定义为

$$\begin{cases} \mathbf{M}_j = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{\hbar v_F(k_j + ik_y)}{E - U_j} & -\frac{\hbar v_F(k_j - ik_y)}{E - U_j} \end{pmatrix} \\ \mathbf{R}_j(x) = \begin{pmatrix} e^{ik_j x} & 0 \\ 0 & e^{-ik_j x} \end{pmatrix} \\ \mathbf{C}_j = \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} \end{cases} \quad (5)$$

利用第 j 条与第 $(j+1)$ 条的波函数在 $x=x_{j+1}$ 处连续性要求, 可以得到

$$\mathbf{M}_j \mathbf{R}_j(x_{j+1}) \mathbf{C}_j = \mathbf{M}_{j+1} \mathbf{R}_{j+1}(x_{j+1}) \mathbf{C}_{j+1} \quad (6)$$

进而

$$\mathbf{C}_{j+1} = \mathbf{R}_{j+1}^{-1}(x_{j+1}) \mathbf{M}_{j+1}^{-1} \mathbf{M}_j \mathbf{R}_j(x_{j+1}) \mathbf{C}_j \quad (7)$$

因此, 可以定义相邻细条间的传输矩阵

$$\mathbf{T}(j, j+1) = \mathbf{R}_{j+1}^{-1}(x_{j+1}) \mathbf{M}_{j+1}^{-1} \mathbf{M}_j \mathbf{R}_j(x_{j+1}) \quad (8)$$

更进一步, 总的传输矩阵则为

$$\mathbf{T} \equiv \mathbf{T}(J, J-1) \mathbf{T}(J-1, J-2) \cdots \mathbf{T}(1, 0) \quad (9)$$

式中 J 为中间区域划分的总条数。

1.3 输运参数计算

在石墨烯中, 当费米面在 Dirac 点以下时, 空穴和电子对透射率都有贡献。设 T_{21}, T_{22} 分别为式(9)中的矩阵元, α 定义为 $\cos\alpha = k_x/k \equiv \hbar v_F k_x / |E - U_L|$, 通过中间区域的透射几率可以表达为^[6]

$$T = \begin{cases} f(s, \alpha) \cdot \left(1 - \left|\frac{T_{21}}{T_{22}}\right|^2\right) & (E - U_L)(E - U_R) > 0 \\ f(s, \alpha) \cdot \left(1 - \left|\frac{T_{22}}{T_{21}}\right|^2\right) & \text{其他} \end{cases} \quad (10)$$

式中: $f(s, \alpha)$ 是一个符号函数, 表示为

$$f(s, \alpha) = \frac{s+1}{2} f_1(\alpha) + \frac{-s+1}{2} f_2(\alpha) \quad (11)$$

其中

$$\begin{cases} f_1(\alpha) = \Theta\left(\frac{\pi}{2} - \alpha\right) - \Theta\left(-\frac{\pi}{2} - \alpha\right) \\ f_2(\alpha) = \Theta\left(-\frac{\pi}{2} - \alpha\right) - \Theta\left(\frac{\pi}{2} - \alpha\right) - \Theta(-\pi - \alpha) + \Theta(\pi - \alpha) \end{cases} \quad (12)$$

式(12)中 Θ 是阶梯函数。当 $(E - U_L) > 0$ 时, $s=1$; 当 $(E - U_L) < 0$ 时, $s=-1$ 。更详细的步骤, 可参考文献[6, 11]。

利用式(11), 如果给系统两端加偏压, 则可得到零温近似下的弹道式输运电流表达式

$$I = \frac{2geW}{v_F \hbar^2} \int_{\mu_R}^{\mu_L} |E - U_L| dE \int_{-\pi}^{\pi} \text{sgn}(E - U_L) T(E, \alpha) \cos\alpha d\alpha \quad (13)$$

式中: e 是基本电荷量; $g=4$ 是石墨烯中电子态的简并度; W 为样品宽度; μ_L, μ_R 是偏压条件下左端(右端)的局部费米能; $T(E, \alpha)$ 为透射几率。正向偏压的定义为 $U_a = \frac{1}{e}(\mu_L - \mu_R)$, 反向偏压则为 $U_a = \frac{1}{e}(\mu_R - \mu_L)$, 所以式(13)描述了系统的电流-偏压伏安特性。

2 结果及分析

2.1 p-n 结中的负微分电阻

图 2 对应的结构是一个 p-n 结形成的势场台阶,而不是一个势垒或势阱, U_L 为左端势场, U_R 为右端势场, ΔU 是 p-n 间势差, d 为势差降落宽度,而且假定势差与偏压在 d 区域内均是线性变化的。对不同入射角度、不同入射能量的载流子进行积分,利用式(13),我们可以得到相应的电流特性。图 3 中就是相应的电流-偏压特性,其中电流密度定义为 $I^* = I/W$,费米能为 0。

图 3 中的电流-电压曲线与所谓的 Esaki 二极管^[5]类似,所不同的是正偏压下的负微分电阻幅度变小了。这种负微分电阻的减小与石墨烯的手征性有关,因为电子与空穴(负能量范围内)对电流都有贡献,所以负能量范围内的电流贡献是负微分电阻减小的主要原因。Dragoman 等^[13]曾经计算过方形势垒中的透射率,因为没有计入负能量范围内载流子的贡献,得到明显的负微分电阻,引起了争论^[14]。因此,这种电子-空穴对称性引起的负微分电阻减弱可能是石墨烯纳米结构中的一种普适特性。图 3 中在 $U=60$ mV 处出现的突变点源于此时 $U = \Delta U$,此时外加偏压将原势阶抹平,并且当 $U > \Delta U$ 时,原来的 p 型(n 型)变成了 n 型(p 型)。正偏压使原势阶减小这一结果使 Klein 隧穿,当载流子垂直于势垒或势阱入射时,不管势垒或势阱高度及宽度如何变化,透射率始终为 1。产生的物理原因是在势阱中载流子是电子,在势垒中对应的载流子变成了空穴^[15],能量区域也减小,因此 d 对伏安特性影响不大;而当偏压加大了原势阶,Klein 隧穿区域随 $|U|$ 的增加而加大,这就产生了电流幅度随 d 的增加出现明显的减小。

2.2 方形势垒中的负微分电阻

当势阶变成方形势垒后,为验证这种负微分电阻效应是否还会出现,本文采取如图 4 所示的模型,这与文献[12]模型相同。假设压降发生在势垒边缘区,势垒高度为 U_0 ,宽度为 D ,实线和虚线分别表示有无偏压后的势场分布,同时假设外加偏压对称降落在势垒边缘。由于外加偏压的引入使原来势场变得不再对称,与本文采用的计算方法不同,文献[12]只针对某一入射角计算电流,并且结果中忽略了负能量范围内载流子对电流的贡献,而本文采用的是传输矩阵方法,对所有入射角度积分,并且计入所有载流子贡献。

图(5)给出了影响负微分电阻效应的因素费米能级位置与势垒区域宽度。众所周知,对电流有贡献的载流子处于费米面附近,所以当费米能增大时,发生负微分电阻现象的电压位置也随之增大平移,如图 5(a)所示。这种平移的原因是式(13)中 $|E - U_L|$ 项,此处 $U_L = eU_a/2$,而 E 的取值区间是 $[E_F - eU_a/2, E_F + eU_a/2]$,所以当 $eU_a \simeq E_F$ 时,出现电流较小值,对应于负微分电阻出现的电压位置。因此,当势垒宽度一定时,随着费米能的增加,电流-电压曲线中负微分电阻出现的位置也相应增大。图 5(b)中给出了当费米能一定

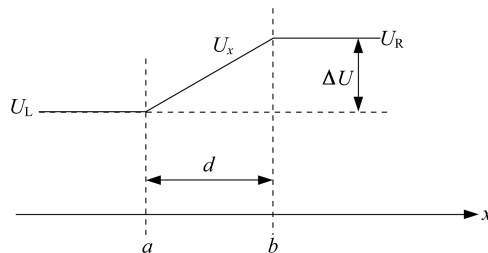


图 2 p-n 结势场分布示意图
Fig. 2 Schematic diagram of the p-n junctions potential profiles

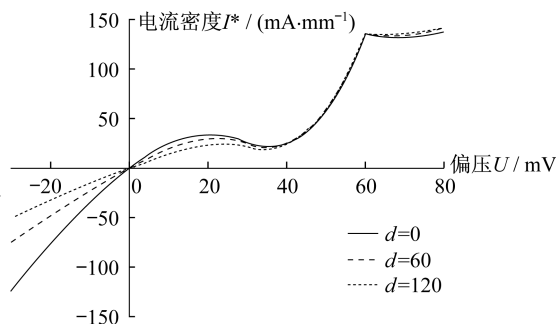


图 3 不同条件下的电流-电压特性
Fig. 3 Current density versus voltage for various conditions

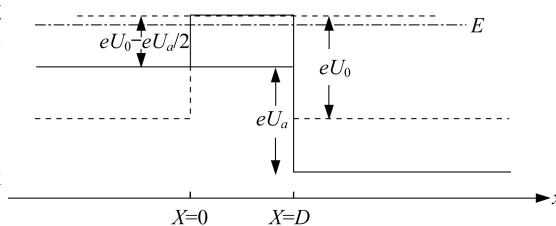


图 4 外加偏压使方形势垒的能带发生的变化
Fig. 4 Band diagram of a barrier under an external voltage

时,势垒宽度对负微分电阻的影响。相同条件下,随着势垒宽度的增加,透射率会呈现一定程度的减小^[16],因此对电流的贡献也就减少,因而,图 5(b)中势垒宽度最小的结构电流最大,相应的负微分电阻现象最不明显。随着宽度的增加,势垒对载流子的阻挡越来越明显,直至一个阻挡极限,此时发生的负微分电阻最明显,但相对于半导体中负微分电阻幅度,石墨烯中要小得多,因为负能量区域内,空穴载流子对电流的贡献是不能忽略的。

实际的势垒变化都不是阶跃型的,而是有个过渡区,如文献[17]所讨论的那样,但是由于过渡区的存在,负微分电阻效应的幅度比方形势垒情形下小了很多。关于如何增大负微分电阻效应的设计与手段,人们仍然在探索研究中。

3 结 论

本文利用传输矩阵方法,对石墨烯典型的 p-n 结及方形势垒纳米结构中的负微分电阻效应进行了研究。石墨烯 p-n 结中负微分电阻现象比传统半导体中的幅度要小,原因在于石墨烯中 Klein 隧穿过程的存在使负能量范围内的空穴对电流也有贡献。石墨烯纳米方形势垒中发生负微分电阻效应的位置在费米面附近,源于费米面附近的载流子对电流的贡献最大,势垒宽度越大,对载流子的阻挡越大,因而负微分电阻效应越明显。这些结果对利用石墨烯高电子迁移率特性制备高频器件具有参考价值。

参考文献:

- [1] NOVOSELOV K S, GEIM A K, MOROZOV S V, et al. Electric field effect in atomically thin carbon films[J]. Science, 2004, 306(5696): 666-609.
- [2] NOVOSELOV K S, GEIM A K, MOROZOV S V, et al. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene[J]. Nature, 2005, 438(7065): 197-200.
- [3] GEIM A K. Graphene: status and prospects[J]. Science, 2009, 324(5934): 1530-1534.
- [4] CASTRO NETO A H, GUINEA F, PERES N M R, et al. The electronic properties of graphene[J]. Reviews of Modern Physics, 2009, 81(1): 109-162.
- [5] SZE S M, NG K K. Physics of semiconductor devices[M]. 3rd Ed. New Jersey: John Wiley & Sons, Inc., 2006.
- [6] NGUYEN H C, NGUYEN V L. Tunneling of Dirac electrons through one-dimensional potentials in graphene: a T-matrix approach [J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2009, 21(4): 045305.
- [7] XU G J, WU B H, CAO J C. Alternating current Josephson effect in superconductor-graphene-superconductor junctions[J]. Journal of Applied Physics, 2011, 109(8): 083704-083709.
- [8] GEIM A K, NOVOSELOV K S. The rise of graphene[J]. Nature Materials, 2007, 6(3): 183-191.
- [9] HEERSCHHE H B, JARILLO-HERRERO P, OOSTINGA J B, et al. Bipolar supercurrent in graphene[J]. Nature, 2007, 446(7131): 56-59.
- [10] WEHLING T O, NOVOSELOV K S, MOROZOV S V, et al. Molecular doping of graphene[J]. Nano Letters, 2008, 8(1): 173-177.
- [11] XU G J, XU X G, WU B H, et al. The resonant tunneling through a graphene multiquantum well system[J]. Journal of Applied Physics, 2010, 107(12): 123718-123724.
- [12] XU G J, WU B H, XU X G, et al. Disorder effect on the transport properties of graphene quantum well structures[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2010, 22(43): 435301.

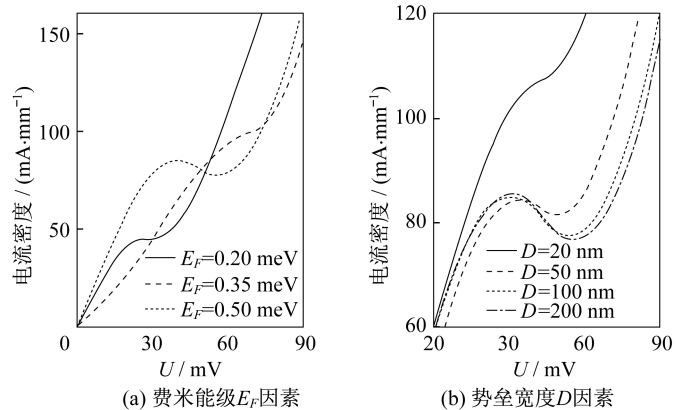


图 5 不同因素对负微分电阻的影响

Fig. 5 The impacts of different factors on the negative differential resistance

5 结论

倾斜光纤光栅由于其特殊的结构特点,正被广泛地应用于诸多传感领域,尤其在测量应变、折射率等方面具有更加广阔的市场前景。本文对倾斜光纤光栅的光谱特性进行了理论和仿真研究,考察了倾斜角度对TFBG的Bragg散射和包层模耦合的光谱特性影响,并得到了不同倾角对应的最大反射率的数值结果,验证了倾斜角度对群时延特性的影响。

参考文献:

- [1] XU O, LU S H, JIAN S S. Theoretical analysis of polarization properties for titled fiber Bragg gratings [J]. Science China Information Sciences, 2010, 53(2): 390-397.
- [2] 郑崇伟,戴瑜兴. 倾斜对光纤光栅反射特性的影响[J]. 光电子技术, 2006, 25(1): 25-27.
- [3] 欧启标,苏百顺,曾庆科,等. 倾斜光纤光栅谱特性[J]. 光子学报, 2012, 41(4): 414-420.
- [4] 刘超,孙祺,柴雅婷,等. 倾斜光纤光栅周期对其透射谱的影响[J]. 光学仪器, 2014, 36(1): 58-61.
- [5] CHEN X F, ZHOU K M, ZHANG L, et al. Optical chemsensor based on etched titled Bragg grating structures in multimode fiber[J]. IEEE Photonics Technology Letters, 2005, 17(4): 864-866.
- [6] HILL K O, MELTZ G. Fiber Bragg grating technology fundamentals and overview[J]. Journal of Lightwave Technology, 1997, 15(18): 1263-1276.
- [7] ERDOGAN T. Fiber grating spectra[J]. Journal of Lightwave Technology, 1997, 15(8): 1277-1294.
- [8] CAO CHETEOR C, SHEVCHENKO Y, SHAO L Y, et al. High resolution interrogation of tilted fiber grating SPR sensors from polarization properties measurement[J]. Optics Express, 2011, 19(2): 1656-1664.
- [9] 饶云江,王义平,朱涛. 光纤光栅原理与应用[M]. 北京:科学出版社, 2006.

(编辑:张磊)

~~~~~  
(上接第 338 页)

- [13] DRAGOMAN D, DRAGMAN M. Negative differential resistance of electrons in graphene barrier[J]. Applied Physics Letters, 2007, 90(14): 143111.
- [14] NAM DO V. Comment on "Negative differential conductance of electrons in graphene barrier" [J]. Applied Physics Letters, 2008, 92(21): 216101.
- [15] KATSNELSON M I, NOVOSELOV K S, GEIM A K. Chiral tunneling and the Klein paradox in graphene[J]. Nature Physics Letters, 2006, 2(9): 620-625.
- [16] CHEN X, TAO J W. Design of electron wave filters in monolayer graphene by tunable transmission gap[J]. Applied Physics Letters, 2009, 94(26): 262102.
- [17] XU X G, XU G J, CAO J C. Electron tunneling through a trapezoidal barrier in graphene[J]. Japanese Journal of Applied Physics, 2010, 49(8): 085201.

(编辑:刘铁英)

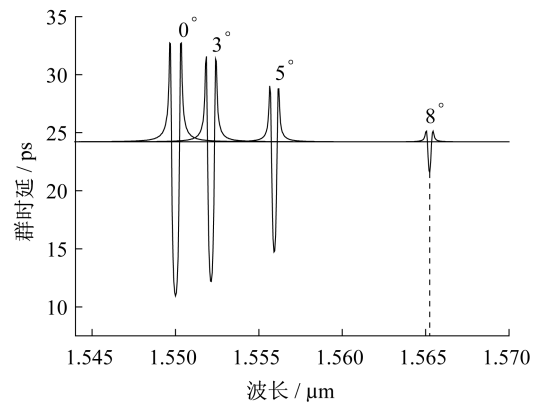


图5 不同倾角的TFBG群时延曲线  
Fig. 5 Group delay curves of TFBG with different titled angles