arXiv:2603.03240v1 [cond-mat.mes-hall] 3 Mar 2026

应变石墨烯中的磁势垒反常克莱因隧穿

预印本

EdgardoMarin-Colli†, 1, **Tonatiuh Gómez-Ramírez**†, 2, **O-Excell Gutierrez***, 3, **YonatanBetancur-Ocampo***, 4, **Alfredo Raya****, ***, 5 和 **Erik Díaz-Bautista**†, 6

†国立理工学院物理与数学高等学院，墨西哥墨西哥城 07738

*下加利福尼亚自治大学理学院，墨西哥下加利福尼亚州恩塞纳达 22860*墨西哥国立自治大学物理研究所，墨西哥城，墨西哥

**米却肯圣尼古拉斯·德·伊达尔戈大学电气工程学院，墨西哥米却肯州莫雷利亚 58040

***精确科学中心，比奥比奥大学。智利奇廉，邮政信箱 447。电子邮箱：emarinc2200@alumno.ipn.mx1，agomezr2201@alumno.ipn.mx2，oscar.gutierrez22@uabc.edu.mx3，ybetancur@fisica.unam.mx4，alfredo.raya@umich.mx5，ediazba@ipn.mx6

摘要

我们研究了受到一系列 N 静电势垒和磁势垒作用的应变石墨烯片中的电子输运。采用改进后的传输矩阵框架，我们考察了透射系数和反射系数随单轴应变及势垒数量变化的规律。研究发现，机械形变与外部磁场的相互作用会产生反常克莱因隧穿，使电导能够通过应变和势垒构型得到有效调控。这些发现凸显了应变工程和磁场调制作为调控二维材料中电荷输运的有力工具所发挥的作用。更广泛而言，它们表明，机械控制与电磁控制可用于设计具有可调电子性质的下一代固态器件。

关键词　电子透射 ·传输矩阵 · 应变石墨烯 · 磁势垒与静电势垒　s

1 引言

随着石墨烯的发现，实验研究克莱因隧穿成为可能——这是一种相对论效应，最初由奥斯卡·克莱因于 1929 [1] 提出，其特征是相对论性粒子无论势垒的高度和宽度如何，都能以确定的方式穿过势垒。在石墨烯中，电荷载流子表现为无质量狄拉克费米子，以费米速度 v_{F} 运动，其速度几乎比光速 [2]慢 300 倍。这一性质与赝自旋守恒相结合，使电子能够完全透射过静电势垒，即使势垒高度超过载流子能量 [3–5]亦是如此。赝自旋守恒禁止法向入射时发生反向散射，从而产生透射系数 $T = 1$ [3]。

在石墨烯 p-n 结中实验实现克莱因隧穿，标志着凝聚态物理学的一个变革性时刻 [5,6]。这些实验直接证明了电子能够完全透射过人工构造的势垒，证实了关于石墨烯准粒子手征性的理论预言。后续研究在狭窄的石墨烯异质结中发现了电导振荡；在低磁场下观察到的电导条纹相移，构成了载流子法向入射时不存在反向散射的标志 [5]。这些发现确立了石墨烯作为一个易于利用的平台，可用于研究那些借助基本粒子难以观测的量子电动力学现象。

除了这一理想情形，磁场、应变或周期势等更复杂的构型也会改变透射性质，从而产生反常克莱因隧穿，此时在非零入射角或特定能量范围内会发生完全透射 [7,8]。尤其是，应变工程已成为调控石墨烯电子性质的有力工具。单轴应变可在狄拉克点处打开带隙，且拉伸

应变可沿锯齿方向打开超过 23% 的带隙 [9], , 而剪切与单轴应变的结合可在 12–17% 的形变下实现 0 至 0.9 eV 的带隙调制 [10,11]。机械形变与外部磁场之间的相互作用，为调控输运性质提供了更多自由度，并促使谷依赖现象和赝磁场出现，进一步丰富了电子透射的物理图景 [10,12]。

由静电势垒和磁势垒周期性阵列组成的石墨烯超晶格，作为研究透射共振和滤波特性的体系，已引起广泛关注 [13–15]。传输矩阵法已被证明是分析这些多势垒体系中输运行为的重要理论工具，可系统研究势垒高度、宽度和周期性等结构参数如何影响透射谱 [15,16]。包括高斯势和洛伦兹势分布在内的非常规超晶格剖面，已展现出产生近乎完美通带和全向滤波特性的能力 [15]。这些发现表明，其有望应用于电子束准直、能量滤波和谷电子器件。

在本文中，我们采用一种由沿 x-轴排列的 N 静电势垒和 δ磁势垒组成的石墨烯超晶格模型 [13,14,16–20] 来研究这一现象。该方法使我们能够探究机械形变和场调制如何影响透射共振（$T = 1$），从而为控制和阐释石墨烯体系中的克莱因隧穿与反常克莱因隧穿提供框架。通过应变与 δ磁场的共同作用调控电子输运，为石墨烯电子器件的发展开辟了新的途径，包括高频晶体管、量子计算平台和柔性电子学 [21–23]。本文其余部分安排如下：第 2 节构建单轴应变石墨烯的有效哈密顿量。第 3 节讨论我们在研究中采用的传递矩阵框架。第 4 节给出并讨论不同势垒构型下的透射系数 T和电导 G 结果。结论将在第 5 节中给出。

2 单轴应变石墨烯的有效狄拉克哈密顿量

石墨烯是一种二维狄拉克材料，因其独特的电子、光学和力学性质而闻名于凝聚态物理领域。它由碳原子构成的蜂窝状晶格组成，其晶格矢量 $\vec{a}_1$ 和 $\vec{a}_2$ 如图 1 所示。石墨烯原胞包含两个碳原子，每个原子都属于一个三角形子晶格，分别标记为 A 或 B。对于本征石墨烯以及应变石墨烯 [9,24–26], , 描述电子跃迁至最近邻原子 [26–28], （即从 A 子晶格中的原子跃迁至 B 子晶格中的原子，或反向跃迁）的紧束缚（TB）哈密顿量，是通过分析倒易晶格得到的，其中忽略了次近邻相互作用和 p_z 轨道重叠。根据布洛赫定理，该哈密顿量可表示为 [26,27,29]:

$$H_{\mathrm{TB}} = \sum_{j=1}^{3} \begin{pmatrix} 0 & t_j \mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_j} \\ t_j \mathrm{e}^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_j} & 0 \end{pmatrix}, \tag{1}$$

其能谱

$$E_{\pm} = \lambda \left(\sum_{i=1}^{3} t_i^2 + 2 \sum_{i<j}^{3} t_i t_j \cos\left(\vec{k} \cdot (\delta_i - \delta_j) \right) \right)^{1/2}, \tag{2}$$

其中， $\lambda = \mathrm{sgn}(E)$表示导带（$\lambda = +1$）和价带（$\lambda = -1$）， $k = (k_x,\ k_y)$为电子的波矢，而 t_1 和 t_2 是两个跃迁参数，用于量化电子跃迁至最近邻原子的概率振幅。在应变石墨烯中， t_j 随单轴应变 ϵ 变化，并通过修正后的键长 δ_j、 $j = 1,\ 2$、3呈指数关系，即 $t_j = t\mathrm{e}^{-\beta(\delta_j/a_0 - 1)}$，其中 $\beta = 2.6$ 为格吕奈森常数，$t = 2.7$eV为本征石墨烯中的跃迁参数， $a_0 = 1.42$ Å为材料未变形片层中的键长 [9,26,30,31]。这里，拉伸应变 ϵ 表示形变 [9] 的百分比，且与沿锯齿形（$\mathcal{ZZ}$）或扶手椅形（$\mathcal{AC}$）方向施加于石墨烯层上的单轴张力 T 的大小成正比（再次参见图1）。

更准确地说，最近邻格点 $\delta_1 = 2\vec{a}_1/3 - \vec{a}_2/3$、$\delta_2 = 2\vec{a}_2/3 - \vec{a}_1/3$ 和 $\delta_3 = -\delta_1 - \delta_2$ 与拉伸应变的关系由形变后的晶格矢量 [32] 给出:

$$\vec{a}_1 = \sqrt{3}\, a_0 \left[(1 + \rho^{+}\epsilon + \rho^{+}\epsilon\cos(2\zeta))\, \mathbf{e}_x \ +\ \rho^{+}\epsilon \sin(2\zeta)\, \mathbf{e}_y \right], \tag{3}$$

$$\vec{a}_2 = \frac{\sqrt{3}}{2}\, a_0 \Big[(1 + \rho^{-}\epsilon + 2\rho^{+}\epsilon\cos(2\zeta - \pi/3))\ \textbf{能量}_x \ +\ \left(\underline{\sqrt{3}}(1 + \rho^{-}\epsilon) + 2\rho^{+}\epsilon \sin(2\zeta - \pi/3)\right)\textbf{能量}_y \Big], \tag{4}$$

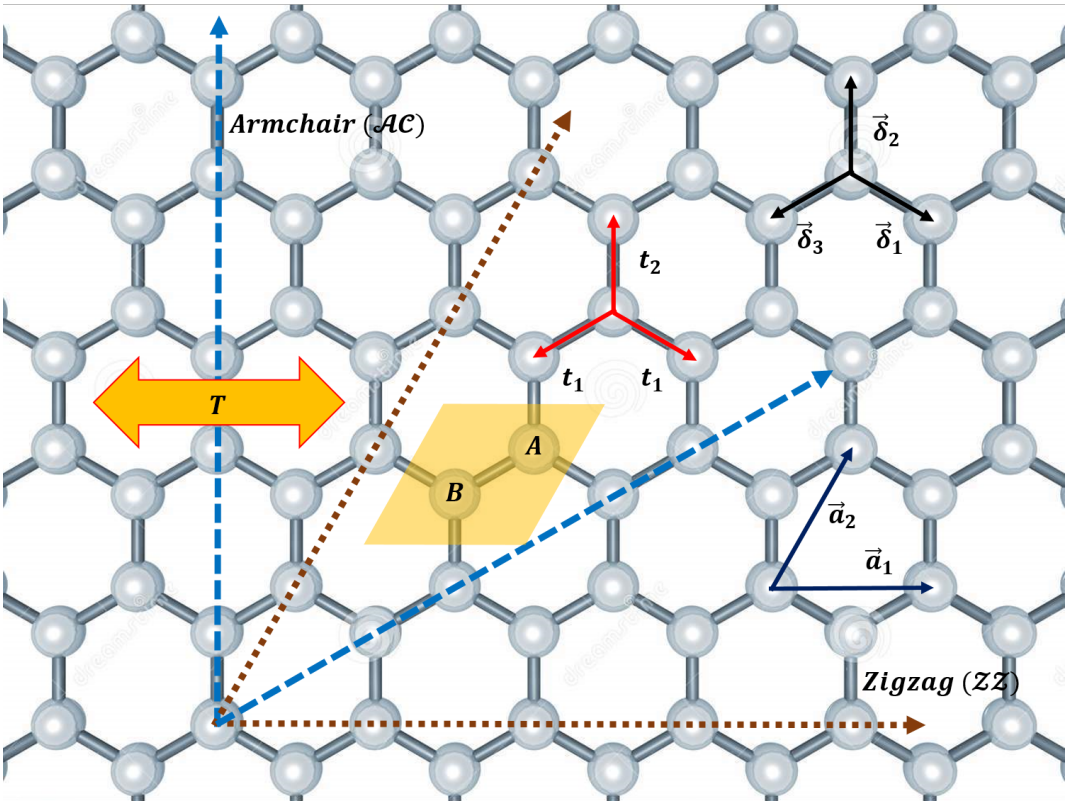


图1：考虑沿 x 轴（y 轴）对齐锯齿形（扶手椅形）方向、每隔 30° 交替排列的单轴应变石墨烯。沿这些高对称方向施加应变，会使最近邻跃迁振幅变为两个不同的值，即 t_1 和 t_2。最近邻位置由 δ_1、δ_2 和 δ_3 给出，而晶格矢量 $\vec{a}_1$ 和 $\vec{a}_2$ 张成变形六角结构。晶胞以黄色标示。

其中，$\rho^{\pm} = (1 \pm \nu)/2$，$\nu \sim 0.165$ 为石墨烯的泊松比，[33,34]，而 ζ 表示施加单轴应变的方向。因而，对于 $\mathcal{ZZ}$ 形变（$\zeta = 0^\circ$），有

$$\delta_1^{\mathcal{ZZ}} = \delta_3^{\mathcal{ZZ}} = a_0\sqrt{\left(1+\frac{1}{4}(3-\nu)\epsilon\right)^2 + \frac{3}{16}(1+\nu)^2\epsilon^2}, \quad \delta_2^{\mathcal{ZZ}} = a_0(1-\nu\epsilon), \tag{5}$$

而对于 $\mathcal{AC}$ 形变（$\zeta = 90^\circ$），我们得到

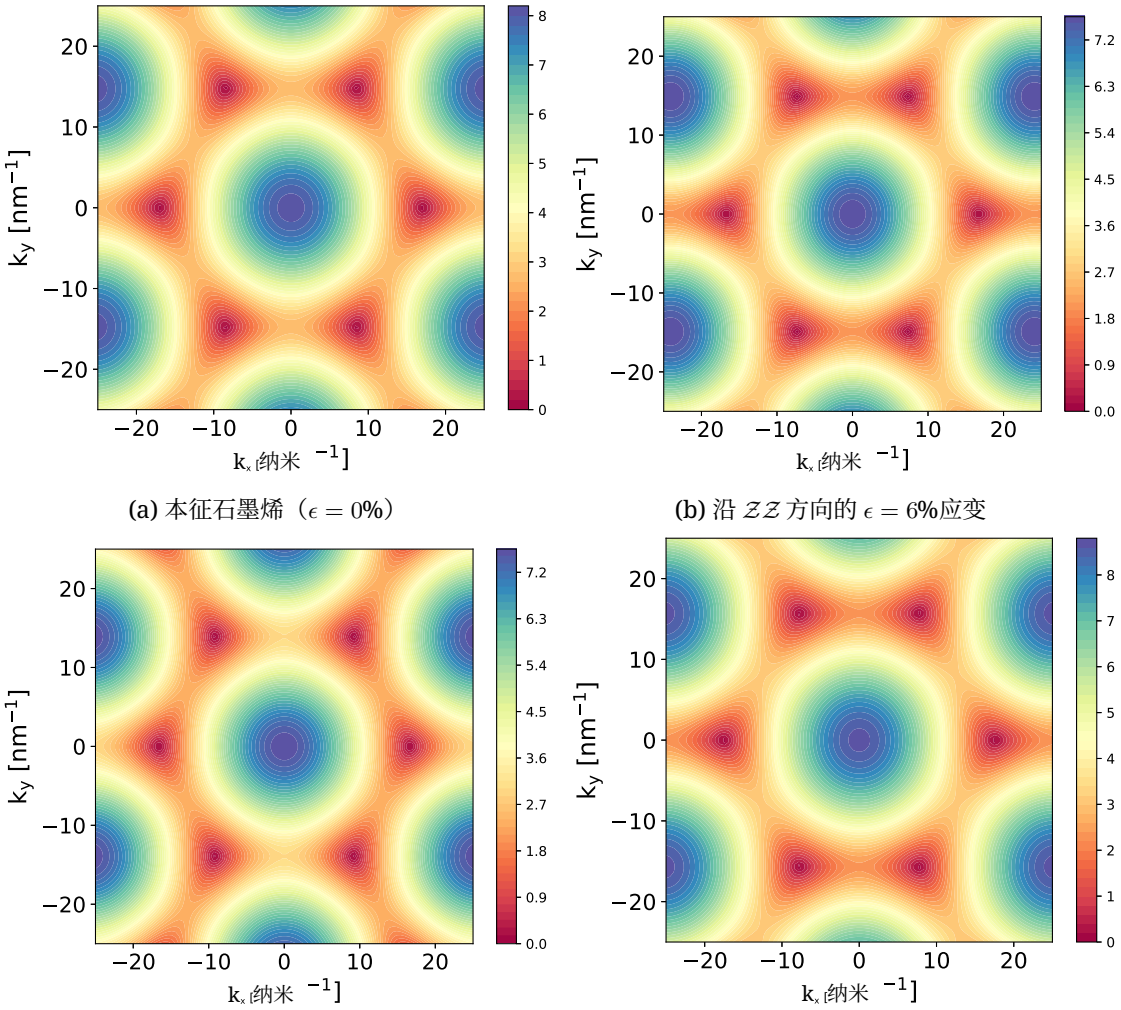
$$\delta_1^{\mathcal{AC}} = \delta_3^{\mathcal{AC}} = a_0\sqrt{\left(1+\frac{1}{4}(1-3\nu)\epsilon\right)^2 + \frac{3}{16}(1+\nu)^2\epsilon^2}, \quad \delta_2^{\mathcal{AC}} = a_0(1+\epsilon). \tag{6}$$

现在，将紧束缚哈密顿量 (1) 在第一布里渊区中的狄拉克点位置 K_{D} 附近展开（见图 2），即取 $\vec{k} = \vec{p} + \vec{K}_{\mathrm{D}}$ 使得 $|\vec{p}| \ll |\vec{K}_{\mathrm{D}}|$，并满足以下关系

$$\sum_j^3 t_j \exp\left(-i\vec{K}_{\mathrm{D}}\cdot\vec{\delta}_j\right) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \cos[\vec{K}_{\mathrm{D}}\cdot(\vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_2)] = -\frac{t_2}{2t_1}, \tag{7}$$

连续近似下的有效狄拉克型哈密顿量由下式给出

$$H = v_x\, p_x\sigma_x + v_y\, p_y\sigma_y, \tag{8}$$



(a) 本征石墨烯（$\epsilon = 0\%$）

(b) 沿 $\mathcal{ZZ}$ 方向的 $\epsilon = 6\%$应变

(c)沿 $\mathcal{AC}$ 方向的 $\epsilon = 6\%$应变

(d) 沿 $\mathcal{AC}$ 方向的 $\epsilon = -6\%$应变

图 2：不同应变值 ϵ下，第一布里渊区附近式（2）中导带的能量等值线。

其中$\sigma_{x/y}$ 为泡利矩阵，且

$$v_x = \frac{1}{\hbar}\sum_{j=1}^{3}\delta_{jx}t_j \sin\left(\vec{K}_{\mathrm{D}}\cdot\vec{\delta}_j\right) = \frac{1}{\hbar}\sqrt{a_{1x}^2t_1^2 + (a_{2x}-a_{1x})a_{2x}t_2^2}, \tag{9}$$

$$v_y = \frac{1}{\hbar}\sum_{j=1}^{3}\delta_{jx}t_j \cos\left(\vec{K}_{\mathrm{D}}\cdot\vec{\delta}_j\right) = \frac{1}{\hbar}\sqrt{a_{1y}^2t_1^2 + (a_{2y}-a_{1y})a_{2y}t_2^2}, \tag{10}$$

为费米速度的分量。

然后，由薛定谔方程

$$H\Psi(\vec{r},\vec{k}) = \hbar\begin{pmatrix}0 & g^*(\vec{k})\\ g(\vec{k}) & 0\end{pmatrix}\Psi(\vec{r},\vec{k}) = E\Psi(\vec{r},\vec{k}), \tag{11}$$

其中 E 表示能量和函数 $g(\vec{k}) = g_x(\vec{k}) + ig_y(\vec{k}) = v_xk_x + iv_yk_y$，我们将解写为：

$$\Psi(\vec{r},\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \lambda\,\mathrm{e}^{i\theta(\vec{k})}\end{pmatrix}\mathrm{e}^{ik_xx}\mathrm{e}^{ik_yy}, \quad E = \lambda\hbar\sqrt{v_x^2k_x^2 + v_y^2k_y^2}. \tag{12}$$

这里，

$$\theta(\vec{k}) = \arctan\left(g_y(\vec{k})/g_x(\vec{k})\right), \tag{13}$$

称为赝自旋角，而波矢方向记为

$$\gamma(\vec{k}) = \arctan\left(k_y/k_x\right). \tag{14}$$

值得一提的是，群速度方向由下式给出：

$$\phi(\vec{k}) = \arctan\left(\partial_{k_y}|g(\vec{k})|/\partial_{k_x}|g(\vec{k})|\right), \tag{15}$$

它表示散射过程中电子束的方向。因此，对于应变石墨烯等各向异性材料， [26,35], 角度 $\theta(\vec{k})$、 $\gamma(\vec{k})$ 和 $\phi(\vec{k})$ 通常并不平行。这一特点促使人们通过赝自旋守恒 $\theta(\vec{k})$ 来解释应变石墨烯中的反常克莱因隧穿，而 $\phi(\vec{k})$ 则遵循各向异性斯涅尔定律。

值得一提的是，上文推导的有效狄拉克哈密顿量在长波长极限下成立。在此极限中，电子波长远大于晶格常数 $a_c = \sqrt{3}\,a_0 \sim 0.25\,\mathrm{nm}$，且外部势的空间变化尺度显著大于原子间距。在此情况下，第一布里渊区中的两个不等价谷 $\vec{K}_{\mathrm{D}}$ 和 $\vec{K}'_{\mathrm{D}}$ 仍保持解耦，谷间散射可以忽略 [3,30]。基于这些原因，我们假设本文所考虑的静电势 $V(x)$ 和磁矢势 $A_y(x)$ 都在数纳米的距离范围内平滑变化。为便于解析处理，我们用狄拉克δ函数描述磁势垒；但应将其理解为在长度尺度为 $\sim 5{-}10\,\mathrm{nm}$ 的范围内发生的尖锐但具有有限宽度的跃变，这足以避免显著的谷混合 [36,37]。这样， δ函数理想化模型既抓住了磁场突变的基本物理特性，又保持了数学上的简洁性。

同样，假设应变场在整个样品中平滑变化，这与式（3）–（6）中采用的连续介质弹性理论一致 [38]。本模型未考虑可能引发谷间散射的原子尺度无序或缺陷。因此，此处呈现的结果适用于高质量石墨烯样品，其中这类无序极少见；现代实验中的剥离石墨烯或化学气相沉积生长的石墨烯便达到了这一条件 [39,40]。

另一方面，对于原子尺度上的势变化，或存在强无序的情况，则需要采用完整的紧束缚方法或原子模拟，才能恰当考虑谷混合效应 [41,42]。尽管如此，此处采用的连续介质狄拉克模型已通过大量实验验证，能够在谷混合受到抑制的条件下准确预测输运性质。

3 传递矩阵框架

现在，考虑一个处于应变石墨烯中的电子，它受到由 N 静电势 $V(x)$ 和磁场 $\vec{B}(x)$ 构成的多势垒结构的作用。假设采用朗道规范 $\vec{A}(x) = A_y(x)\mathbf{e}_y$，相应的哈密顿量为 [35,43–46]

$$H = \hbar\left(v_x\sigma_x p_x + v_y\sigma_y(p_y + eA_y(x))\right) + V(x)\sigma_0, \tag{16}$$

其中

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & x_{2n-2} < x < x_{2n-1}, \\ 0, & \text{otherwise}, \end{cases} \qquad A_y(x) = B\ell_B\left(\Theta(x - x_{2n-2}) - \Theta(x - x_{2n-1})\right), \tag{17}$$

其中 $n = 1,\ 2,\ \ldots\ldots,\ (N+1)/2$。这里， $D = x_{2n-1} - x_{2n-2}$ 是第 n 个区域的宽度， N 表示区域的数量，而 $\ell_B = \sqrt{\hbar/(e\,B)}$ 是磁长（见图 3）。函数 $\Theta(x)$ 表示赫维赛德阶跃函数，因此

$$\vec{B}(x) = \nabla \times \vec{A}(x) = B\ell_B\left(\delta(x - x_{n-1}) - \delta(x - x_n)\right)\mathbf{e}_z, \tag{18}$$

也就是说，这对应于一对强度为 B 、间距为 D 的方向相反的 δ-函数磁势垒。选择矢势 $\vec{A}(x)$ 如式（17）所示，可保证其在每个区间$x_{2n-1} < x < x_{2n-2}$内为常数。

如前所述，式（18）中描述的 δ-函数磁势垒是一种理想化模型，有助于对输运问题进行解析和半解析处理。实际上，宽度趋近于零的磁场分布无法实现，任何实验实现都需要具有有限的空间范围。尽管如此，这种

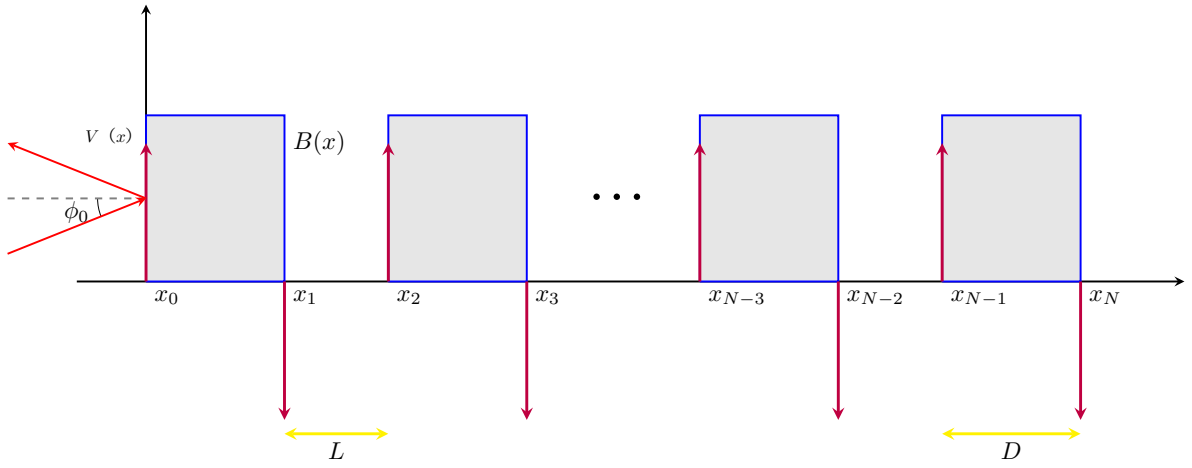


图3：材料表面上沿 x 轴排列的 N 磁势垒与静电势垒系统示意图。

理想化模型有双重作用：（i）它在数学上便于处理，使我们能够通过传递矩阵法推导出精确或半精确解；（ii）它捕捉了突变磁场跃变的基本物理特性，而这种跃变可在石墨烯器件中实现。

对于本文所考虑的磁场强度（$B \sim 0.1{-}0.2$ 特斯拉），磁长 $\ell_B = \sqrt{\hbar/(e\,B)}$ 定义了磁约束的特征尺度。如果实际磁势垒宽度 D 满足 $D \ll \ell_B$，则δ-函数近似可为输运物理提供合理的一阶描述。然而，当势垒宽度与 ℓ_B相当或更大时，会出现更复杂的效应。尤其是，势垒区域内朗道能级的形成变得重要，电子态呈现出量子点约束的特征，并具有离散能谱 [47]。

接着，为了实施传递矩阵方法，我们提出在第 n个区域内采用如下波函数试探形式

$$\begin{aligned}\Phi_n(\vec{r}) &= t_n\Psi(\vec{r},\vec{k}_n^{t}) + r_n\Psi(\vec{r},\vec{k}_n^{r}) \\ &= \frac{\mathrm{e}^{ik_y y}}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{ik_{n,x}^{t}x} & \mathrm{e}^{ik_{n,x}^{r}x} \\ \lambda_n\mathrm{e}^{i(\theta(k_{n,x}^{t})+k_{n,x}^{t}x)} & \lambda_n\mathrm{e}^{i(\theta(k_{n,x}^{r})+k_{n,x}^{r}x)}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} t_n \\ r_n\end{pmatrix} = \frac{\mathrm{e}^{ik_y y}}{\sqrt{2}}M_n(x)\begin{pmatrix} t_n \\ r_n\end{pmatrix},\end{aligned} \tag{19}$$

其中，t_n 和 r_n 分别为透射波幅和反射波幅。对于第一个区域（$n=0$），$t_0 = 1$对应于入射波，其入射波矢为 $\vec{k}_0^{t}$；$r_0 = r$ 对应于反射部分，波矢为$\vec{k}_0^{r}$。注意，在最后一个区域中 $n = N+1$，因此 $r_{N+1} = 0$，因为不存在反射，且出射波的 $t_{N+1} = t$。此外，我们定义动力学量：

$$k_{x,n}^{(t/r)} = (+/-)\lambda_n\sqrt{\left(\frac{E-V(x)}{\hbar v_x}\right)^2 - \frac{v_y^2}{v_x^2}\left(k_{y,0}+\frac{eA_y(x)}{\hbar}\right)^2}, \tag{20}$$

$$k_{y,0} = \frac{v_x|E|\tan(\phi_0)}{\hbar v_y^2\sqrt{1+\left(\frac{v_x\tan(\phi_0)}{v_y}\right)^2}}, \tag{21}$$

$$\theta(\vec{k}_n^{(t/r)}) = \arctan\left(\frac{v_y\left(k_{y,0}+\frac{eA_y(x)}{\hbar}\right)}{v_x k_{x,n}^{(t/r)}}\right), \tag{22}$$

其中，$\phi_0 \equiv \phi\,(\vec{k}_0^{t})$ 是根据式（15）得到的第一个势垒处的入射角。

现在，在分隔波函数为 $\Phi_n(\vec{r})$ 和 $\Phi_{n+1}(\vec{r})$ 的区域的位置 $x = x_n$ 处施加连续性条件，

$$\Phi_n(x_n) = \Phi_{n+1}(x_n), \tag{23}$$

我们得到以下关系式

$$\begin{pmatrix} t_n \\ r_n \end{pmatrix} = M_n^{-1}(x_n) M_{n+1}(x_n) \begin{pmatrix} t_{n+1} \\ r_{n+1} \end{pmatrix},$$

其中矩阵 $M_m(x_l)$ 为

$$M_m(x_l) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{ik_{x,m}^t x_l} & \mathrm{e}^{ik_{x,m}^r x_l} \\ \lambda_m \mathrm{e}^{i(\theta(\vec{k}_m^t)+k_{x,m}^t x_l)} & \lambda_m \mathrm{e}^{i(\theta(\vec{k}_m^r)+k_{x,m}^r x_l)} \end{pmatrix}. \tag{24}$$

现在，考虑由 N 个区域组成的系统部分，可得

$$\Phi_0(\vec{r}) = M_1(x_0) M_1^{-1}(x_1) M_2(x_2) M_2^{-1}(x_3) \cdots M_N(x_{N-1}) M_N^{-1}(x_N) \Phi_{N+1}(\vec{r}), \tag{25}$$

由此可定义有效传输矩阵为

$$\Lambda = \prod_{n=1}^{N} M_n(x_{n-1}) M_n^{-1}(x_n), \tag{26}$$

为

$$\begin{aligned} &M_n(x_{n-1}) M_n^{-1}(x_n) \\ &= \frac{1}{\mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_n^r)} - \mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_n^t)}} \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{i(\theta(\vec{k}_n^r)-\xi_{nn-1}^t)} - \mathrm{e}^{i(\theta(\vec{k}_n^t)-\xi_{nn-1}^r)} & \lambda_n(\mathrm{e}^{-i\xi_{nn-1}^r} - \mathrm{e}^{-i\xi_{nn-1}^t}) \\ \lambda_n \mathrm{e}^{i(\theta(\vec{k}_n^t)+\theta(\vec{k}_n^r))}(\mathrm{e}^{-i\xi_{nn-1}^t} - \mathrm{e}^{-i\xi_{nn-1}^r}) & \mathrm{e}^{i(\theta(\vec{k}_n^r)-\xi_{nn-1}^r)} - \mathrm{e}^{i(\theta(\vec{k}_n^t)-\xi_{nn-1}^t)} \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{27}$$

且 $\xi_{nn-1}^{(r/t)} = k_{x\,n}^{(r/t)}(x_n - x_{n-1})$ 是第 n 个区域中出射波的相移。后一表达式也可以用传播 P_n 和动力学 D_n 矩阵表示为

$$M_n(x_{n-1}) M_n^{-1}(x_n) = D_n P_n D_n^{-1}, \tag{28}$$

其中

$$P_n = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-ik_{x,n}^t(x_n - x_{n-1})} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-ik_{x,n}^r(x_n - x_{n-1})} \end{pmatrix}, \quad D_n = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \lambda_n \mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_n^t)} & \lambda_n \mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_n^r)} \end{pmatrix}. \tag{29}$$

先前的矩阵传递框架使我们能够简化电子在分层势垒中的散射过程，只需求解一个 2×2 线性方程组，即可确定电子穿过整个势垒组的透射概率

$$\Lambda \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda_{N+1} \mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_{N+1}^t)} \end{pmatrix} \mathrm{e}^{ik_{x,N+1}^t x_N} t = \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda_0 \mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_0^t)} \end{pmatrix} + r \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda_0 \mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_0^r)} \end{pmatrix}, \tag{30}$$

我们可得透射 t和反射 r 振幅的模平方:

$$T = |t|^2 = \frac{4\sin^2\left(\frac{1}{2}(\theta(\vec{k}_0^t) - \theta(\vec{k}_0^r)\right)}{|\rho_y - \lambda_0 \rho_x \mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_0^r)}|^2}, \quad R = |r|^2 = \frac{|\rho_y - \lambda_0 \rho_x \mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_0^t)}|^2}{|\rho_y - \lambda_0 \rho_x \mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_0^r)}|^2}, \tag{31}$$

其中

$$\begin{pmatrix} \rho_x \\ \rho_y \end{pmatrix} = \Lambda \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda_{N+1} \mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_{N+1}^t)} \end{pmatrix}. \tag{32}$$

3.1 电导

电导是定义为电阻倒数的物理量；因此，研究电导有助于深入了解磁场和单轴应变对石墨烯电子输运的综合影响。根据朗道尔–比特克形式体系，单位长度电导计算如下： [48–50]

$$G = \frac{e^2}{\hbar} \int T \, \mathrm{d}k = \frac{G_0}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} T \frac{\sec^2(\phi_0)}{\left(1 + \frac{v_x^2}{v_y^2} \tan^2(\phi_0)\right)^{3/2}} \, \mathrm{d}\phi_0, \tag{33}$$

其中

$$G_0 = \frac{e^2|E|v_x}{\hbar^2 v_y^2}. \tag{34}$$

这一形式体系已成为介观物理的基石，它将电子输运视为费米能级处的散射问题，其中电导由库之间电子的透射概率决定 [50,51]。该方法特别适用于石墨烯系统：在低温下，相干输运可在微米尺度的距离上得以维持，而电荷载流子的手征性则导致独特的透射性质 [3,52]。

在克莱因隧穿的背景下，电导呈现出鲜明特征，直接反映了狄拉克费米子穿过势垒时的反常透射性质。石墨烯 p-n 结中的实验测量已表明，电导振荡构成克莱因隧穿的直接特征 [5,6]。这些振荡源于结腔内的法布里-珀罗共振，而它们在低磁场下的相移为垂直入射载流子的完全透射提供了明确证据 [5]。跨越陡峭势阶的电阻已被证明与狄拉克费米子克莱因隧穿的理论预言定量相符，从而证实了朗道尔-比特克描述在该情形下的有效性 [6,53]。

外部磁场的应用使电导行为变得更加复杂。磁势垒会偏转电子透射的角度依赖性，抑制正入射电子并降低整体电导 [54,55]。当磁场强度超过某一临界值，即回旋轨道直径与势垒宽度相匹配时，无论势垒高度如何，电导都可以被抑制到近乎为零，从而有效实现对狄拉克费米子的限域 [54]。这种由磁场引起的电导调制已被提出作为电光应用和谷电子器件的一种机制 [12,55]。磁势垒与静电势之间的相互作用会在电导中产生独特的法布里-珀罗条纹图样；当势垒高度接近费米能时，还会出现具有特征性的狭窄区域 [54]。

另一方面，单轴应变为石墨烯系统中的电导调制提供了额外的自由度。应变工程可以在晶界和界面处打开输运带隙，从而显著影响潜在晶体管应用中的开关比 [56,57]。电导调制对边界的拓扑结构、应变方向以及取向错配的石墨烯层之间的扭转角高度敏感 [56,57]。在垂直石墨烯异质结构中，应变诱导的狄拉克锥位移可以在仅施加几个百分点应变的情况下产生高达数百毫电子伏特的导电带隙，从而实现强电导调制，并显著提高塞贝克系数 [57]。近期理论研究预测，应变调制石墨烯异质结构可以实现高达 10^{12} 的开关比，同时实现高电流谷极化，使其成为谷电子学电流开关的有力候选者 [58]。

应变与磁场对石墨烯超晶格电导的综合影响，为器件应用提供了颇具前景的途径。通过压力调控应变诱导的赝磁场，可实现具有方向选择性的电子传输和谷过滤，从而构建谷电子学的基本元件 [59]。通过应变工程抑制克莱因隧穿，有助于解决石墨烯晶体管面临的一项根本挑战：反向散射的缺失通常会妨碍电流的有效切换 [58]。因此，利用静电势垒、磁场与机械形变之间的相互作用调制电导，为控制石墨烯中的电子输运提供了灵活多样的方案，并对柔性电子学、应变传感器和量子计算平台具有重要意义 [23,56,57]。

4 结果与讨论

本节分析单个磁势垒与静电势垒的情形，由此可得到精确表达式，并可利用矩阵传递法对多个势垒的数值计算结果进行验证。随后，我们考虑多个势垒的情形，并采用矩阵传递法和朗道尔-比特克形式体系对透射率进行数值计算。

4.1 解析情形：单个磁势垒和静电势垒

为了得到透射系数和反射系数的显式方程，我们将考虑在 $x_0 = 0$ 处、宽度为 D 的单个磁势垒与静电势垒（$N = 1$）的情况。由式（32）左侧可得

$$\rho_x = (\mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_1^r)} - \mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_1^t)})^{-1} \left((\mathrm{e}^{-i\xi_{10}^t}\mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_1^r)} - \mathrm{e}^{-i\xi_{10}^r}\mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_1^t)}) + \lambda_0\lambda_1\mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_0^t)}(\mathrm{e}^{-i\xi_{10}^r} - \mathrm{e}^{-i\xi_{10}^t}) \right), \tag{35}$$

$$\rho_y = (\mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_1^r)} - \mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_1^t)})^{-1} \left(\lambda_1\mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_1^t)}\mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_1^r)}(\mathrm{e}^{-i\xi_{10}^t} - \mathrm{e}^{-i\xi_{10}^r}) + \lambda_0\mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_0^t)}(\mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_1^r)}\mathrm{e}^{i\xi_{10}^r} - \mathrm{e}^{i\theta(\vec{k}_1^t)}\mathrm{e}^{-i\xi_{10}^t}) \right), \tag{36}$$

其中，我们对 $x > x_1$ 作了如下定义：$\xi_{10}^{(r/t)} = k_x^{(r/t)},_1$ D、$\vec{k}_2^t = \vec{k}_0^t$ 和 $\lambda_2 = \lambda_0$。

现在，假设 透射波和反射波的赝自旋角满足以下近似：

$$\theta(\vec{k}_n^r) = \pi - \theta(\vec{k}_n^t), \quad n = 0, 1, \tag{37}$$

并考虑到各区域波矢的 x 分量符号变化，我们得到：

$$T = \frac{\left(v_x^2 k_{x,0}^t k_{x,1}^t\right)^2}{\left(v_x^2 k_{x,0}^t k_{x,1}^t \cos(k_{x,1}^t D)\right)^2 + \left(v_y^2 k_{y,0}\left(k_{y,0} + \frac{eA_y(x)}{\hbar}\right) - \lambda_0\lambda_1 |g(\vec{k}_0^t)|\,|g(\vec{k}_1^t)|\right)^2 \sin^2(k_{x,1}^t D)}, \tag{38}$$

$$R = \frac{v_y^2\left(|g(\vec{k}_1^t)|\,k_{y,0} - \lambda_0\lambda_1 |g(\vec{k}_0^t)|\,\left(k_{y,0} + \frac{eA_y(x)}{\hbar}\right)\right)^2 \sin^2(k_{x,1}^t D)}{\left(v_x^2 k_{x,0}^t k_{x,1}^t \cos(k_{x,1}^t D)\right)^2 + \left(v_y^2 k_{y,0}\left(k_{y,0} + \frac{eA_y(x)}{\hbar}\right) - \lambda_0\lambda_1 |g(\vec{k}_0^t)|\,|g(\vec{k}_1^t)|\right)^2 \sin^2(k_{x,1}^t D)}, \tag{39}$$

其中 $g(\vec{k}_0^t) = v_x k_{x,0}^t + i v_y k_{y,0}$ 且 $g(\vec{k}_1^t) = v_x k_{x,1}^t + i v_y \left(k_{y,0} + \frac{eA_y(x)}{\hbar}\right)$。对于本征石墨烯，先前的结果分别与 [4,30,60] 中 $B = 0$ 时的结果相符，或与 [61] 中 $V_0 = 0$ 时的结果相符。在式（39）中，可以确定反常克莱因隧穿角的条件，该条件不同于法布里-珀罗共振。当$R = 0$时，我们发现

$$\sin\phi_{\mathrm{KT}} = -\frac{e\,v_y A_y(x)}{V_0}, \tag{40}$$

这样的入射角 $\phi_0 = \phi_{\mathrm{KT}}$ 指示完全透射的方向，这也与势垒内的折射角 $\phi_t = \phi_0 = \phi_{\mathrm{KT}}$ 相吻合。因此，当磁势垒和静电势垒内的弹道电子保持直线轨迹时，就会发生这种反常克莱因隧穿。

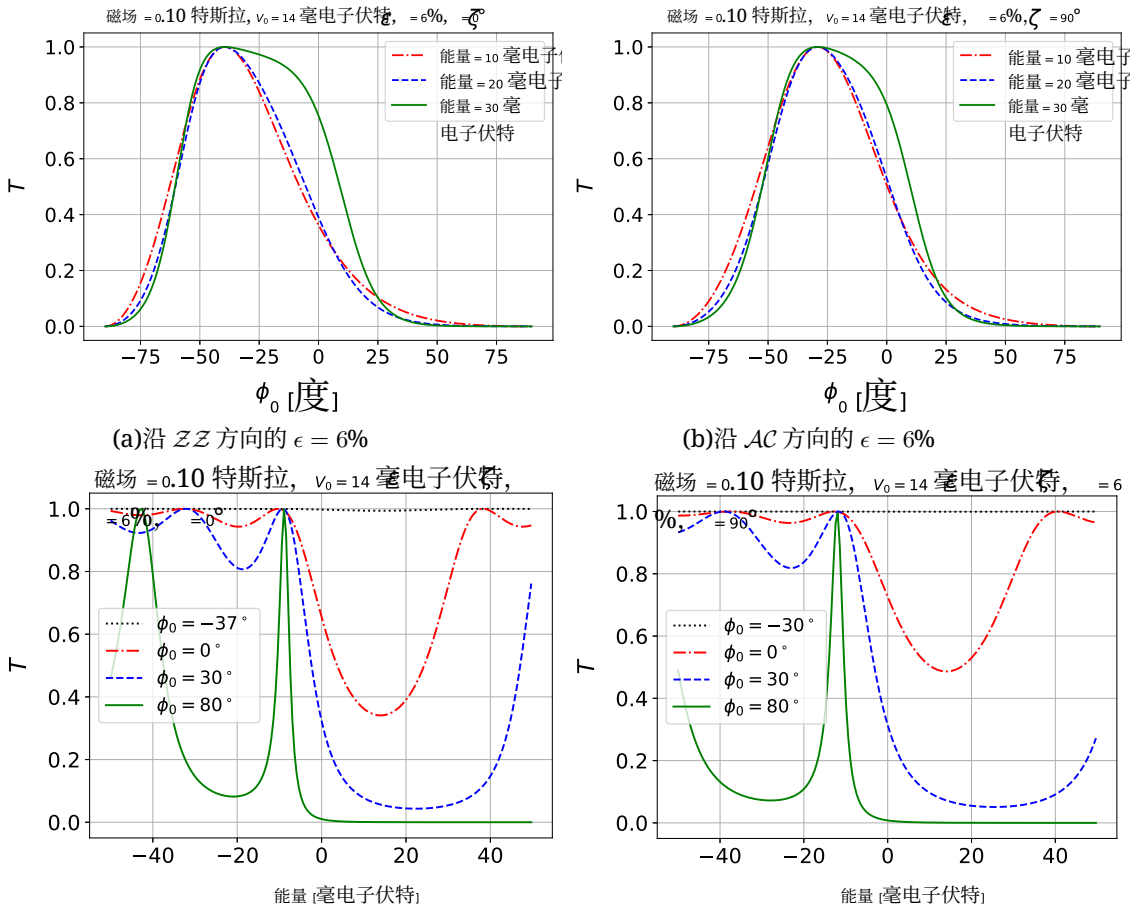
为了对比沿 $\mathcal{ZZ}$ 和$\mathcal{AC}$ 方向施加单轴形变对透射系数和电导的影响，我们考虑一个系统，其中包含一个高度为 $V_0 = 14$ 毫电子伏特、宽度为 $D = \ell_B \approx 81.1$纳米的单势垒，并在同一区域施加一个强度为 $B = 0.1$ 特斯拉的 δ-函数磁势垒（见图4）。

众所周知，在未扰动情形下，当入射能量 E 的所有取值在 $\phi_0 = 0°$（法向入射）时均发生完全透射（$T = 1$），这便是克莱因隧穿。然而，如果沿 $\mathcal{ZZ}$ 或 $\mathcal{AC}$ 方向引入机械形变，我们会发现这种隧穿现象发生了变化。这一点在图4的（a）和（b）面板中尤为明显，其中 $T = 1$并未在零角度发生。此外，与磁势垒和静电势垒作用下的本征石墨烯情形 [61], 相比，沿 $\mathcal{ZZ}$ 方向的形变比沿 $\mathcal{AC}$ 方向的形变更容易偏离未扰动情形（再次参见图4）。

现在，让我们比较图4中的(a)和(b)两幅图，它们分别对应沿 $\mathcal{ZZ}$和 $\mathcal{AC}$ 方向施加机械形变的两种不同构型。这些透射结果表明，对于 $E = 10$，20，30 毫电子伏特，图4b中发生完全透射时的入射角比图4a中更接近 $\phi_0 = 0°$。事实上，根据式（40），对于图4a，$\phi_{\mathrm{KT}} \approx -36.04°$；而对于图4b，$\phi_{\mathrm{KT}} \approx -31.70°$。此外，当入射能量为 $E = 30$ 毫电子伏特时，前者在较大的角度区间 ϕ_0 内均可能发生完全透射，这与图4b形成鲜明对比；图4b的透射曲线几乎与 $E = 10$，20 毫电子伏特时的图形相似。

另一方面，比较图4中的(c)和(d)两幅图——它们同样分别对应沿$\mathcal{ZZ}$ 和 $\mathcal{AC}$ 方向施加机械形变——可以看到，在入射角为 $\phi_0 = 0°$时，两幅图中的透射系数都在 $E = 10$ 至 $E = 20$ 毫电子伏特的能量范围内达到局部最小值（几乎处于图中的能量刻度范围内）。不过，图4c中的最小透射率约为 $T = 0.3$，而图4d中约为 $T = 0.5$。对于 $\phi_0 = 30°$，两幅图中的透射系数都从接近 $E = -10$ 毫电子伏特的能量处开始下降，并在接近 $E = 20$ 毫电子伏特时几乎降至零；但随后图4c中的透射系数开始比图4d中上升得更快。最后，对于 $\phi_0 = 80°$，图(c)中出现两个共振，而图(d)中只有一个；在这两幅图中，透射系数都会在某些 $E > 0$ 处消失，而后一幅图中迷你带隙覆盖的区域比前一幅更宽。

总体而言，在图4c和图4d中，我们观察到，在所选能量范围和施加的机械形变作用下，共振使 $T = 1$ 在负斜入射角处达到。此外，对于所采用的三个角度，面板（c）中的透射系数随费米能量增大而下降的速度比面板（d）中更快。如前所述，在 $\mathcal{ZZ}$ 方向和 $\mathcal{AC}$ 方向上，反常克莱因隧穿分别出现在入射角 $\phi_{\mathrm{KT}} \approx -36.04°$ 和 $\phi_{\mathrm{KT}} \approx -31.70°$ 处，且不受费米能级调节的影响。这些入射角处出现反常克莱因隧穿，是由于赝自旋守恒；根据式（40），只有通过调节磁场 B 和静电势 V_0才能改变这一现象。如图4c和图4d所示，势垒内部的相长干涉会产生其他 $T = 1$ 取值，从而形成法布里-珀罗



(a)沿 $\mathcal{ZZ}$ 方向的 $\epsilon = 6\%$

(b)沿 $\mathcal{AC}$ 方向的 $\epsilon = 6\%$

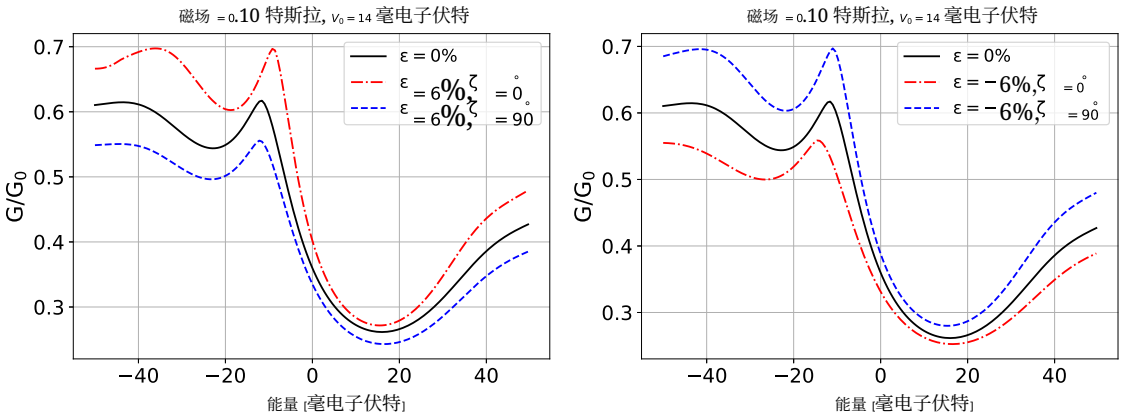
(c) $\epsilon = 6\%$沿 $\mathcal{ZZ}$ 方向

(d) $\epsilon = 6\%$沿 $\mathcal{AC}$ 方向

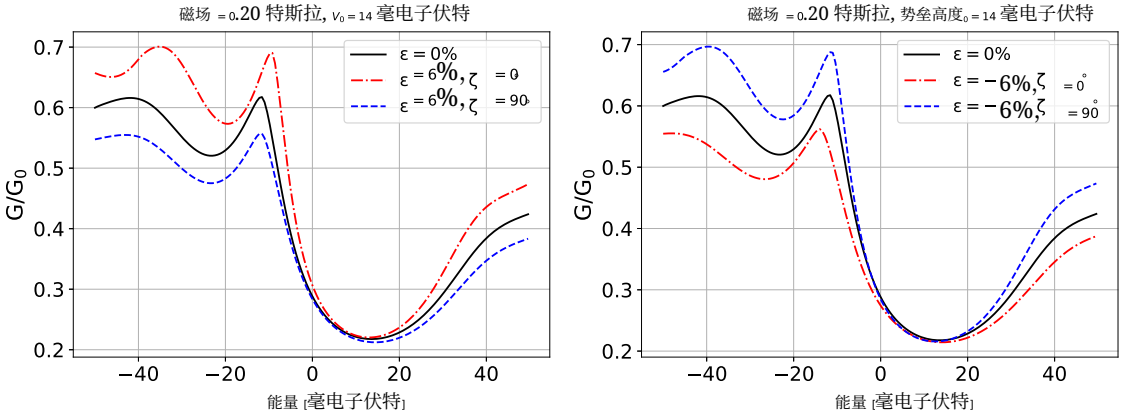
图4：单个静电势垒和磁势垒下，应变石墨烯中的电子透射 T。(a)和(b)图显示了不同入射能量 E下，透射率对入射角 ϕ_0 的依赖关系。(c)和(d)图展示了不同入射角 ϕ_0下，透射率对费米能 E 的依赖关系。静电势垒高度固定为 $V_0 = 14$ 毫电子伏特，磁场强度设为 $B = 0.1$特斯拉，两种势垒的宽度均为 $D \approx 81.1$ 纳米。下方图中的黑色点线对应反常克莱因隧穿。

共振。这类共振可通过改变势垒的宽度或高度，以及调节费米能级来控制。

现在，让我们比较式(33)的电导在本征石墨烯与应变石墨烯情形下的行为。在图5a中，沿 $\mathcal{ZZ}$ 方向应变 $\epsilon = 6\%$的应变石墨烯表现出最高电导，而沿 $\mathcal{AC}$方向的应变则导致最低值。本征石墨烯的电导介于这两种情形之间。相反，图5b显示，当对材料施加压缩形变时行为相反：沿 $\mathcal{AC}$ 方向形变$\epsilon = -6\%$的形变石墨烯表现出最高电导，而沿 $\mathcal{ZZ}$ 方向 $\epsilon = -6\%$则导致最低值。曲线的这种明显互换可归因于机械形变如何改变晶体结构、跃迁参数，并因此改变石墨烯中的费米速度。随后，当磁场强度增大时，电导也随之改变，如图5c和图5d所示。更确切地说，对于磁场强度 $B = 0.1$ 特斯拉以及给定的费米能值 E，所得电导取决于所施加的机械形变，并且在本征石墨烯与应变石墨烯情形之间始终不同。然而，例如当 $B = 0.2$ 特斯拉时，在所给出的图中，电阻在 $E > 0$处增大，如图5d所示。此外，存在某些入射能量值 E，使得本征石墨烯与应变石墨烯情形下的电导相同，这是 B增大的结果。



(a) $B = 0.1$ 特斯拉 (b) $B = 0.1$特斯拉



(c) $B = 0.2$ 特斯拉 (d) $B = 0.2$特斯拉

图5：单个静电势垒和磁势垒的电导 G/G_0 随费米能级 E 的变化。黑色实线、红色虚线和蓝色点线分别表示本征石墨烯以及沿 $\mathcal{ZZ}$和 $\mathcal{AC}$ 方向的应变石墨烯。参数设为 $V_0 = 14$ 毫电子伏特和 $D \approx 81.1$ 纳米。

4.1.1 法布里-珀罗共振与临界角

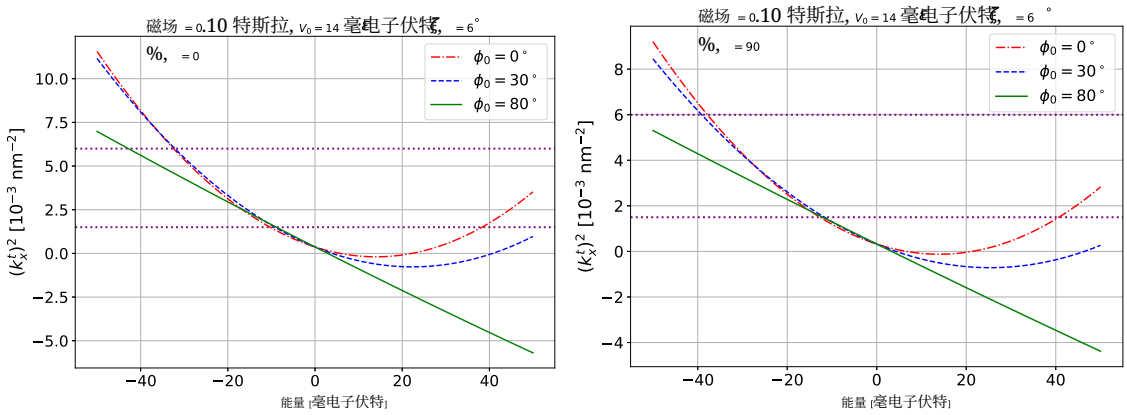
进一步深入探讨斜入射（$\phi_0 \neq 0°$）时出现的共振，我们认识到势垒可被分析为置于 $x = 0$ 和 $x_1 = D$处的双界面，类似于法布里-珀罗干涉仪 [4]。因此，若入射波在两个界面之间与自身发生相长干涉，则会出现透射共振，因为势垒对具有$k^t_{x,\ 1} = n\,\pi/D$ 的电子是透明的（隧穿共振）。更明确地说，此类共振的条件可写为：

$$\left(\frac{n\,\pi}{D}\right)^2 = \left(\frac{E - V_0}{\hbar\, v_x}\right)^2 - \left(\frac{|E|\tan(\phi_0)}{\hbar\, v_y\sqrt{1 + \left(\frac{v_x\tan(\phi_0)}{v_y}\right)^2}} + \frac{e v_y A_y(x)}{\hbar\, v_x}\right)^2, \tag{41}$$

根据式（20）和式（21）（见图 6）。

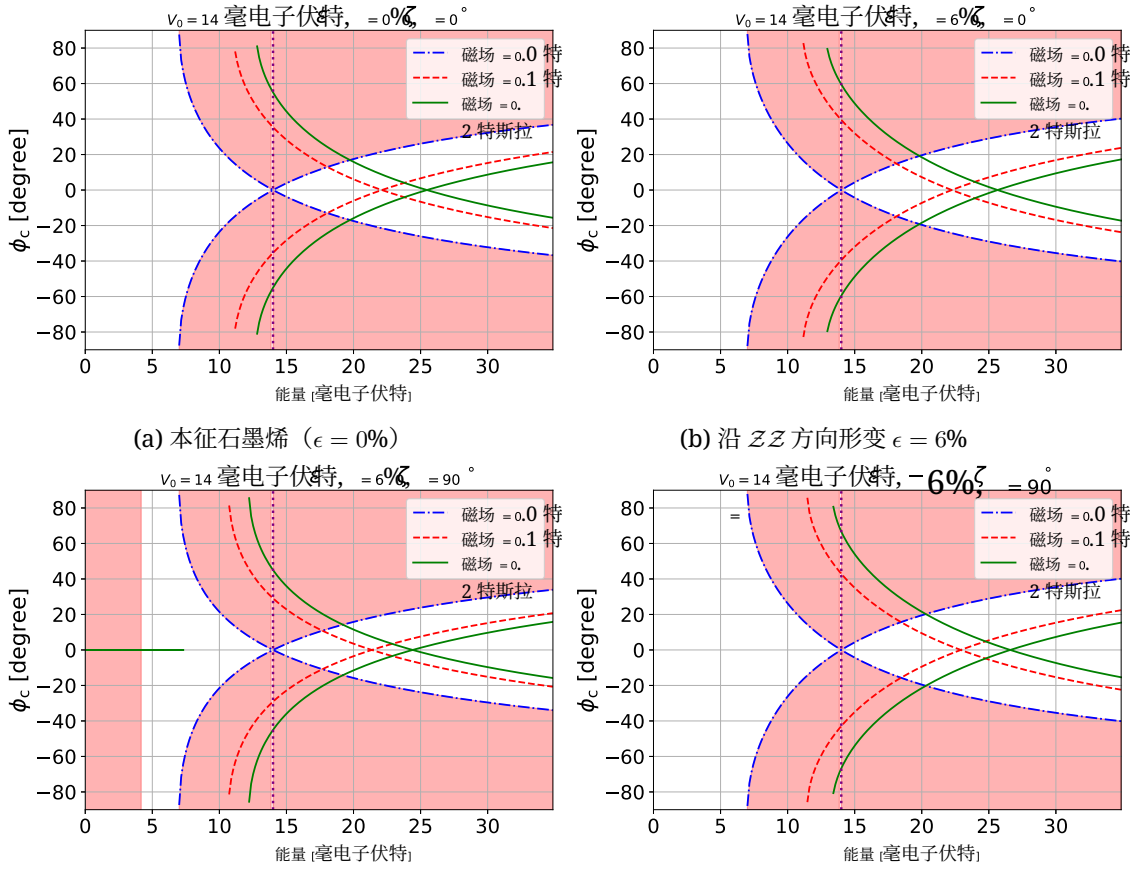
此外，对于某些入射能量，存在一个临界入射角 ϕ_c，在该角度下，透射波矢的 x 分量 $\vec{k}^t_1$ 变为虚数，导致入射平面波在势垒内部传播时变为倏逝波。确定这一临界角的条件为：

$$\phi_c = \arcsin\left|\frac{v_y\left(E - V_0 - e v_y A_y(x)\right)}{\sqrt{v_x^2 E^2 + \left(v_y^2 - v_x^2\right)\left(E - V_0 - e v_y A_y(x)\right)^2}}\right|. \tag{42}$$



(a) $\epsilon = 6\%$ 沿 $\mathcal{ZZ}$ 方向　　(b) $\epsilon = 6\%$ 沿 $\mathcal{AC}$ 方向

图 6：对于某些入射角 ϕ_0 以及沿 $\mathcal{ZZ}$ 和 $\mathcal{AC}$ 方向的不同形变构型，平方后的 x分量透射波数 $\vec{k}_1^t$ 随费米能级 E 的变化。水平紫色点划线对应于数值 $n^2\pi^2/D^2$。当$k_{x,\ 1}^t = n\,\pi/D$时，将获得隧穿共振，如公式（41）所示。



(a) 本征石墨烯（$\epsilon = 0\%$）　　(b) 沿 $\mathcal{ZZ}$ 方向形变 $\epsilon = 6\%$

(c)沿 $\mathcal{AC}$ 方向形变 $\epsilon = 6\%$　　(d) 沿 $\mathcal{AC}$ 方向形变 $\epsilon = -6\%$

图 7：根据式 (42) 中的入射角ϕ_c，不同形变构型沿 $\mathcal{ZZ}$ 或 $\mathcal{AC}$ 方向，以及不同磁场强度B时，磁势垒与静电势垒内部波的性质相图。所有情况下，我们均设定 $V_0 = 14$ 毫电子伏特（紫色竖向点线）。白色区域表示振荡波区域，红色区域表示倏逝波区域。

因此，对于能量为 E、不存在临界角的电子（即式 (42) 中参数的绝对值大于 1），无法在势垒处发生全反射，而是以平面波的形式透射。对于能量为 E、使式 (42) 中参数的绝对值小于 1 的入射粒子，只有当其入射角满足 $|\phi_0| < \phi_c$ 时，才能以平面波的形式透射；ϕ_c 的值由能量本身决定（见图 7）。

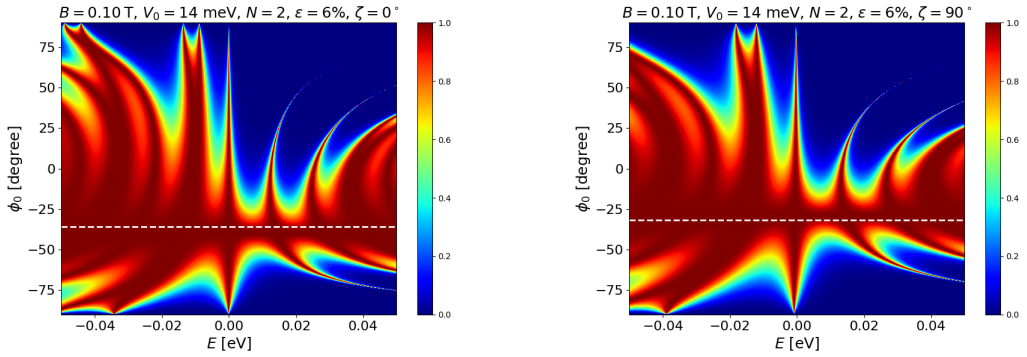
换言之，在没有磁场时，对于入射能量为 $E < V_0/2$ 的粒子，存在一个振荡波区域（即经典允许区），该区域可产生共振，且其面积会在 $1/2 < E/V_0 < 1$ 时缩小。此外，还存在一个倏逝波区域（即经典禁阻区），使粒子有可能通过倏逝波产生隧穿效应。图 7a 中分别以白色和红色区域标出了这些区域，对应未扰动情形。式 (42) 中的临界角（图 7 中的蓝色曲线）划定了这些区域的边界；对材料施加机械形变也会改变这些区域（见图 7b–7d）。施加磁场后（图 7 中的红色和绿色曲线），振荡波的条件 $E < V_0/2$ 不再满足，前述区域会向右移动，对应更大的能量值。

4.2 数值案例：多势垒结构

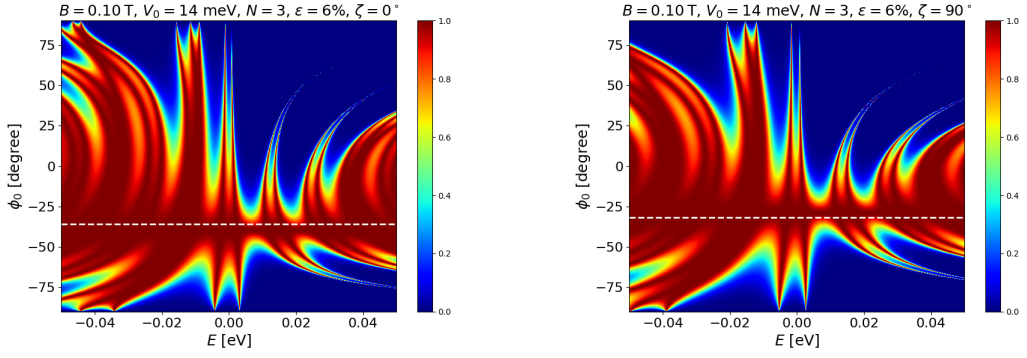
考虑一组均匀分布的静电势垒，其高度为 $V_0 = 14$ 毫电子伏特；另有强度为 $B = 0.1$ 特斯拉的 δ 磁势垒，宽度为 D，间距为 L，且等于 $\ell_B \approx 81.1$ 纳米，如图 3 所示。
这里，图 8 和图 9 分别展示了在拉伸形变为 $\epsilon = 6\%$ 和压缩形变为 $\epsilon = -6\%$ 的应变石墨烯中，沿 $\mathcal{ZZ}$（$\zeta = 0°$）和 $\mathcal{AC}$（$\zeta = 90°$）方向时，透射系数随入射角 ϕ_0 和费米能 E 变化的情况，其中 N 取不同值。总体而言，当 $N = 2$ 至 $N = 5$ 时，可以观察到能带和迷你带隙的数量随势垒数量增加而增加。此外，在本节研究的所有情形中，均可看到单势垒部分所描述的行为仍然成立，即在 $\phi_0 = 0°$ 处不存在克莱因隧穿，并且在不同入射角下出现反常克莱因隧穿。

另一方面，比较图 8 中沿 $\mathcal{ZZ}$ 方向（第一列）与沿 $\mathcal{AC}$方向（第二列）的形变，可以发现二者之间存在显著差异。例如，在第一种情况下，反常克莱因隧穿出现在区间 $-40° < \phi_{KT} < -35°$ 内；而在第二种情况下，这种效应出现在范围 $-32° < \phi_{KT} < -27°$ 内，这与图 4a 和 4b 所示单势垒的结果一致。此外，随着势垒数量增加，这种行为仍然存在。此时还可以清楚地看到，无论势垒数量多少，沿 $\mathcal{AC}$ 方向施加拉伸形变时，反常克莱因隧穿出现的入射角都更接近法向入射。与未扰动情形 [3,4] 相比，当材料受到磁势垒作用时，沿 $\mathcal{AC}$ 方向施加拉伸形变对透射系数的影响小于沿正交方向施加形变的影响。随后，如图 9 所示，施加压缩形变时，上述行为会互换；沿 $\mathcal{ZZ}$ 方向施加这种机械形变时，电子透射 T（相较于未扰动情形）变化较小。事实上，根据式（40），对于图 9 中的参数值，沿 $\mathcal{ZZ}$ 方向施加压缩形变时，反常克莱因隧穿出现在 $\phi_{KT} \approx -34.76°$；而沿 $\mathcal{AC}$ 方向施加压缩形变时，则出现在 $\phi_{KT} \approx -39.50°$。与单势垒情形相比，这一反常克莱因隧穿角在多势垒结构中仍然存在，因为该结构由一系列相同的势垒组成，这些势垒具有相同的静电势高度 V_0 和矢势分布 $\vec{A}(x)$。因此，式（40）仍适用于由多个相同势垒构成的系统。这种稳健性源于赝自旋守恒，而这一守恒在存在和不存在外部势的区域中同样成立。因此，电子束能够沿直线贯穿整个多势垒结构。

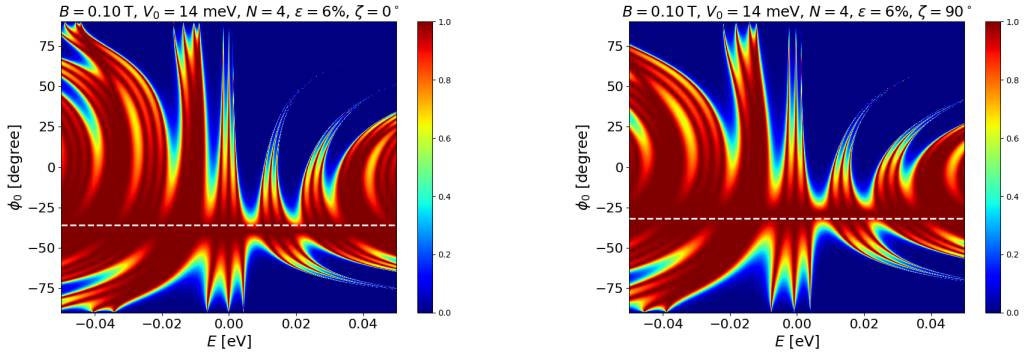
现在，我们来关注图10所示的电导行为。对于 $N = 2$ 至 $N = 5$，随着势垒数量 N 增加，电导达到最大值的峰值数量也随之增加。在所有情形下，与未扰动情形相比，沿 $\mathcal{ZZ}$方向施加拉伸形变时，电导趋于增大。相反，当这种形变作用于正交方向时，电阻趋于增大。与单势垒情形类似，电导在 $E = 0$ 毫电子伏特附近显著下降；然而，约在 $E > 20$ 毫电子伏特之后，电导又开始增大。另一方面，尽管这里观察到的电导行为不如单势垒情形那样明显——因为未扰动情形下的电导并未处于另外两种情形之间，而是在费米能的某些取值处与其他电导曲线相交——但磁场强度增大总体上会导致电阻增大。对此可以这样理解：尽管磁势垒的构型因磁场分布的突变而无法形成朗道能级，但其作用足以改变带电粒子的动力学，从而改变电子穿越的每个区域中的相长干涉。



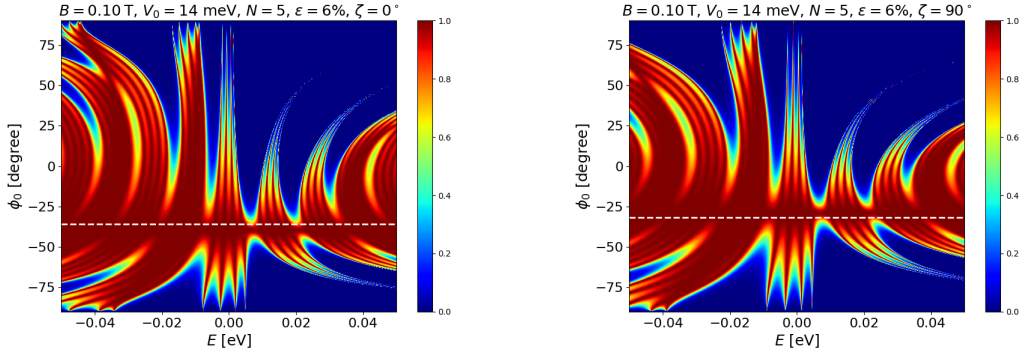
(a) $N = 2, \zeta = 0°$ (b) $N = 2, \zeta = 90°$



(c) $N = 3, \zeta = 0°$ (d) $N = 3, \zeta = 90°$

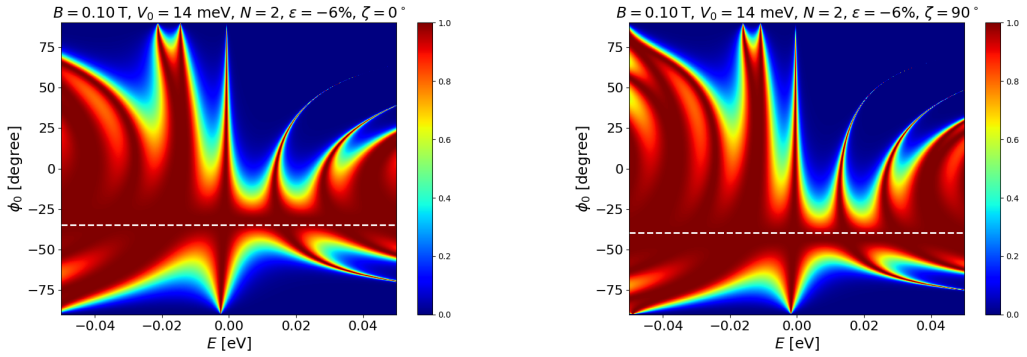


(e) $N = 4, \zeta = 0°$ (f) $N = 4, \zeta = 90°$

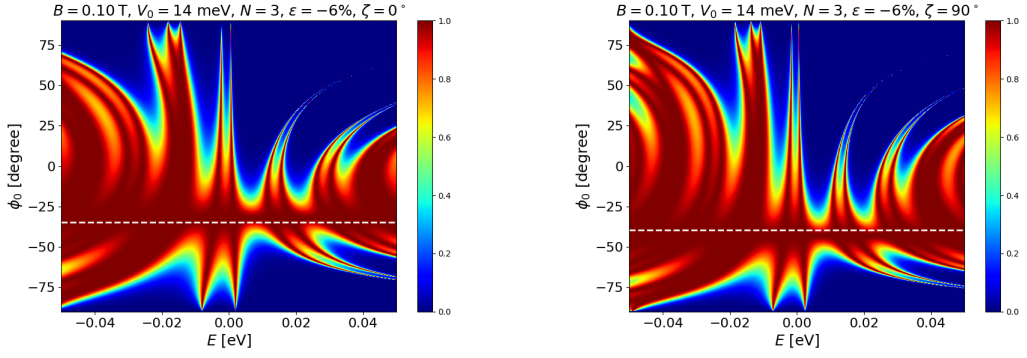


(g) $N = 5, \zeta = 0°$ (h) $N = 5, \zeta = 90°$

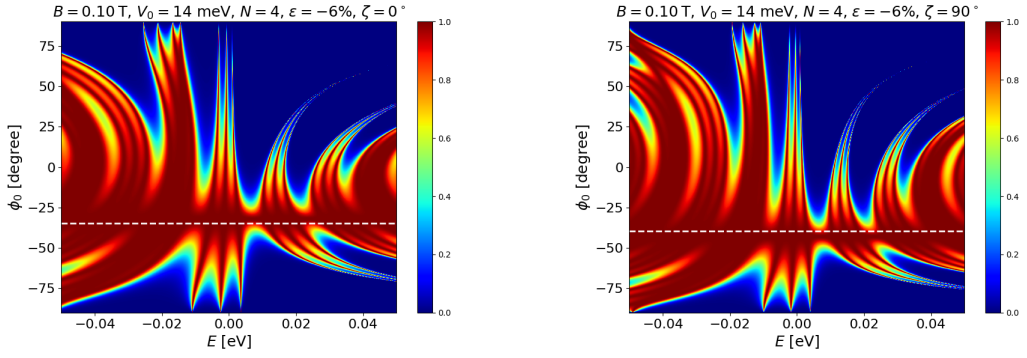
图8：在单轴应变石墨烯中，电子透射 T 随费米能 E和入射角 ϕ_0的变化，其中 $\epsilon = 6\%$为应变；图中展示了不同数量 N 的静电势垒和磁势垒。左侧面板对应沿 $\mathcal{ZZ}$ 方向的形变，右侧面板对应沿 $\mathcal{AC}$ 方向的形变。所有情况下，参数均设为 $V_0 = 14$ 毫电子伏特、 $B = 0.1$ 特斯拉和 $L = D \approx 81.1$ 纳米。白色虚线表示反常克莱因隧穿方向，其对应的角度由式（40）预测。



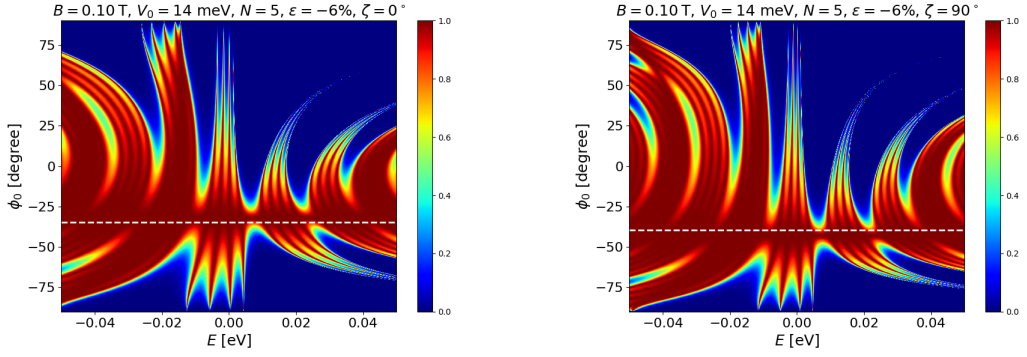
(a) $N = 2, \zeta = 0^\circ$ (b) $N = 2, \zeta = 90^\circ$



(c) $N = 3, \zeta = 0^\circ$ (d) $N = 3, \zeta = 90^\circ$

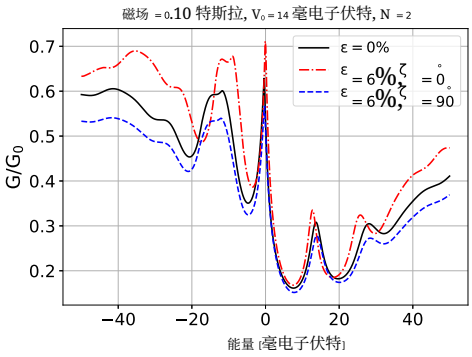


(e) $N = 4, \zeta = 0^\circ$ (f) $N = 4, \zeta = 90^\circ$

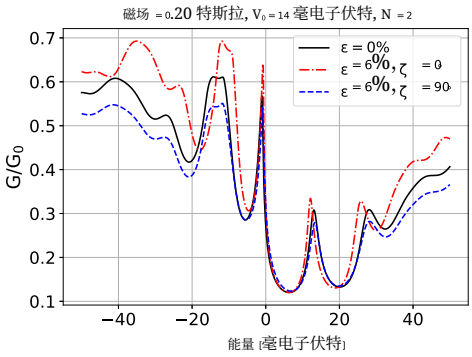


(g) $N = 5, \zeta = 0^\circ$ (h) $N = 5, \zeta = 90^\circ$

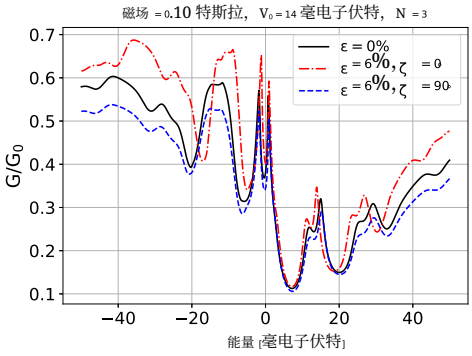
图 9：不同静电势垒和磁势垒数量 N 下，应变率为 $\epsilon = -6\%$ 的单轴应变石墨烯中的电子透射 T，其为费米能 E 和入射角 ϕ_0 的函数。左侧面板对应沿 $\mathcal{ZZ}$ 方向的形变，右侧面板对应沿 $\mathcal{AC}$ 方向的形变。所有情况下，参数均设为 $V_0 = 14$ 毫电子伏特、 $B = 0.1$ 特斯拉和 $L = D \approx 81.1$ 纳米。白色虚线表示反常克莱因隧穿方向，其对应的角度由方程（40）预测。



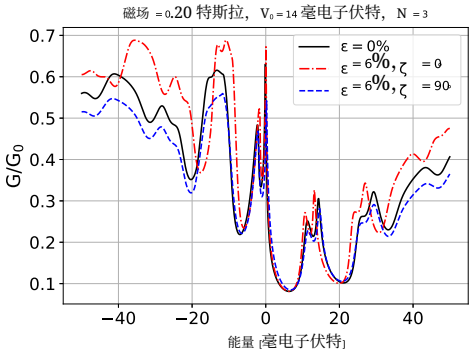
(a) $N = 2$



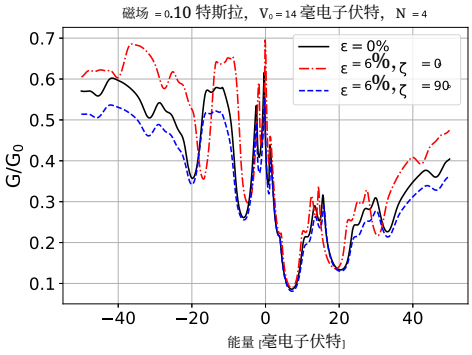
(b) $N = 2$



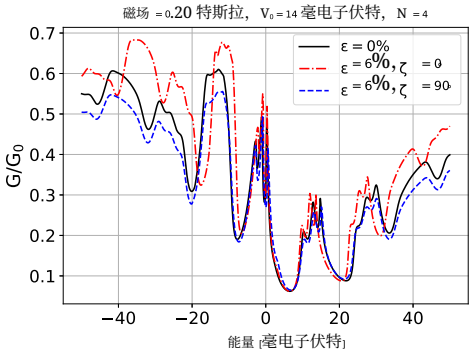
(c) $N = 3$



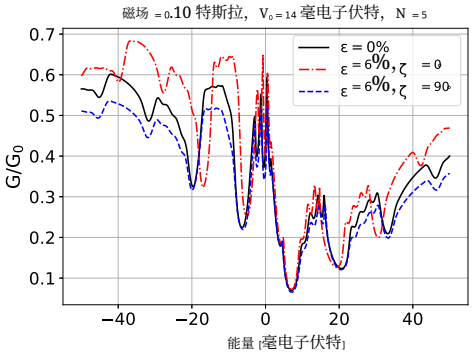
(d) $N = 3$



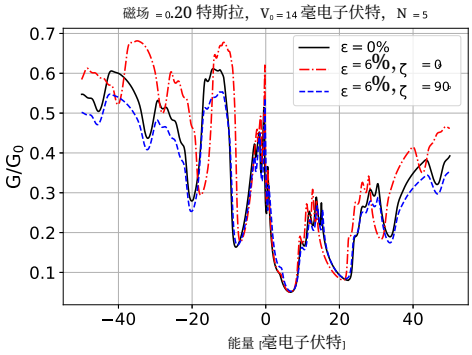
(e) $N = 4$



(f) $N = 4$



(g) $N = 5$



(h) $N = 5$

图10：不同数量 $N \geq 2$ 的静电势垒和磁势垒下，电导 G/G_0 随费米能级 E 的变化，势垒宽度固定为 $D \approx 81.1$ 纳米。黑色实线、红色虚线和蓝色点线分别对应本征石墨烯，以及沿 $\mathcal{ZZ}$ 和 $\mathcal{AC}$ 方向的应变石墨烯。所有情况下，左侧（右侧）面板的参数均设为 $V_0 = 14$ 毫电子伏特和 $B = 0.1$ 特斯拉（$B = 0.2$ 特斯拉）。

5 结论

在本研究中，我们通过构建适用于由磁势和静电势组成的多势垒系统的传递矩阵框架，描述了单轴应变石墨烯中狄拉克费米子的电子透射。这有助于深入理解如何将应变工程与磁相互作用相结合，以调控石墨烯的电子性质。

我们的结果表明，通常情况下，对材料施加机械形变，并沿材料表面的某一空间方向设置一组 δ-函数磁势垒，会导致反常克莱因隧穿。与通常的反常克莱因隧穿 [26, 35, 62], 不同，后者例如会在沿相对于 $\mathcal{ZZ}$ 和 $\mathcal{AC}$ 方向倾斜的方向施加机械形变时发生 [35], ；此处，这种隧穿还可通过 δ-函数磁场势垒进行调控。此外，应变与所施加磁场的共同作用会影响电导。

值得指出的是，尽管如图 2 所示，由于石墨烯的泊松比，沿 $\mathcal{ZZ}$ 方向的拉伸形变可视为沿 $\mathcal{AC}$ 方向的压缩形变的对应情形，反之亦然；在电导方面，图 5a 和 5b 显示了这一点。然而，当磁势垒的强度发生变化时，这种等效关系便不再成立，如图 5d 所示。比较图 8 的右侧面板与图 9 的左侧面板也可得出这一结论：迷你带和迷你带隙不会出现在相同的费米能量处，反常克莱因隧穿也并非如此。

我们的模型为理解应变与磁势垒对克莱因隧穿的综合影响提供了有价值的见解，但我们也承认，模型中的某些近似限制了其与实验进行直接定量比较的能力。具体而言，连续介质狄拉克描述假设谷混合可以忽略；这一假设适用于平滑的势变化，但在原子尺度无序或尖锐缺陷的情况下则不再成立。此外，δ-函数磁势垒虽然在数学上便于处理，却忽略了在实际有限宽度势垒中会出现的朗道能级形成和量子限域效应。已有大量理论研究探讨了石墨烯中非均匀磁场对狄拉克型电子的俘获与限域 [47, 63–66]。这些研究表明，磁场的不均匀性能够形成局域态并产生量子点行为，而这些效应无法通过 δ-函数模型加以描述。若要更定量地描述磁势垒具有有限宽度的实际实验装置，就需要扩展该模型，将磁场的空间结构以及由此产生的边缘态和准束缚态形成过程纳入考虑 [67]。

尽管存在固有局限，δ函数势垒模型仍能为理解磁约束、应变诱导各向异性与克莱因隧穿之间的相互作用提供有价值的物理见解。它是一个实用的教学工具，也为理解磁场梯度如何调控应变石墨烯中的电子输运提供定性指导。文献报道，通过施加铁磁条带（例如遵循克罗尼希-彭尼模型 [55, 68–70], ），可以实现 δ函数磁势垒；一些研究结果表明，这类结构能够调控石墨烯中的电子谷极化 [71]。

总之，我们认为，本研究有助于加深对各向异性与外部磁场如何共同影响石墨烯等材料中的电子透射和电导的理解。未来若开展理论研究，将有限宽度势垒引起的量子限域效应纳入考量，并结合针对磁场分布可控的应变工程石墨烯器件的实验研究，将能更全面地揭示二维狄拉克材料中的反常克莱因隧穿现象。

致谢

E.D.-B. 和 A.R. 感谢 CONAHCYT 项目 FORDECYT-PRONACES/61533/2020 提供的资金支持。他们还分别感谢 SIP-IPN 提供的第 20254000 号资助以及 CIC-UMSNH 提供的第 18236 号资助。Y.B.-O. 感谢 UNAM-PAPIIT 项目 IA-102125 提供的资金支持。

参考文献

[1] O. Klein, 《根据狄拉克相对论动力学论电子在势跃变处的反射》, 《物理学杂志》, 第 53 卷, 第 157–165 页, 1929年。[2] K. S. Novoselov、A. K. Geim、S. V. Morozov、D. Jiang、M. I. Katsnelson、I. V. Grigorieva、S. V. Dubonos 和 A. A. Firsov, 《石墨烯中无质量狄拉克费米子的二维气体》, 《自然》, 第 438 卷, 第 197–200 页, 2005 年。

[3] M. I. Katsnelson、K. S. Novoselov 和 A. K. Geim，《石墨烯中的手性隧穿与克莱因悖论》，《自然·物理》，第 2 卷，第 620–625 页，2006 年。[4] P. E. Allain 和 J. N. Fuchs，《石墨烯中的克莱因隧穿：无质量电子的光学》，《欧洲物理学杂志 B》，第 83 卷，第 301 页，2011 年。[5] A. F. Young 和 P. Kim，《石墨烯异质结中的量子干涉与克莱因隧穿》，《自然·物理》，第 5 卷，第 222–226 页，2009 年。[6] N. Stander、B. Huard 和 D. Goldhaber-Gordon，《石墨烯 p-n 结中克莱因隧穿的证据》，《物理评论快报》，第 102 卷，第 026807 页，2009 年。[7] T. R. Robinson，《论石墨烯中的克莱因隧穿》，《美国物理学杂志》，第 80 卷，第 141–147 页，2012 年。[8] T. Yokoyama，《铁磁硅烯结中可控的谷与自旋输运》，《物理评论 B》，第 87 卷，第 241409 页，2013 年。[9] V. M. Pereira、A. H. Castro Neto 和 N. M. R. Peres，《石墨烯单轴应变的紧束缚方法》，《物理评论 B》，第 80 卷，第 045401 页，2009 年。[10] F. Guinea、M. I. Katsnelson 和 A. K. Geim，《通过应变工程在石墨烯中产生能隙和零场量子霍尔效应》，《自然·物理》，第 6 卷，第 30–33 页，2010 年。[11] I. Y. Sahalianov、T. M. Radchenko、V. A. Tatarenko、G. Cuniberti 和 Y. I. Prylutskyy，《石墨烯应变电子学：拉伸和剪切应变诱导的超大电子带隙》，《应用物理杂志》，第 126 卷，第 054302 页，2019 年。[12] J.-D. Lu、P. Xu 和 D. Wang，《基于石墨烯的磁性应变超晶格中的谷依赖电子输运》，《超导与新型磁学杂志》，第 35 卷，第 1629–1634 页，2022 年。[13] C.-H. Park、L. Yang、Y.-W. Son、M. L. Cohen 和 S. G. Louie，《周期势下石墨烯中无质量狄拉克费米子的各向异性行为》，《自然·物理》，第 4 卷，第 213–217 页，2008 年。[14] M. Barbier、P. Vasilopoulos 和 F. M. Peeters，《单层石墨烯超晶格能谱中的额外狄拉克点》，《物理评论 B》，第 81 卷，第 075438 页，2010 年。[15] A. Sánchez-Arellano、J. Madrigal-Melchor 和 I. Rodríguez-Vargas，《作为电子带通滤波器的非常规石墨烯超晶格》，《科学报告》，第 9 卷，第 8759 页，2019 年。[16] M. Barbier、P. Vasilopoulos 和 F. M. Peeters，《单层与双层石墨烯超晶格：准直、额外狄拉克点和狄拉克线》，《英国皇家学会哲学汇刊 A》，第 368 卷，第 5499–5524 页，2010 年。[17] M. Sharma 和 S. Ghosh，《电势垒和磁势垒下石墨烯中的电子输运与古斯–汉欣位移：光学类比和能带结构》，《凝聚态物理学杂志》，第 23 卷，第 5 期，第 055501 页，2011 年。[18] M. Yankowitz、J. Xue、D. Cormode、J. D. Sanchez-Yamagishi、K. Watanabe、T. Taniguchi、P. Jarillo-Herrero、P. Jacquod 和 B. J. LeRoy，《六方氮化硼基底上石墨烯中超晶格狄拉克点的出现》，《自然·物理》，第 8 卷，第 382–386 页，2012 年。[19] L. A. Ponomarenko、R. V. Gorbachev、G. L. Yu、D. C. Elias、R. Jalil、A. A. Patel、A. Mishchenko、A. S. Mayorov、C. R. Woods、J. R. Wallbank、M. Mucha-Kruczynski、B. A. Piot、M. Potemski、I. V. Grigorieva、K. S. Novoselov、F. Guinea、V. I. Fal’ko 和 A. K. Geim，《石墨烯超晶格中狄拉克费米子的克隆》，《自然》，第 497 卷，第 594–597 页，2013 年。[20] C. R. Dean、L. Wang、P. Maher、C. Forsythe、F. Ghahari、Y. Gao、J. Katoch、M. Ishigami、P. Moon、M. Koshino、T. Taniguchi、K. Watanabe、K. L. Shepard、J. Hone 和 P. Kim，《莫尔超晶格中的霍夫施塔特蝴蝶与分形量子霍尔效应》，《自然》，第 497 卷，第 598–602 页，2013 年。[21] W. A. de Heer、C. Berger、X. Wu、P. N. First、E. H. Conrad、X. Li、T. Li、M. Sprinkle、J. Hass、M. L. Sadowski、M. Potemski 和 G. Martinez，《外延石墨烯》，《固态通讯》，第 143 卷，第 1 期，第 92–100 页，2007 年。[22] Y.-M. Lin、C. Dimitrakopoulos、K. A. Jenkins、D. B. Farmer、H.-Y. Chiu、A. Grill 和 P. Avouris，《晶圆级外延石墨烯制成的 100 GHz 晶体管》，《科学》，第 327 卷，第 662 页，2010 年。[23] F. Schwierz，《石墨烯晶体管》，《自然·纳米技术》，第 5 卷，第 487–496 页，2010 年。[24] M. Oliva-Leyva 和 G. G. Naumis，《将应变石墨烯中的电子行为理解为倒易空间畸变》，《物理评论 B》，第 88 卷，第 085430 页，2013 年。[25] D. Midtvedt、C. H. Lewenkopf 和 A. Croy，《用于单层二维材料应变工程的应变–位移关系》，《二维材料》，第 3 卷，第 1 期，第 011005 页，2016 年。

[26] Y. Betancur-Ocampo, 《单轴应变石墨烯非对称维塞拉戈透镜中的部分正折射》, 《物理评论 B》, 第 98 卷, 第 205421 页, 2018 年。[27] M. O. Goerbig, 《强磁场下石墨烯的电子性质》, 《现代物理评论》, 第 83 卷, 第 1193 页, 2011 年。[28] M. O. Goerbig、J.-N. Fuchs、G. Montambaux 和 F. Piéchon, 《醌式石墨烯中的倾斜各向异性狄拉克锥及 α–(BEDT-TTF)$_2$I$_3$,》, 《物理评论 B》, 第 78 卷, 第 045415 页, 2008 年。[29] P. R. Wallace, 《石墨的能带理论》, 《物理评论》, 第 71 卷, 第 622 页, 1947 年。[30] A. H. Castro Neto、F. Guinea、N. M. R. Peres、K. S. Novoselov 和 A. K. Geim, 《石墨烯的电子性质》, 《现代物理评论》, 第 81 卷, 第 109 页, 2009 年。[31] D. A. Papaconstantopoulos、M. J. Mehl、S. C. Erwin 和 M. R. Pederson, 《碳和硅的紧束缚哈密顿量》, 《MRS会议论文集》, 第 491 卷, 第 221 页, 1997 年。[32] E. Díaz-Bautista 和 Y. Betancur-Ocampo, 《单轴应变石墨烯中朗道态和电子相干态的相空间表象》, 《物理评论 B》, 第 101 卷, 第 125402 页, 2020年3月。[33] V. M. Pereira 和 A. H. Castro Neto, 《石墨烯电子结构的应变工程》, 《物理评论快报》, 第 103 卷, 第 046801 页, 2009 年。[34] E. Cadelano、P. L. Palla、S. Giordano 和 L. Colombo, 《单层石墨烯的非线性弹性》, 《物理评论快报》, 第 102 卷, 第 235502 页, 2009 年。[35] E. Díaz-Bautista、Y. Betancur-Ocampo 和 A. Raya, 《各向异性二维材料中电子透射的扩展传递矩阵法：应变与势的（非）周期性之间的相互作用》, 《应用物理杂志》, 第 136 卷, 第 124302 页, 2024年9月。[36] T. Ando, 《碳纳米管中电子态与输运的理论》, 《日本物理学会志》, 第 74 卷, 第 777–817 页, 2005 年。[37] N. M. R. Peres、F. Guinea 和 A. H. Castro Neto, 《无序二维碳的电子性质》, 《物理评论 B》, 第 73 卷, 第 125411 页, 2006 年。[38] K. Cao、S. Feng、Y. Han、L. Gao、T. H. Ly、Z. Xu 和 Y. Lu, 《自由悬空单层石墨烯的弹性应变》, 《自然·通讯》, 第 11 卷, 第 284 页, 2020 年。[39] C. R. Dean、A. F. Young、I. Meric、C. Lee、L. Wang、S. Sorgenfrei、K. Watanabe、T. Taniguchi、P. Kim、K. L. Shepard 和 J. Hone, 《用于高质量石墨烯电子器件的氮化硼衬底》, 《自然·纳米技术》, 第 5 卷, 第 722–726 页, 2010 年。[40] L. Wang、I. Meric、P. Y. Huang、Q. Gao、Y. Gao、H. Tran、T. Taniguchi、K. Watanabe、L. M. Campos、D. A. Muller、J. Guo、P. Kim、J. Hone、K. L. Shepard 和 C. R. Dean, 《二维材料的一维电接触》, 《科学》, 第 342 卷, 第 614–617 页, 2013 年。[41] N. Leconte、A. Lherbier、F. Varchon、P. Ordejon、S. Roche 和 J.-C. Charlier, 《化学改性二维石墨烯中的量子输运：从最小电导率到安德森局域化》, 《物理评论 B》, 第 84 卷, 第 235420 页, 2011年12月。[42] M. Settnes、S. R. Power 和 A.-P. Jauho, 《石墨烯中的赝磁场与三轴应变》, 《物理评论 B》, 第 93 卷, 第 035456 页, 2016 年。[43] Ícaro S.F. Bezerra 和 J. R. Lima, 《具有调制费米速度的磁性石墨烯超晶格的输运性质》, 《固态通讯》, 第 340 卷, 第 114511 页, 2021 年。[44] D. E. Fernandes, 《含静电势和磁矢势的石墨烯超晶格有效介质模型》, 《物理评论 B》, 第 107 卷, 第 085119 页, 2023年2月。[45] Y. Fattasse、M. Mekkaoui、A. Jellal 和 A. Bahaoui, 《应变对石墨烯磁势垒中隧穿时间的影响》, 《物理学 E：低维系统与纳米结构》, 第 148 卷, 第 115634 页, 2023 年。[46] W. Belhadj、H. Dakhlaoui、O. H. Alsalmi 和 F. Ungan, 《电场和磁场对石墨烯基多势垒结构光学与电子特性的影响》, 《光学与量子电子学》, 第 55 卷, 第 1171 页, 2023 年。[47] A. De Martino、L. Dell'Anna 和 R. Egger, 《石墨烯中狄拉克–外尔准粒子的磁势垒与限域》, 《固态通讯》, 第 144 卷, 第 12 期, 第 547–550 页, 2007 年。[48] R. Landauer, 《局域散射体导致金属导电中的电流和场的空间变化》, 《IBM研究与开发杂志》, 第 1 卷, 第 223–231 页, 1957 年。[49] M. Büttiker, 《四端相干电导》, 《物理评论快报》, 第 57 卷, 第 1761–1764 页, 1986 年。

[50] S. Datta，《介观系统中的电子输运》。剑桥大学出版社，1995 年。[51] L. E. F. Foa Torres、S. Roche 和 J.-C. Charlier，《石墨烯基纳米材料导论：从电子结构到量子输运》。剑桥大学出版社，2014 年。[52] J. Tworzydło、B. Trauzettel、M. Titov、A. Rycerz 和 C. W. J. Beenakker，《石墨烯中的亚泊松散粒噪声》，《物理评论快报》，第 96 卷，第 246802 页，2006 年。[53] B. Huard、J. A. Sulpizio、N. Stander、K. Todd、B. Yang 和 D. Goldhaber-Gordon，《石墨烯中可调势垒的输运测量》，《物理评论快报》，第 98 卷，第 236803 页，2007 年。[54] Y. Li、Q. Wan、Y. Peng、G. Wang、Z. Qian、G. Zhou 和 M. B. A. Jalil，《磁场对 p-n-p 石墨烯结中手性传输的影响》，《科学报告》，第 5 卷，第 18458 页，2016 年。[55] C. Yesilyurt、S. G. Tan、G. Liang 和 M. B. A. Jalil，《磁场作用下外尔半金属中的克莱因隧穿》，《科学报告》，第 6 卷，第 38862 页，2016 年。[56] S. B. Kumar 和 J. Guo，《应变诱导的石墨烯晶界电导调制》，《纳米快报》，第 12 卷，第 1362–1366 页，2012年3月。[57] V. H. Nguyen、H.-V. Nguyen、J. Saint-Martin 和 P. Dollfus，《取向错配石墨烯层构成的垂直器件中应变诱导的导电带隙》，《纳米技术》，第 26 卷，第 115201 页，2015年2月。[58] M. Chauwin、Z. B. Siu 和 M. B. A. Jalil，《作为谷电子学电流开关的应变调制石墨烯异质结构》，《物理评论应用》，第 17 卷，第 024035 页，2022 年。[59] G. W. Jones、D. A. Bahamon、A. H. C. Neto 和 V. M. Pereira，《形状优化石墨烯科尔比诺器件中的量子化输运、应变诱导完美导电模式与谷过滤》，《纳米快报》，第 17 卷，第 5304–5313 页，2017年9月。[60] J. D. Lejarreta、C. H. Fuentevilla、E. Diez 和 J. M. Cerveró，《石墨烯中单势垒和双势垒的精确透射系数》，《物理学杂志 A：数学与理论》，第 46 卷，第 155304 页，2013年4月。[61] N. Myoung 和 G. Ihm，《狄拉克费米子在石墨烯磁势垒中的隧穿》，《物理学 E：低维系统与纳米结构》，第 42 卷，第 1 期，第 70–72 页，2009 年。[62] X. Zhou，《8-$Pmmn$ 硼烯基 $n{-}p{-}n$ 结中的谷依赖电子逆反射与反常克莱因隧穿》，《物理评论 B》，第 100 卷，第 195139 页，2019年11月。[63] A. De Martino、L. Dell'Anna 和 R. Egger，《石墨烯中无质量狄拉克费米子的磁约束》，《物理评论快报》，第 98 卷，第 066802 页，2007年2月。[64] F. Libisch、S. Rotter、J. Güttinger、C. Stampfer 和 J. Burgdörfer，《石墨烯量子点中的朗道能级转变》，《物理评论 B》，第 81 卷，第 24 期，第 245411 页，2010 年。[65] L. Cohnitz、W. Häusler、A. Zazunov 和 R. Egger，《洁净磁性石墨烯波导中零模诱导的相互作用电导》，《物理评论 B》，第 92 卷，第 085422 页，2015年8月。[66] M. Slota、A. Keerthi、W. K. Myers、E. Tretyakov、M. Baumgarten、A. Ardavan、H. Sadeghi、C. J. Lambert、A. Narita、K. Müllen 和 L. Bogani，《石墨烯纳米带的磁性边缘态与相干操控》，《自然》，第 557 卷，第 691–695 页，2018 年。[67] P. G. Silvestrov 和 K. B. Efetov，《石墨烯中的量子点》，《物理评论快报》，第 98 卷，第 1 期，第 016802 页，2007 年。[68] A. Matulis、F. M. Peeters 和 P. Vasilopoulos，《磁势垒中的波矢依赖隧穿》，《物理评论快报》，第 72 卷，第 1518–1521 页，1994年3月。[69] M. Ramezani Masir、P. Vasilopoulos 和 F. M. Peeters，《单层石墨烯中狄拉克电子的磁性克罗尼格–彭尼模型》，《新物理学杂志》，第 11 卷，第 095009 页，2009年9月。[70] C. Yesilyurt、S. Ghee Tan、G. Liang 和 M. B. A. Jalil，《单势垒区域中应变石墨烯的完美谷过滤器》，《AIP 进展》，第 6 卷，第 056303 页，2016 年3月。[71] X.-S. Chen、D. Wang、P. Xu 和 J.-D. Lu，《铁磁金属条带和应变势垒对石墨烯中电子输运特性的影响》，《超导与新型磁学杂志》，第 35 卷，第 3363–3369 页，2022 年。