

ФІЗИЧНІ, ХІМІЧНІ ТА ІНШІ ЯВИЩА, НА ОСНОВІ ЯКИХ МОЖУТЬ БУТИ СТВОРЕНІ СЕНСОРИ

PHYSICAL, CHEMICAL AND OTHER PHENOMENA, AS THE BASES OF SENSORS

PACS: 05.60.Gg, 72.25.-b, 73.43.-f, 85.30.Fg, 85.35.-p

УРОКИ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ: ТРАНСПОРТ СПІНІВ І КВАНТОВИЙ СПІНОВИЙ ЕФЕКТ ХОЛЛА В КОНЦЕПЦІЇ «ЗНИЗУ – ВГОРУ»

*Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха**

Одеський державний екологічний університет

вул. Львівська, 15, Одеса, Україна

тел. (067) 725 2209, *E-mail: quantumnet@yandex.ua*

* Інститут фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова НАН України

пр. Науки, 41, Київ, Україна

тел. (044) 525 6033, *E-mail: maksym_strikha@hotmail.com*

УРОКИ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ: ТРАНСПОРТ СПІНІВ І КВАНТОВИЙ СПІНОВИЙ ЕФЕКТ ХОЛЛА В КОНЦЕПЦІЇ «ЗНИЗУ – ВГОРУ»

Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха

Анотація. На продовження попередніх навчально-оглядових статей авторів у рамках концепції «знизу – вгору» сучасної наноелектроніки розглядається спіновий транспорт у моделі нерівноважних функцій Гріна (НРФГ) у спінорному зображенні. Описано, зокрема, спіновий вентиль, обертання магнітних контактів, прецесію спіну і обертання спінів, спінові гамільтоніани Зеємана і Рашби, квантовий спіновий ефект Холла, обчислення спінового потенціалу, чотирьохкомпонентний формат опису транспорту.

Ключові слова: нанофізика, наноелектроніка, молекулярна електроніка, «знизу–вгору», транспорт спінів, спіновий вентиль, прецесія спіну, спінові гамільтоніани, зеєманове розщеплення, ефект Рашби, спінори, квантовий спіновий ефект Холла, метод НРФГ.

LESSONS OF NANOELECTRONICS: SPIN TRANSPORT AND QUANTUM SPIN HALL EFFECT BY «BOTTOM – UP» APPROACH

Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha

Abstract. Spin transport within the Non-Equilibrium Green's Functions (NEGF) method in the spinor representation, in particular, spin valve, rotating magnetic contacts, spin precession and rotating spins, Zeeman and Rashba spin Hamiltonians, quantum spin Hall effect, calculation of the spin potential, and four-component description of transport are discussed in the frame of the «bottom – up» approach of modern nanoelectronics in continuation to the previous tutorial review articles of the authors.

Keywords: nanophysics, nanoelectronics, molecular electronics, bottom–up, spin transport, spin valve, spin precession, spin Hamiltonians, Zeeman splitting, Rashba effect, spinors, quantum spin Hall effect (QSHE), NEGF.

УРОКИ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ: ТРАНСПОРТ СПИНОВ И КВАНТОВЫЙ СПИНОВЫЙ ЭФФЕКТ ХОЛЛА В КОНЦЕПЦИИ «СНИЗУ – ВВЕРХ»

Ю. А. Кругляк, М. В. Стриха

Аннотация. В продолжение предыдущих учебно-обзорных статей авторов в рамках концепции «снизу – вверх» нанoeлектроники рассматривается спиновый транспорт в формализме метода неравновесных функций Грина (НРФГ) в спинорном представлении, в частности, обсуждаются спиновый вентиль, вращение магнитных контактов, прецессия спина и вращение спинов, роль спиновых гамильтонианов Зеемана и Рашбы, квантовый спиновый эффект Холла, вычисление спинового потенциала, четырехкомпонентный формат описания транспорта.

Ключевые слова: нанofизика, нанoeлектроника, молекулярная электроника, снизу-вверх, транспорт спинов, спиновый вентиль, прецессия спина, спиновые гамильтонианы, зеемановское расщепление, эффект Рашбы, спиноры, квантовый спиновый эффект Холла, метод НРФГ.

Вступ. Цією статтею автори продовжують серію навчально-оглядових статей, які друкуються в журналі «Сенсорна електроніка і мікросистемні технології» починаючи з №4 за 2012 рік. Нагадаємо, що раніше у рамках концепції «знизу – вгору» сучасної нанoeлектроніки ми розглядали фізичні основи виникнення струму в наносистемах (№4, 2012), термоелектричні явища (№1, 2013), основи спінтроніки (№2, 2013) та застосування методу нерівноважних функцій Гріна (НРФГ) до транспортних задач (№№ 3,4, 2013), класичний та квантовий ефекти Холла (№1, 2014).

У цій статті ми розглядатимемо спиновий транспорт у моделі нерівноважних функцій Гріна (НРФГ) у спіноному зображенні. Буде описано, зокрема, спиновий вентиль, обертання магнітних контактів, прецесію спіну і обертання спінів, спинові гамільтоніани Зеемана і Рашби, квантовий спиновий ефект Холла, обчислення спинового потенціалу, чотирьохкомпонентний формат опису транспорту.

Наша стаття зорієнтована насамперед на викладачів, аспірантів і студентів, які читають курси або навчаються на різних спеціалізаціях фізичного й інженерного профілю, й має

на меті популяризацію сучасної концепції викладання фізики наносистем, автором якої є проф. Супрійо Датта (Supriyo Datta), сформульованої в рамках ініціативи Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u] і до певної міри альтернативної традиційній, що відштовхується від розгляду аналогічних явищ у великих об'ємних провідниках.

Застосування магнітних контактів для генерації спінового струму в немагнітному каналі провідності навіть за межами протікання електричного струму з використанням пробного магнітного контакту 2 з поляризацією \vec{P}_2 (рис.1) розглядалося в [1] на основі концепції про зарядовий хімпотенціал μ і спіновий потенціал $\vec{\mu}_s$.

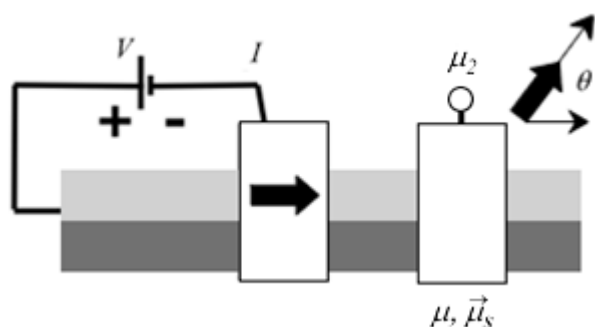


Рис. 1. Реєструючий контакт 2 в ролі аналізатора спінового струму.

Нагадаємо: в рамках такої концепції зв'язок між зарядовим і спіновим потенціалами дається простим виразом:

$$\mu_2 = \mu + \frac{\vec{P}_2 \cdot \vec{\mu}_s}{2}, \quad (1)$$

в якому вектор поляризації збігається з напрямом струму в реєструючому контакті 2, а вектор спінового потенціалу збігається з напрямом спінової поляризації каналу провідності, який за домовленістю є напрямом намагніченості інжектуючого контакту. Звичайно, паралельна і антипаралельна орієнтації намагніченості контактів є окремими випадками загального виразу (1). У нас поки немає надійних відомостей, чи виконувалися насправді подібні

експерименти, тобто чи інжектувалися спіни контактом з фіксованим напрямом намагніченості, і чи при цьому різниця потенціалів замірялася магнітним контактом, що обертається. Проте, неодноразово експериментально досліджувалася фактично аналогічна ситуація, коли обидва магнітні контакти були фіксовані один щодо одного, а спін електронів у провіднику обертався зовнішнім магнітним полем.

Усі подібні ефекти винятково цікаві й важливі самі по собі, з фундаментальної точки зору. В нашій статті ми покажемо, як такі спінові ефекти врахувати в методі нерівноважних функцій Гріна (НРФГ) [2] стосовно модельних транспортних задач наноелектроніки, зокрема, для розгляду квантового спінового ефекту Холла в графені. Покажемо також, як метод НРФГ приводить до результатів, що відповідають рівнянню (1).

Врахування спіну в методі НРФГ потребує введення матричних потенціалів форми (2 x 2), які, як виявиться, можуть бути виражені через зарядні й спінові потенціали, що фігурують в (1).

Спін електронів і поляризація фотонів багато в чому подібні, за винятком того, що поняття ортогональності для них має різний зміст. Для фотонів ортогональність поляризації реалізується при 90° , а для електронів – при 180° (оскільки проекція спіну на вибрану вісь може набувати лише двох взаємопротилежних значень), і це виявляється в коливанні нелокального спінового потенціалу залежно від кута між інжектуючим і реєструючим магнітними контактами (рис. 2) [1].

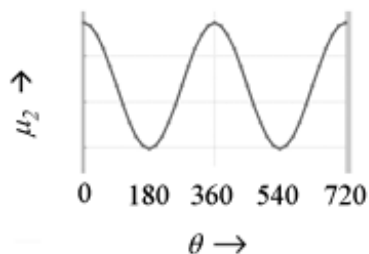


Рис. 2. Коливання нелокального спінового потенціалу залежно від кута між інжектуючим і реєструючим магнітними контактами (див. рис. 1).

Математично адекватний опис ортогональності електронних спінів потребує спінорного числення, а не векторного, як у випадку поляризації фотонів. Вектор описується трьома дійсними компонентами уздовж осей x , y , z декартової системи координат, а спінор описується двома комплексними компонентами уздовж напрямів вгору (up) і вниз (dn):

$$\begin{Bmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{Bmatrix}, \quad \begin{Bmatrix} \psi_{up} \\ \psi_{dn} \end{Bmatrix},$$

де тут і далі, як і раніше в [2], вектори-стовпці ми братимемо у фігурні дужки, а квадратні матриці – в прямокутні.

І проте спінор потрібно сприймати як об'єкт, що має певний напрям, як і вектор. Як же узгоджується таке візуальне сприйняття спінора з його двокомпонентною структурою?

Спінор, орієнтований уздовж напрямку одиничного вектора \hat{n} з проекціями на осі x , y , z

$$\hat{n} \equiv \begin{Bmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{Bmatrix}, \quad (2)$$

описується двома комплексними компонентами c і s :

$$\begin{Bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} \equiv c \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{+i\phi/2} \equiv s \end{Bmatrix}. \quad (3)$$

Це зовсім не очевидно від початку, але пізніше ми покажемо, що векторне (2) і спінорне (3) зображення одного і того ж абстрактного об'єкту, що обертається, ідентичні, точніше ізоморфні (набір математичних операцій в одній системі відповідає визначеному наборові математичних операцій в іншій системі). Поки що ж сприймаймо еквівалентність (2) і (3) як дещо наперед задане.

При врахуванні спіну у формалізмі НРФГ відповідні рівняння, природно, залишаються попередніми, а ось порядок усіх матриць – гамільтоніана $[H]$, контактних $[\Sigma]$, нерівноважної функції Гріна $[G^n]$, спектральної функції $[A]$ [2] подвоюється за рахунок того, що

електрони, які знаходяться в одному й тому ж квантовому координатному стані, але з різними спінами, тепер описуються різними базисними функціями. Якщо раніше, коли не враховувалася відмінність між спінами двох електронів, що знаходяться в одному й тому ж квантовому стані, число базисних функцій дорівнювало N , то тепер число базисних функцій дорівнює $2N$. У квантовій хімії цей підхід відомий як необмежений (за спіном) метод Хартрі – Фока (Unrestricted Hartree – Fock) [3, 4], або ж інакше як метод різних орбіталей для різних спінів (Different Orbitals for Different Spins) [5], чи розщеплених орбіталей [6].

В найпростішому варіанті опису каналу провідності без втрати «фізики», до чого ми завжди прагнемо, в гюккелівському наближенні, більш відомому у фізичній літературі як метод сильного зв'язку в ортогональному базисі з урахуванням взаємодії лише сусідніх атомів, канал провідності вважається не чутливим до спіну, іншими словами, він однаково взаємодіє з електронами, що знаходяться в різних спінових станах. Гамільтоніан $[H]$ провідника в гюккелівському наближенні запишеться так само, як і в [2], тільки кулонівський ε і резонансний t інтеграл матимуть тепер вигляд матриць 2×2 $[\alpha]$ і $[\beta]$ (рис. 3), а саме:

$$\begin{aligned} [\alpha] &= \varepsilon [I], \\ [\beta_x] &= [\beta_y] = t [I], \end{aligned} \quad (4)$$

де $[I]$ – одинична матриця форми 2×2 . Фактично маємо два розщеплювані гамільтоніани, що не несе якої-небудь нової «фізики».

Аналогічно записуються матриці власної енергії $[\Sigma]$ контактів, які в цьому наближенні однаково реагують на різні спіни; вирази для них з роботи [2] множаться на одиничну матрицю $[I_2]$. В цьому наближенні результат очікується тривіальним у тому значенні, що ми ніби враховуємо лише спіни одного сорту, і лише в кінці обчислень всі результати просто подвоюємо.

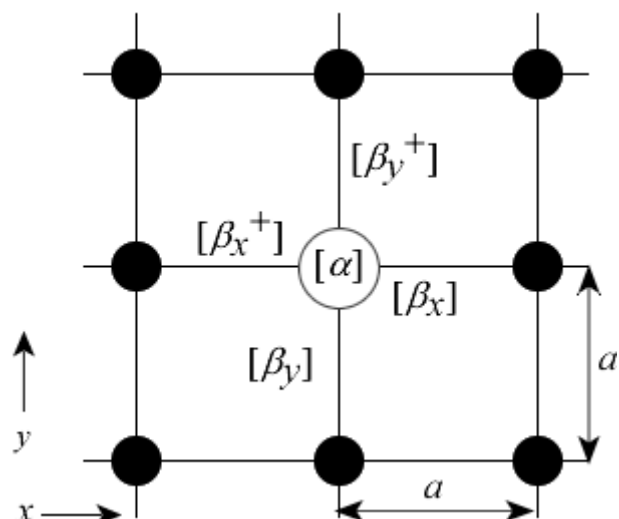


Рис. 3. Однорідна 2D ґратка зі сталою a , в якій кожний атом описується кулонівським $[\alpha]$ і резонансними $[\beta]$ інтегралами у вигляді матриць 2×2 .

Всі розглянуті спінові ефекти, наприклад, у [1], виникають або як результат врахування нетривіальних контактів, чутливих до спіну і описуваних відповідними контактними матрицями $[\Sigma]$, або коли канал провідності чутливий до спіну й описується відповідним гамільтоніаном $[H]$, або ж коли мають місце обидві названі обставини.

Однорівневий спіновий вентиль. Розгляньмо декілька модельних транспортних задач методом НРФГ з урахуванням спіну. Почнімо з простої однорівневої моделі спінового вентиля. З обчислювальної точки зору питання лише в тому, як записати гамільтоніан і контактні матриці, а далі хід обчислень стандартний [2].

Як відомо, спіновий вентиль має різну провідність G_p або G_{AP} залежно від того, чи намагніченість обох контактів паралельна P , чи антипаралельна AP . Магнітоопір

$$MR = (G_p - G_{AP}) / G_{AP}. \quad (5)$$

виражається через поляризацію P магнітних контактів:

$$MR = \frac{P^2}{1 - P^2}, \quad (6)$$

яка в свою чергу визначається межовими опорами вентиля

$$P \equiv \frac{R - r}{R + r} \quad (7)$$

за умови рівності нулевій опору каналу провідності.

В режимі магнітного тунельного переходу (МТП) у виразі для магнітоопору діелектричного провідника з'являється додаткова двійка [1]:

$$MR = \frac{2P^2}{1 - P^2}, \quad (8)$$

появу якої можна зрозуміти з фізики тунельних провідників, згідно з якою результуючий опір двох послідовно сполучених провідників пропорційний їхньому добуткові, а не сумі.

Ми зараз отримуємо цей самий результат щодо появи множника двійки, застосувавши метод НРФГ до однорівневого вентиля в припущенні, що рівноважний електрохімічний потенціал μ_0 лежить на багато kT нижче за енергію ε каналу діелектричного провідника, в якому «власні» носії провідності відсутні (рис. 4).

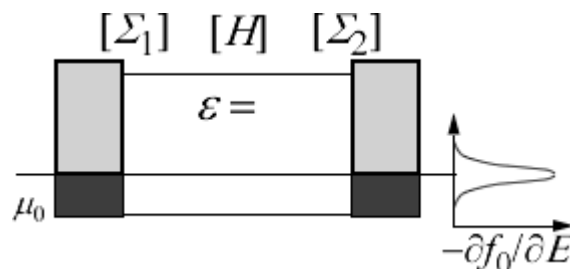


Рис. 4. Модель рівноважного діелектричного однорівневого провідника.

Згідно до квантової моделі однорівневого однорідного 1D резистора без урахування спіну [2] його гамільтоніан і контактні матриці є просто числа (рис. 5).

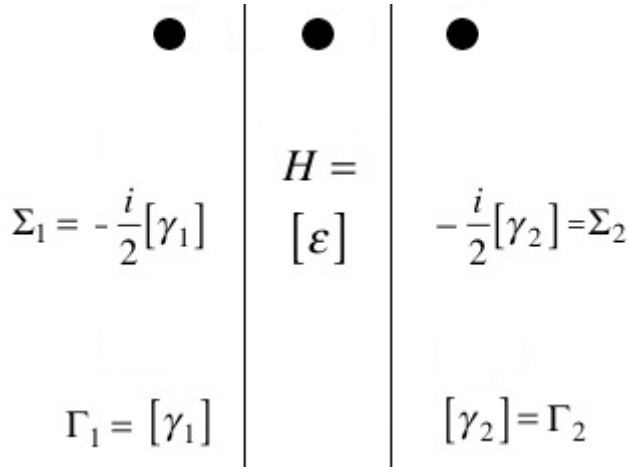


Рис. 5. Однорідний однорівневий 1D провідник без урахування спіну.

Власні енергії контактів

$$\gamma_1 = \hbar v_1, \quad (9a)$$

$$\gamma_2 = \hbar v_2 \quad (9б)$$

пропорційні швидкостям, з якими електрони покидають провідник у напрямі до контактів [2].

При врахуванні спіну число базисних функцій подвоюється, замість чисел з'являються матриці 2-го порядку: гамільтоніан, проте, є просто діагональна матриця, а ось контактні матриці різні для спінів «угору» u і спінів «униз» d (рис. 6).

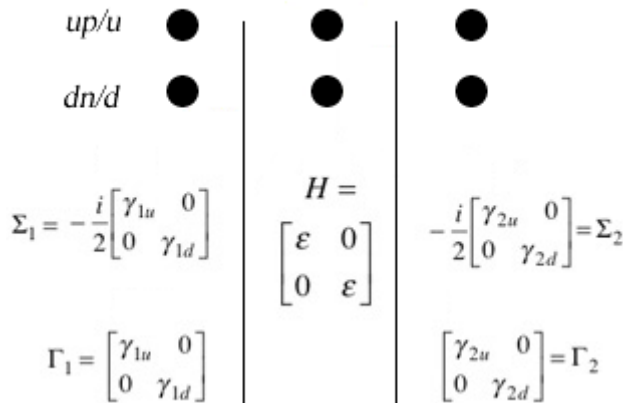


Рис. 6 Однорідний однорівневий 1D провідник з урахуванням спіну (спіновий вентиль).

Для спінового вентилля відразу одержуємо запізнену функцію Гріна [2]:

$$[G^R] = \begin{bmatrix} E - \varepsilon + \frac{i}{2}(\gamma_{1u} + \gamma_{2u}) & 0 \\ 0 & E - \varepsilon + \frac{i}{2}(\gamma_{1d} + \gamma_{2d}) \end{bmatrix}^{-1} \quad (10)$$

і далі коефіцієнт проходження

$$\bar{T} = Tr[\Gamma_1 G^R \Gamma_2 G^A] = \frac{\gamma_{1u} \gamma_{2u}}{(E - \varepsilon)^2 + \left(\frac{\gamma_{1u} + \gamma_{2u}}{2}\right)^2} + \frac{\gamma_{1d} \gamma_{2d}}{(E - \varepsilon)^2 + \left(\frac{\gamma_{1d} + \gamma_{2d}}{2}\right)^2} \quad (11)$$

Потрібно пам'ятати, що зараз ми розглядаємо «нечутливий до спіну» канал провідності.

Для паралельної конфігурації намагніченості контактів P обидва контакти можна вважати однаковими, так що ($\alpha > \beta$)

$$\gamma_{1u} = \gamma_{2u} = \alpha \quad (12a)$$

$$\gamma_{1d} = \gamma_{2d} = \beta, \quad (12б)$$

тоді як для антипаралельної конфігурації AP в порівнянні з паралельною конфігурацією P другий контакт «перевертає» проекцію спіну:

$$\gamma_{1u} = \gamma_{2d} = \alpha \quad (13a)$$

$$\gamma_{1d} = \gamma_{2u} = \beta. \quad (13б)$$

Підставляючи (12а,б) в (8), одержуємо коефіцієнт P -проходження

$$\bar{T}_P = \frac{\alpha^2}{(E - \varepsilon)^2 + \alpha^2} + \frac{\beta^2}{(E - \varepsilon)^2 + \beta^2} \quad (14a)$$

а підстановка (13а,б) дає коефіцієнт AP -проходження:

$$\bar{T}_{AP} = \frac{2\alpha\beta}{(E - \varepsilon)^2 + \left(\frac{\alpha + \beta}{2}\right)^2} \quad (14б)$$

Вимірювана провідність визначається усередненим значенням коефіцієнта проходження в області енергій декількох kT навколо значення μ_0 . Нагадаємо: ми розглядаємо діелектричний провідник, в якому носії струму можуть

з'явитися лише внаслідок інжекції з контактів (рис. 4). Припускаючи

$$\varepsilon - \mu_0 \gg kT, \alpha, \beta, \quad (15)$$

одержуємо:

$$G_p \approx \bar{T}_p|_{E=\mu_0} = \frac{\alpha^2}{(\mu_0 - \varepsilon)^2 + \alpha^2} + \frac{\beta^2}{(\mu_0 - \varepsilon)^2 + \beta^2} \approx \frac{\alpha^2 + \beta^2}{(\mu_0 - \varepsilon)^2} \quad (16a)$$

і

$$G_{AP} \approx \bar{T}_{AP}|_{E=\mu_0} \approx \frac{2\alpha\beta}{(\mu_0 - \varepsilon)^2}, \quad (16b)$$

а для магнітоопору одержуємо шукану формулу (8):

$$MR \equiv \frac{G_p}{G_{AP}} - 1 = \frac{\alpha^2 + \beta^2}{2\alpha\beta} - 1 = \frac{2P^2}{1 - P^2} \quad (17)$$

з поляризацією

$$P \equiv \frac{\alpha - \beta}{\alpha + \beta}. \quad (18)$$

Так само можна отримати формулу для магнітоопору (6) металевого немагнітного провідника, якщо припустити, що хімпотенціал μ_0 лежить поблизу рівня з енергією ε , а $kT \gg \alpha, \beta$.

Обертання магнітних контактів. У спіновому вентилі в режимі AP в порівнянні з вентилям в режимі P другий контакт перевертає проекцію спіну, так що

$$\Gamma_1 = \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{bmatrix}, \quad \Gamma_2 = \begin{bmatrix} \beta & 0 \\ 0 & \alpha \end{bmatrix}. \quad (19)$$

Як записати матрицю Γ для контакту, орієнтованого в довільному напрямі одиничного вектора \hat{n} через його проекції (2) уздовж осей x, y, z ? Остаточна формула має вигляд

$$\Gamma = \frac{\alpha + \beta}{2} [I] + \frac{\alpha - \beta}{2} \begin{bmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{bmatrix}, \quad (20)$$

де I – одинична матриця 2-го порядку. Формула відразу не очевидна, але ми скоро її отримаємо. А поки що зазначмо, що ця формула містить окремі випадки паралельної і антипаралельної орієнтації намагніченостей контак-

тів відповідно:

$$n_z = +1, \quad n_x = n_y = 0: \quad \Gamma = \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{bmatrix}, \quad (21a)$$

$$n_z = -1, \quad n_x = n_y = 0: \quad \Gamma = \begin{bmatrix} \beta & 0 \\ 0 & \alpha \end{bmatrix}. \quad (21b)$$

Переконалися в справедливості загальної формули (20) можна шляхом подальшого міркування. Матриця

$$\tilde{\Gamma} = \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{bmatrix} \quad (22)$$

описує магнітний контакт, орієнтований уздовж довільно направленою одиничного вектора \hat{n} , якщо як вісь відліку вибрати напрям $+\hat{n}$ і $-\hat{n}$ замість стандартних декартових напівосей $+\hat{z}$ і $-\hat{z}$. Повернутися назад до стандартного базису $\pm\hat{z}$ можна шляхом унітарного перетворення $\Gamma = V \tilde{\Gamma} V^+$ матриці (22):

$$\begin{array}{ccc} \hat{n} & -\hat{n} & \hat{z} & -\hat{z} \\ \hat{z} & \begin{bmatrix} c & -s^* \\ s & c^* \end{bmatrix} & \hat{n} & \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{bmatrix} & -\hat{n} & \begin{bmatrix} c^* & s^* \\ -s & c \end{bmatrix} \\ -\hat{z} & & & & & \end{array} \quad (23)$$

$V \qquad \qquad \qquad V^+$

де колонки матриці унітарного перетворення $[V]$ є компоненти спінора c і s (3) уздовж напрямів $\pm\hat{n}$. Перша колонка матриці V відповідає напрямі $+\hat{n}$, а друга колонка відповідає напрямі $-\hat{n}$ з компонентами спінора $-s^*$ і c^* , які виходять з (3) шляхом перетворення кутів

$$\theta \rightarrow \pi - \theta, \quad \phi \rightarrow \pi + \phi \quad (24)$$

і видалення з обох компонент загального фазового множника.

Перемножування трьох матриць в (23) дає

$$\begin{aligned} \Gamma &= \begin{bmatrix} c & -s^* \\ s & c^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c^* & s^* \\ -s & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c & -s^* \\ s & c^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha c^* & \alpha s^* \\ -\beta s & \beta c \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} \alpha c c^* + \beta s s^* & (\alpha - \beta) c s^* \\ (\alpha - \beta) s c^* & \alpha s s^* + \beta c c^* \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (25)$$

Використовуючи визначення компонент спінора c і s (3) і тригонометричну рівність

$$2 \cos^2 \frac{\theta}{2} = 1 + \cos \theta, \quad 2 \sin^2 \frac{\theta}{2} = 1 - \cos \theta \quad (26)$$

$$2 \sin \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} = \sin \theta,$$

перепишемо (25) у вигляді

$$\Gamma = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} (\alpha + \beta) + (\alpha - \beta) \cos \theta & (\alpha - \beta) \sin \theta e^{-i\phi} \\ (\alpha - \beta) \sin \theta e^{+i\phi} & (\alpha + \beta) - (\alpha - \beta) \cos \theta \end{bmatrix}, \quad (27)$$

що приводить до шуканої формули (20), якщо скористатися виразами (2) для компонент одиничного вектора \hat{n} уздовж осей x, y, z .

Якщо вектор поляризації

$$\vec{P} \equiv P \hat{n} = \frac{\alpha - \beta}{\alpha + \beta} \hat{n} \quad (28)$$

визначити його величиною (18) і одиничним вектором \hat{n} , то рівняння (20) можна переписати у вигляді:

$$\Gamma = \frac{\alpha + \beta}{2} \left([I] + \begin{bmatrix} P_z & P_x - iP_y \\ P_x + iP_y & -P_z \end{bmatrix} \right), \quad (29)$$

або ж ще інакше:

$$\frac{[\Gamma]}{(\alpha + \beta)/2} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + P_x \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + P_y \begin{bmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{bmatrix} + P_z \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (30)$$

через широко використовувані в квантовій теорії спінові матриці Паулі

$$\sigma_x \equiv \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y \equiv \begin{bmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (31)$$

Насамкінець рівняння (29) можна переписати компактно у вигляді

$$\begin{aligned} \Gamma &= \frac{\alpha + \beta}{2} ([I] + [\sigma_x] P_x + [\sigma_y] P_y + [\sigma_z] P_z) = \\ &= \frac{\alpha + \beta}{2} ([I] + [\vec{\sigma}] \cdot \vec{P}). \end{aligned} \quad (32)$$

Подібним же чином можна компактно переписати контактні матриці власної енергії. Нехай, наприклад, у базисі $\pm \hat{n}$ має місце:

$$\tilde{\Sigma} = -\frac{i}{2} \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{bmatrix}, \quad (33)$$

тоді в базисі $\pm \hat{z}$ маємо:

$$\Sigma = -i \frac{\alpha + \beta}{4} [I] - i \frac{\alpha - \beta}{4} [\vec{\sigma}] \cdot \hat{n} = -i \frac{\alpha + \beta}{4} ([I] + [\vec{\sigma}] \cdot \vec{P}). \quad (34)$$

Гамільтоніан із зєсманівським розщепленням. Перейдімо до обговорення спін-залежних гамільтоніанів, розглянувши послідовно врахування класичного спін-орбітального зєсманівського розщеплення і гамільтоніан Рашби [7, 8].

Нехай напрям магнітного поля \vec{B} визначається одиничним вектором \hat{n} . Тоді гамільтоніан у базисі $\pm \hat{n}$ має вигляд

$$\mu_{el} \begin{bmatrix} +B & 0 \\ 0 & -B \end{bmatrix}, \quad (35)$$

де μ_{el} – магнітний момент електрона. У полі рівень з проекцією спіну «вгору» зміщується вгору на величину $\mu_{el} B$, а з проекцією «вниз» – зміщується вниз на цю ж величину (зєсманівське розщеплення, відкрите голландським фізиком Пітером Зєсманом ще в 1896 році; це відкриття було вшановане Нобелівською премією 1902 року).

В базисі $\pm \hat{z}$ маємо:

$$H_B = \mu_{el} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}. \quad (36)$$

Сюди потрібно додати спін-незалежну частину гамільтоніану. Для випадку параболічного закону дисперсії маємо:

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) [I] + \mu_{el} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}, \quad (37)$$

а для однорідної 2D ґратки в гюккелівському наближенні з резонансним і кулонівським інтегралами [2]

$$t = -\hbar^2 / 2ma^2, \quad (38)$$

$$\varepsilon = E_c - 4t, \quad (39)$$

гамільтоніан має вигляд:

$$H = (\varepsilon + 2t \cos k_x a + 2t \cos k_y a) [I] + \mu_{el} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}, \quad (40)$$

де a – стала ґратки. Для ґратки, зображеної на рис. 3, кулонівська і резонансна матриці мають вигляд:

$$\begin{aligned}\alpha &= \varepsilon[I] + \mu_{el}\vec{\sigma} \cdot \vec{B}, \\ \beta_x &= t[I], \quad \beta_y = t[I].\end{aligned}\quad (41)$$

В порівнянні зі спин-незалежним гамільтоніаном (4) змінюється тільки кулонівська матриця.

Послідовніше врахування спин-орбітальної взаємодії дає гамільтоніан Рашби (названий так на честь визначного фізика-теоретика Емануїла Рашби, який вивів його, працюючи в Києві):

$$H_R = \eta \hat{z} \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{k}) = \eta(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x), \quad (42)$$

де η – параметр Рашби [7 – 9]. Цей гамільтоніан має релятивістське «походження» (як, власне, і всі магнітні явища), обумовлені ним ефекти широко спостерігаються експериментально і надійно інтерпретовані [9]. Однак зараз нас цікавитиме тільки одне – як врахувати взаємодію Рашби для нашої однорідної 2D ґратки в гюккелівському наближенні. З цією метою апроксимуємо (42) синусами

$$H_R = \frac{\eta}{a}(\sigma_x \sin k_y a - \sigma_y \sin k_x a) \quad (43)$$

і запишемо їх заради зручності через експоненти:

$$H_R = \frac{\eta}{2ia}\sigma_x(e^{+ik_y a} - e^{-ik_y a}) - \frac{\eta}{2ia}\sigma_y(e^{+ik_x a} - e^{-ik_x a}), \quad (44)$$

співмножники перед якими

$$\begin{aligned}\beta_x &= \frac{i\eta}{2a}\sigma_y, \quad \beta_x^+ = -\frac{i\eta}{2a}\sigma_y, \\ \beta_y &= -\frac{i\eta}{2a}\sigma_x, \quad \beta_y^+ = \frac{i\eta}{2a}\sigma_x.\end{aligned}\quad (45)$$

забезпечують правильний вигляд (37).

Врахуємо спин-незалежну частину гамільтоніана 2D ґратки (4), а також постійне магнітне поле (41), яке спричиняє зєсманівське розщеплення. Остаточно кулонівська і резонансна матриці однорідних 2D ґраток з урахуванням зєсманівської спин-орбітальної взаємодії і взаємодії Рашби мають вигляд:

$$\begin{aligned}\alpha &= \varepsilon I + \mu_{el}\vec{\sigma} \cdot \vec{B}, \\ \beta_x &= tI + \frac{i\eta}{2a}\sigma_y, \quad \beta_x^+ = tI - \frac{i\eta}{2a}\sigma_y, \\ \beta_y &= tI - \frac{i\eta}{2a}\sigma_x, \quad \beta_y^+ = tI + \frac{i\eta}{2a}\sigma_x.\end{aligned}\quad (46)$$

Звернімо увагу на те, що взаємодія Рашби враховується через параметр Рашби і матриці Паулі в резонансних матрицях 2D ґратки, а зєсманівська взаємодія – в кулонівських матрицях.

Спінори і вектори. Ми зазвичай «візуально» уявляємо собі спин як об'єкт, орієнтований в певному напрямі, що обертається. Він описується двома комплексними компонентами спінора (3), а вектор у цьому ж напрямі задається трьома дійсними проекціями (2) на осі декартової системи координат. Щоб відчутти зв'язок між двома способами зображення одного і того ж направленого об'єкта – векторним і спінорним – корисно розглянути прецесію спіна в магнітному полі в обох зображеннях.

Розглянемо однорівневий резистор з $\varepsilon = 0$ в магнітному полі, направленому уздовж осі z . Двокомпонентне рівняння Шредінґера

$$\frac{d}{dt} \begin{Bmatrix} \psi_u \\ \psi_d \end{Bmatrix} = \frac{\mu_{el} B_z}{i\hbar} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \psi_u \\ \psi_d \end{Bmatrix}, \quad (47)$$

де праворуч стоїть спінова матриця σ_z , фактично розпадається на два диференціальні рівняння з очевидними розв'язками:

$$\begin{aligned}\psi_u(t) &= \psi_u(0)e^{-i\omega t/2} \\ \psi_d(t) &= \psi_d(0)e^{+i\omega t/2},\end{aligned}\quad (48)$$

де частота прецесії

$$\omega \equiv \frac{2\mu_{el} B_z}{\hbar}. \quad (49)$$

Нехай спин електрона в початковий момент часу $t = 0$ направлений уздовж одиничного вектора \hat{n} під кутами θ і ϕ щодо обраної системи відліку (рис. 7).

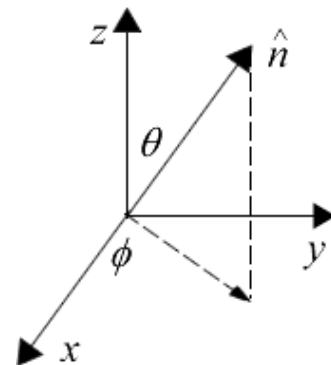


Рис. 7. До прецесії спіну, направлено уздовж одиничного вектора \hat{n} , по куту ϕ .

У цей початковий момент часу його хвильові функції

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_u(0) = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} \\ \psi_d(0) = \sin \frac{\theta}{2} e^{+i\phi/2} \end{array} \right\}, \quad (50)$$

а в подальші моменти часу

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_u(t) = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} e^{-i\omega t/2} \\ \psi_d(t) = \sin \frac{\theta}{2} e^{+i\phi/2} e^{+i\omega t/2} \end{array} \right\}, \quad (51)$$

що відповідає обертанню спіну навколо осі z під фіксованим до неї кутом θ , тоді як кут ϕ росте лінійно з часом:

$$\phi(t) = \phi(0) + \omega t. \quad (52)$$

Згідно з (2), для проекцій одиничного вектора маємо:

$$\left\{ \begin{array}{l} n_x = \sin \theta \cos \phi(t), \\ n_y = \sin \theta \sin \phi(t), \\ n_z = \cos \theta, \end{array} \right. \quad (53)$$

звідки з використанням (52) одержуємо:

$$\frac{dn_x}{dt} = -\omega n_y, \quad \frac{dn_y}{dt} = +\omega n_x, \quad (54)$$

або в матричному вигляді для всіх трьох компонентів одиничного вектора:

$$\frac{d}{dt} \begin{Bmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{Bmatrix} = \omega \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{Bmatrix}, \quad (55)$$

де квадратна матриця, яку зазвичай позначають R_z , є матриця обертання одиничного вектора навколо осі z .

Порівняймо отримане рівняння (55) з рівнянням Шредінгера (47) в спінорному зображенні, переписаному через частоту прецесії (49):

$$\frac{d}{dt} \begin{Bmatrix} \psi_u \\ \psi_d \end{Bmatrix} = \frac{\omega}{2i} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \psi_u \\ \psi_d \end{Bmatrix}, \quad (56)$$

де фігурує матриця Паулі σ_z .

Нехай ми хочемо описати прецесію спіну електрона в магнітному полі, направленому уздовж осі x . Для цього в рівнянні (55) достатньо лише виконати циклічну перестановку змінних: $x \rightarrow y$, $y \rightarrow z$, $z \rightarrow x$, і ми отримаємо рівняння з матрицею обертання R_x :

$$\frac{d}{dt} \begin{Bmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{Bmatrix} = \omega \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & +1 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{Bmatrix}. \quad (57)$$

Звернімо увагу: якщо в (55) -1 стояла на перетині рядка x і стовпчика y , то в (57) вона виявилася на перетині рядка y і стовпчика z .

Відразу не очевидно, як саме з тією ж метою потрібно модифікувати рівняння (56). Правильна відповідь така:

$$\frac{d}{dt} \begin{Bmatrix} \psi_u \\ \psi_d \end{Bmatrix} = \frac{\omega}{2i} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \psi_u \\ \psi_d \end{Bmatrix}, \quad (58)$$

де фігурує матриця Паулі σ_x .

Рівняння (55) та (56), як і рівняння (57) та (58), описують один і той самий фізичний процес, а саме, обертання спіну електрона в магнітному полі, направленому уздовж осі z , у першому випадку – через три дійсні компоненти, а в другому – через дві комплексні. Циклічна перестановка в протилежному напрямі дасть нам матрицю обертань R_y , а відповідна їй спінова матриця σ_y була наведена серед виразів (31).

Що робить матриці обертання й спінові матриці ізоморфними, дозволяючи їм описувати один і той самий фізичний процес? Відповідь полягає в тому, що в цих матрицях однакові комутаційні співвідношення.

Легко переконатися, що матриці обертання

$$R_x = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & +1 & 0 \end{bmatrix}, \quad R_y = \begin{bmatrix} 0 & 0 & +1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad R_z = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (59)$$

підкоряються таким комутаційним співвідношенням:

$$\left\{ \begin{array}{l} [R_x, R_y] \equiv R_x R_y - R_y R_x = R_z \\ [R_y, R_z] \equiv R_y R_z - R_z R_y = R_x \\ [R_z, R_x] \equiv R_z R_x - R_x R_z = R_y \end{array} \right. \quad (60)$$

де зліва стоять стандартні позначення відповідних комутаторів.

Спінові матриці Паулі підкоряються таким самим комутаційним співвідношенням, якщо R формально замінити на $\sigma/2i$:

$$\begin{aligned} [\sigma_x, \sigma_y] &\equiv \sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = 2i\sigma_z \\ [\sigma_y, \sigma_z] &\equiv \sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y = 2i\sigma_x \\ [\sigma_z, \sigma_x] &\equiv \sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z = 2i\sigma_y \end{aligned} \quad (61)$$

Відзначмо, що в стандартних підручниках квантової механіки спінові матриці Паулі зазвичай вводять постулативно.

Які повинні бути компоненти в спінора, направлено уздовж осі z ? Оскільки спінор не змінюється при обертанні навколо осі z , то його компонентами повинні бути власні вектори спінової матриці σ_z в наборі виразів (31):

$$\begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad \text{або} \quad \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \end{Bmatrix}, \quad (62)$$

які справді описують спін «вгору» або спін «вниз» уздовж осі z .

Якщо ж ми хочемо знати компоненти спінора, направлено уздовж осі x , то потрібно знайти власні вектори спінової матриці σ_x , якими є вектори

$$\begin{Bmatrix} +1 \\ +1 \end{Bmatrix} / \sqrt{2} \quad \text{або} \quad \begin{Bmatrix} +1 \\ -1 \end{Bmatrix} / \sqrt{2}, \quad (63)$$

що відповідають напряму проєкції спіну «вгору» (уздовж додатної півосі) або «вниз» (уздовж від'ємної півосі осі x).

В загальному випадку, якщо ми хочемо знайти компоненти спінора, направлено уздовж довільно орієнтованого одиничного вектора \hat{n} (2), потрібно шукати власні вектори матриці

$$\begin{aligned} \vec{\sigma} \cdot \hat{n} &= \sigma_x \sin \theta \cos \phi + \sigma_y \sin \theta \sin \phi + \sigma_z \cos \theta = \\ &= \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{+i\phi} & -\cos \theta \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (64)$$

позначені раніше як

$$\begin{Bmatrix} c \\ s \end{Bmatrix} \quad \text{та} \quad \begin{Bmatrix} -s^* \\ c^* \end{Bmatrix},$$

перший з яких відповідає орієнтації спіну вздовж додатного напрямку вектора \hat{n} і в явному вигляді виписаний в (3).

Прецесія спіну. Ми вже знаємо, як скласти гамільтоніан H і контактні матриці Σ , зокрема й з урахуванням нетривіальних спінових ефектів, і готові застосувати чисельні моделі, обчислюючи електронну густину через нерівноважну функцію Гріна G^n , а густину станів - через спектральну функцію A і струм [2].

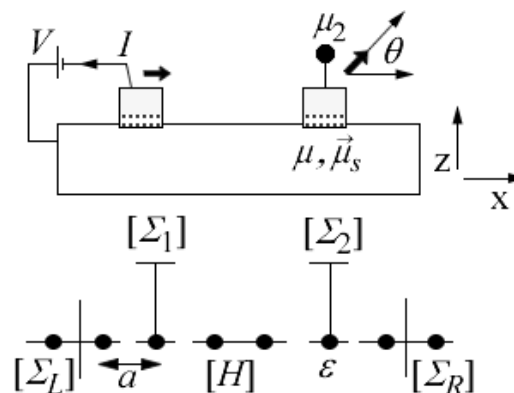


Рис. 8. До вимірювання і розрахунку методом НРФГ спінового потенціалу в рамках чотирьохтермінальної моделі однорідного 1D провідника з двома магнітними зондами, описуваними контактними матрицями Σ_1 і Σ_2 .

Спочатку розрахуємо потенціал на другому зонді, описуваному контактною матрицею Σ_2 , однорідного 1D провідника (рис. 8) методом НРФГ з простим гамільтоніаном без урахування спінових ефектів залежно від кута нахилу θ магнітного зонда 2 щодо лінійного провідника (плаваючий контакт). Результати розрахунку для різних значень поляризації P_2 (7) 2-го зонда щодо 1-го представлені на рис. 9.

Розрахунком методом НРФГ повністю підтверджується формула (1): вимірюваний потенціал осцилює залежно від кута нахилу одного магнітного контакту щодо іншого. При нульовій поляризації контактів вимірюваний потенціал залишається сталим.

Як ми вже відзначали, досі немає відомостей про реальні експерименти з плаваючим магнітним контактом. Проводилися, проте, експерименти з обертанням спіну електронів у провідному каналі при фіксованій геометрії взаємного розташування магнітних контактів.

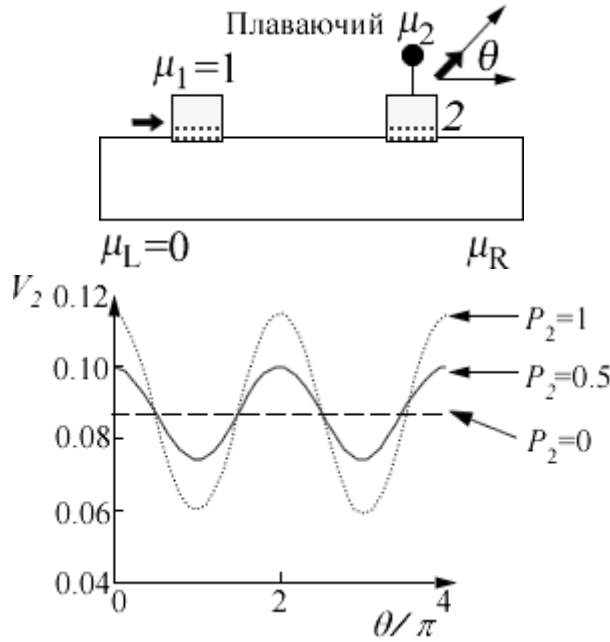


Рис. 9. Зміна потенціалу 2-го зонда щодо 1-го залежно від кута нахилу, нормованого на 180° , при різних значеннях взаємної поляризації зондів [10].

Один з поширених методів полягає в прикладанні зовнішнього магнітного поля, що призводить до прецесії спіну навколо напрямку магнітного поля з циклічною частотою ω (49). Це означає, що спіновий потенціал μ_2 в точці, де знаходиться пробний зонд 2, обернеться на кут $\omega\tau$, де τ – час проходження електроном шляху від інжектуючого контакту до пробного зонда 2. Записавши $\tau = L/v$, з рівнянь (1) і (49) маємо:

$$\mu_2 = \mu + P_2 \mu_s \cos \frac{2\mu_{el}L}{\hbar v} B_z. \quad (65)$$

Таким чином, можна очікувати появи осцилюючого потенціалу на зонді 2, величина якого залежить від величини прикладеного магнітного поля. Проте зазвичай в експерименті спостерігається не суто балістичний транспорт, і тому має місце великий розкид значень часів τ , внаслідок чого потенціал, усереднений по всіх часах τ , зануляється. Типові експерименти, замість осцилюючого сигналу, залежного від магнітного поля, показують просто зменшення потенціалу від значення $P_2 \mu_s$ аж до нуля (ефект Хенлі [11, 12]). Проте, осциляції

в ефекті Хенлі таки вдалося побачити за рахунок зменшення розкиду часів τ настільки, що розкид виявився набагато меншим від середнього значення часу τ [13].

Іншим підходом до обертання спіну електрона може служити ефект Рашби в провідниках з сильною спин-орбітальною взаємодією. Зараз на прикладі багатьох напівпровідників надійно встановлено, що електричне поле уздовж осі z (рис. 8) веде до появи ефективного магнітного поля, залежного від імпульсу електрона. В цьому можна перекопатися, порівнюючи гамільтоніан з урахуванням магнітного поля (36) з гамільтоніаном Рашби (42), який для зручності перепишемо у вигляді:

$$H_R = \eta \hat{z} \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{k}) = \eta \vec{\sigma} \cdot (\vec{k} \times \hat{z}). \quad (66)$$

Звідси для ефективного магнітного поля, яке виникає через взаємодію Рашби, одержуємо:

$$\mu_{el} \vec{B}_{eff} = \eta \hat{z} \times \vec{k}. \quad (67)$$

Отже, згідно з (65) можна очікувати осцилюючого потенціалу вигляду

$$\mu_2 = \mu + P_2 \mu_s \cos \frac{2\eta k L}{\hbar v} \quad (68)$$

з періодом

$$\frac{2kL}{\hbar v} \Delta\eta = 2\pi \quad \text{або інакше} \quad \Delta\eta = \frac{2\pi a t_0}{kL} \sin ka. \quad (69)$$

Цей висновок непогано узгоджується з чисельними результатами, отриманими методом НРФГ для енергії, що відповідає $ka = \pi/3$, при відстані між інжектором і детектором $L = 40a$ (рис. 10).

В цій моделі електрони, що рухаються уздовж осі x в її додатному напрямі, зазнають впливу ефективного магнітного поля уздовж осі y . Оскільки інжектвані електрони мають спіновий потенціал $\vec{\mu}_s$, направлений уздовж намагніченості зондів 1 і 2 (вісь x), спіновий потенціал повинен обертатися. Осциляції потенціалу зникають, якщо намагніченості обох зондів направлені уздовж осі y . Цей ефект підтверджується експериментально [14, 15].

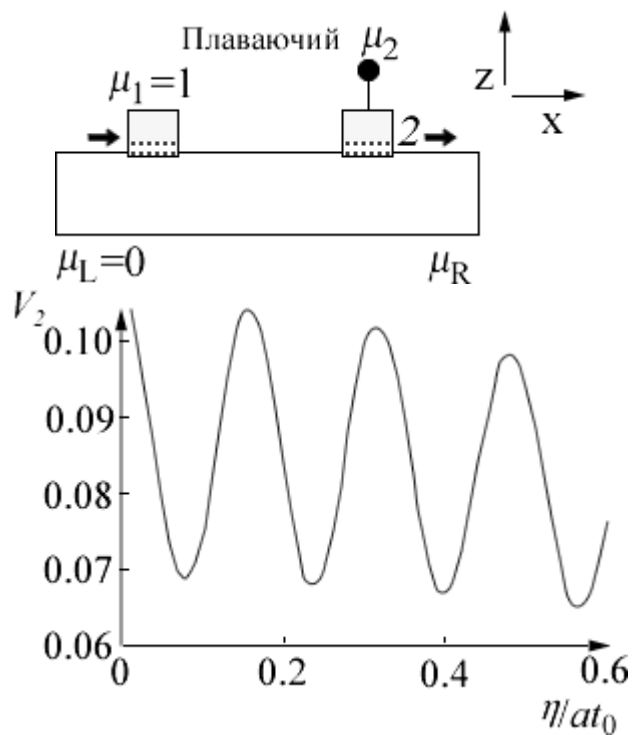


Рис. 10. У провідниках з великим значенням коефіцієнта Рашби η потенціал зонда 2 осцилює, якщо намагніченості обох зондів направлені уздовж провідника (вісь x); осциляції зникають, якщо намагніченості направлені перпендикулярно до провідника (вісь z) [10].

Квантовий спіновий ефект Холла. Транспорт поляризованих спінів у немагнітних матеріалах, таких як мідь, був вивчений достатньо повно і його фізична картина загалом зрозуміла. Цього не можна сказати про дифузію спінів у матеріалах із сильною спін-орбітальною взаємодією.

Протягом останнього десятиріччя пильну увагу приділяли квантовому спіновому ефекту Холла (КСХ). У звичайному класичному ефекті Холла електрони, що рухаються від витoku до стоку уздовж осі x , під дією магнітного поля, направлено перпендикулярно поверхні 2D провідника, уздовж осі z , відхиляються таким чином, що створюється поперечна різниця потенціалів уздовж осі y (рис. 11) [24].

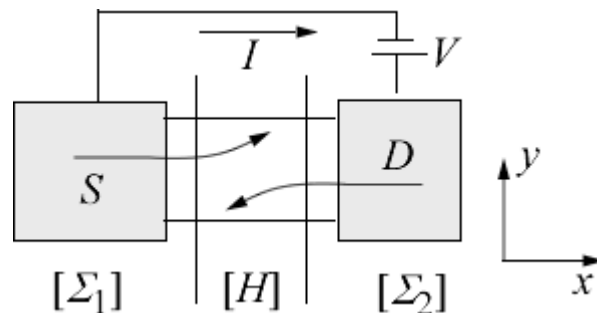


Рис. 11. До вибору системи координат при обговоренні ефекту КСХ.

Ефект КСХ можна зрозуміти в рамках моделі, згідно з якою ефективне магнітне поле «закручує» електрони з проекціями спінів уздовж півосей $+z$ і $-z$, у протилежних напрямках, тоді як у класичному ефекті Холла обидві проекції спіна «закручуються» в одному і тому ж напрямку.

Оскільки електрони в провідниках з сильною спін-орбітальною взаємодією зазнають дії ефективного магнітного поля, природно запитати: чи можна спостерігати холлівський ефект у відсутності зовнішнього магнітного поля, а лише під впливом внутрішнього ефективного магнітного поля?

Відповідь виявляється позитивною, але явище із «закручуванням» електронів з проекціями спінів уздовж $+z$ і $-z$ в протилежних напрямках виявляється вельми «делікатним», оскільки заряди не накопичуються в поперечному напрямку і холлівська напруга зануляється. Проте, спіновий потенціал може бути вимірний магнітними контактами.

У перших експериментах накопичення електронів зі спінами протилежної поляризації в поперечному напрямку (КСХ) виявили в масивних напівпровідниках оптичними зондами [25], а нещодавно КСХ цього типу виміряли магнітними зондами в нанопровідниках [15].

Транспортна модель на основі методу НРФГ [2] адекватно описує КСХ, про що свідчать результати розрахунку для однорідного 2D провідника (рис. 10) з коефіцієнтом Рашби $\eta = 1 \cdot 10^{-11} \text{ eV} \cdot \text{м}$, з енергією $E = 0.05t_0$ і змінною шириною W (рис. 12). Для вичленування z -компоненти спінової густини з гринівської

функції G^n використовувалося рівняння (65).

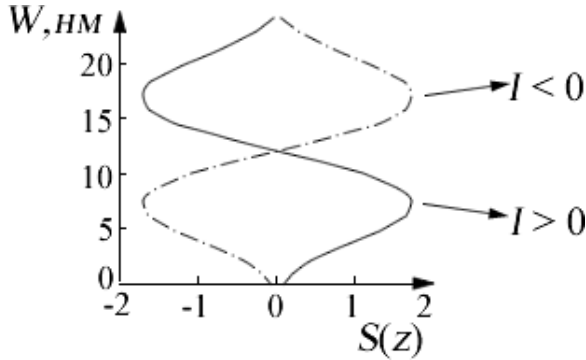


Рис. 12. Квантовий спіновий ефект Холла. Чисельні результати, отримані методом НРФГ, показують накопичення електронів зі спінами протилежної поляризації $S(z)$ (у відносних одиницях) на протилежних сторонах 2D провідника, при цьому зміна напрямку струму вздовж провідника на протилежну приводить до обертання картини накопичуваних електронів з протилежними спінами [10].

В останні декілька років значно зріс інтерес до транспорту спінів у матеріалах з сильною спін-орбітальною взаємодією, особливо в топологічних діелектриках [1], де виявляють цілком неординарні прояви КСХ [25].

Метод НРФГ і дифузійний транспорт. На закінчення обговоримо зв'язок методу НРФГ з дифузійним підходом для балістичного транспорту, розвиненим у [1]. Ми вже знаємо, що чисельні результати, отримані вище методом НРФГ, якісно правильно описуються рівнянням (1), сформульованим у [1] з евристичних міркувань. Проте причина цієї узгодженості не очевидна, тим більше, що в методі НРФГ для моделювання транспорту спінів первинно використовуються двокомпонентні комплексні спінори, а спіновий потенціал $\vec{\mu}_s$ описується трьохкомпонентним дійсним вектором.

Вище вже підкреслювався зв'язок між одиничним вектором \hat{n} , уздовж якого направлена проекція спіну, і спіновими хвильовими функціями ψ_{up} і ψ_{dn} . Щоб встановити зв'язок між рівнянням (1) і методом НРФГ для транспорту спінів, потрібно розглядати грінівську функ-

цію $G^n \sim \psi\psi^+$, а не просто хвильову функцію ψ , оскільки метод НРФГ початково формулюється через G^n . До того ж саме грінівська функція G^n , а не хвильова функція, є спостережуваною величиною, придатною для встановлення зв'язку з експериментальними результатами.

Електронна густина в матричному зображенні. Ми вже не раз використовували електронну густину в матричному записі $[G^n]$, діагональні елементи якого дають нам число електронів в заданій точці провідника [2]. З урахуванням спіну матриця $[G^n]$ у певній визначеній точці є матриця (2 x 2) і вона дає нам число електронів або сумарний спін \vec{S} . Переконатися в цьому можна, розглядаючи електрон зі спіном, направленим уздовж довільного напрямку \hat{n} (рис.7) і описуваним хвильовою функцією в спінорному зображенні (50), коли відповідна матриця електронної густини $[G^n]$ форми (2 x 2) дається виразом

$$\psi\psi^+ = \begin{Bmatrix} c \\ s \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} c^* & s^* \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} cc^* & cs^* \\ sc^* & ss^* \end{bmatrix}, \quad (70)$$

або ж інакше, використовуючи (2) і (26),

$$\psi\psi^+ = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1+n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & 1-n_z \end{bmatrix} = \frac{1}{2} [I + \vec{\sigma} \cdot \hat{n}]. \quad (71)$$

Підсумовуючи вклади в $\psi\psi^+$ від усіх N електронів, для матриці грінівської функції остаточно отримаємо:

$$\frac{G^n}{2\pi} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} N+S_z & S_x - iS_y \\ S_x + iS_y & N-S_z \end{bmatrix} = \frac{1}{2} (N[I] + \vec{\sigma} \cdot \vec{S}). \quad (72)$$

Обчисливши матрицю $[G^n]$, повне число електронів і сумарний спін можна знайти з

$$N = \frac{1}{2\pi} Tr[G^n], \quad \vec{S} = \frac{1}{2\pi} Tr[\vec{\sigma}G^n], \quad (73)$$

що є наслідком рівності нулю сліду спінових матриць Паулі (31) і властивостей спінових матриць, які випливають з (31) і (61), а саме:

$$\begin{aligned} \sigma_x^2 &= \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I \\ \sigma_x\sigma_y &= -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z \\ \sigma_y\sigma_z &= -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x \\ \sigma_z\sigma_x &= -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y \end{aligned} \quad (74)$$

У результаті, вся інформація, що міститься в ермітовій матриці $[G^n]$, може бути подана чотирма дійсними величинами в заданій точці провідника – повним числом електронів N і трьома дійсними компонентами вектора повного спіну \vec{S} , які можна отримати з (73).

Вимірювання спінового потенціалу. Ми підійшли до встановлення зв'язку між рівняннями (1) і методом НРФГ для транспорту спінів. Скалярну версію рівняння (1) (рівняння (53) в [1]) ми отримали в рамках напівкласичної моделі обчислення струмів на детектуючому зонді через його межові провідності для спінів протилежної спрямованості (рис. 12 в [1]), вважаючи зондовий струм нульовим. Тепер ми отримуємо повне рівняння (1) у векторній формі, спираючись на метод НРФГ (рис. 13).

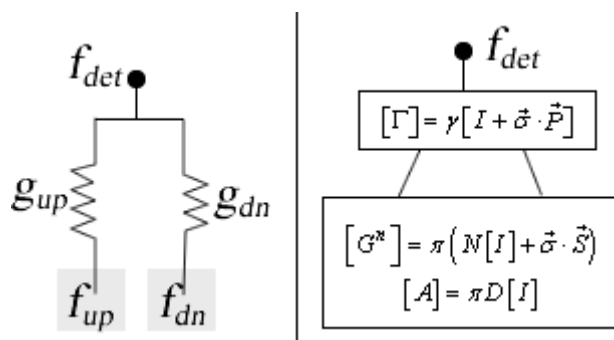


Рис. 13. Моделювання детектуючого зонду в напівкласичній моделі і в методі НРФГ.

Для струму маємо четверте рівняння у формалізмі НРФГ (рівняння (16) в [2])

$$I \approx Tr[\Gamma][f_{det}[A] - [G^n]]; \quad (75)$$

отже, при нульовому струмі на детектуючому зонді (рис. 13)

$$f_{det} = \frac{Tr[\Gamma][G^n]}{Tr[\Gamma][A]}. \quad (76)$$

Підставляючи сюди грінівську функцію G^n (72), а спектральну функцію A виражаючи через спін-незалежну густину станів D

$$\frac{A}{2\pi} = \frac{D}{2}[I], \quad (77)$$

описуючи зв'язок детектуючого зонду з каналом провідності згідно (32)

$$\Gamma = \gamma[I + \vec{\sigma} \cdot \vec{P}] \quad (78)$$

і враховуючи нульовий слід у всіх матриць Паулі, остаточно отримуємо:

$$f_{det} = Tr[I + \vec{\sigma} \cdot \vec{P}] \left[\frac{N}{D} I + \vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{S}}{D} \right]. \quad (79)$$

Враховуючи тотожність для двох довільних векторів \vec{P} і $\vec{B} \equiv \vec{S}/D$

$$[\vec{\sigma} \cdot \vec{P}][\vec{\sigma} \cdot \vec{B}] = (\vec{P} \cdot \vec{B})[I] + i\vec{\sigma} \cdot [\vec{P} \times \vec{B}], \quad (80)$$

маємо:

$$[I + \vec{\sigma} \cdot \vec{P}][bI + \vec{\sigma} \cdot \vec{B}] = (b + \vec{P} \cdot \vec{B})[I] + \vec{\sigma} \cdot [\vec{P} + \vec{B} + i\vec{P} \times \vec{B}]. \quad (81)$$

Остаточно, використовуючи рівність нулю сліду матриць Паулі, замість (79) одержуємо:

$$f_{det} = \frac{N}{D} + \vec{P} \cdot \frac{\vec{S}}{D} \equiv f + \vec{P} \cdot \frac{\vec{f}_s}{2}, \quad (82)$$

де зарядна f і спінова f_s заселеності визначені так, щоб їх максимально можливі значення не перевищували одиниці. Щоб перейти від заселеностей до хімпотенціалів і отримати шукане рівняння (1), скористаємося лінійною залежністю між ними в режимі лінійного відгуку (рівняння (21) в [26]).

Чотирьохкомпонентний транспорт.

Підкреслимо ще раз, що квантовий підхід природним чином веде до комплексної матриці $[G^n]$ форми (2 x 2) в кожній точці провідника, і разом з тим грінівську матрицю завжди можна переписати через чотири дійсних і фізично зрозумілих числа, таких як (N, \vec{S}) або $(\mu, \vec{\mu}_s)$.

Ми вже бачили в [1], як багато різних явищ спінового транспорту можна описати за допомогою рівняння Вале – Фера (рівняння (23) в [1]) разом з моделлю спін-залежних прикордонних опорів. Проте, цей підхід [1] був обмежений задачами спінового транспорту тільки в одному напрямі (вісь z). Зараз же, маючи повну версію методу НРФГ, можна розглядати транспорт спінів, орієнтованих у будь-якому

довільному напрямі, хоча такі розрахунки і потребують великих обчислювальних ресурсів.

Транслюючи матрицю $[G^n]$ в чотирьохкомпонентний формат (N, \vec{S}) , можемо замінити спін-залежні межові провідності [1] матрицею провідності G форми (4×4) , яка зв'язує чотири компоненти потенціалів з чотирма компонентами струму:

$$\begin{pmatrix} I \\ I_{sx} \\ I_{sy} \\ I_{sz} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} G \\ 4 \times 4 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \Delta\mu \\ \Delta\mu_{sx} \\ \Delta\mu_{sy} \\ \Delta\mu_{sz} \end{pmatrix}. \quad (83)$$

Аналогічним чином, двокомпонентне рівняння Вале – Фера для (μ, μ_s) може бути конвертовано в чотирьохкомпонентне рівняння дифузії для (μ, μ_s) .

Як уже зазначалося, врахування відмінності між двома спіновими станами подвоює порядок всіх матриць у методі НРФГ. Наприклад, якщо в 1D провіднику враховуються три атоми, то блокова матриця $[G^n]$ буде 6-го порядку:

$$\begin{matrix} 1_{up} & 1_{dn} & 2_{up} & 2_{dn} & 3_{up} & 3_{dn} \\ \begin{matrix} 1_{up} \\ 1_{dn} \end{matrix} & [N_1, \vec{S}_1] & & & & \\ & & \begin{matrix} 2_{up} \\ 2_{dn} \end{matrix} & [N_2, \vec{S}_2] & & \\ & & & & \begin{matrix} 3_{up} \\ 3_{dn} \end{matrix} & [N_3, \vec{S}_3] \end{matrix}, \quad (84)$$

і в ній діагональні блоки (2×2) відповідають чотирьохкомпонентному формату опису транспорту.

У гринівській матриці (84) не вистачає недіагональних елементів, що зв'язують сусідні і більш видалені один від одного атоми провідника. Як буде показано далі, ці елементи гринівської матриці породжують ефекти квантової інтерференції. Для деяких транспортних задач це не істотно, оскільки ці ефекти часто нівелюються процесами дефазування, опису чого буде присвячено нашу наступну статтю.

На завершення наголосімо: робота є наслідком прослуховування одним з нас (ЮОК) курсів лекцій «Fundamentals Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts і «Fundamentals Nanoelectronics», Part II: Quantum Models», прочитаного он-лайн в січні – квітні 2012 долі

проф. С. Датта (Supriyo Datta) і курсу лекцій «Nanoscale Transistors», прочитаного он-лайн в жовтні – листопаді 2012 долі проф. М. Лундстромом (Mark Lundstrom) в рамках ініціативи Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u]. В ній також використано напрацювання авторського курсу «Фізика конденсованого середовища», який інший автор (МВС) упродовж останніх років читає для магістрів радіофізичного факультету Київського національного університету імені Т. Г. Шевченка.

Один з авторів (МВС) вдячний НАН України й УНТЦ за підтримку, надану в рамках виконання проекту № 5716 «Розвіток графенових технологій і дослідження базованих на графені наноструктур для наноелектроніки й оптоелектроніки».

Автори щиро вдячні Н. Ю. Кругляк за допомогу в роботі над статтею і в підготовці її до друку.

Список використаної літератури

1. Кругляк Ю. О., Кругляк Н. Ю., Стріха М. В. Уроки наноелектроніки: Спінтроніка в концепції «знизу – вгору» // Sensor Electronics and Microsys. Techn. – 2013. – V. 10, N 2. – P. 5 – 37.
2. Кругляк Ю. О., Стріха М. В. Уроки наноелектроніки: Метод нерівноважних функцій Гріна: 1. Теорія // Sensor Electronics and Microsys. Techn. – 2013. – V. 10, N 3. – P. 22 – 35; 2. Модельні транспортні задачі, Ibid. – 2013. – V. 10, N 4. – P. 5 – 22.
3. Кругляк Ю. А., Прейсс Х., Яношек Р. Расчет электронных оболочек бензильного радикала неограниченным методом Хартри – Фока на гауссовом базисе // Ж. структ. хим. – 1971. – Т. 12, N 4. – С. 689 – 696.
4. Кругляк Ю. О., Прейсс Х., Яношек Р. Неємпіричний розрахунок електронної будови бензильного радикала // УФЖ. – 1970. – Т. 15, N 6. С. 977 – 985.
5. Kruglyak Yuri A., Ukrainsky I.I. Study

- of the electronic structure of alternant radicals by the DODS method // Intern. J. Quantum Chem. – 1970. – V. 4, N 1. – P. 57 – 72.
6. Украинский И. И., Кругляк Ю. А. Изучение электронной структуры альтернантных радикалов методом расщепленных орбиталей // УФЖ. – 1970. – Т. 15, N 7. С. 1068 – 1081.
 7. Рауба Э. И. Свойства полупроводников с петлей экстремумов. I. Циклотронный и комбинированный резонанс в магнитном поле, перпендикулярном плоскости петли // ФТТ. – 1960. – Т. 2, N 6. – С. 1224 – 1238; *Rashba E.I.* Properties of semiconductors with an extremum loop . 1. Cyclotron and combinational resonance in a magnetic field perpendicular to the plane of the loop // Sov. Phys. Solid. State. – 1960. – V. 2. – P. 1109.
 8. *Bychkov Yu. A., Rashba E. I.* Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers // J. Phys. C. – 1984. – V. 17, N 33. – P. 6039 – 6045.
 9. *Winkler Roland.* Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems. – Berlin: Springer. – 2003. – pp. 228.
 10. *Datta Supriyo.* Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport. – Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company. – 2012. – pp. 473.
 11. *Hanle Wilhelm.* Über magnetische Beeinflussung der Polarisation der Resonanzfluorescenz // Z. Physik. – 1924. – V. 30, N 1. – P. 93 – 105.
 12. *Van Dyck R., Stoltenberg J. Pengra D.* The Hanle Effect. – Washington: The University of Washington. – 2006.
 13. *Huang B., Jang Hyuk-Jae, Appelbaum Ian.* Geometric dephasing-limited Hanle effect in long distance lateral silicon spin transport devices // Appl. Phys. Lett. – 2008. – V. 93, N 16. – P. 162508/1 – 3.
 14. *Koo H. C., Kwon J. H., Eom J., Chang J., Han S. H., Johnson M.* Control of Spin Precession in a Spin-Injected Field Effect Transistor // Science. – 2009. – V. 325. – P. 1515.
 15. *Wunderlich J., Park Byong-Guk, Irvine Andrew C., Zárbo Liviu P., Rozkotová Eva, Nemeč Petr, Novák Vít, Sinova Jairo, Jungwirth Tomás.* Spin Hall Effect Transistor // Science. – 2010. – V. 330, N 6012. – P. 1801 – 1804.
 16. *Drune C., Roth A., Buhmann H., Hankiewicz E.M., Molenkamp L.W., Maciejko J., Xiao-Liang Q, Shou-Cheng Zhang.* Spin polarization of the quantum spin Hall edge states // Nature Physics. – 2012. – V. 8. – P. 485 – 490.
 17. *Jun-Won Rhim.* Quantum Spin Hall Effect in Graphene Nanoribbons: Effect of Edge Geometry // Phys. Rev. B. – 2011. – V. 84, N 3. – P. 035402/1 – 7.
 18. *Son-Hsien Chen.* Inverse quantum spin Hall effect generated by spin pumping from precessing magnetization into a graphene-based two-dimensional topological insulator // Phys. Rev B. – 2010. – V. 81. – P. 035428.
 19. *Xiao-Liang Qi, Shou-Cheng Zhang.* The Quantum Spin Hall Effect and Topological Insulators // Physics Today. – 2010. – V. 63, N 1. – P. 33.
 20. *Cangas R., Hidalgo M.A.* Rashba spin-orbit coupling in a two dimensional electron system under quantum Hall regime // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. – 2009. – V. 41, N 7. –P. 1306 – 1309.
 21. *Konig M., Buhmann H., Molenkamp L. W., Hughes T., Liu C. X., Qi X. L., Zhang S. C.* The Quantum Spin Hall Effect. Theory and Experiment // J. Phys. Soc. Japan. – 2008. – V. 77, N 3. – P. 031007.
 22. *Kane C.L., Mele E.J.* Quantum Spin Hall Effect in Graphene // Phys. Rev. Lett. – 2005. – V. 95. – P. 226801/1 – 4.
 23. *Jun-Won Rhim.* Quantum Spin Hall Effect in Graphene Nanoribbons: Effect

- of Edge Geometry // *Phys. Rev. B.* – 2011. – V. 84, N 3. – P. 035402/1 – 7.
24. Кругляк Ю. О., Стріха М. В. Уроки наноелектроніки: Ефект Холла і вимірювання електрохімічних потенціалів в концепції «знизу – вгору» // *Sensor Electronics and Microsys. Techn.* – 2014. – V. 11, N 1. – P. 5 – 30.
25. *Sih V., Lau W. H., Myers R. C., Horowitz V. R., Gossard A. C., Awschalom D. D.* Generating Spin Currents in Semiconductors with the Spin Hall Effect // *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – V. 97, N 9. – P. 096605/1 – 4.
26. Кругляк Ю. О., Кругляк Н. Ю., Стріха М. В. Уроки наноелектроніки: Виникнення струму, формулювання закону Ома і моди провідності в концепції «знизу – вгору» // *Sensor Electronics and Microsys. Techn.* – 2012. – V. 9, N 4. – P. 5 – 29.

Стаття надійшла до редакції 19.04.2013
Прийнята до публікації 23.01.2014