

Наноэлектроника: транспорт спинов в модели НРФГ и квантовый спиновый эффект Холла в концепции «снизу – вверх»

Ю.А. Крутляк¹, П.А. Кондратенко², Ю.М. Лопаткин³

¹ Одесский государственный экологический университет, ул. Львовская, 15, 65016 Одесса, Украина

² Национальный авиационный университет, пр. Космонавта Комарова, 1, 03058 Киев, Украина

³ Сумский государственный университет, ул. Римского-Корсакова, 2, 40007 Сумы, Украина

(Получено 31.08.2015; опубликовано online 24.12.2015)

В рамках концепции «снизу – вверх» наноэлектроники рассматривается спиновый транспорт в формализме 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: Нанозфизика, Наноэлектроника, Молекулярная электроника, Снизу-вверх, Транспорт спинов, Спиновый вентиль, Прецессия спина, Спиновые гамильтонианы, Зеемановское расщепление, Эффект Рашбы, Спиноры, Квантовый спиновый эффект Холла, Метод НРФГ.

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

Введение. Применение магнитных контактов для генерирования спинового тока в немагнитном канале проводимости даже за пределами протекания тока с использованием пробного магнитного контакта 2 с поляризацией \vec{P}_2 (рис. 1) рассматривалось в [1] на основе концепции о зарядовом химпотенциале μ и спиновом потенциале $\vec{\mu}_s$.

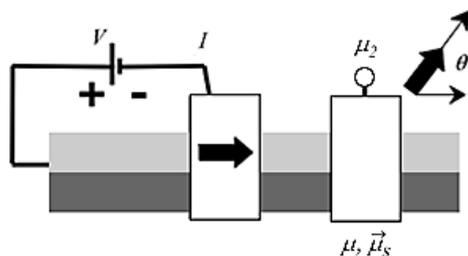


Рис. 1 – Регистрирующий контакт 2 в роли анализатора спинового тока

Связь между зарядовым и спиновым потенциалами дается простым выражением

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

в котором вектор поляризации совпадает с направлением регистрирующего контакта 2 относительно направления тока, а вектор спинового потенциала совпадает с направлением спиновой поляризации канала проводимости, которое по договоренности есть направление намагниченности инжектирующего контакта. Обычно рассматриваемые параллельная и антипараллельная ориентации намагниченности контактов являются частными случаями общего выражения (1). У нас пока нет надежных сведений, выполнялись ли на самом деле подобные эксперименты, т.е. спины инжектировались контак-

том с фиксированным направлением намагниченности, а разность потенциалов замерялась вращающимся магнитным контактом. Неоднократно, однако, экспериментально измерялась фактически аналогичная ситуация, когда оба магнитных контакта были фиксированы друг относительно друга, а спин электронов в проводнике вращался внешним магнитным полем.

Все подобные эффекты исключительно интересны и важны сами по себе. Мы же, однако, в этом сообщении займемся тем, что покажем как подобные спиновые эффекты учесть в методе неравновесных функций Грина (НРФГ) [2] применительно к модельным транспортным задачам наноэлектроники, в частности, к рассмотрению квантового спинового эффекта Холла в графене. Покажем также, как метод НРФГ приводит к результатам, соответствующим уравнению (1). Учет спина в методе НРФГ потребует введения матричных потенциалов формы (2×2) , которые, как окажется, могут быть выражены через зарядовые и спиновые потенциалы, фигурирующие в (1).

Спин электронов и поляризация фотонов во многом похожи, за исключением того, что понятие ортогональности для них имеет разный смысл. Для фотонов ортогональность поляризации реализуется при 90° , а для электронов – при 180° , что проявляется в колебании нелокального спинового потенциала в зависимости от угла между инжектирующим и регистрирующим магнитными контактами (рис. 2) [1].

Математически адекватное описание ортогональности электронных спинов требует спинорного исчисления, а не векторного как в случае поляризации фотонов. Вектор описывается тремя действительными компонентами вдоль осей x, y, z декартовой системы координат, а спинор описывается двумя комплексными компонентами вдоль направлений вверх (up) и вниз (dn):

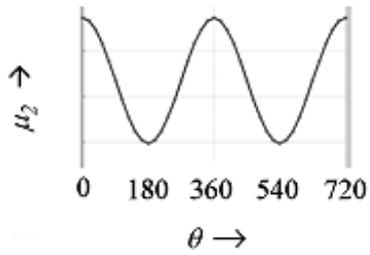


Рис. 2 – Колебания нелокального спинового потенциала в зависимости от угла между инжектирующим и регистрирующим магнитными контактами (рис. 1)

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

где здесь и далее, как и прежде [2], векторы-столбцы будем брать в фигурные скобки, а квадратные матрицы – в прямоугольные.

И тем не менее, спинор нужно воспринимать как объект, имеющий определенное направление как и вектор. Как же согласуется такое визуальное восприятие спинора с его двухкомпонентной структурой?

Спинор, ориентированный вдоль направления единичного вектора \hat{n} с проекциями на оси x, y, z

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

описывается двумя комплексными компонентами c и s :

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

Это совсем не очевидно, но позже мы покажем, что векторное (2) и спинорное (3) представления одного и того же абстрактного вращающегося объекта идентичны, точнее изоморфны. Пока что воспримем эквивалентность (2) и (3) как нечто заданное.

При учете спина в формализме НРФГ соответствующие уравнения, естественно, остаются прежними, а вот порядок всех матриц – гамильтониана $[H]$, контактных $[\Sigma]$, неравновесной функции Грина $[G^n]$, спектральной функции $[A]$ [2] удваивается за счет того, что электроны, находящиеся в одном и том же квантовом координатном состоянии, но с разными спинами, теперь описываются разными базисными функциями. Если раньше, когда не учитывалось различие между спинами двух электронов, находящихся в одном и том же квантовом состоянии, число базисных функций было равно N , то теперь число базисных функций равно $2N$. В квантовой химии этот подход известен как неограниченный (по спину) метод Хартри-Фока (Unrestricted Hartree-Fock) [3, 4] или иначе метод разных орбиталей

для разных спинов (Different Orbitals for Different Spins) [5] или расщепленных орбиталей [6].

В простейшем варианте описания канала проводимости без потери «физики», к чему мы всегда стремимся, в хюккелевском приближении, более известном в физической литературе как методе сильной связи в ортогональном базисе с учетом взаимодействия лишь соседних атомов, канал проводимости считается не чувствительным к спину, другими словами, одинаково взаимодействует с электронами, находящимися в разных спиновых состояниях. Гамильтониан $[H]$ проводника в хюккелевском приближении теперь запишется точно так же, как и в [2], только кулоновский ε и резонансный t интегралы пишутся теперь в виде матриц 2×2 $[\alpha]$ и $[\beta]$ (рис. 3), а именно:

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

где $[I]$ – единичная матрица формы 2×2 . Фактически налицо два расщепленных гамильтониана, что не несет какой-либо новой «физики».

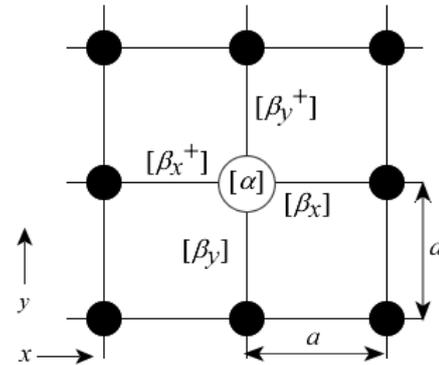


Рис. 3 – Однородная 2D решетка с параметром решетки a , в которой каждый атом описывается кулоновским $[\alpha]$ и резонансными $[\beta]$ интегралами в виде матриц 2×2

Аналогично записываются матрицы собственной энергии $[\Sigma]$ контактов, которые в этом приближении одинаково реагируют на разные спины, перемножая их обычные выражения [2] на единичную матрицу $[I_2]$. В этом приближении результат ожидается тривиальным в том смысле, что мы как бы учитываем лишь спины одного сорта, и лишь в конце вычислений все результаты просто удваиваем.

Все спиновые эффекты, рассмотренные, например, в [1], возникают либо как результат учета нетривиальных контактов, чувствительных к спину и описываемых соответствующими контактными матрицами $[\Sigma]$, либо канал проводимости чувствителен к спину и описывается соответствующим гамильтонианом $[H]$, либо имеют место оба обстоятельства.

Сейчас же пока рассмотрим несколько модельных транспортных задач методом НРФГ с учетом спина и начнем с простой одноуровневой модели спинового вентиля. С вычислительной точки зрения вопрос лишь в том, как записать гамильтониан и контактные матрицы, а далее ход вычислений стандартный [2].

Одноуровневый спиновый вентиль. Как известно [1], спиновый вентиль обнаруживает различную проводимость G_P или G_{AP} в зависимости от того, намагниченность обоих контактов параллельна P или антипараллельна AP . Магнитосопротивление

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

выражается через поляризацию P магнитных контактов

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

которая в свою очередь определяется граничными сопротивлениями вентилья

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

при условии равенства нулю сопротивления канала проводимости.

В режиме магнитного туннельного перехода (МТП) в выражении для магнитосопротивления диэлектрического проводника появляется дополнительная двойка [1]:

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

появление которой можно понять из физики туннельных проводников, согласно которой результирующее сопротивление двух последовательно соединенных проводников пропорционально их произведению, а не сумме.

Мы сейчас получим этот же результат, включая множитель двойку, применив метод НРФГ к одноуровневому вентилью в предположении, что равновесный электрохимический потенциал μ_0 лежит на много kT ниже энергии ε диэлектрического проводника (рис. 4).

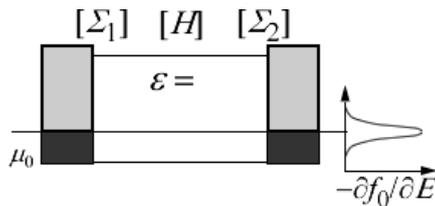


Рис. 4 – Модель равновесного диэлектрического одноуровневого проводника

Согласно квантовой модели одноуровневого однородного 1D резистора без учета спина [2] гамильтониан и контактные матрицы есть просто числа (рис. 5).

Собственные энергии контактов

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

$$\gamma_2 = \hbar v_2 \quad (9b)$$

пропорциональны скоростям, с которыми электроны покидают проводник в направлении контактов [2].

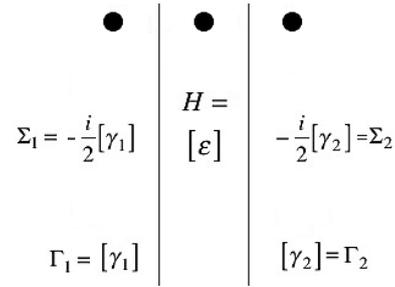


Рис. 5 – Однородный одноуровневый 1D проводник без учета спина

При учете спина число базисных функций удваивается, вместо чисел появляются матрицы 2-го порядка: гамильтониан, однако, есть просто диагональная матрица, а вот контактные матрицы различные для спинов «вверх» u и спинов «вниз» d (рис. 6).

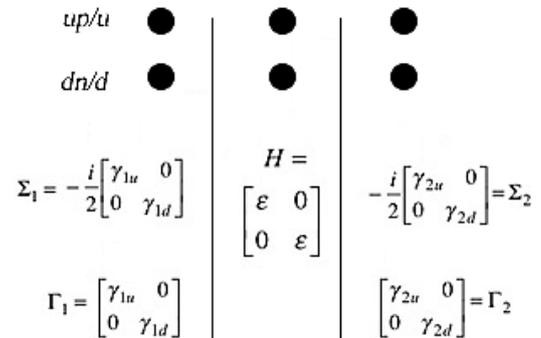


Рис. 6 – Однородный одноуровневый 1D проводник с учетом спина (спиновый вентиль)

Для спинового вентилья сразу получаем запаздывающую функцию Грина [2]

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

и далее коэффициент прохождения

$$T = T_r[G_1 G^R G_2 G^A] = \frac{\gamma_{1u} \gamma_{2u}}{(E - \varepsilon)^2 + \left(\frac{\gamma_{1u} + \gamma_{2u}}{2}\right)^2} + \frac{\gamma_{1d} \gamma_{2d}}{(E - \varepsilon)^2 + \left(\frac{\gamma_{1d} + \gamma_{2d}}{2}\right)^2}. \quad (11)$$

Нужно помнить, что сейчас мы рассматриваем «не чувствительный к спину» канал проводимости.

Для параллельной конфигурации намагниченности контактов P оба контакта можно считать одинаковыми, так что ($\alpha > \beta$)

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

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

тогда как для антипараллельной конфигурации AP второй контакт опрокидывает спин по сравнению с параллельной конфигурацией P , а именно:

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

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

Подставляя (12а, б) в (8), получаем коэффициент P -прохождения

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

а (13а, б) дает коэффициент AP -прохождения

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

Измеряемая проводимость определяется усредненным значением коэффициента прохождения в области энергий нескольких kT вокруг значения μ_0 . Мы сейчас рассматриваем диэлектрический проводник (рис. 4). Предполагая

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

Получаем

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

и

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

а для магнитосопротивления получаем искомую формулу (8)

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

с поляризацией

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

Точно так же можно получить формулу для магнитосопротивления (6) металлического немагнитного проводника, если предположить, что химпотенциал μ_0 лежит вблизи уровня с энергией ε , а $kT \gg \alpha, \beta$.

Вращение магнитных контактов. В спиновом вентиле в режиме AP второй контакт опрокидывает спины по сравнению с вентилем в режиме P , так что

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

Как записать матрицу Γ для контакта, ориентированного в произвольном направлении единичного вектора \hat{n} через его проекции (2) вдоль осей x, y, z ? Окончательная формула имеет вид

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

где I – единичная матрица 2-го порядка. Формула сразу не очевидна, но мы скоро ее получим. А пока что убедитесь, что эта формула содержит частные случаи параллельной и антипараллельной ориентации намагниченностей контактов, соответственно:

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

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

Убедиться в справедливости общей формулы (20) можно путем следующего наблюдения. Матрица

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

описывает магнитный контакт, ориентированный вдоль произвольно направленного единичного вектора \hat{n} , если в качестве оси отсчета выбрать направления $+\hat{n}$ и $-\hat{n}$ вместо стандартных декартовых полуосей $+\hat{z}$ и $-\hat{z}$. Вернуться назад к стандартному базису $\pm\hat{z}$ можно путем унитарного преобразования $\Gamma = V \tilde{\Gamma} V^+$ матрицы (22):

$$\begin{matrix} \hat{n} & -\hat{n} & & \hat{z} & -\hat{z} \\ \hat{z} & \begin{bmatrix} c & -s^* \\ s & c^* \end{bmatrix} & \hat{n} & \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{bmatrix} & \hat{n} & \begin{bmatrix} c^* & s^* \\ -s & c \end{bmatrix} \\ & V & & & & V^+ \end{matrix}, \quad (23)$$

где колонки матрицы унитарного преобразования $[V]$ есть компоненты спинора c и s (3) вдоль направлений $\pm\hat{n}$. Первая колонка матрицы V соответствует направлению $+\hat{n}$, а вторая колонка соответствует направлению $-\hat{n}$ с компонентами спинора $-s^*$ и c^* , которые получаются из (3) путем преобразования углов

$$\theta \rightarrow \pi - \theta \quad \text{и} \quad \phi \rightarrow \pi + \phi \quad (24)$$

и удаления из обеих компонент общего фазового множителя.

Перемножение трех матриц в (23) дает

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

Используя определение компонент спинора c и s (3) и тригонометрических равенств

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

$$\text{и } 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} = \sin \theta \quad (26)$$

перепишем (25) в виде

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

что приводит к искомой формуле (20), если воспользоваться выражениями (2) для компонент единичного вектора \hat{n} вдоль осей x, y, z .

Если вектор поляризации

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

определить его величиной (18) и единичным вектором \hat{n} , то уравнение (20) можно переписать в виде

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

или же еще иначе

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

через широко используемые в квантовой теории спиновые матрицы Паули

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

В конечном итоге уравнение (29) можно переписать компактно в виде

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

Подобным же образом можно компактно переписать контактные матрицы собственной энергии. Пусть, например, в базисе $\pm \hat{n}$

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

тогда в базисе $\pm \hat{z}$ имеем:

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

Спиновые гамильтонианы. Перейдем к обсуждению спин-зависимых гамильтонианов и рассмотрим учет классического спин-орбитального зеемановского расщепления и гамильтониан Рашбы [7, 8].

Гамильтониан с зеемановским расщеплением. Пусть направление магнитного поля \vec{B} определяется единичным вектором \hat{n} . Тогда гамильтониан в базисе $\pm \hat{n}$ имеет вид

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

где μ_{el} – магнитный момент электрона. Уровень с положительным спином смещается вверх на величину $\mu_{el} B$, а с отрицательным спином смещается вниз на эту же величину (зеемановское расщепление).

В базисе $\pm \hat{z}$ имеем:

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

Добавить еще нужно спин-независимую часть гамильтониана. Для случая параболической дисперсии имеем

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

а для однородной 2D решетки в хюккелевском приближении с резонансным и кулоновским интегралами [2]

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

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

гамильтониан имеет вид:

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

где a – параметр решетки. Для такой решетки (рис. 3) кулоновская и резонансная матрицы имеют вид:

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

По сравнению со спин-независимым гамильтонианом (4) изменяется только кулоновская матрица.

Гамильтониан Рашбы. Более полный учет спин-орбитального взаимодействия дает гамильтониан

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

где η – параметр Рашбы [7-9]. Этот гамильтониан имеет релятивистское происхождение, обусловленные им эффекты широко наблюдаются экспериментально и надежно интерпретированы [9]. Нас же сейчас интересует только одно – как учесть взаимодействие Рашбы для нашей однородной 2D решетки в хюккелевском приближении. С этой целью аппроксимируем (42) синусами

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

и запишем их удобства ради через экспоненты

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

сомножители перед которыми

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

обеспечивают правильное дисперсионное соотношение (37).

Учтем спин-независимую часть гамильтониана на 2D решетки (4), а также постоянное магнитное поле (41) через зеемановское расщепление. Окончательно кулоновская и резонансная матрицы однородной 2D решетки с учетом зеемановского спин-орбитального взаимодействия и взаимодействия Рашбы имеют вид:

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

Обратим внимание на то, что взаимодействие Рашбы учитывается через параметр Рашбы и матрицы Паули в резонансных матрицах 2D решетки, а зеемановское взаимодействие – в кулоновских матрицах.

Спиноры и векторы. Мы обычно визуально представляем себе спин как вращающийся объект, ориентированный в определенном направлении. Он описывается двумя комплексными компонентами спинора (3), а вектор в этом же направлении задается тремя действительными проекциями (2) на оси декартовой системы координат. Чтобы почувствовать связь между двумя представлениями одного и того же направленного объекта – векторным и спинорным полезно рассмотреть прецессию спина в магнитном поле в обоих представлениях.

Рассмотрим одноуровневый резистор с $\varepsilon = 0$ в магнитном поле, направленном вдоль оси z . Двухкомпонентное уравнение Шредингера

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

где справа стоит спиновая матрица σ_z , фактически есть два дифференциальных уравнения с очевидными решениями

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

где частота прецессии

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

Пусть спин электрона в начальный момент времени $t = 0$ направлен вдоль единичного вектора \hat{n} под углами θ и ϕ относительно выбранной системы отсчета (рис. 7).

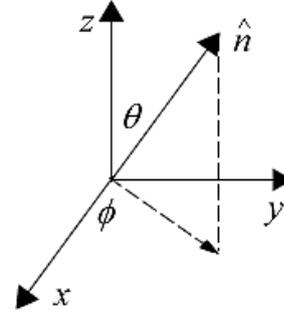


Рис. 7 – К прецессии спина, направленного вдоль единичного вектора \hat{n} , по углу ϕ

В этот начальный момент времени его волновые функции

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

а в последующие моменты времени

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

что соответствует вращению спина вокруг оси z под фиксированным к ней углом θ , тогда как угол ϕ растет линейно со временем:

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

Согласно (2), для проекций единичного вектора имеем:

$$\begin{aligned} n_x &= \sin \theta \cos \phi(t), \\ n_y &= \sin \theta \sin \phi(t), \\ n_z &= \cos \theta, \end{aligned} \quad (53)$$

откуда с использованием (52) получаем

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

или в матричном виде для всех трех компонентов единичного вектора

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

где квадратная матрица, обозначаемая обычно

R_z , есть матрица вращения единичного вектора вокруг оси z .

Сравните полученное уравнение (55) с уравнением Шредингера (47) в спинорном представлении, переписанном через частоту прецессии (49):

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

где фигурирует матрица Паули σ_z .

Пусть мы хотим описать прецессию спина электрона в магнитном поле, направленном вдоль оси x . Для этого в уравнении (55) достаточно лишь выполнить циклическую перестановку переменных: $x \rightarrow y, y \rightarrow z, z \rightarrow x$ и мы получим уравнение с матрицей вращения R_x :

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

если в уравнении (55) – 1 стояла на пересечении строки x и колонки y , то в (57) она окажется на пересечении строки y и колонки z .

Сразу не очевидно как именно с той же целью модифицировать уравнение (56). Правильный ответ таков:

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

где фигурирует матрица Паули σ_x .

Уравнения (55) и (56), как и уравнения (57) и (58), описывают один и тот же физический процесс, а именно, вращение спина электрона в магнитном поле, направленном вдоль оси z , соответственно вдоль оси x , в первом случае – через три действительных компоненты, а во втором – через две комплексных. Циклическая перестановка в противоположном направлении даст нам матрицу вращений R_y , а соответствующая ей спиновая матрица σ_y приведена в сводке (31).

Что делает матрицы вращения и спиновые матрицы изоморфными, позволяя им описывать один и тот же физический процесс? Ответ состоит в том, что у этих матриц одинаковые коммутационные соотношения.

Легко убедиться, что матрицы вращения

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

$$R_z = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

подчиняются следующим коммутационным соотношениям:

$$\begin{aligned} [R_x, R_y] &\equiv R_x R_y - R_y R_x = R_z \\ [R_y, R_z] &\equiv R_y R_z - R_z R_y = R_x \\ [R_z, R_x] &\equiv R_z R_x - R_x R_z = R_y \end{aligned} \quad (60)$$

где слева стоят стандартные обозначения соответствующих коммутаторов.

Спиновые матрицы Паули подчиняются таким же коммутационным соотношениям, если R формально заменить на $\sigma/2i$:

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

Заметим, что в стандартных учебниках квантовой механики спиновые матрицы Паули обычно вводятся постулативно.

Какие должны быть компоненты у спинора, направленного вдоль оси z ? Поскольку спинор не изменяется при вращении вокруг оси z , то его компонентами должны быть собственные векторы спиновой матрицы σ_z в сводке (31):

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

представляющие действительно спин «вверх» или спин «вниз» вдоль оси z .

Если же мы хотим узнать компоненты спинора, направленного вдоль оси x , то нужно найти собственные векторы спиновой матрицы σ_x , какими являются векторы

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

представляющие направление спина «вверх» вдоль положительной полуоси или спина «вниз» вдоль отрицательной полуоси оси x .

В общем случае, если мы хотим найти компоненты спинора, направленного вдоль произвольно ориентированного единичного вектора \hat{n} (2), нужно искать собственные векторы матрицы

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

обозначенные ранее как

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

первый из которых соответствует ориентации спина вдоль положительного направления вектора \hat{n} и в явном виде выписан в (3).

Прецессия спина. Мы уже знаем, как составить гамильтониан H и контактные матрицы Σ , в том числе и с учетом нетривиальных спиновых

эффектов, и готовы просчитать численные модели вычисляя электронную плотность через неравновесную функцию Грина G^n , плотность состояний через спектральную функцию A и ток [2].

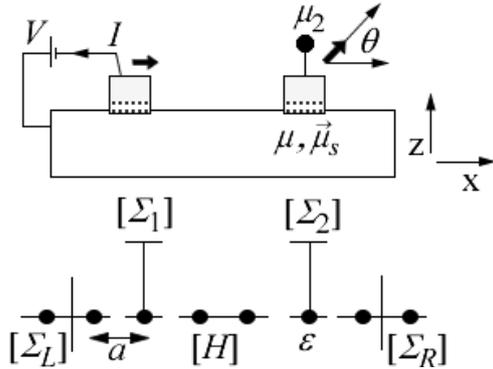


Рис. 8 – К измерению и расчету методом НРФГ спинового потенциала в рамках четырехтерминальной модели однородного 1D проводника с двумя магнитными зондами, описываемыми контактными матрицами Σ_1 и Σ_2

Сначала рассчитаем потенциал на 2-ом зонде, описываемом контактной матрицей Σ_2 , однородного 1D проводника (рис. 8) методом НРФГ с простым гамильтонианом без учета спиновых эффектов в зависимости от угла наклона θ магнитного зонда 2 по отношению к линейному проводнику (плавающий контакт). Результаты расчета для различных значений поляризации (7) P_2 2-го зонда относительно 1-го представлены на рис. 9.

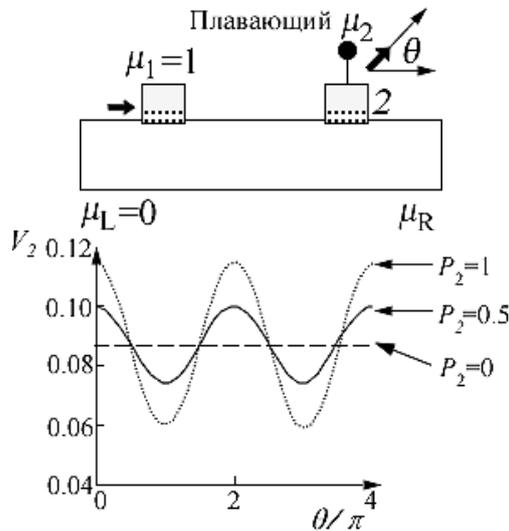


Рис. 9 – Изменение потенциала 2-го зонда относительно 1-го в зависимости от угла наклона, нормированного на 180° , при разных значениях взаимной поляризации зондов [10]

Полностью подтверждается расчетом методом НРФГ формула (1): измеряемый потенциал осциллирует в зависимости от угла наклона одного магнитного контакта относительно другого. При нулевой поляризации контактов измеряемый потенциал остается постоянным.

Как уже упоминалось вначале, нет сведений, что подобные эксперименты с плавающим магнитным контактом действительно проводились. Проводились, однако, эксперименты с вращени-

ем спина электронов в канале проводимости при фиксированной геометрии взаимного расположения магнитных контактов.

Один из широко распространенных методов заключается в приложении внешнего магнитного поля, что приводит к прецессии спина относительно направления магнитного поля с циклической частотой ω (49). Это означает, что спиновый потенциал μ_2 в точке, где находится пробный зонд 2, повернется на угол $\omega\tau$, где τ есть время прохождения электроном пути от инжектирующего контакта до пробного зонда 2. Записав $\tau = L/v$, из уравнений (1) и (49) имеем:

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

Можно ожидать появления осциллирующего потенциала на зонде 2, зависящего от величины приложенного магнитного поля. Однако, обычно наблюдают не баллистический транспорт, и имеет место большой разброс в значениях времен τ , в результате чего потенциал, усредненный по всем временам τ зануляется. Типичные эксперименты вместо осциллирующего сигнала, зависящего от магнитного поля, показывают просто уменьшение потенциала от значения $P_2 \mu_s$ вплоть до нуля (эффект Хэнли [11, 12]). И тем не менее, осцилляции в эффекте Хэнли наблюдать удалось за счет уменьшения разброса времен τ настолько, что разброс оказался намного меньше среднего значения времени τ [13].

Другим подходом к вращению спина электрона может служить эффект Рашбы в проводниках с сильным спин-орбитальным взаимодействием. Сейчас хорошо установлено на примере многих полупроводников, что электрическое поле вдоль оси z (рис. 8) ведет к появлению эффективного магнитного поля, зависящего от импульса электрона. В этом можно убедиться, сравнивая гамильтониан с учетом магнитного поля (36) с гамильтонианом Рашбы (42), который, удобства ради, перепишем в виде

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

откуда для эффективного магнитного поля, обязанного взаимодействию Рашбы, получаем

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

так что согласно (65) можно ожидать осциллирующий потенциал вида

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

с периодом

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

Этот вывод находится в неплохом согласии с численными результатами, полученными методом НРФГ для энергии, соответствующей $ka = \pi/3$

при расстоянии между инжектором и детектором $L = 40a$ (рис. 10).

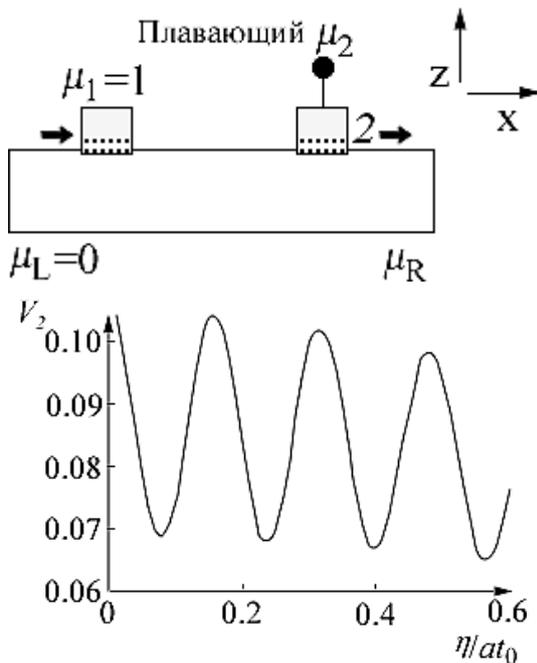


Рис. 10 – В проводниках с большим значением коэффициента Рашбы η потенциал зонда 2 осциллирует, если намагниченности обоих зондов направлены вдоль проводника (ось x); осцилляции исчезают, если намагниченности направлены перпендикулярно к проводнику (ось z) [10]

В этой модели электроны, движущиеся вдоль оси x в ее положительном направлении, испытывают влияние эффективного магнитного поля вдоль оси y . Поскольку инжектируемые электроны имеют спиновый потенциал μ_s , направленный вдоль намагниченности зондов 1 и 2 (ось x), спиновый потенциал должен вращаться. Осцилляции потенциала исчезают, если намагниченности обоих зондов направлены вдоль оси y . Этот эффект подтверждается экспериментально [14, 15].

Квантовый спиновый эффект Холла. Транспорт поляризованных спинов в немагнитных материалах, таких как медь, изучен достаточно полно и физические основы в целом ясны. Этого нельзя сказать о диффузии спинов в материалах с сильным спин-орбитальным взаимодействием.

В последнее десятилетие пристальное внимание уделялось квантовому спиновому эффекту Холла (КСХ). В обычном классическом эффекте Холла электроны, движущиеся от истока к стоку вдоль оси x , под действием магнитного поля, направленного перпендикулярно поверхности 2D проводника, вдоль оси z , закручиваются таким образом, что создается поперечная разность потенциалов вдоль оси y (рис. 11) [24].

Эффект КСХ можно понять в рамках модели, согласно которой эффективное магнитное поле закручивает спины, поляризованные вдоль осей $+z$ и $-z$, в противоположных направлениях, тогда как в классическом эффекте Холла оба сорта спинов закручиваются в одном и том же направлении.

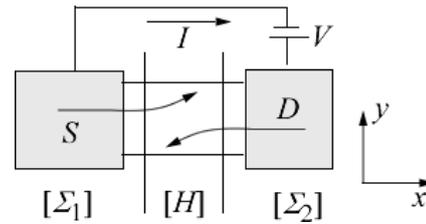


Рис. 11 – К выбору системы координат при обсуждении эффекта КСХ

Поскольку электроны в проводниках с сильным спин-орбитальным взаимодействием испытывают действие эффективного магнитного поля, естественно задать вопрос, можно ли наблюдать холловский эффект в отсутствие внешнего магнитного поля, а лишь под влиянием внутреннего эффективного магнитного поля.

Ответ оказывается положительным, но подобное явление с закручиванием спинов, поляризованных вдоль $+z$ и $-z$, в противоположных направлениях представляется весьма деликатным явлением, поскольку заряды не накапливаются в поперечном направлении и холловское напряжение зануляется. Однако, спиновый потенциал может быть измерен магнитными контактами.

В первых экспериментах накопление спинов противоположной поляризации в поперечном направлении (КСХ) обнаружили в массивных полупроводниках оптическими зондами [25], а недавно КСХ этого типа измерили магнитными зондами в нанопроводниках [15].

Транспортная модель на основе метода НРФГ [2] адекватно описывает КСХ, о чем свидетельствуют результаты расчета однородного 2D проводника (рис. 10) с коэффициентом Рашбы $\eta = 1 \cdot 10^{-11}$ эВ·м с энергией $E = 0.05t_0$ и переменной ширине W (рис. 12). Для вычленения z -компоненты спиновой плотности из гриновской функции G^n использовалось уравнение (65).

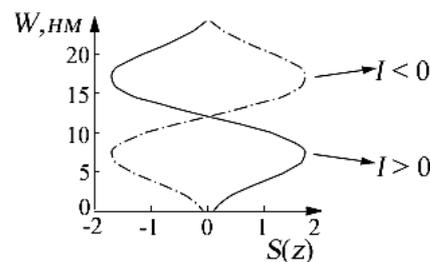


Рис. 12 – Квантовый спиновый эффект Холла. Численные результаты, полученные методом НРФГ, показывают накопление $+z$ -спинов и $-z$ -спинов $S(z)$ (в произвольных единицах) на противоположных сторонах 2D проводника, при этом изменение направления тока вдоль проводника на противоположное приводит к обращению накапливаемых спинов [10]

В последние несколько лет значительно возрос интерес к транспорту спинов в материалах с сильным спин-орбитальным взаимодействием, особенно в топологических диэлектриках [1], которые обнаруживают совсем удивительные проявления КСХ [25].

Метод НРФГ и диффузионный транспорт.

В заключение обсудим связь метода НРФГ с диффузионным подходом для баллистического транспорта, развитым в [1]. Мы уже знаем, что численные результаты, полученные выше методом НРФГ, качественно верно описываются уравнением (1), сформулированным в [1] из эвристических соображений. Однако, причина этого согласия не очевидна, тем более что в методе НРФГ для моделирования транспорта спинов первично используются двухкомпонентные комплексные спиноры, а спиновый потенциал $\vec{\mu}_s$ описывается трехкомпонентным действительным вектором.

Выше уже подчеркивалась связь между единичным вектором \hat{n} , вдоль которого направлен спин, и спиновыми волновыми функциями ψ_{up} и ψ_{dn} . Чтобы установить связь между уравнением (1) и методом НРФГ для транспорта спинов, нужно рассматривать такие величины как гриновская функция $G^n \sim \psi\psi^+$, а не просто волновая функция ψ , поскольку метод НРФГ исходно формулируется через G^n . Не говоря уже о том, что именно гриновская функция G^n , а не волновая функция, является наблюдаемой величиной, пригодной для установления связи с экспериментальными результатами.

Электронная плотность в матричном представлении. Мы уже не раз использовали электронную плотность в матричной записи $[G^n]$, диагональные элементы которой дают нам число электронов в данной точке проводника [2]. С учетом спина матрица $[G^n]$ в данной точке есть матрица (2 x 2) и она дает нам число электронов или суммарный спин \vec{S} . Убедиться в этом можно рассматривая электрон со спином, направленным вдоль произвольного направления \hat{n} (рис. 7) и описываемым волновой функцией в спинорном представлении (50), так что соответствующая матрица электронной плотности $[G^n]$ формы (2 x 2) дается выражением

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

или иначе, используя (2) и (26),

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

Суммируя вклады в $\psi\psi^+$ от всех N электронов, для матрицы гриновской функции окончательно получим

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

Вычислив матрицу $[G^n]$, полное число электронов и суммарный спин можно найти из

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

что следует из равенства нулю следа спиновых матриц Паули (31) и из следующих свойств спиновых матриц, вытекающих из (31) и (61), а именно:

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

В итоге, вся информация, содержащаяся в эрмитовой матрице $[G^n]$, может быть представлена четырьмя действительными величинами в данной точке проводника – полным числом электронов N и тремя действительными компонентами вектора полного спина \vec{S} , которые можно извлечь из (73).

Измерение спинового потенциала. Мы подошли к установлению связи между уравнением (1) и методом НРФГ для транспорта спинов. Скалярную версию уравнения (1) (ур-е (53) в [1]) мы получили в рамках полуклассической модели вычисления токов на детектирующем зонде через его граничные проводимости для спинов противоположной направленности (рис. 12 в [1]), полагая зондовый ток нулевым. Теперь мы получим полное уравнение (1) в векторной форме, опираясь на метод НРФГ (рис. 13).

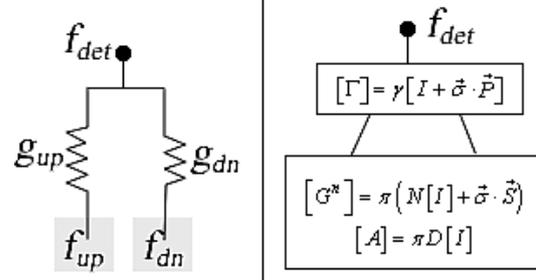


Рис. 13 – Моделирование детектирующего зонда в полуклассической модели и в методе НРФГ

Для тока имеем четвертое уравнение в формализме НРФГ (ур-е (16) в [2])

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

так что при нулевом токе на детектирующем зонде (рис. 13)

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

Подставляя гриновскую функцию G^n (72), спектральную функцию A выражая через спин-независимую плотность состояний D

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

описывая связь детектирующего зонда с каналом проводимости согласно (32)

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

и учитывая нулевой след у всех матриц Паули, окончательно получим:

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

Учитывая тождество для двух произвольных векторов \vec{P} и $\vec{B} \equiv \vec{S}/D$

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

имеем

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

и окончательно, используя равенство нулю следа матриц Паули, вместо (79) имеем:

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

где зарядовая заселенность f и спиновая f_s определены таким образом, чтобы их максимальные значения не превышали единицы. Чтобы перейти от заселенностей к химпотенциалам и получить искомое уравнение (1), воспользуемся линейной зависимостью между ними в режиме линейного отклика (ур-е (21) в [26]).

Четырехкомпонентный транспорт. Подчеркнем еще раз, что квантовый подход естественным образом ведет к комплексной матрице $[G^n]$ формы (2×2) в каждой точке проводника, и вместе с тем гриновскую матрицу всегда можно переписать через четыре действительных и физически понятных числа таких как (N, \vec{S}) или $(\mu, \vec{\mu}_s)$.

Мы уже видели в [1] как много различных явлений спинового транспорта можно описать с помощью уравнения Вале-Ферта (ур-е (23) в [1]) вместе с моделью спин-зависимых пограничных сопротивлений. Однако, этот подход [1] был ограничен применением к задачам транспорта спинов только в одном направлении (ось z). Сейчас же, имея полную версию метода НРФГ, можно рассматривать транспорт спинов, ориентированных в любом произвольном направлении, хотя подобные расчеты и требуют больших вычислительных ресурсов.

Транслируя матрицу $[G^n]$ в четырехкомпонентный формат (N, \vec{S}) спин-зависимые граничные проводимости [1] могут быть замещены на

матрицу проводимости G формы (4×4) , которая свяжет четыре компоненты потенциалов с четырьмя компонентами тока:

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

Аналогичным образом, двухкомпонентное уравнение Вале-Ферта для (μ, μ_s) может быть конвертировано в четырехкомпонентное уравнение диффузии для $(\mu, \vec{\mu}_s)$.

Как уже упоминалось выше, учет различия между двумя состояниями спина удваивает порядок всех матриц в методе НРФГ. Например, если в 1D проводнике учитываются три атома, то блочная матрица $[G^n]$ будет 6-го порядка:

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

в которой диагональные блоки (2×2) соответствуют четырехкомпонентному формату описания транспорта.

Чего не хватает в гриновской матрице (84), так это недиагональных элементов, связывающих соседние и более удаленные друг от друга атомы проводника. Как будет показано далее, эти элементы гриновской матрицы порождают эффекты квантовой интерференции. Для некоторых транспортных задач это не существенно, поскольку эти эффекты часто нивелируются процессами дефазировки, чему будет посвящено следующее сообщение.

Настоящая работа явилась результатом посещения одним из нас (ЮАК) курсов лекций «Fundamentals of Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts» и «Fundamentals of Nanoelectronics, Part II: Quantum Models», прочитанных он-лайн в январе – апреле 2012 года проф. С.Датта (Supriyo Datta) в рамках инициативы Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u].

Благодарность. Авторы выражают благодарность проф. Supriya Datta за проявленный интерес к работе и поддержку её публикации.

Наноелектроніка: транспорт спінів в моделі НРФГ і квантовий спіновий ефект Холла в концепції «знизу - вгору»

Ю.О. Кругляк¹, П.О. Кондратенко², Ю.М. Лопаткін³

¹ Одеський державний екологічний університет, вул. Львівська, 15, 65016 Одеса, Україна

² Національний авіаційний університет, пр. Космонавта Комарова, 1, 03058 Київ, Україна

³ Сумський державний університет, вул. Римського-Корсакова, 2, 40007 Суми, Україна

В рамках концепції «знизу - догори» наноелектроніки розглядається спіновий транспорт у формалізмі нерівноважних функцій Гріна (НРФГ) у спінорному поданні, зокрема, обговорюються спіновий вентиль, обертання магнітних контактів, прецесія спіна і обертання спінів, роль спінових гамільтоніанів Зеємана і Рашба, квантовий спіновий ефект Холла, обчислення спінового потенціалу, чотирьохкомпонентний формат опису транспорту.

Ключові слова: Нанofізика, Наноелектроніка, Молекулярна електроніка, Знизу-вгору, Транспорт спінів, Спіновий вентиль, Прецесія спіна, Спінові гамільтоніани, Зеємановське розщеплення, Ефект Рашба, Спінори, Квантовий спіновий ефект Холла, Метод НРФГ

Nanoelectronics. Spin transport in the NEGF method and quantum spin Hall effect by «bottom-up» approach

Yu.A. Kruglyak¹, P.A. Kondratenko², Yu.M. Lopatkin³

¹ Odessa State Environmental University 15, Lvivska st., 65016 Odessa, Ukraine

² National Aviation University, 1, Komarov ave., 03058 Kyiv, Ukraine

³ Sumy State University, 2, Rimskiy-Korsakov st., 40007 Sumy, Ukraine

Spin transport with the 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 the spin potential, and four-component description of transport are discussed in the frame of the «bottom – up» approach of modern nanoelectronics.

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.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Yu.A. Kruglyak, P.A. Kondratenko, Yu.M. Lopatkin, *J. Nano- Electron. Phys.* **6** No 4, 04042 (2014).
2. Yu.O. Kruglyak, M.V. Strikha, *Sensor Electron. Microsyst. Tech.* **10** No 3, 22 (2013).
3. Ю.А. Кругляк, Х. Прейсс, Р. Яношек, *Ж. структ. хим.* **12** № 4, 689 (1971) (Yu.A. Kruglyak, Kh. Preiss, R. Yanoshek, *Zh. Strukt. Khim.* **12** No 4, 689 (1971)).
4. Ю.О. Кругляк, Х. Прейсс, Р. Яношек, *Укр. фіз. журн.* **15** № 6, 977 (1970) (Yu.A. Kruglyak, Kh. Preiss, R. Yanoshek, *Ukr. J. Phys.* **15** No 6, 977 (1970)).
5. Yu.A. Kruglyak, I.I. Ukrainsky, *Intern. J. Quantum Chem.* **4** No 1, 57 (1970).
6. І.І. Український, Ю.А. Кругляк, *Укр. фіз. журн.* **15** № 7, 1068 (1970) (I.I. Ukrainsky, Yu.A. Kruglyak, *Ukr. J. Phys.* **15** No 7, 1068 (1970)).
7. Э.И. Рашба, *ФТТ* **2** № 6, 1224 (1960). (E.I. Rashba, *Phys. Solid. State* **2**, 1109 (1960)).
8. Yu.A. Bychkov, E.I. Rashba, *J. Phys. C* **17**, 6039 (1984).
9. Roland Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems* (Berlin: Springer: 2003).
10. Supriyo Datta, *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport* (Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2012).
11. Wilhelm Hanle, *Z. Physik* **30** No 1, 93 (1924).
12. R. Van Dyck, J. Stoltenberg, D. Pengra, *The Hanle Effect* (Washington: The University of Washington: 2006).
13. B. Huang, Hyuk-Jae Jang, Ian Appelbaum, *Appl. Phys. Lett.* **93**, 162508 (2008).
14. H.C. Koo, J.H. Kwon, J. Eom, J. Chang, S.H. Han, M. Johnson, *Science* **325**, 1515 (2009).
15. J. Wunderlich, Byong-Guk Park, Andrew C. Irvine, Liviu P. Zárbo, Eva Rozkotová, Petr Nemeč, Vít Novák, Jairo Sinova, Tomáš Jungwirth, *Science* **330**, 1801 (2010).
16. C. Drune, A. Roth, H. Buhmann, E.M. Hankiewicz, L.W. Molenkamp, J. Maciejko, Q. Xiao-Liang, Zhang Shou-Cheng, *Nat. Phys.* **8**, 485 (2012).
17. Rhim Jun-Won, *Phys. Rev. B* **84**, 035402 (2011).
18. Chen Son-Hsien, *Phys. Rev. B* **81**, 035428 (2010).
19. Oi Xiao-Liang, Zhang Shou-Cheng, *Phys. Today* **63**, 33 (2010).
20. R. Cangas, M.A. Hidalgo, *Physica E* **41**, 1306 (2009).
21. M. König, H. Buhmann, L.W. Molenkamp, T. Hughes, C.X. Liu, X.L. Qi, S.C. Zhang, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 031007 (2008).
22. C.L. Kane, E.J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005).
23. Rhim Jun-Won, *Phys. Rev. B* **84**, 035402 (2011).
24. Yu.A. Kruglyak, P.A. Kondratenko, Yu.M. Lopatkin, *J. Nano- Electron. Phys.* **7** No 2, 02031 (2015).
25. V. Sih, W.H. Lau, R.C. Myers, V.R. Horowitz, A.C. Gossard, D.D. Awschalom, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 096605 (2006).
26. Yu.A. Kruglyak, P.A. Kondratenko, Yu.M. Lopatkin, *J. Nano- Electron. Phys.* **5** No 1, 01023 (2013).