UNIWERSYTET IM. ADAMA MICKIEWICZA W POZNANIU WYDZIAŁ FIZYKI

Spinowy efekt Halla

- ROZPRAWA DOKTORSKA -

Anna Dyrdał

PROMOTOR: prof. dr hab. Józef Barnaś



 $9\ kwietnia\ 2013$

UNIWERSYTET IM. ADAMA MICKIEWICZA W POZNANIU, WYDZIAŁ FIZYKI ROZPRAWA DOKTORSKA: Spinowy efekt Halla

Streszczenie

Spinowy efekt Halla cieszy się w ostatnich latach dużym zainteresowaniem, gdyż stwarza możliwość manipulacji spinem elektronu tylko przy pomocy pola elektrycznego (bez obecności pól magnetycznych i magnetycznych materiałów). To z kolei daje możliwość dalszej miniaturyzacji elementów elektronicznych, zwiększenie ich wydajności oraz przede wszystkim wykorzystanie prądu spinowego na równi z prądem ładunkowym.

Procesy prowadzące do spinowego efektu Halla mają bezpośredni związek z charakterem oddziaływania spin-orbita. Efekty związane ze spinowo zależnym rozpraszaniem (znane w literaturze jako *skew scattering* i *side jump*) wynikają z obecności w układzie domieszek, które generują oddziaływanie spin-orbita. Z kolei, tak zwane wewnętrzne oddziaływanie spinowo-orbitalne wpływa na topologię struktury energetycznej. W tym przypadku mówimy o wewnętrznym lub topologicznym spinowym efekcie Halla. Ten wkład do holowskiego przewodnictwa spinowego jest bardzo istotny, gdyż zależy nie tylko od stanów elektronowych na poziomie Fermiego, ale także od wszystkich stanów poniżej poziomu Fermiego. To oznacza, że prąd spinowy związany z wkładem topologicznym do przewodnictwa spinowego, jako nie związany z procesami rozpraszania mógłby być bezstratny.

Celem rozprawy było zbadanie jak różnego typu oddziaływania spinowo-orbitalne w czystym układzie (bez domieszek i defektów) wpływają na transport spinowy (jak zachowuje się spinowe przewodnictwo holowskie) oraz jak obecność domieszek/defektów modyfikuje ten transport.

W modelu dwuwymiarowego gazu elektronowego omówiono spinowy efekt Halla związany ze stałym oddziaływaniem spin-orbita Rashby oraz Dresselhausa i pokazano jak obecność domieszek wpływa na spinowe przewodnictwo holowskie. Rozszerzono zaproponowany przez Mahana i Hanscha formalizm Keldysha na przypadek silnego oddziaływania spin-orbita. Stosując formalizm Kubo-Stredy i diagramowy rachunek zaburzeń zbadano spinowy efekt Halla w dwuwymiarowym gazie elektronowym z oddziaływaniem Dresselhausa oraz fluktuującym polem Rashby.

Rozważono, stosując teorię liniowej odpowiedzi i równowagowe funkcje Greena, topologiczny spinowy efekt Halla dla atomowej monowarstwy grafenu i silicenu oraz dla podwójnej warstwy grafenu. Pokazano m.in., że w silicenie oraz podwójnej warstwie grafenu z wewnętrznym oddziaływaniem spinowo-orbitalnym obserwuje się, w wyniku przyłożenia napięcia bramkującego, przejście fazowe z fazy spinowego izolatora, ze stałą i skwantowaną wartością spinowego przewodnictwa holowskiego dla położenia poziomu Fermiego wewnątrz przerwy energetycznej, do fazy konwencjonalnego izolatora, z zerowym spinowym przewodnictwem holowskim dla położenia poziomu Fermiego w przerwie energetycznej. Dla pojedynczej warstwy grafenu zbadano także wpływ fluktuacji pola Rashby na spinowy efekt Halla.

Zbadano również spinowy efekt Halla w układzie trójwymiarowym - w półprzewodnikach IV-VI, dla których pokazano, że wkład topologiczny do przewodnictwa spinowego jest niezerowy i w związku z tym, zgodnie ze wcześniejszymi przewidywaniami, półprzewodniki te również należą do klasy spinowych izolatorów.

Podziękowania

W pierwszej kolejoności chciałabym podziękować mojemu promotorowi, Panu Profesorowi Józefowi Barnasiowi, który prawie od początku studiów był moim opiekunem naukowym, a następnie podjął się opieki nad moim doktoratem. Praca pod kierunkiem człowieka takiego formatu jest ogromnym wyróżnieniem i daje wiele satysfakcji. Za życzliwość, cenne rady, dyskusje oraz wszelką pomoc otrzymane przez te wszystkie lata serdecznie dziękuję, mając jednocześnie nadzieję na dalszą owocną współpracę.

Szczególne podziękowania kieruję także w stronę prof. Vitaliiego Dugaeva, za nieocenioną pomoc w nauce metod stosowanych w teorii transportu elektronowego oraz wiele konstruktywnych dyskusji.

Dziękuję koleżankom i kolegom z Zakładu Fizyki Mezoskopowej, za codzienne spotkania, dyskusje i rady.

Dziękuję również moim Rodzicom za pomoc i wsparcie...

WSPARCIE FINANSOWE:

- Projekt współfinansowany ze środków Uni Europejskiej w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego: Program Operacyjny Kapitał Ludzki "Proinnowacyjne kształcenie, kompetentna kadra, absolwenci przyszłości" POKL.04.01.01-00-133/09-00.
- Projekt został częściowo sfinansowany ze środków Narodowego Centrum Nauki przyznanych na lata 2012-2014, na podstawie decyzji numer DEC-2011/03/N/ST3/02353.
- Anna Dyrdał jest stypendystką Fundacji Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu na rok 2013.

Spis treści

\mathbf{St}	reszczenie	i
Po	odziękowania	iii
W	stęp	1
Ι	Wprowadzenie do fizyki spinowego efektu Halla	5
1	Efekty Halla indukowane oddziaływaniem spin-orbita 1.1 Efekty Halla w układach z oddziaływaniem spin-orbita 1.2 Mikroskopowe mechanizmy prowadzące do spinowego efektu Halla 1.3 Prąd spinowy i spinowe przewodnictwo w spinowym efekcie Halla	6 6 8 10
2	Przegląd eksperymentalnych metod badania spinowego efektu Halla 2.1 Metody optyczne badania SEH w półprzewodnikach 2.2 Elektryczny pomiar SEH w układach metalicznych 2.3 Elektryczny pomiar SEH w układach półprzewodnikowych	15 16 20 23
Π	Spinowy efekt Halla w dwuwymiarowym gazie elektronowym	25
3	Dwuwymiarowy gaz elektronowy ze stałym oddziaływaniem spin-orbita Ra-	ว6
	 3.1 Dwuwymiarowy gaz elektronowy 3.2 Oddziaływanie spin-orbita 3.3 Topologiczny SEH w 2DEG z oddziaływaniem spin-orbita typu Rashby i Dresselhausa 3.4 Rola domieszek w SEH 3.4.1 Wpływ obecności domieszek na topologiczny SEH w 2DEG 3.4.2 SEH indukowany oddziaływaniem spin-orbita domieszek 	26 29 34 38 38 41
4	Dwuwymiarowy gaz elektronowy: formalizm Keldysha i metoda równań kinetycznych 4.1 Model i opis metody 4.2 SEH w domieszkowanym dwuwymiarowym gazie elektronowym	48 49 54
5	Spinowy efekt Halla w dwuwymiarowym gazie elektronowym indukowany fluktuacjami pola Rashby 5.1 SEH w 2DEG indukowany fluktuacjami pola Rashby	56 57

	5.2	SEH w 2DEG z oddziaływaniem spin-orbita Dresselhausa oraz z fluktuującym polem Rashby	60
II	I S	pinowy efekt Halla w grafenie i silicenie	65
6	Spi 6.1	nowy efekt Halla w atomowej monowarstwie grafenu Hamiltonian w modelu ciasnego wiązania oraz hamiltoniany efektywne opisujące	66
		grafen	67
	6.2	Spinowy efekt Halla w pojedynczej warstwie grafenu	72
		6.2.1 Graten z wewnętrznym oddziaływaniem spin-orbita	73
		6.2.3Grafen z oddziaływaniami spin-orbita obu typów6.2.3	70 80
7	Spir	nowy efekt Halla w podwójnej warstwie grafenowej	85
	7.1	Hamiltonian w modelu ciasnego wiązania oraz modele etektywne opisujące po- dwójna warstwe grafenowa	85
	7.2	SEH indukowany wewnetrznym oddziaływaniem SO	90
	7.3 7.4	Wpływ napięcia bramkującego Spinowy efekt Halla w podwójnej warstwie grafenu - rozważania w ramach modelu	92
	1.4	efektywnego - zredukowanego	95
	7.5	SEH w podwójnej warstwie grafenu w konfiguracji AA	98
8	Spir	nowy efekt Halla w grafenie indukowany fluktuacjami pola Rashby	103
9	Spir	nowy efekt Halla w silicenie	110
	0.1		
	9.1	Model ciasnego wiązania oraz model efektywny dla silicenu	110
	9.1 9.2	Model ciasnego wiązania oraz model efektywny dla silicenu	110 112
IV	9.1 9.2 7 S	Model ciasnego wiązania oraz model efektywny dla silicenu	110112116
IV 10	9.1 9.2 7 S	Model ciasnego wiązania oraz model efektywny dla silicenu	110112116117
IV 10	9.1 9.2 7 S Spin 10.1	Model ciasnego wiązania oraz model efektywny dla silicenu	110 112 116 117 118
IV 10	9.1 9.2 7 Spin 10.1 10.2	Model ciasnego wiązania oraz model efektywny dla silicenu	110 112 116 117 118 119
IV 10 Pc	9.1 9.2 7 S 5 10.1 10.2 0dsur	Model ciasnego wiązania oraz model efektywny dla silicenu	110 112 116 117 118 119 125
IV 10 Pc Su	9.1 9.2 7 S Spin 10.1 10.2 odsur	Model ciasnego wiązania oraz model efektywny dla silicenu	110 112 116 117 118 119 125 129
IV 10 Pc Su A	9.1 9.2 7 Spin 10.1 10.2 odsur umma Wł	Model ciasnego wiązania oraz model efektywny dla silicenu	110 112 116 117 118 119 125 129 132
IV 10 Pc Su A Lis	9.1 9.2 7 Spin 10.1 10.2 odsur umma Wł	Model ciasnego wiązania oraz model efektywny dla silicenu	110 112 116 117 118 119 125 129 132 137
IV 10 Pc Su A Lii	9.1 9.2 7 Spin 10.1 10.2 odsun wh sta p bliog	Model ciasnego wiązania oraz model efektywny dla silicenu	 110 112 116 117 118 119 125 129 132 137 138

Wstęp

Historia indukowanych oddziaływaniem spin-orbita poprzecznych efektów transportowych sięga końca dziewiętnastego wieku, kiedy odkryto anomalny efekt Halla (AEH) w materiałach ferromagnetycznych [1]. Główny wzrost zainteresowania tymi efektami nastąpił około 10 lat temu, gdy zaobserwowano po raz pierwszy spinowy efekt Halla oraz odkryto izolatory topologiczne.

Możliwość indukowania prądem elektrycznym poprzecznej akumulacji spinowej zapostulowana została na początku lat siedemdziesiątych ubiegłego wieku przez Dyakonova i Perela [2, 3]. Problem ten podjął następnie w 1999 roku Hirsh [4], który jako pierwszy nazwał ten efekt spinowym efektem Halla (SEH). Teoretyczne rozważania dotyczące spinowego efektu Halla były początkowo podyktowane badaniami nad anomalnym efektem Halla, którego źródłem są te same procesy fizyczne.

Pierwsza teoria próbująca wyjaśnić AEH została zaproponowana przez Karplusa i Luttingera [5], którzy założyli, że efekt wynika z ogólnych właściwości jakie posiada elektron poruszający się w idealnie periodycznej sieci. Okazuje się, że elektron poruszający się w periodycznym potencjale oprócz prędkości grupowej posiada również wkład związany z międzypasmowymi elementami macierzowymi operatora prędkości - tzw. prędkość anomalną, która jest kluczowa w AEH. Teoria ta początkowo spotkała się z dużym sceptycyzmem, ale zyskała na wartości po odkryciu fazy Berry'ego [6] i jej powiązaniu przez Sundarama i Niu [7] z prędkością anomalną.

Teoria Karplusa i Luttingera została skrytykowana przez Smita [8, 9], który założył, że rozpraszanie na domieszkach jest kluczowe i wprowadził do opisu AEH proces rozproszeniowy typu *skew scattering*. W trakcie tego procesu, w wyniku rozpraszania następuje zależne od spinu odchylenie średniej trajektorii elektronu. Innym spinowo-zależnym procesem rozproszeniowym jest wprowadzony przez Bergera *side jump* [10, 11]. W wyniku tego procesu, następuje lateralne przesunięcie średniej trajektorii elektronu w trakcie aktu rozpraszania.

Tak więc, chociaż źródło prądu spinowego (lub akumulacji spinowej) w zależności od sytuacji fizycznej i badanego materiału może być inne, to obecnie bezdyskusyjnie uważa się, że za SEH odpowiedzialne są spinowo-zależne procesy rozproszeniowe, których źródłem są domieszki generujące oddziaływanie spin-orbita w układzie (procesy typu *skew scattering* i *side jump*) oraz topologia struktury energetycznej, która powoduje, że nośniki ładunku w polu elektrycznym zyskują dodatkowy przyczynek do prędkości (prędkość anomalna) opisany matematycznie poprzez tzw. krzywiznę Berry'ego [6, 7].

Dynamiczny rozwój badań nad SEH rozpoczął się po 2004 roku, gdy po raz pierwszy udało się ten efekt zaobserwować [12]. Dwa lata później pokazano, że SEH jest mierzalny również w temperaturach pokojowych, co pozwoliło myśleć o praktycznym wykorzystaniu tego efektu. Obecnie prowadzone są badania teoretyczne oraz eksperymentalne nad SEH, zarówno w układach półprzewodnikowych jak i metalicznych, mające na celu dokładne zrozumienie procesów prowadzących do tego efektu oraz jego zastosowanie w rozwiązaniach praktycznych - jako narzędzie eksperymentalne w badaniach transportu spinowego lub przy konstruowaniu tzw. urządzeń spintronicznych nowej generacji pracujących właśnie w oparciu o SEH. Efekt już stał się jednym z narzędzi umożliwiających detekcję prądu spinowego i spinowej polaryzacji, a także został wykorzystany w badaniach dotyczących indukowanej prądem dynamiki spinowej [13]. SEH miał też istotne znaczenie w pomiarze spinowego efektu Seebecka [14].

Prąd spinowy indukowany przez tzw. wkład topologiczny do spinowego efektu Halla, jako nie związany z procesami rozpraszania, mógłby być bezstratny. W tym kontekście rozpoczęto badania nad tzw. izolatorami spinowymi [15], a więc materiałami w których możliwe jest obserwowanie prądu spinowego nawet gdy potencjał chemiczny leży wewnątrz przerwy energetycznej. Ten kierunek badań przyczynił się z kolei do odkrycia kwantowego spinowego efektu Halla i topologicznych izolatorów [16–18].

Spinowy efekt Halla jest więc jednym z bardziej aktualnych problemów fizyki fazy skondensowanej. Poza motywacjami czysto poznawczymi, związanymi z badaniem i wyjaśnieniem procesów spinowo-zależnego transportu, w efekcie tym upatruje się także szanse na konstruowanie układów nowej generacji (takich jak np. tranzystory spinowe), które pozwolą na dalszą miniaturyzację elementów elektronicznych, zwiększenie ich wydajności oraz wykorzystanie prądu spinowego na równi z prądem ładunkowym (w czym upatruje się zmniejszenie strat energii). SEH przyczynił się także do badania szeregu nowych poprzecznych efektów transportowych, takich jak spinowy i anomalny efekt Nernsta [19–21], czy indukowany termicznie magnonowy efekt Halla [22].

Celem rozprawy było teoretyczne zbadanie spinowego efektu Halla w wybranych modelowych układach. Zasadniczym problemem było wyjaśnienie jak różnego typu oddziaływania spinowo-orbitalne w czystym układzie (bez domieszek lub defektów) wpływają na spinowe przewodnictwo holowskie oraz jak obecność domieszek/defektów modyfikuje ten transport. W przypadku gdy potencjał chemiczny znajduje się w przerwie energetycznej, możliwe jest obserwowanie skończonego przewodnictwa spinowego, które zdeterminowane jest przez efekty topologiczne. Jeśli jednak potencjał chemiczny znajduje się wewnątrz pasma, efekty rozproszeniowe mogą silnie modyfikować przewodnictwo spinowe. Wpływ efektów rozproszeniowych zależy od rodzaju i wymiarowości układu. Jednakże wkład od domieszek znika w układach balistycznych, gdzie SEH zależy tylko od topologii struktury energetycznej (mezoskopowy/topologiczny SEH).

Ponieważ efekty topologiczne silnie zależa od struktury pasmowej, istotny jest wybór odpowiedniego materiału. Półprzewodniki charakteryzują się długim czasem koherencji spinowej (w temperaturach pokojowych jest on trzy rzędy wielkości dłuższy aniżeli w metalach), co ułatwia badanie transportu spinowego i jednocześnie stwarza możliwości konstrukcji urządzeń elektronicznych opartych na transporcie spinowym. Złożona struktura energetyczna i silne oddziaływanie spinowo-orbitalne różnego typu (wewnętrzne oddziaływanie spin-orbita, oddziaływanie spin-orbita typu Rashby i Dresselhausa) generowane zarówno poprzez sieć krystaliczną, obecność domieszek, jak również poprzez asymetrię wynikającą z geometrii układu powodują, że struktury półprzewodnikowe stwarzają wiele możliwości i są atrakcyjne z punktu widzenia badań dotyczących SEH. Szczególne znaczenie w przypadku SEH mają półprzewodniki w których obserwuje się przewodnictwo spinowe mimo że przewodnictwo ładunkowe znika (tzw. izolatory spinowe) [15]. Do grupy izolatorów spinowych możemy zaliczyć, poza intensywnie badanymi w ostatnich latach półprzewodnikami II-VI, również półprzewodniki IV-VI oraz grafen w obszarze półprzewodzącym. Oba typy materiałów charakteryzuje nieparaboliczna zależność dyspersyjna, w której niskoenergetyczne stany elektronowe mogą być opisane przy pomocy relatywistycznego równania Diraca.

Rozprawa została podzielona na pięć części. Pierwsza część ma za zadanie wprowadzenie w tematykę pracy. Znajduje się w niej omówienie mechanizmów prowadzących do spinowego efektu Halla, wprowadzona jest także definicja pradu spinowego i metody wykorzystane do obliczenia spinowego przewodnictwa holowskiego. W części tej omówione zostały także ważniejsze prace eksperymentalne, które ilustrują nie tylko sposób pomiaru SEH ale także możliwości zastosowania tego efektu jako narzędzia pomiarowego - wykorzystywanego do generacji i detekcji prądów spinowych. Część druga poświecona jest spinowemu efektowi Halla w dwuwymiarowym gazie elektronowym i złożona jest z trzech rozdziałów (rozdziały 3-5). Pierwszy z nich - Rozdział 3 to wsparty rachunkami przegląd literatury dotyczący spinowego efektu Halla w dwuwymiarowym gazie elektronowym. Zebrane zostały w nim wyniki dotyczące zarówno SEH indukowanego oddziaływaniem spin-orbita Rashby i Dresselhausa, jak również roli domieszek w tym efekcie. Rozdział ten ma również za zadanie wprowadzenie i szersze zobrazowanie metod stosowanych w obliczeniach spinowego przewodnictwa holowskiego. Rozdział 4 prezentuje model i wyniki otrzymane w ramach formalizmu Keldysha w przybliżeniu półklasycznych równań kinetycznych. W Rozdziale 5 omówiony został wpływ fluktuującego pola Rashby na spinowe przewodnictwo holowskie. Trzecia część rozprawy (rozdziały 6-9) dotyczy spinowego efektu Halla w grafenie i silicenie. W Rozdziale 6 omówiony został wkład topologiczny do spinowego efektu Halla, pochodzący od tzw. wewnętrznego oddziaływania spin-orbita grafenu oraz od oddziaływania spin-orbita typu Rashby, w ramach modelu ciasnego wiązania oraz modelu Kane'a, który pozwolił otrzymać analityczne wyrażenia na spinowe przewodnictwo holowskie. Rozdział 7 opisuje wkład topologiczny do spinowego przewodnictwa holowskiego w podwójnej warstwie grafenowej w obecności wewnętrznego oddziaływania spin-orbita oraz napięcia bramkującego prostopadłego do płaszczyzny warstw. Rozdział ten, chociaż dotyczy głównie podwójnej warstwy grafenowej w tzw. konfiguracji AB (zarówno w modelu ciasnego wiązania oraz w modelu efektywnym), to na jego końcu omówione zostało spinowe przewodnictwo holowskie w podwójnej warstwie grafenowej w konfiguracji AA (w modelu efektywnym). W Rozdziałe 8 omówiony jest spinowy efekt Halla w grafenie indukowany fluktuacjami oddziaływania spin-orbita typu Rashby. Rozdział 9 zawiera wyniki dla silicenu z wewnętrznym oddziaływaniem spinowo-orbitalnym i w obecności napięcia bramkującego prostopadłego do jego płaszczyzny. Na zakończenie, w części czwartej omówiony został spinowy efekt Halla w układzie trójwymiarowym. Rachunki zostały wykonane w ramach efektywnego modelu Dimmocka, który opisuje niskoenergetyczne stany elektronowe w półprzewodnikach IV-VI. Na końcu rozprawy umieszczono także podsumowanie niniejszej pracy oraz dodatek.

Część I

Wprowadzenie do fizyki spinowego efektu Halla

Rozdział 1

Efekty Halla indukowane oddziaływaniem spin-orbita

1.1 Efekty Halla w układach z oddziaływaniem spin-orbita

W 1879 roku Edwin Hall zaobserwował zjawisko, które dziś nosi jego imię [23]. Jeśli do układu, w którym płynie prąd, przyłożymy zewnętrzne pole magnetyczne, skierowane dla uproszczenia prostopadle do kierunku przepływu prądu, to w wyniku działania na nośniki prądu siły Lorentza na przeciwległych brzegach płytki pojawią się pewne nadmiarowe ładunki przestrzenne o przeciwnych znakach, a co za tym idzie pewne poprzeczne pole elektryczne równoważące działanie siły Lorentza (rys. 1.1(a)). Już bardzo proste rachunki pozwalają pokazać, że oporność prądu, jaki popłynąłby gdyby zewrzeć oba krańce płytki, wykazuje proporcjonalność do zewnętrznego pola magnetycznego.

Jak się jednak okazało, w układach wykazujących uporządkowanie magnetyczne oporność holowska zawiera dodatkowy składnik proporcjonalny do magnetyzacji w układzie i nie znika nawet w zerowym polu magnetycznym [1]. Ten dodatkowy przyczynek do przewodnictwa związany jest właśnie z anomalnym efektem Halla. którego źródłem jest silne oddziaływanie spin-orbita w obecności polaryzacji spinowej w układzie. Oddziaływanie spin-orbita powoduje m. in., że rozpraszanie elektronów na domieszkach staje się spinowo-zależne. Elektrony o przeciwnych spinach, w trakcie poruszania się w polu elektrycznym, odchylane są w przeciwnych kierunkach, co w przypadku układów uporządkowanych magnetycznie prowadzi do pojawienia się niezrównoważonego ładunku przestrzennego na brzegach próbki, a więc do pojawienia się napięcia holowskiego (rys. 1.1(b)).

Jeśli układ nie jest spinowo-spolaryzowany (w układzie jest tyle samo nośników ze spinem "w górę" co ze spinem "w dół"), to w wyniku tych samych procesów rozproszeniowych, choć



RYSUNEK 1.1: Klasyczny efekt Halla (a), anomalny efekt Halla (b), spinowy efekt Halla (c), odwrotny spinowy efekt Halla (d), spinowy efekt Nernsta (e), kwantowy efekt Halla oraz kwantowy spinowy efekt Halla (f). Rysunek (f) pochodzi z [24].

nie wyindukuje się napięcie holowskie, to jednak na przeciwnych brzegach próbki pojawi się akumulacja spinowa (rys. 1.1(c)). Efekt ten nazywamy spinowym efektem Halla. Istnieje także odwrotny spinowy efekt Halla - jeśli przez układ przepływa prąd spinowy, wówczas w wyniku oddziaływania spin-orbita indukuje się poprzeczny prąd elektryczny (rys. 1.1(d)).

Wiele efektów takich jak wstrzykiwanie spinu, czy propagacja prądów spinowych może być generowana gradientem temperatury (rys. 1.1(e)). Poprzez analogię do anomalnego i spinowego efektu Halla możemy spodziewać się takich spinowych efektów termoelektrycznych, w których gradient temperatury w wyniku oddziaływania spin-orbita będzie indukował poprzeczną akumulację spinową i/lub prądy spinowe. Mówimy w tej sytuacji o anomalnym (gdy układ wykazuje polaryzację spinową) lub spinowym efekcie Nernsta.

Dla porządku wspomnijmy, że podobnie jak klasyczny efekt Halla, tak i spinowy efekt Halla ma swój kwantowy odpowiednik. W przypadku kwantowego (całkowitego) efektu Halla mamy do czynienia z pojawieniem się skwantowanych wartości przewodnictwa holowskiego w dwuwymiarowych układach znajdujących się w silnym polu magnetycznym, co związane jest z pojawieniem się w układzie chiralnych stanów brzegowych (elektrony propagują w jednym kierunku wzdłuż danego brzegu) (rys. 1.1(f)). W kwantowym spinowym efekcie Halla obserwuje się skwantowanie wartości przewodnictwa spinowego w układzie z oddziaływaniem spin-orbita. W tym przypadku transport odbywa się poprzez tzw. helikalne stany brzegowe (elektrony o przeciwnych spinach propagują się w przeciwnych kierunkach wzdłuż danego brzegu płytki), które wbudowują się w przerwę energetyczną tzw. kwantowego izolatora topologicznego.

1.2 Mikroskopowe mechanizmy prowadzące do spinowego efektu Halla

Możliwość indukowania prądem elektrycznym poprzecznej akumulacji spinowej zapostulowana została na początku lat siedemdziesiątych ubiegłego wieku [2, 3]. Teoretyczne rozważania dotyczące SEH były początkowo podyktowane badaniami dotyczącymi anomalnego efektu Halla (AEH) [25, 26], którego źródłem są te same procesy fizyczne co SEH. W ogólności, procesy prowadzące do indukowanych oddziaływaniem spin-orbita poprzecznych efektów transportowych mają bezpośredni związek z charakterem oddziaływania spinowo-orbitalnego. Poniżej omówimy te procesy w języku półklasycznym.

Pierwsza grupa procesów związana jest z rozpraszaniem elektronów na domieszkach, które generują oddziaływanie spin-orbita w układzie.

Proces typu skew scattering

W obecności sprzężenia spin-orbita cząstki niosące spin są rozpraszane asymetrycznie na potencjale domieszki. Amplituda pakietu falowego staje się anizotropowa - zależy od względnych kierunków fal padającej i rozproszonej oraz od spinu. W wyniku aktu rozpraszania następuje odchylenie średniej trajektorii elektronu o zależny od spinu kąt, rzędu 10^{-2} rad., tak jak to zostało przedstawione na rysunku 1.2(a) [27]. Rysunek 1.2(b) opisuje sytuację, w której elektron jest rozpraszany na ujemnie naładowanym centrum. W układzie odniesienia związanym z poruszającym się elektronem pojawia się efektywne pole magnetyczne $\mathbf{B} \sim \mathbf{v} \times \mathbf{E}$ (E pole elektryczne pochodzące od naładowanej domieszki, \mathbf{v} - prędkość elektronu). To pole jest prostopadłe do płaszczyzny, w której leży trajektoria i ma przeciwny zwrot dla elektronów poruszających się w prawo i w lewo. To efektywne pole magnetyczne jest oczywiście niejednorodne w przestrzeni ponieważ pole \mathbf{E} pochodzące od domieszek jest niejednorodne, a prędkość \mathbf{v} zmienia się wzdłuż trajektorii ruchu. W związku z tym, na elektron niosący spin działa spinowo-zależna siła [28], która jest proporcjonalna do gradientu z energii Zeemana $2\mu_B \mathbf{B} \cdot \mathbf{S}$ i prowadzi do asymetrycznego, ze względu na spin, rozpraszania. Proces typu skew scattering został wprowadzony do teorii anomalnego efektu Halla po raz pierwszy przez Smita [8, 9]. Jest to proces trzeciego rzędu względem potencjału rozpraszającego, a zatem, chcąc go uwzględnić w rachunkach należy wyjść poza przybliżenie Borna [25, 29, 30].

Proces typu side jump

Proces typu *side jump* został wprowadzony przez Bergera [10, 11] i opisuje lateralne przesunięcie pakietu falowego (rzędu 10^{-11} m) w wyniku aktu rozpraszania [27] (rys. 1.2(c)). Efekt



RYSUNEK 1.2: Schematyczne przedstawienie procesów typu skew scattering (a), (b) i side jump
(c). W ogólnym przypadku podczas rozparaszania mogą zachodzić oba procesy (d). Rysunki (a) i (c) pochodzą z pracy [27], rysunek (b) pochodzi z [28], a rysunek (d) z [29].

ten jest także spinowo-zależny. W ogólności, w układzie zachodzą oba procesy rozproszeniowe - *skew scattering* i *side jump. Side jump* nie modyfikuje jednak kąta rozpraszania na dużych odległościach i w tym sensie nie modyfikuje efektów związanych z procesem typu *skew scattering* (rys.1.2 (d)). Lateralne przesunięcie pakietu falowego, prowadzi do pojawienia się dodatkowej składowej wektora prędkości - tzw. prędkości anomalnej oraz do anomalnej poprawki do funkcji rozkładu [31]. Uwzględniając te poprawki w równaniu Boltzmanna (lub w formule Kubo) otrzymamy wkład do przewodnictwa pochodzący od procesu typu *side jump* [25, 29, 30].

Topologia struktury pasmowej

Wzrost zainteresowania zarówno anomalnym jak i spinowym efektem Halla nastąpił po odkryciu fazy Berry'ego [6], co umożliwiło reinterpretację pierwszych teorii dotyczących AEH [5, 7]. Okazało się, że za SEH odpowiedzialne są nie tylko procesy rozproszeniowe ale także topologia struktury pasmowej, która w obecności wewnętrznego oddziaływania spin-orbita ulega modyfikacji. W skład efektywnego hamiltonianu dla elektronu poruszającego się w periodycznym potencjale wchodzą poprawki relatywistyczne, które zawierają również wkład od oddziaływania spin-orbita. Człon związany z oddziaływaniem spin-orbita modyfikuje blochowską funkcję falową. Jak się okazuje, w wyniku przyłożenia zewnętrznego pola elektrycznego następuje mieszanie się stanów z różnych pasm i w konsekwencji pojawia się dodatkowy wkład do prędkości (prędkość anomalna), który wyraża się poprzez krzywiznę Berry'ego [7, 25].

Efekty topologiczne stały się ważnym problemem w rozważaniach teoretycznych dotyczących SEH. Pokazano, że wkład do przewodnictwa związany z efektami topologicznymi zależy nie tylko od stanów elektronowych na poziomie Fermiego ale również od wszystkich stanów poniżej poziomu Fermiego. Badania nad topologicznym SEH zapoczątkowały intensywne badania nad izolatorami spinowymi, w których spinowe przewodnictwo holowskie jest niezerowe nawet gdy poziom Fermiego leży wewnątrz przerwy energetycznej.

1.3 Prąd spinowy i spinowe przewodnictwo w spinowym efekcie Halla

Kluczowym zagadnieniem elektroniki spinowej jest wypracowanie efektywnych metod generowania prądu spinowego i manipulowania pojedynczym spinem. Niezbędny jest również poprawny formalizm pozwalający opisać zjawiska generowane prądem spinowym. Gdy spin (lub jego rzut na zadany kierunek) jest zachowany, prąd spinowy może być zdefiniowany jako różnica pomiędzy prądami ładunkowymi, których nośniki znajdują się w różnych stanach spinowych¹ [32–34]. Dwukanałowy model Motta [32] opisujący transport elektronowy w ferromagnetycznych metalach opiera się na niezależnych prądach niosących spin "w górę" i "w dół". Konsekwencją modelu Motta jest więc zdefiniowanie gęstości operatora prądu spinowego w następującej postaci:

$$\mathbf{j}^{s_n} = \frac{1}{2} \left[\mathbf{v}, s_n \right]_+ ;$$
 (1.1)

gdzie operator prędkości $\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} H$ (*H* oznacza hamiltonian opisujący rozważany układ), *n*ta składowa spinu: $s_n = \frac{\hbar}{2} \sigma_n$, która wyrażona jest przez odpowiednią macierz Pauliego σ_n (n = x, y, z).

W obecności oddziaływania spin-orbita całkowity spin nie jest zachowany. W związku z tym prąd spinowy zdefiniowany równaniem (1.1) nie spełnia definicji prądu w sensie twierdzenia Noether lub, innymi słowy, nie spełnia równania ciągłości bez dodatkowych źródeł: $\frac{\partial S_n}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}^{s_n} = 0.$

Shi i in. [35] zaproponowali definicję prądu spinowego uwzględniającą spinowy moment siły. Autorzy rozważyli cząstkę, której stan opisuje spinor $\psi(\mathbf{r})$. Wówczas równanie ciągłości można zapisać następująco [35]:

$$\frac{\partial S_z}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}^{s_z} = \mathcal{T}_z \,, \tag{1.2}$$

gdzie zgodnie z definicją operatora spinu $S_z = \psi^{\dagger}(\mathbf{r})s_z\psi(\mathbf{r})$, gęstość prądu spinowego zdefiniowana jest w następujący sposób $\mathbf{J}^{s_z} = \psi^{\dagger}(\mathbf{r})\frac{1}{2}[\mathbf{v},s_z]_+\psi(\mathbf{r})$, natomiast moment siły: $\mathcal{T}_z = \operatorname{Re}\psi^{\dagger}(\mathbf{r})\tau\psi(\mathbf{r})$, gdzie operator momentu siły: $\tau = \frac{\partial s_z}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[s_z,H]_-$.

¹W przypadku elektronów o spinie $\hbar/2$, których składowa $s_z = \pm \hbar/2$, prąd spinowy będzie zdefiniowany jako różnica między prądem nośników ze spinem "w górę" $(+\hbar/2)$ i prądem nośników ze spinem "w dół" $(-\hbar/2)$: $I_s = \frac{\hbar}{2e}(I_{\uparrow} - I_{\downarrow})$, w przypadku materiałów magnetycznych (ferromagnetyczne metale, magnetyczne półprzewodniki) stosuje się definicję $I_s = \frac{\hbar}{2e}(I_{+} - I_{-})$ gdzie indeks \pm definiuje odpowiednio prąd związany z większościowym/mniejszościowym spinem w układzie.

Jeśli średni moment siły znika $\frac{1}{V} \int dV \mathcal{T}(\mathbf{r}) = 0$, co jest ogólnie słuszne w reżimie liniowej odpowiedzi dla układów z zachowaną symetrią względem inwersji przestrzennej, a także dla wielu układów bez symetrii względem inwersji, w których znika średni moment siły związany z pewną składową spinu², to możemy zapisać gęstość momentu siły jako dywergencję z gęstości dipolowego momentu siły $\mathbf{P}_{\tau}(\mathbf{r})$ [35]:

$$\mathcal{T}(\mathbf{r}) = -\nabla \cdot \mathbf{P}_{\tau}(\mathbf{r}). \tag{1.3}$$

Wstawiając (1.3) do (1.2) dostajemy:

$$\frac{\partial S_z}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{J}^{s_z} = 0.$$
(1.4)

W tym równaniu $\mathcal{J}^{s_z} = \mathbf{J}^{s_z} + \mathbf{P}_{\tau}$ jest zrenormalizowaną, efektywną gęstością prądu spinowego. Na podstawie powyższego rozważania, autorzy zapostulowali definicję operatora gęstości prądu spinowego w postaci [35]:

$$\tilde{j}^{s_z} = \frac{d}{dt} (\mathbf{r}s_z) \,. \tag{1.5}$$

Wyrażenie to, w porównaniu z konwencjonalną definicją (1.1), zawiera dodatkowy człon: $\mathbf{r} \frac{ds_z}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} [s_z, H]_-$, który wyraża fakt, że spin w układzie nie jest zachowany i powoduje, że zdefiniowana powyżej efektywna gęstość prądu spinowego \mathcal{J}^{s_z} jest wielkością zachowaną. Posługiwanie się gęstością prądu spinowego, która jest wielkością zachowaną, jest szczególnie istotne, gdy chcemy połączyć prąd spinowy, który płynie przez układ z akumulacją spinową na jego brzegach.

Posługiwanie się gęstością prądu spinowego daną przez (1.1) jest fizycznie dopuszczalne i szeroko stosowane w literaturze, natomiast matematycznie nie ma ona sensu gęstości "prądu" (jako wielkości spełniającej równanie ciągłości bez dodatkowych źródeł). Problem definicji prądu spinowego był dyskutowany w literaturze [35, 36, 40, 41]. Do tej pory nie została wprowadzona jedna - ogólnie przyjęta definicja. W niniejszej pracy stosowana będzie więc konsekwentnie definicja prądu spinowego dana przez operator (1.1), niemniej jednak należy zdawać sobie sprawę z jej ograniczeń³.

Standardowym podejściem w obliczeniach SEH jest zastosowanie w limicie liniowej odpowiedzi równowagowych funkcji Greena (Formuła Kubo [43]) oraz diagramowego rachunku zaburzeń [44, 45]. Powszechnie stosuje się również formalizm oparty o nierównowagowe funkcje Greena czy równanie kinetyczne Boltzmanna [44–48]. W zależności od rozważanego problemu równowagowe lub nierównowagowe funkcjie Greena stosuje się także w połączeniu z formalizmem Landauera-Buttikera oraz kwantowym równaniem Boltzmanna. W przypadku tzw. wewnętrznego lub topologicznego wkładu do przewodnictwa w SEH stosuje się także formalizm związany z fazą Berry'ego [6, 7].

²Tak jest w wielu układach w których badano SEH, np. [36–39]

 $^{^{3}}$ Spinowy efekt Halla w dwuwymiarowym gazie elektronowym z oddziaływaniem spin-orbita typu Rashby w obecności domieszek dla obu definicji prądu spinowego: (1.1) i (1.5) był szczegółowo analizowany np. w pracy Sugimoto i in. [42].

W niniejszej pracy do opisu SEH wykorzystany zostanie głównie formalizm równowagowych funkcji Greena oraz diagramowy rachunek zaburzeń. W Rozdziale 4 wykorzystana zostanie metoda równania kinetycznego i formalizm Keldysha. Formalizm zawarty w tym rozdziale, omówiony w kontekście wyznaczania przewodnictwa spinowego w SEH, stanowi rozszerzenie metody zaproponowanej przez Mahana [47] na przypadek transportu w układzie z silnym oddziaływaniem spin-orbita.

W przypadku równowagowych funkcji Greena punktem wyjścia jest operator gęstości prądu spinowego dany przez (1.1). Kwantowo-mechaniczna wartość średnia tego operatora dana jest równaniem:

$$j_i^{s_n}(t) = -i\frac{e\hbar}{4} \operatorname{Tr} \sum_{\mathbf{k}} [v_i, \sigma_n]_+ G_{\mathbf{k}}(t, t+\delta)$$
(1.6)

Jeśli, w powyższym wyrażeniu, rozwiniemy funkcję Greena względem zaburzenia, jakim jest zewnętrzne pole elektryczne: $H_{int} = -ev_j A_j$ (A_j - składowa wektora potencjału elektromagnetycznego) oraz wykonamy transformatę Fouriera, to w limicie liniowej odpowiedzi otrzymamy:

$$j_i^{s_n}(\omega) = \frac{e\hbar^2}{4\omega} E_j \operatorname{Tr} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \int \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} [v_i, \sigma_n]_+ G_{\mathbf{k}}(\varepsilon + \omega) v_j G_{\mathbf{k}}(\varepsilon) , \qquad (1.7)$$

gdzie D jest równe 1, 2 lub 3 w zależności od wymiarowości układu. W związku z powyższym, przewodnictwo spinowe w spinowym efekcie Halla możemy zapisać w następującej postaci:

$$\sigma_{ij}^{s_n}(\omega) = \frac{e\hbar^2}{4\omega} \operatorname{Tr} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \int \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} [v_i, \sigma_n]_+ G_{\mathbf{k}}(\varepsilon + \omega) v_j G_{\mathbf{k}}(\varepsilon) \,.$$
(1.8)

Powyższe wyrażenie na przewodnictwo spinowe w limicie $\omega \to 0$ jest równoważne z formułą typu Kubo-Stredy⁴[52–55]. Okazuje się, że pozadiagonalny element tensora przewodnictwa spinowego możemy zapisać jako sumę dwóch składników:

$$\sigma_{ij}^{s_n} = \sigma_{ij}^{s_n I} + \sigma_{ij}^{s_n II} . \tag{1.9}$$

Pierwszy z nich, $\sigma_{ij}^{s_n I}$, związany jest ze stanami na powierzchni Fermiego. Będzie więc on silnie zależał od efektów związanych z obecnością w układzie domieszek, defektów oraz od związanych z nimi efektów rozproszeniowych. $\sigma_{ij}^{s_n I}$ zwykle zapisuje się jako sumę [27, 49–51]:

$$\sigma_{ij}^{s_n I} = \sigma_{ij}^{s_n I(a)} + \sigma_{ij}^{s_n I(b)} :$$
 (1.10)

⁴Analogiczne do (1.8) wyrażenie, zawierające zamiast operatora gęstości prądu spinowego operator gęstości prądu ładunkowego, powszechnie stosuje się w obliczeniach anomalnego efektu Halla i również, w limicie $\omega \to 0$, daje się sprowadzić do formuły Kubo-Stredy [27, 49–51].

gdzie [27, 49–51]:

$$\sigma_{ij}^{s_n I(a)} = \frac{e\hbar}{2\pi} \operatorname{Tr} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \langle \hat{j}_i^{s_n} G^R(\mu) \hat{v}_y G^A(\mu) \rangle, \qquad (1.11)$$

$$\sigma_{ij}^{s_n I(b)} = -\frac{e\hbar}{4\pi} \operatorname{Tr} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \langle \hat{j}_i^{s_n} G^R(\mu) \hat{v}_y G^R(\mu) + \hat{j}_i^{s_n} G^A(\mu) \hat{v}_y G^A(\mu) \rangle .$$
(1.12)

Składnik $\sigma_{ij}^{s_n II}$ zawiera natomiast wkład od wszystkich stanów poniżej poziomu Fermiego i przyjmuje postać[27, 49–51]:

$$\sigma_{ij}^{s_n II} = \frac{e\hbar}{4\pi} \operatorname{Tr} \int d\varepsilon f(\varepsilon) \left\langle \hat{j}_i^{s_n} G^R(\varepsilon) \hat{v}_y \frac{\partial G^R(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} - \hat{j}_i^{s_n} \frac{\partial G^R(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \hat{v}_y G^R(\varepsilon) - \hat{j}_i^{s_n} \frac{\partial G^A(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \hat{v}_y G^A(\varepsilon) + \hat{j}_i^{s_n} G^A(\varepsilon) \hat{v}_y \frac{\partial G^A(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right\rangle.$$
(1.13)

W powyższych wyrażeniach $G^{R/A}(\mu)$ oznaczają odpowiednio opóźnioną i przedwczesną funkcję Greena, liczone na poziomie Fermiego, a $\langle ... \rangle$ oznacza uśrednianie po konfiguracjach domieszek. Ponieważ $\sigma_{ii}^{s_n II}$ zawiera iloczyny złożone tylko z opóźnionych lub tylko z przedwczesnych funkcji Greena, więc poprawki od domieszek do tego wyrażenia będą bardzo małe i w konsekwencji, w limicie małej koncentracji domieszek - słabego rozpraszania, tylko wolna od domieszek część $\sigma_{ij}^{s_n II}$ jest istotna. Z tych samych powodów $\sigma_{ij}^{s_n I(b)}$, w limicie słabego rozpraszania, często wynosi dokładnie zero albo jest bardzo mała i nie wpływa jakościowo na otrzymywane wyniki [45]. Składnikiem dominującym w $\sigma_{ij}^{s_n I}$, jest więc $\sigma_{ij}^{s_n I(a)}$, który możemy wyznaczyć przy pomocy diagramów Feynmana. Rysunek 1.3 przedstawia przykładowe diagramy jakie będą nas interesować podczas wyznaczania przewodnictwa w spinowym efekcie Halla. Prawy wierzchołek tych diagramów związany jest z efektami jakie zachodzą w wyniku przyłożenia pola elektrycznego (np. przyspieszenie pakietu falowego, sprzężenie pola elektrycznego z oddziaływaniem spin-orbita i w efekcie mieszanie stanów z różnych podpasm), lewy wierzchołek stanowi natomiast odpowiedź układu na ten efekt. W naszym przypadku lewy wierzchołek bedzie wiec odpowiadał poprzecznemu pradowi spinowemu związanemu z SEH. Istotnym wkładem do wewnętrznego/topologicznego spinowego przewodnictwa holowskiego jest diagram podstawowy (ang. bare bubble), który złożony jest z opóźnionej i przedwczesnej funkcji Greena (na rysunku reprezentowane przez linie ciągłe łączące wierzchołki diagramu) wyznaczonej na podstawie hamiltonianu niezaburzonego (bez potencjału generowanego przez domieszki). Wkład od domieszek może zostać uwzgledniony poprzez sumowanie diagramów drabinkowych zawierający diagramy związane z rozpraszaniem nie tylko na pojedynczej domieszce, ale także z rozpraszaniem, w którym bierze udział wieksza liczba domieszek (linia przerywana na diagramie odpowiada potencjałowi od domieszki). Wkład od diagramów drabinkowych może zostać uwzględniony poprzez funkcję wierzchołkową. Jeśli domieszki są źródłem oddziaływania spin-orbita wówczas pojawiają się spinowo-zależne procesy rozproszeniowe (typu skew scattering i side jump), które również dają wkład do przewodnictwa spinowego w SEH. Procesy te mogą zostać opisane przez pary sprzężonych ze sobą diagramów,



RYSUNEK 1.3: Diagramy Feynmana wykorzystywane w obliczeniu przewodnictwa spinowego w spinowym efekcie Halla.

które również zostały przedstawione na rys. 1.3. W diagramach tych prawy wierzchołek związany jest z pojawiającą się w wyniku oddziaływania spin-orbita anomalną prędkością. Poszczególne diagramy zostaną szerzej omówione w dalszych rozdziałach podczas omawiania poszczególnych wkładów do holowskiego przewodnictwa spinowego.

Tak zwany wewnętrzny (topologiczny) wkład do przewodnictwa w SEH jest związany z wewnętrznym oddziaływaniem spin-orbita, które wpływa na topologię struktury pasmowej układu. Będzie więc on sumą wkładu od stanów poniżej poziomu Fermiego $\sigma_{ji}^{s_n,II}$ oraz wkładu od stanów na poziomie Fermiego $\sigma_{ji}^{s_n,Ip}$, który jest reprezentowany przez diagram podstawowy:

$$\sigma_{ij}^{s_n \, intr} = \sigma_{ji}^{s_n, Ip} + \sigma_{ji}^{s_n, II} \,. \tag{1.14}$$

Pozostałe diagramy wchodzące w skład $\sigma_{ji}^{s_n,I}$ będą uwzględniały wkład od domieszek i procesów rozproszeniowych. Przedstawienie holowskiego przewodnictwa spinowego przy pomocy formuły Kubo-Stredy jest wygodne szczególnie, gdy chcemy badać niezależnie poszczególne wkłady do przewodnictwa w SEH.

Rozdział 2

Przegląd eksperymentalnych metod badania spinowego efektu Halla

Prosty oraz odwrotny spinowy efekt Halla jest obecnie powszechnie stosowany do generacji oraz detekcji prądów spinowych i polaryzacji spinowej, mimo że od pierwszych pomiarów SEH upłynęło niecałe dziesięć lat [12]. Indukowane przez SEH prądy spinowe są wykorzystywane do generacji indukowanej prądem dynamiki spinowej [13]. Dzięki wykorzystaniu odwrotnego SEH udało się zmierzyć po raz pierwszy spinowy efekt Seebecka [14]. Również jeden z pierwszych spinowych tranzystorów polowych działa w oparciu o spinowy efekt Halla [56]. Problem badań nad spinowym efektem Halla jest więc dzisiaj osadzony w szerszym kontekście - nie tylko stanowi on jeden z głównych kierunków badań spintroniki (m. in. obok indukowanej prądem dynamiki spinowej, spinowych efektów termoelektrycznych), ale także jest jednym z jej podstawowych narzędzi badawczych umożliwiając generację spinowej polaryzacji i prądów spinowych w materiałach niemagnetycznych. W niniejszym rozdziale omówiony zostanie sposób pomiaru prostego i odwrotnego SEH oraz możliwości jego wykorzystania w układach elektroniki spinowej.

Pierwsze koncepcje pomiaru SEH zostały zaproponowane w teoretycznych pracach Hirscha [4] i Zhanga [57]. Hirsch zaproponował układ, w którym w jednej jego części prąd spinowy generowany przez SEH jest wstrzykiwany do innej części tego układu, gdzie odbywa się detekcja wykorzystująca odwrotny SEH. Układ przedstawiony jest na rys.2.1 (a). Rozważana jest podłużna płytka o długości L, mniejszej niż droga dyfuzji spinu, przez którą w kierunku x przepływa prąd elektryczny j_x . W wyniku spinowo-zależnych procesów rozproszeniowych w kierunku prostopadłym do kierunku przepływu prądu j_x pojawi się spinowa akumulacja na przeciwległych brzegach płytki. Kiedy oba brzegi płytki zostaną połączone przez, wykonany z tego samego przewodnika, wąski pasek o szerokości l, wówczas popłynie przez niego prąd spinowy i odwrotny spinowy efekt Halla wyindukuje napięcie elektryczne. Przekształcenie spinowego efektu Halla w odwrotny spinowy efekt Halla, aby zaobserwować i zmierzyć ten pierwszy, okazało się dużym



RYSUNEK 2.1: Schematy ilustrujące geometrię układów pomiarowych zaproponowanych przez Hirscha (a) i Zhanga (b). Rysunek (a) pochodzi z pracy [4], a rysunek (b) - z [57].

wyzwaniem dla eksperymentatorów. Proponowany przez Hirscha sposób pomiaru SEH został zrealizowany dopiero w 2010 roku przez grupę z Uniwersytetu w Würzburgu [58].

Koncepcja Zhanga, zainspirowana eksperymentem Johnsona i Silsbee'ego [59], oparta była na pomiarze zależności potencjału elektrochemicznego ferromagnetycznej elektrody dołączonej do płytki, w której zachodzi SEH, od względnej orientacji namagnesowania elektrody i spinowej akumulacji w niemagnetycznej płytce (rys.2.1(b)). Jeśli przyłożymy ferromagnetyczną elektrodę pomiarową do brzegu niemagnetycznej metalicznej płytki w której zachodzi SEH, to jej średni potencjał chemiczny na interfejsie musi dopasować się do potencjału chemicznego tej płytki.

Propzycje Hirscha jak i Zhanga były propozycjami elektrycznego pomiaru SEH. Obaj autorzy rozważali SEH indukowany procesami rozproszeniowymi. W teoretycznych pracach Murakamiego [36] oraz Sinovy [37] na temat wewnętrznego SEH zaproponowany został sposób detekcji oparty o optyczne własności materiałów półprzewodnikowych i ich silny związek z polaryzacją spinową. Sinova proponował pomiar oparty na magnetooptycznym efekcie Kerra lub Faradaya, natomiast Murakami sugerował również wykorzystanie kołowo spolaryzowanej elektroluminescencji.

2.1 Metody optyczne badania SEH w półprzewodnikach

W 2004 roku grupa D.D. Awschaloma z Uniwersytetu w Kaliforni, wykorzystując właśnie magnetooptyczny efekt Kerra, jako pierwsza zaobserwowała spinowy efekt Halla. [12]. Półprzewodnikowa próbka arsenku galu typu n (n-GaAs) otrzymanego metodą epitaksji została umieszczona w niskotemperaturowym mikroskopie Kerra jak na rys.2.2(a). Warstwa n-GaAs ma szerokość $77\mu m$ oraz długość $300\mu m$. Wiązka laserowa spolaryzowana liniowo zorientowana jest



RYSUNEK 2.2: Spinowy efekt Halla w GaAs. Pomiar wykonano w T = 30K. (a) Schemat układu pomiarowego. (b) Kąt Kerra w funkcji zewnętrznego pola magnetycznego dla położeń wiązki światła $x = \pm 35 \mu m$ i dla wartości pola elektrycznego $E = 10mV/\mu m$. Rysunek pochodzi z pracy [12].

wzdłuż osi z. Wiązka odbita, będzie miała oś polaryzacji obróconą o pewien kąt w stosunku do osi polaryzacji wiązki padającej. Kąt ten jest proporcjonalny do wypadkowej magnetyzacji warstwy GaAs, generowanej przez spiny elektronów. Rysunek 2.2(b) przedstawia pomiar kąta Kerra w funkcji zewnętrznego pola magnetycznego skierowanego w płaszczyźnie warstwy i prostopadle do pola elektrycznego. Pomiary wykonane były w temperaturze 30K. Czerwona i niebieska krzywa odpowiadają pozycji wiązki dla $x = \pm 35 \mu m$ (położenia te odpowiadają brzegom warstwy) i mogą być interpretowane jako rzuty polaryzacji spinowej na oś z. Widać więc, że wraz ze wzrostem pola magnetycznego polaryzacja spinowa zanika w wyniku precesji Hanle'a [60]. Sygnał kerrowski zmienia znak na przeciwnych brzegach warstwy, co wskazuje, że akumulacja spinowa jest spolaryzowana w kierunku +z dla $x = -35\mu m$ oraz w kierunku -z dla $x = +35\mu m$.

Przytaczane wyniki stanowią piękną ilustrację spinowego efektu Halla i potwierdzają podstawowe założenia teoretyczne (polaryzacja spinowa skierowana prostopadle do płaszczyzny warstwy i zorientowana przeciwnie na jej przeciwległych brzegach).

Również w oparciu o spektroskopię Kerra, Stern i in. [61] zmierzyli SEH w epitaksjalnej warstwie ZnSe typu n w temperaturach pokojowych. Silny sygnał SEH w temperaturach pokojowych stworzył realną możliwość czysto elektrycznego kontrolowania i generowania polaryzacji spinowej w półprzewodnikach. Autorzy obu prac w swoich pomiarach wskazują procesy rozproszeniowe jako źródło SEH.

Wunderlich i in. [62] zaproponował pomiar SEH w złączu p-n. Układ składał się z dwóch diod świecących LED (ang. *light-emitting diode*), które pozwalały mierzyć spolaryzowane kołowo światło generowane w wyniku zjawiska elektroluminescencji. Badana w cytowanej powyżej pracy dioda to heterostruktura półprzewodnikowa (Al, Ga)As/GaAs wykonana metodą molekularnej epitaksji oraz przy wykorzystaniu optycznej oraz elektronowej litografii. Przekrój diody przedstawiony jest na rys.2.3(a), na którym schematycznie zaznaczono sytuację gdy, w wyniku przyłożenia napięcia w kierunku przewodzenia, elektrony z obszaru dwuwymiarowego gazu elektronowego przechodzą do obszaru dwuwymiarowego gazu dziurowego i tam rekombinują.



RYSUNEK 2.3: Dioda LED wykorzystana do pomiaru SEH. Przekrój przez złącze p-n tworzące diodę LED (a), układ wykorzystany do pomiaru SEH - zdjęcie ze skaningowego mikroskopu elektronowego (b). Polaryzacja wzdłuż kierunku z mierzona dla aktywnej diody LED1 dla dwóch przeciwnych orientacji prądu I_p (c). Polaryzacja wzdłuż osi z mierzona dla ustalonego I_p gdy do diody LED1 lub LED2 przyłożone jest napięcie bramkujące (d). Rysunek pochodzi z [62].

Optyczne reguły wyboru powodują, że polaryzacja kołowa wzdłuż danego kierunku propagującego światła wskazuje orientację spinowej polaryzacji rekombinujących nośników. Tak więc mierząc polaryzację kołową emitowanego światła otrzymujemy informację o spinowej polaryzacji nośników. Rysunek 2.3(b) przedstawia zdjęcie ze skaningowego mikroskopu elektronowego układu pozwalającego mierzyć SEH. Prąd I_p przepływający przez kanał p w kierunku x będzie generował SEH. W trakcie pomiaru kołowej polaryzacji światła rozchodzącego się w kierunku z przyłożone jest napięcie do jednej z diod. Kiedy przykładamy napięcie, np. do diody *LED 1*, polaryzacja emitowanego światła ¹ jest niezerowa i zmienia znak (a więc polaryzacja spinowa - $\langle s_z \rangle$ dziur jest niezerowa i zmienia znak) gdy zmieniamy kierunek przepływu prądu I_p (rys.2.3c). Rysunek 2.3(d) przedstawia sytuację, gdy kierunek przepływu prądu I_p jest ustalony, natomiast aktywna jest albo dioda *LED 1* albo dioda *LED 2*. Przeciwne znaki dla pomiaru polaryzacji kołowej światła emitowanego przez te dwie diody potwierdzają, że akumulacja spinowa generowana przez SEH ma przeciwne orientacje po przeciwnych brzegach kanału (patrz rys.2.3(b)) w którym efekt jest mierzony.

W następnych pracach [56, 63] autorzy wykorzystali koplanarną diodę p-n pracującą jako fotokomórka, co pozwoliło na optyczną generację polaryzacji spinowej oraz jej elektryczną detekcję. Rysunek 2.4(a) przedstawia schemat rozważanej mikrostruktury, która składa się ze złącza p-n oraz krzyży holowskich. Układ nie przewodzi gdy nie przyłożymy napięcia, lub przyłożymy

 $^{^{1}}$ W pomiarze badana jest polaryzacja emitowanego światła związana z pikiem B na widmie fotoluminescencyjnym dla omawianego układu. Pik ten związany jest z rekombinacją elektronów z pasma walencyjnego z dziurami tworzącymi dwuwymiarowy gaz dziurowy. Na rysynkach 2.3(c),(d) zakres energii odpowiada właśnie zakresowi energii przy którym występuje pik B. Szczegółowe informacje w [62].



RYSUNEK 2.4: Schemat koplanarnego złącza p-n pracującego jako dioda LED oraz geometria pomiaru SEH (a). Stacjonarny sygnał oporności holowskiej dla spinowo-spolaryzowanych nośników wstrzykniętych do obszaru dwuwymiarowego gazu elektronowego (b). Zmiana znaku związana jest ze zmianą polaryzacji na przeciwną. Schemat tranzystora spinowego (c) oraz zależność napięcia holowskiego w funkcji napięcia bramkującego (d). Opis w tekście. Rysunki (a) i (b) pochodzą z [63], a rysunki (c), (d) z pracy [56].

napięcie w kierunku zaporowym. Jeśli jednak, tak przygotowane złącze, oświetlimy światłem o odpowiedniej długości fali, to wygenerujemy poruszające się w przeciwnych kierunkach elektrony i dziury. Nośniki te, z uwagi na wspomniane wyżej reguły wyboru będą spinowo spolaryzowane. Ponieważ padająca wiązka światła skierowana jest prostopadle do płaszczyzny złącza p-n, to polaryzacja spinowa będzie również zorientowana prostopadle do płaszczyzny mikrostruktury.

Na rysunku 2.4(b) przedstawiony jest opór holowski $R_H = V_H/I_{PH}$ zmierzony na krzyżu H2, w temperaturze 4K, dla różnych polaryzacji padającego na złącze światła przy napięciu $V_B = -10V$ [63]. Autorzy mieli możliwość elektrycznej kontroli polaryzacji padającego światła. Przedstawione na rysunku wyniki wskazują że opór R_H zmienia znak gdy zmienimy skrętność polaryzacji kołowej na przeciwną oraz znika gdy światło jest spolaryzowane liniowo. Zależność od czasu t_m wskazuje na stabilność mierzonego sygnału elektrycznego.

W oparciu o omówiony powyżej mikroukład Wundrlich i in. [56] zaproponowali model tranzystora spinowego. Na rysunku rys.2.4(c) przedstawiony jest schemat takiego tranzystora. Układ, dzięki elektrodzie bramkującej przed pierwszym krzyżem holowskim może pracować w dwóch reżimach. Pierwszy zakres pracy takiego urządzenia to zakres dużych ujemnych napięć bramki, gdy sygnał holowski zanika w związku z silnym potencjałem odpychającym na bramce uniemożliwiającym spinowo-spolaryzowanym elektronom dyfuzję z obszaru optycznego pompowania do krzyża holowskiego. Drugi zakres - dla napięć na bramce otwierających kanał transportowy. W tym obszarze napięcie holowskie początkowo rośnie, a następnie zachowuje się w sposób niemonotoniczny, przy czym, mierzony sygnał jest, tak jak w analizowanym poprzednio przykładzie, sygnałem od czystego prądu spinowego (indukowany optycznie prąd elektryczny jest drenowany przed elektrodą bramki). Na rysunku 2.4(d) przedstawiona jest zależność napięcia holowskiego oraz fotoprądu I_{PH} w funkcji napięcia bramkującego dla dwóch różnych położeń wiązki światła. Czerwona linia przedstawia zależność napięcia holowskiego przy położeniu wiązki światła w pobliżu złącza p-n w obszarze p, natomiast czarna przerywana linia przedstawia zależność napięcia holowskiego dla położenia wiązki przesuniętej o około $1\mu m$ w głąb obszaru p. Dla obu położeń wiązki sygnał znika przy tym samym ujemnym napięciu bramkującym. Dla napięć, przy których kanał jest otwarty obserwujemy, że sygnały mają przeciwny znak dla zadanej wartości napięcia bramkującego oraz że maksima tych zależności są przesunięte względem siebie. Obserwujemy także większe wartości sygnału dla położenia wiązki światła bliżej krzyża holowskiego. Pośrednie pola elektryczne wytwarzane przez elektrodę bramkującą modyfikują precesję spinową wstrzykiwanych elektronów, a co za tym idzie polaryzację spinową mierzoną na krzyżu holowskim. Zakres pracy zaproponowanego tu tranzystora spinowego przy pośrednich napięciach odpowiada zakresowi pracy zaproponowanego po raz pierwszy tranzystora spinowego Datty-Das [64].

2.2 Elektryczny pomiar SEH w układach metalicznych

O ile optyczne metody detekcji SEH bardzo dobrze rozwinęły się w przypadku półprzewodników, co jest związane z faktem, że dla tych materiałów długość dyfuzji spinu jest znacznie większa niż promień "plamki" wiązki laserowej (rzędu $1 \mu m$), to w przypadku metali z nanometrową drogą dyfuzji spinu są one nieefektywne.

Tak więc, w przypadku układów metalicznych eksperymentatorzy starają się raczej realizować pomiar oparty na propozycji Zhanga [57]. Pierwszy czysto elektryczny niskotemperaturowy (4.2K) pomiar odwrotnego spinowego efektu Halla wykonali Valenzuela i Tinkham [65], którzy wykorzystali pomysł Zhanga modyfikując układ pomiarowy tak, aby nie był on zakłócony przez inne efekty spinowe takie jak anizotropowy magnetoopór w ferromagnetycznych elektrodach, spinowo-zależne rozpraszanie na interfejsie czy też anomalny i klasyczny efekt Halla. Rysunek 2.5(a) przedstawia obraz układu pomiarowego wykonany mikroskopem sił atomowych. Układ ten składa się z ferromagnetycznych elektrod (F1 i F2) wykonanych z CoFe oraz wykonanego z aluminium krzyża holowskiego. Prad elektryczny płynie przez ferromagnetyczną elektrodę a następnie przez pasek aluminium tak jak przedstawiono na rysunku 2.5(b). Prąd spinowy wstrzykiwany jest z ferromagnetycznej elektrody do aluminium w wyniku nierównowagowego rozszczepienia potencjału elektrochemicznego dla spinów w górę i w dół po obu stronach złacza między elektroda F1 i aluminium (rys.2.5(c)). Ten wstrzyknięty prąd spinowy będzie przepływał przez krzyż holowski, gdzie w wyniku odwrotnego SEH pojawia się napięcie (V_{SH}) . Napięcie V_{SH} będzie proporcjonalne do skierowanej prostopadle do płaszczyzny polaryzacji spinowej, którą możemy zmieniać przyłożonym prostopadle do płaszczyzny układu polem magnetycznym. Możemy więc zdefiniować holowski opór spinowy $R_{SH} = V_{SH}/I$ i dokonać jego pomiaru w funkcji wartości



RYSUNEK 2.5: Pomiar odwrotnego SEH w układzie metalicznym. Zdjęcie układu pomiarowego wykonane przy pomocy mikroskopu sił atomowych (a). Schematyczny rysunek przedstawiający geometrię pomiaru odwrotnego SEH (b). Potencjał elektrochemiczny w funkcji położenia dla elektronów ze spinem "w górę" i "w dół" oraz gęstość prądu spinowego w funkcji położenia (c). Spinowy opór holowski (białe kółka) oraz sinus kąta magnetyzacji θ (czarne kropki) w funkcji zewnętrznego pola magnetycznego skierowanego prostopadle do płszczyzny układu (d). Pomiar wykonano dla różnych wartości L_{SH} zdefiniowanej na rys.(b). Rysunek pochodzi z pracy [65].

indukcji pola magnetycznego. Wyniki takiego pomiaru przedstawione są na (rys.2.5(d)), gdzie oprócz R_{SH} mierzony jest sin(θ), który niesie informację o wychyleniu namagnesowania elektrody F1 od płaszczyzny. Dysponując tymi pomiarami autorom pracy udało się oszacować kąt holowski $\sigma_{SH}/\sigma_c = (1-3) \times 10^{-4}$.

Kimura i in. [66] w 2007 roku zmierzyli prosty oraz odwrotny efekt Halla w temperaturach pokojowych. Rysunek 2.6 (a) przedstawia obraz ze skaningowego mikroskopu elektronowego przedstawiający układ wykorzystany do pomiaru akumulacji spinowej i ładunkowej związanych z prostym i odwrotnym SEH [67]. Układ składa się z paska permaloyu, miedzianego krzyża oraz platynowego drutu. Aby wyindukować dużą akumulację spinową w miedzi, wybrano wymiary złącza Py/Cu 100 nm × 100 nm, natomiast odległość między pkt. 1 i 3 (patrz rysunek 2.6 (a)) wynosi 400 nm.

Rozważmy najpierw sytuację, gdy prąd ładunkowy jest wstrzykiwany z ferromagnetycznego permaloyu do miedzi. Odpowiednio przyłożone napięcie bramkujące powoduje, że prąd ten może płynąć wzdłuż jednego z dwóch ramion krzyża holowskiego, natomiast akumulacja spinowa na złączu indukuje dyfuzyjny przepływ prądu spinowego.



RYSUNEK 2.6: Spinowy efekt Halla w układzie Py/Cu. Obraz układu pomiarowego wykonany przy pomocy skaningowego mikroskopu elektronowego oraz jego schematyczny rysunek (a). Zmiana oporności Halla, dana przez $\Delta V_c/I$, wywołana odwrotnym SEH w funkcji zewnętrznego pola magnetycznego. Pomiar wykonano w temperaturze pokojowej (RT) (b) oraz w 77K (c). Oporność holowskia $\Delta V_s/I$ wywołana SEH w funkcji zewnętrznego pola magnetycznego dla temperatury pokojowej (d) oraz dla 77K (e). Wstawki na rysunkach (c) i (e) przedstawiają geometrię pomiaru. Rysunek pochodzi z pracy [66].

Jeśli więc odległość między złączem Py/Cu a Cu/Pt jest mniejsza od drogi dyfuzji spinu ($L_s \approx 500$ nm), to prąd spinowy będzie absorbowany do drutu platynowego (por. rys. 2.6 (b),(c)). Prąd spinowy jest chętnie absorbowany do materiału z mniejszą opornością spinową. Ponieważ opór spinowy ² dla platyny jest o rząd wielkości mniejszy niż dla miedzi, to wyindukowany prąd spinowy w miedzi może być skierowany do platynowego drutu, tak jak to pokazano na rysunku 2.6 (c). Wstrzyknięty do platyny prąd spinowy bardzo szybko zanika z uwagi na bardzo małą długość dyfuzji spinu dla tego metalu co powoduje, że prąd spinowy płynie w zasadzie prostopadle do płaszczyzny złącza. W związku z powyższym, wzdłuż platynowego drutu, w wyniku odwrotnego SEH indukuje się prąd ładunkowy. Aby zmierzyć powstałą w wyniku odwrotnego SEH akumulację ładunku dokonano pomiaru napięcia holowskiego V_c w platynie. Aby zwiększyć akumulację spinową w platynie przyłożone pole magnetyczne skierowane równolegle do płaszczyzny permaloyu. Rysunek 2.6 (b),(c) przedstawia zmianę oporu holowskiego $\Delta V_c/I$, która pojawia się w wyniku odwrotnego SEH, od przyłożonego pola magnetycznego w temperaturze pokojowej (RT) oraz w temperaturze 77 K. Widoczna na tych zależnościach histereza potwierdza, że badana akumulacja ładunku jest indukowana przez prąd spinowy wstrzykiwany z permaloyu.

Autorom udało się również zmierzyć prosty SEH. W tym przypadku platynowy drut wykorzystuje się jako źródło prądu spinowego. Przepływający przez platynę prąd ładunkowy, z uwagi

²W omawianej pracy opór spinowy jest zdefiniowany następująco: $R_s = \lambda/[\sigma S(1-P^2)]$, gdzie λ - długość drogi dyfuzji spinu, P - polaryzacja spinowa, σ - przewodność, S efektywne pole przekroju poprzecznego przewodnika przez który płynie prąd spinowy (por. [68]).

na silne oddziaływanie spin - orbita indukuje w kierunku poprzecznym akumulację spinową i prąd spinowy, który jest następnie pompowany do miedzi. Na rysunku 2.6 (d),(e) przedstawione są zależności sygnału napięciowego V_s związanego z wyindukowaną akumulacją spinową w platynie $\Delta V_s/I$ od pola magnetycznego w temperaturze pokojowej i w 77 K.

Zauważmy, że w funkcji pola $\Delta V_s/I$ zachowuje się bardzo podobnie do $\Delta V_c/I$ i co więcej całkowita zmiana oporności ΔR_s jest taka sama jak ΔR_{SHE} . Kąt holowski dla platyny otrzymany w eksperymencie wynosił $\sigma_{SH}/\sigma_c = 3.7 \times 10^{-1}$

2.3 Elektryczny pomiar SEH w układach półprzewodnikowych

Brune i in. [58] zaproponowali elektryczny pomiar spinowego efektu Halla w studni kwantowej HgTe/(Hg,Cd)Te. Dwuwymiarowy gaz elektronowy w takich strukturach charakteryzuje się wysoką ruchliwością nośników oraz dużym rozszczepieniem spin-orbita typu Rashby, które dodatkowo możemy kontrolować poprzez zmianę napięcia bramkującego przykładanego do układu. Układ pomiarowy tworzy, wykonana metodą litografii elektronowej, próbka w kształcie litery H. Dwa jej ramiona mają długość 1 μ m oraz szerokość 200nm, a element łączący ma 200nm długości oraz 200nm szerokości. Ponieważ średnia droga swobodna w tego typu nanostrukturach wynosi więcej niż 2.5 μ m, transport w rozważanym układzie odbywa się w reżimie quasi-balistycznym. Rysunek 2.7(a) przedstawia schematyczny rysunek omawianej nanostruktury "H" oraz jej zdjęcie wykonane przy pomocy mikroskopii elektronowej.



RYSUNEK 2.7: Elektryczny pomiar SEH w studni kwantowej HgTe/(Hg,Cd)Te. Schemat układu pomiarowego oraz zdjęcie z mikroskopii elektronowej (a). Pomiar nielokalnej rezystancji w funkcji napięcia bramkującego w konfiguracjach przedstawionych na wstawkach (b), (c). Rysunek pochodzi z pracy [58].

Pomiar spinowego efektu Halla w takiej strukturze odbywa się następująco. Prąd elektryczny, który przepływa przez jedno ramię litery H (np. między kontaktami 1 i 2) generuje w wyniku SEH poprzeczny prąd spinowy. Prąd ten płynie przez element łączący oba ramiona i w wyniku odwrotnego SEH generuje prad ładunkowy w drugim ramieniu. Tak więc, między kontaktami 3 i 6 pojawia się napięcie, które możemy zmierzyć bezpośrednio przy pomocy woltomierza. Zmieniając napięcie bramkujące możemy zmienić położenie poziomu Fermiego i dokonać pomiaru SEH zarówno gdy poziom Fermiego leży w paśmie walencyjnym (próbka jest półprzewodnikiem typu p) jak również gdy Poziom Fermiego leży w paśmie przewodnictwa (półprzewodnik typu n). W zakresie gdzie układ jest typu p oddziaływanie spin-orbita jest silniejsze i sygnał jest o jeden rząd wielkości większy niż dla sytuacji w której próbka jest półprzewodnikiem typu p. Rysunek 2.7(b),(c) przedstawia wyniki dla nielokalnej rezystancji mierzonej w funkcji napięcia bramkującego, pochodzącej od SEH, przy zamianie kontaktów prądowych i napięciowych. Dzięki rozmiarom układu wyniki przedstawione na obu wykresach nie są zakłócone przez sygnał od kwantowego spinowego efektu Halla. Co więcej, gdy poziom Fermiego leży w paśmie walencyjnym zamiana kontaktów prądowych z napięciowymi, w zasadzie nie wpływa na nielokalną rezystancję pochodzącą od SEH, a relacja Onsagera jest spełniona.

Część II

Spinowy efekt Halla w dwuwymiarowym gazie elektronowym

Rozdział 3

Dwuwymiarowy gaz elektronowy ze stałym oddziaływaniem spin-orbita Rashby

3.1 Dwuwymiarowy gaz elektronowy

Dzięki opracowanym współcześnie metodom wytwarzania nanostruktur, takich jak np. epitaksja z wiązki molekularnej (MBE - molecular beam epitaxy) czy epitaksja z pary związków metaloorganicznych (MOVPE - metallorganic vapour phase epitaxy) [69], możliwe stało się nie tylko wytwarzanie pojedynczych cienkich warstw półprzewodnikowych ale także nakładanie na siebie dwóch lub więcej różnych warstw półprzewodników. Struktury składające się z nałożonych naprzemiennie warstw różnych półprzewodników nazywane są heterostrukturami półprzewodnikowymi [69, 70].

Półprzewodniki wchodzące w skład heterostruktury charakteryzują się m.in. różnymi przerwami energetycznymi (rys. 3.1(a)). Na granicy między dwoma materiałami musi nastąpić więc zmiana szerokości przerwy energetycznej oraz dopasowanie obu struktur pasmowych. Ponieważ w równowadze termodynamicznej poziom Fermiego musi mieć taką samą wartość po obu stronach złącza, natomiast w głębi każdego półprzewodnika jest on określony przez poziom domieszkowania, będziemy obserwować, związane z gromadzącym się na interfejsie ładunkiem przestrzennym, zaginanie się pasm. Jako przykład na rysunku 3.1(b) przedstawione jest izotypowe złącze n-N. Z uwagi na warunek ciągłości poziomu Fermiego na interfejsie, obserwujemy po stronie półprzewodnika z mniejszą przerwą energetyczną tzw. obszar wzbogacony ładunku przestrzennego dla elektronów, a po stronie półprzewodnika o większej przerwie energetycznej - tzw. obszar zubożony o dużym dodatnim ładunku przestrzennym, który jest konsekwencją wysokiej koncentracji zjonizowanych donorów. Obserwujemy więc przechodzenie elektronów walencyjnych z donorów



RYSUNEK 3.1: Heterozłącze n-N. (a) Schematyczne przedstawienie dwóch półprzewodników nie będących w kontakcie. Położenie poziomu Fermiego w obu półprzewodnikach zależy od struktury pasm energetycznych oraz od koncentracji donorów. (b) Te same półprzewodniki po utworzeniu heterozłącza znajdujące się w równowadze termodynamicznej. Ponieważ poziom Fermiego jest niezależny od współrzędnej położenia, więc część elektronów z obszaru N przechodzi do obszaru n. (c) Symetryczna studnia kwantowa - np. gdy donory znajdują się na zewnątrz studni, a elektrony tworzące 2DEG wzbudzane są termicznie. (d) Seria studni kwantowych tworząca supersieć.

do energetycznie korzystniejszej studni potencjału, która wytworzyła się w wyniku zaginania pasm po stronie półprzewodnika o mniejszej przerwie energetycznej.

Widać więc, że w nanostrukturach półprzewodnikowych możliwa jest przestrzenna separacja atomów domieszek od swobodnych nośników (tzw. domieszkowanie modulacyjne). Elektrony związane w tak powstałej studni kwantowej tworzą dwuwymiarowy gaz elektronowy. Kształt barier potencjału może być różny. Na rysunku 3.1(c) przedstawiono również prostokątną studnię kwantowa z dwuwymiarowym gazem elektronowym. Aby wytworzyć taka studnie kwantowa atomy donorów wprowadza się tylko do materiału bariery i w wyniku wzbudzenia termicznego elektrony walencyjne donorów przechodzą do pasma przewodnictwa materiału o większej przerwie energetycznej, a następnie zostają wychwycone przez niskoenergetyczne stany studni kwantowej. Innym sposobem jest wytworzenie całej serii warstw półprzewodników n i N o różnych przerwach energetycznych. W takiej sytuacji powstaje seria studni kwantowych (rys.3.1(d)) i mówimy o tzw. supersieciach. O ile w objętościowych półprzewodnikach domieszkowanych ruchliwość nośników jest bardzo mała, to w nanostrukturach półprzewodnikowych, w wyniku domieszkowania modulacyjnego, ruchliwość nośników jest znacznie większa. W praktyce, w omawianych strukturach, obszar bariery znajdujący się w bezpośredniej bliskości studni jest niedomieszkowany i tworzy warstwę dodatkowo oddalającą ładunki donorów od swobodnych elektronów przez co eliminuje się rozpraszanie elektronów na domieszkach w bezpośrednim sąsiedztwie złącza lub bariery.

Dwuwymiarowy gaz elektronowy (2DEG - ang. *two-dimensional electron gas*), który można obecnie wytwarzać w różnego typu strukturach półprzewodnikowych na skalę przemysłową, stał się podstawowym obiektem badań mikroelektroniki, optoelektroniki oraz fizyki układów mezo-skopowych, które zaowocowały odkryciem wielu nowych efektów ważnych dla mikroelektroniki oraz elektroniki spinowej.

Rozważamy więc dwuwymiarowy gaz elektronowy uwięziony w studni potencjału. Elektrony poruszają się swobodnie w kierunku równoległym do złącza, natomiast w kierunku prostopadłym do złącza (przyjmijmy, że jest to kierunek osi z) ruch elektronów jest ograniczony. Dynamika elektronów może więc być opisana w ogólności równaniem:

$$\left[\left(i\frac{\hbar}{2m}\nabla + e\mathbf{A}\right)^2 + U\right]\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \qquad (3.1)$$

gdzie *m* - masa efektywna (traktowana tu dla uproszczenia jako stały parametr), **A** - potencjał wektorowy. Ponieważ elektron jest swobodny w kierunku równoległym do złącza, więc energia potencjalna będzie zależeć tylko od zmiennej *z* (U = U(z)). W związku z tym, zakładając rozwiązanie równania (3.1) w postaci: $\Psi(\mathbf{r}) = \chi(z)e^{i(k_x x + k_y y)}$ oraz przyjmując **A** = 0 otrzymamy dwa niezależne równania różniczkowe:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z} + U\right)\chi(z) = (E - \varepsilon)\chi(z), \qquad (3.2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x} + \frac{\partial^2}{\partial y}\right)e^{i(k_x x + k_y y)} = \varepsilon e^{i(k_x x + k_y y)}.$$
(3.3)

Równanie (3.3) ma natomiast następujące wartości własne:

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2). \tag{3.4}$$

Rozwiązanie równania (3.2) będzie natomiast zależało od postaci potencjału ograniczającego studnię U. W przypadku prostokątnej studni potencjału o szerokości L otrzymujemy dobrze znane rozwiązanie:

$$E - \varepsilon = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \frac{n^2}{L^2} = E_n \qquad (n = 1, 2, 3, ...).$$
(3.5)

Tak więc wartości własne całkowitej energii elektronów dwuwymiarowego gazu elektronowego tworzą całą rodzinę podpasm:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) + E_n.$$
(3.6)

Każde podpasmo indeksowane jest przez liczbę n, której odpowiada inna funkcja falowa $\chi_n(z)$. W niskich temperaturach i dla małej koncentracji nośników obsadzone jest tylko najniższe pasmo (dla n = 1) a pozostałe podpasma nie odgrywają znaczącej roli.

3.2 Oddziaływanie spin-orbita

Dwuwymiarowy gaz elektronowy jest więc układem modelowym, który z jednej strony możemy badać eksperymentalnie i stosować w mikroelektronice, a z drugiej strony jest punktem wyjścia do opisu bardziej skomplikowanych struktur półprzewodnikowych i niskowymiarowych układów metalicznych. Obecnie rozwinięta technologia pozwala na kontrolę wzrostu studni kwantowej, domieszkowania, kształtu potencjału ograniczającego itd. W związku z tym dwuwymiarowy gaz elektronowy jest doskonałym układem modelowym do badania transportu ładunkowego oraz spinowego indukowanego różnym typem oddziaływań spinowo-orbitalnych.

W niniejszej pracy dwuwymiarowy gaz elektronowy będzie omawiany w kontekście struktur półprzewodnikowych III-V. Są to półprzewodniki o strukturze blendy cynkowej z prostą przerwą energetyczną. W przypadku słabego domieszkowania, w badaniach transportu, możemy ograniczyć się do struktury pasmowej wokół punktu Γ strefy Brillouina, gdzie znajduje się paraboliczne pasmo przewodnictwa typu s oraz pasmo walencyjne typu p z trzema gałęziami. Efektywny jednocząstkowy hamiltonian, dla elektronów z pasma przewodnictwa w półprzewodnikach III-V, może być otrzymany przy wykorzystaniu metody $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ oraz transformacji unitarnej typu Foldy-Wouthuysena [71–74]. Hamiltonian ten możemy dość ogólnie zapisać następująco [29, 75]:

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V + H_w^{so} + H_d^{so}, \qquad (3.7)$$

gdzie

$$H_w^{so} = \frac{\hbar}{2} \mathbf{\Omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} \,, \qquad \mathbf{\Omega}(\mathbf{k}) = \frac{e}{m} \mathbf{B}_{eff}^{so} \,, \tag{3.8}$$

$$H_d^{so} = \lambda \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{k} \times \nabla V) \,. \tag{3.9}$$

W powyższych wyrażeniach $k^2 = k_x^2 + k_y^2$, m - masa efektywna, V - potencjał pochodzący od domieszek lub innych defektów. Człon H_w^{so} opisuje tzw. wewnętrzne oddziaływanie spin-orbita. Człon ten wyrażony jest przy pomocy wektora częstotliwości precesji spinów elektronów $\Omega(\mathbf{k})$ wokół efektywnego pola magnetycznego \mathbf{B}_{eff}^{so} (por. np z [29, 33, 75]). W przypadku omawianego tu dwuwymiarowego gazu elektronowego w strukturach półprzewodnikowych częstotliwość precesji $\Omega(\mathbf{k}) = \Omega(\mathbf{k})_R + \Omega(\mathbf{k})_D$ jest sumą częstotliwości precesji związanej z oddziaływaniem typu Rashby (składnik $\Omega(\mathbf{k})_R$) oraz Dresselhausa (składnik $\Omega(\mathbf{k})_D$). Wspomniane oddziaływania spinowo-orbitalne zostaną omówione w dalszej części tego podrozdziału. O ile zewnętrzne pole magnetyczne indukuje makroskopową polaryzację spinową, to efektywne pole magnetyczne, którego źródłem jest oddziaływanie spin-orbita, generuje tyle samo stanów ze spinem w górę co w dół. Pole \mathbf{B}_{eff}^{so} jest, w ogólności, konsekwencją braku symetrii względem inwersji przestrzennej w układzie. Hamiltonian H_d^{so} opisuje natomiast oddziaływanie spin-orbita, którego źródłem są domieszki.

Wewnętrzne oddziaływanie spin-orbita

Degeneracja spinowa w strukturach półprzewodnikowych jest związana z obecnością w układzie zachowania inwersji w przestrzeni ($\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$) oraz w czasie ($t \to -t$) [74]. Operacja inwersji w przestrzeni zmienia wektor falowy $\mathbf{k} \to -\mathbf{k}$, natomiast operacja odwrócenia czasu oprócz zmiany $\mathbf{k} \to -\mathbf{k}$ obraca spin. W związku z powyższym, obecność w układzie symetrii względem inwersji przestrzennej: $E_+(\mathbf{k}) = E_+(-\mathbf{k})$ oraz względem odwrócenia czasu: $E_+(\mathbf{k}) = E_-(-\mathbf{k})$ daje w konsekwencji, że $E_+(\mathbf{k}) = E_-(-\mathbf{k})$, a więc degenerację spinową w układzie. W strukturach półprzewodnikowych mamy do czynienia z łamaniem symetrii względem inwersji przestrzennej, co prowadzi do pojawienia się oddziaływania spin-orbita w układzie i w konsekwencji również do zniesienia degeneracji spinowej.

W dwuwymiarowym gazie elektronowym mamy do czynienia z łamaniem symetrii względem inwersji przestrzennej, które ma swoje źródło albo w strukturze krystalograficznej, mówimy wtedy o objętościowej asymetrii względem inwersji (BIA - ang. *bulk inversion asymmetry*), albo w kształcie potencjału ograniczającego - w tym przypadku mówimy o strukturalnej asymetrii względem inwersji (SIA - ang. *structural inversion asymetry*).

Oddziaływanie spin-orbita typu Rashby [74, 76, 77] wynika ze złamania symetrii względem inwersji potencjału ograniczającego studni kwantowej (SIA) w kierunku jej wzrostu (asymetria w wyniku zmiany $z \rightarrow -z$) w heterozłączach czy też w domieszkowanych w sposób asymetryczny studniach kwantowych. Wektor opisujący efektywną precesję Larmora, gdy elektrony znajdują się w układzie z oddziaływaniem spin-orbita typu Rashby, przyjmuje postać [33, 75]:

$$\mathbf{\Omega}_R(\mathbf{k}) = \frac{2}{\hbar} \alpha(k_y, -k_x, 0) \tag{3.10}$$

i w związku z tym hamiltonian opisujący oddziaływanie spin-orbita Rashby możemy zapisać w następującej postaci:

$$H_R = \alpha (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x). \tag{3.11}$$

Stała oddziaływania α zależy od potencjału ograniczającego, a jej wartość może być modyfikowana zewnętrznym polem elektrycznym. Efektywne pole magnetyczne pochodzące od oddziaływania spin-orbita typu Rashby ma stałą wartość (dla ustalonego α) i leży zawsze w płaszczyźnie (rys.3.2).

Półprzewodniki III-V czy też II-VI (np. GaAs, ZnSe), ze strukturą krystalograficzną typu blendy cynkowej, posiadają dwa różne atomy w komórce elementarnej Bravais, przez co wykazują one brak symetrii względem inwersji w krysztale (BIA). Oddziaływanie spin-orbita związane z brakiem tej symetrii nazywamy oddziaływaniem spin-orbita typu Dresselhausa. Częstotliwość


RYSUNEK 3.2: Wektor Ω na powierzchni Fermiego w przypadku gdy za pojawienie się oddziaływania spin-orbita odpowiedzialne jest złamanie symetrii potencjału studni kwantowej względem inwersji (SIA) oraz objętościowe (na poziomie komórki elementarnej kryształu) złamanie symetrii względem inwersji (BIA). Kierunek wektora Ω wskazuje także ułożenie spinu na powierzchni Fermiego. Ponieważ elektrony o przeciwnej orientacji spinu mają różne energie, powierzchnia Fermiego złożona jest z dwóch koncentrycznych okręgów z przeciwnie zorientowanymi spinami. Na rysunku dwa okręgi Fermiego przedstawione są tylko dla SIA, natomiast dla BIA pokazano tylko jedno koło Fermiego. W zależności od kierunku wzrostu studni kwantowej BIA generuje efektywne pole związane z oddziaływaniem spin-orbita zorientowane prostopadle do powierzchni Fermiego lub w jej płaszczyźnie. Rysunek pochodzi z pracy [33].

precesji spinu wokół efektywnego pola związanego z BIA, dla układu trójwymiarowego w najniższym rzędzie względem k możemy zapisać [74, 75, 78]:

$$\mathbf{\Omega}_D(\mathbf{k}) = \frac{2}{\hbar} \alpha_c \left(k_x (k_y^2 - k_z^2), k_y (k_z^2 - k_x^2), k_z (k_x^2 - k_y^2) \right),$$
(3.12)

gdzie α_c - stała materiałowa.

W przypadku quasi-dwuwymiarowych struktur, możemy zastąpić operator $-i\partial_z$ przez jego kwantowomechaniczną wartość średnią $\langle k_z \rangle^{-1}$ [74]. W przypadku studni kwantowych wzrastających wzdłuż kierunku krystalograficznego [001] ($z \parallel (001)$) główny wkład, liniowy względem **k**, do częstotliwości precesji Ω będzie miał postać:

$$\mathbf{\Omega}_{D}^{[001]}(\mathbf{k}) = \frac{2}{\hbar} \beta(-k_x, k_y, 0), \qquad (3.13)$$

stała $\beta = \alpha_c \langle k_z^2 \rangle \approx \alpha_c \pi^2 / L^2$ zależy od szerokości studni kwantowej *L*. Porównując powyższe wyrażenie z (3.8) dostajemy następującą postać hamiltonianu Dresselhausa:

$$H_D = \beta(\sigma_x k_x - \sigma_y k_y). \tag{3.14}$$

Oddziaływanie spin-orbita Dresselhausa silnie zależy od kierunku wzrostu studni kwantowej. Na rysunku 3.2 przedstawiona została orientacja spinów na powierzchni Fermiego dla oddziaływania spin-orbita typu Rashby (związanego z SIA) oraz dla oddziaływania spin-orbita Dresselhausa dla trzech różnych kierunków wzrostu studni kwantowej. W sytuacji, gdy kierunek wzrostu studni jest równoległy do kierunku krystalograficznego (110), zachowana jest składowa spinu prostopadła do płaszczyzny (do warstwy dwuwymiarowego gazu elektronowego). Z kolei,

¹Zamieniamy także $(-i\partial_z)^n$ przez $\langle k_z^n \rangle$; przy czym dla nieparzystych n: $\langle k_z^n \rangle = 0$ [74].

gdy $z \parallel (111)$ oddziaływanie spin-orbita Dresselhausa prowadzi do takiego samego rozłożenia orientacji spinów na powierzchni Fermiego jak oddziaływanie spin-orbita Rashby.

Tak więc, jednocząstkowy hamiltonian efektywny dla dwuwymiarowego gazu elektronowego bez domieszek możemy zapisać w następującej formie:

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + H_R + H_D \,. \tag{3.15}$$

Wartości własne tego hamiltonianu:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm k \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 + 2\alpha\beta \sin(2\phi)}; \qquad \phi = \operatorname{arc} \operatorname{tg}(\frac{k_y}{k_x}). \tag{3.16}$$

Wkład od oddziaływania spin-orbita w powyższym wyrażeniu, zgodnie z tym co zostało już wcześniej napisane, możemy traktować jak zależne od pędu pole Zeemanowskie działające na spin elektronu. Z zależności tej wynika również, że jeżeli tylko jedno z tych oddziaływań jest niezerowe ($\alpha = 0$ lub $\beta = 0$), to dwie gałęzie zależności dyspersyjnej są rozsunięte względem siebie horyzontalnie (wzdłuż osi k), a nie wertykalnie (wzdłuż osi energii) jak to ma miejsce dla zwykłego pola Zeemana.

W niskowymiarowych strukturach opartych na GaAl oddziaływanie Rashby i Dresselhausa są zwykle tego samego rzędu. W studniach kwantowych wykonanych z InGaAs zwykle dominuje oddziaływanie Rashby [79–82]. W heterozłączach GaAs/Al_xGa_{1-x}As oraz opartych na krzemie tranzystorach polowych asymetria strukturalna (SIA) jest bardzo silna. Stała oddziaływania Rashby dla tych materiałów wynosi $\alpha \sim 10^{-10} eVm$.

Oddziaływanie spin-orbita od domieszek

Efektywny Hamiltonian opisujący wkład do oddziaływania spin-orbita od domieszek, dla półprzewodników z wąską przerwą energetyczną, ma postać daną równaniem (3.9). Zależność ta jest matematycznie podobna do postaci poprawki od oddziaływania spin-orbita w hamiltonianie Pauliego. Wynika to z faktu, że zarówno opisujący strukturę pasmową półprzewodników hamiltonian Kane'a jak również hamiltonian Diraca posiadają symetrię sferyczną oraz z uwagi na to, że zarówno równanie Pauliego oraz (3.9) zostały otrzymane w przybliżeniu niskich energii [29, 74, 83]. Stała oddziaływania spin-orbita związana z wkładem od domieszek jest ponad sześć rzędów wielkości większa (np. w GaAs $\lambda \approx 5.3 Å^2$, a w InAs $\lambda \approx 120 Å^2$) niż odpowiadająca jej stała dla próżni z równania Pauliego ($\lambda_{Pauli} = -\hbar^2/4m_0^2c^2 \approx -3.7 \times 10^{-6} Å^2$) [29]. Tak znaczne wzmocnienie oddziaływania spin-orbity w strukturach krystalicznych w porównaniu do stałej λ_{Pauli} wynika z faktu, że blochowskie elektrony poruszają się z dużymi prędkościami w silnym polu elektrycznym rdzeni atomowych [74, 83].



RYSUNEK 3.3: Studnie kwantowe z fluktuującym polem Rashby. Fluktuacje oddziaływania spinorbita pojawiają się w wyniku rozmieszczenia w sposób przypadkowy donorów w warstwie sąsiadującej ze studnią kwantową lub w wyniku niejednorodności lub defektów na jej ścianach.

Przestrzenne fluktuacje oddziaływania spin-orbita

W wiekszości rozważanych w literaturze przypadków stałe oddziaływania spin-orbita Rashby i Dresselhausa (α i β) były traktowane jako wielkości stałe (lub dobrze kontrolowalne poprzez zewnętrzne pole elektryczne) w przestrzeni. Należy jednak pamiętać, że oddziaływanie spin-orbita jest zdeterminowane właściwościami materiałowymi i strukturalnymi, a co za tym idzie jakiekolwiek lokalne niejednorodności czy defekty rozważanego układu będą lokalnie zmieniały to oddziaływanie. W ogólnym przypadku efektywne pole opisujące oddziaływania spin-orbita oprócz tzw. wkładu regularnego (stałego lub periodycznego w przestrzeni) zawiera także człon stochastyczny [75, 84]. Przestrzenne fluktuacje oddziaływania spin-orbita będą więc wpływać lokalnie na transport spinowy w układzie. Źródłem fluktuacji pola Rashby będa np. rozłożone przypadkowo zjonizowane donory, które oprócz stałego wkładu do pola Rashby będą dawały również wkład do fluktuacji oddziaływania spin-orbita (fluktuujące pole Rashby). Dodatkowo, każda domieszka jest źródłem lokalnej deformacji komórki elementarnej, która generuje lokalne zaburzenie potencjału krystalicznego i dodatkowy przyczynek do fluktuacji pola spinowo-orbitalnego. Stała oddziaływania Dresselhausa zależy natomiast od szerokości studni kwantowej, a co za tym idzie lokalne niejednorodności na interfejsie będą również generowały wkład stochastyczny do pola oddziaływania spin-orbita. Fluktuacje pola spinowo-orbitalnego generują nieregularną precesję spinową i dają wkład do relaksacji spinowej, są również źródłem spinowo-zależnej lokalizacji [85] i odpowiednika efektu Aharonova-Bohma dla elektronów oddziałujących ze spinami jądrowymi w układach mezoskopowych w kształcie pierścienia [86]. Fluktuacje pola Rashby generują także niezerowy wkład do spinowego efektu Halla [87–91].



RYSUNEK 3.4: (a) Zależność dyspersyjna dla 2DEG z oddziaływaniem spin-orbita Rashby. Zaznaczono również ułożenie spinów (czerwone strzałki) na powierzchni Fermiego dla zadanego pędu (zielone strzałki). (b) W obecności pola elektrycznego **E** powierzchnia Fermiego w czasie t_0 (krótszym niż typowe czasy relaksacji) ulega przesunięciu. Elektrony nabywają efektywny moment siły, który odchyla spiny w górę dla $p_y > 0$, a dla $p_y < 0$ - w dół i w konsekwencji w układzie pojawia się prąd spinowy w kierunku \hat{y} . Rysunek pochodzi z pracy [37].

3.3 Topologiczny SEH w 2DEG z oddziaływaniem spin-orbita typu Rashby i Dresselhausa

Interesuje nas przewodnictwo spinowe związane z prądem spinowym niosącym składowa s_z spinu, a więc składową skierowaną prostopadle do płaszczyzny dwuwymiarowego gazu elektronowego. Ten prąd spinowy jest indukowany w kierunku prostopadłym do kierunku przyłożonego zewnętrznego pola elektrycznego (w kierunku prostopadłym do przepływu prądu ładunkowego) i płynie w płaszczyźnie 2DEG. Rysunek 3.4 ilustruje fizykę omawianego efektu. Na rysunku 3.4(a) przedstawiona jest zależność dyspersyjna dla dwuwymiarowego gazu elektronowego z oddziaływaniem spin-orbita typu Rashby, które działa jak efektywne, zależne od pędu, pole magnetyczne i ustawia spiny elektronów (przedstawione symbolicznie na rysunku jako czerwone strzałki) prostopadle do ich pedu (zielone strzałki na rysunku). W obecności pola elektrycznego, przyłożonego np. wzdłuż kierunku \hat{x} (rys.3.4(b)), elektrony są przyspieszane i dryfują z prędkością $\dot{\mathbf{p}} = -eE\hat{x}$, a powierzchnia Fermiego ulega w czasie t_0 , znacznie krótszym od typowych czasów rozpraszania, przesunięciu o $|eE_xt_0/\hbar|$. To pole elektryczne modyfikuje efektywne pole Rashby i spin elektronu zmienia swoją orientację, tak aby ułożyć się zgodnie z jego kierunkiem, nabywając składowej z-owej. Efektywny moment siły odchyla spin elektronu. Elektrony z $p_y > 0$ nabywają składowej z-owej spinu zorientowanej w kierunku $+\hat{z}$, a elektrony z $p_y < 0$ - składowej w kierunku $-\hat{z}$. Sinova i in. [37] pokazali, że składowa z-owa spinu elektronu zależy liniowo od p_y oraz E_x . Sumując po wszystkich obsadzonych stanach składowa z-owa polaryzacji spinowej znika, ale prąd spinowy w kierunku \hat{y} jest skończony.

Rozważymy spinowy efekt Halla w dwuwymiarowym gazie elektronowym z oddziaływaniem

spin-orbita typu Rashby i Dresselhausa. Hamiltonian efektywny, H, dany jest przez (3.15) oraz przez (3.11) i (3.14). Interesuje nas sytuacja, gdy przepływający w kierunku \hat{y} prąd ładunkowy indukuje, w wyniku oddziaływania spin-orbita, w kierunku \hat{x} prąd spinowy składowej s_z . W tym przypadku formułę (1.8) możemy zapisać w następującej postaci:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e\hbar}{2\omega} \operatorname{Tr} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} [\hat{v}_x, \hat{s}_z]_+ G_{\mathbf{k}}(\varepsilon + \omega) \hat{v}_y G_{\mathbf{k}}(\varepsilon) \,. \tag{3.17}$$

Funkcja Green
a $G_{\mathbf{k}}(\varepsilon)=(\varepsilon-H)^{-1}$ dla rozważanego modelu:

$$G_{\mathbf{k}}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon - \frac{\hbar^2}{2m}k^2 + \alpha(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + \beta(\sigma_x k_x - \sigma_y k_y)}{(\varepsilon - E_+ + i\delta \operatorname{sgn} \varepsilon)(\varepsilon - E_- + i\delta \operatorname{sgn} \varepsilon)},$$
(3.18)

gdzie E_{\pm} to wartości własne hamiltonianu H dane przez (3.16), natomiast prędkości:

$$v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial k_x} = \frac{\hbar}{m} k_x - \frac{\alpha}{\hbar} \sigma_y + \frac{\beta}{\hbar} \sigma_x, \qquad v_y = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial k_y} = \frac{\hbar}{m} k_y + \frac{\alpha}{\hbar} \sigma_x - \frac{\beta}{\hbar} \sigma_y.$$
(3.19)

Wykonując w (3.17) operację śladu, a następnie biorąc granicę $\omega \to 0$, otrzymujemy:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -i\frac{e\hbar^2}{m}(\alpha^2 - \beta^2) \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi^2)} \frac{k_x^2}{(\varepsilon - E_{k+} + i\delta \mathrm{sgn}\varepsilon)^2 (\varepsilon - E_{k-} + i\delta \mathrm{sgn}\varepsilon)^2} \,. \tag{3.20}$$

Całkowanie po ε przeprowadzamy korzystając z twierdzenia o residuach [92] i dostajemy, że:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e\hbar^2}{m} (\alpha^2 - \beta^2) \frac{1}{4\pi^2} \int dk \int_0^{2\pi} d\phi \left[kR_+ f(E_{k+}) + kR_- f(E_{k-}) \right] , \qquad (3.21)$$

gdzie $f(E_{k\pm})$ - funkcje rozkładu Fermiego-Diraca dla podpasma $E_{k\pm}$ (dla T = 0 K), a R_{\pm} to residua funkcji podcałkowej w (3.20) w punkcie $\varepsilon = E_{k\pm} - i\delta \operatorname{sgn} \varepsilon$:

$$R_{+} = -R_{-} = -\frac{\cos^{2}(\phi)}{4k\left(\alpha^{2} + \beta^{2} + 2\alpha\beta\sin(2\phi)\right)^{3/2}}.$$
(3.22)

Podstawiając (3.22) do (3.21) otrzymujemy wyrażenie na spinowe przewodnictwo holowskie w następującej formie:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{1}{16\pi^2} \frac{e\hbar^2}{m} (\alpha^2 - \beta^2) \int dk \int_0^{2\pi} d\phi \frac{\cos^2(\phi) \left(f(E_{k+}) - f(E_{k-})\right)}{\left(\alpha^2 + \beta^2 + 2\alpha\beta\sin(2\phi)\right)^{3/2}}.$$
 (3.23)

Rozważymy najpierw przypadki szczególne - gdy jedno z oddziaływań spinowoorbitalnych można pominąć ($\alpha = 0$ lub $\beta = 0$), a następnie omówimy sytuację gdy w układzie występują oba oddziaływania spin-orbita.

2DEG z oddziaływaniem spin-orbita typu Rashby ($\alpha \neq 0$ i $\beta = 0$)

W sytuacji gdy w układzie dominuje oddziaływanie spin-orbita Rashby, a oddziaływanie Dresselhausa jest zaniedbywalnie małe, możemy położyć $\beta = 0$. Wówczas wyrażenie na przewodnictwo przyjmie postać:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{e}{16\pi} \frac{\hbar^2}{m\alpha} \int dk (f(E_{k+}) - f(E_{k-})) \,. \tag{3.24}$$

Jeśli potencjał chemiczny jest dodatni ($\mu > 0$), to wówczas otrzymujemy:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{e}{16\pi} \frac{\hbar^2}{m\alpha} (k_{F+} - k_{F-}). \qquad (3.25)$$

Ponieważ wektory falowe na poziomie Fermiego dla pasma $E_{k\pm}$ przyjmują postać: $k_{F\pm} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\sqrt{m^2 \alpha^2 + 2\hbar^2 m \mu} \mp m \alpha \right)$, to ostatecznie dostajemy:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e}{8\pi} \,. \tag{3.26}$$

Jeśli potencjał chemiczny jest ujemny ($\mu < 0$), holowskie przewodnictwo spinowe wyraża się wzorem:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e}{16\pi} \frac{\hbar^2}{m\alpha} (k_{F^-}^+ - k_{F^-}^-)$$
(3.27)

z wektorami falowymi na poziomie Fermiego: $k_{F-}^{\pm} = \frac{1}{\hbar^2} \left(m\alpha \pm \sqrt{m^2 \alpha^2 + 2\hbar^2 m\mu} \right)$. Po wstawieniu tych wyrażeń do równania (3.27) znajdujemy, że:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e}{8\pi} \frac{1}{m\alpha} \sqrt{m^2 \alpha^2 + 2\hbar^2 m\mu} \,. \tag{3.28}$$

lub wykorzystując wyrażenia na gęstość cząstek:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e}{8\pi} \frac{n(\mu < 0)}{n(\mu = 0)} \,. \tag{3.29}$$

W powyższym wyrażeniu gęstości cząstek, przy odpowiednim położeniu poziomu Fermiego, dane są wzorami: $n(\mu < 0) = \frac{m\alpha}{\pi\hbar^4} \sqrt{m^2\alpha^2 + 2\hbar^2 m\mu}$ i $n(\mu = 0) = \frac{m^2\alpha^2}{\pi\hbar^4}$.

Wyrażenia na holowskie przewodnictwo spinowe (3.26) oraz (3.29) zostały otrzymane, przy wykorzystaniu innego formalizmu, po raz pierwszy w pracy Sinovy i in. [37]. Holowskie przewodnictwo spinowe w dwuwymiarowym gazie elektronowym przyjmuje stałą uniwersalną wartość równą $e/8\pi$ zawsze, gdy oba rozszczepione, w wyniku sprzężenia spin-orbita, pasma są obsadzone ($\mu > 0$), natomiast gdy obsadzone jest tylko jedno pasmo, $\mu < 0$, przewodnictwo spinowe zanika liniowo wraz z malejącą gęstością cząstek. Przypadek, gdy poziom Fermiego leży tylko w jednym paśmie jest bardzo trudny do zrealizowania i większość otrzymywanych układów znajduje się, ze swymi parametrami, w obszarze gdzie wkład topologiczny do przewodnictwa w SEH przyjmuje wartość uniwersalną. Z

2DEG z oddziaływaniem spin-orbita typu Dresselhausa ($\beta \neq 0$ i $\alpha = 0$)

W przypadku symetrycznych studni kwantowych, oddziaływanie Rashby znika lub jest zaniedbywalnie małe ($\alpha = 0$) i oddziaływanie spin-orbita Dresselhausa staje się istotne. Rachunki prowadzące do wyrażenia na holowskie przewodnictwo spinowe w dwuwymiarowym gazie elektronowym z oddziaływaniem spin-orbita Dresselhausa są analogiczne jak w powyższym przypadku. Otrzymujemy, że

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{e}{8\pi} \tag{3.30}$$

dla $\mu > 0$ oraz

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{e}{8\pi} \frac{n(\mu < 0)}{n(\mu = 0)}$$
(3.31)

gdy $\mu < 0$.

2DEG z oddziaływaniem spin-orbita typu Rashby i Dresselhausa ($\alpha \neq 0$ i $\beta \neq 0$)

W ogólnym przypadku w układzie mamy do czynienia z oddziaływaniami spin-orbita obu typów. Ponieważ oddziaływanie Rashby może być modyfikowane w wyniku przyłożenia napięcia bramkującego, możemy obserwować wzajemne współzawodnictwo obu efektów. Rozważmy więc (3.23) w przypadku realizowanym eksperymentalnie, a więc, gdy oba pasma są obsadzone ($\mu > 0$). W wyniku całkowania po k dostajemy:

$$\sigma_{xy}^{sz} = -\frac{e}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{(\alpha^2 - \beta^2)\cos^2(\phi)}{\alpha^2 + \beta^2 + 2\alpha\beta\sin(2\phi)} \,. \tag{3.32}$$

Spinowe przewodnictwo holowskie w tym przypadku znika dla $|\alpha| = |\beta|$, natomiast gdy wartości stałych Rashby i Dresselhausa są różne, to całkowanie po kącie w powyższym wyrażeniu daje $\pi \operatorname{sgn}(\alpha^2 - \beta^2)$. Ostatecznie otrzymujemy więc, że:

$$\sigma_{xy}^{s_{z}} = \begin{cases} \frac{e}{8\pi}, & \alpha^{2} > \beta^{2}; \\ -\frac{e}{8\pi}, & \beta^{2} > \alpha^{2}; \\ 0, & \alpha^{2} = \beta^{2}. \end{cases}$$
(3.33)

Przypadek $\alpha = \pm \beta$ odpowiada sytuacji, gdy współzawodnictwo między obydwoma oddziaływaniami spinowo-orbitalnymi niszczy SEH. Jeśli w układzie dominuje oddziaływanie Rashby, wówczas przewodnictwo spinowe jest stałe i wynosi $e/8\pi$, jeśli jednak w układzie dominuje oddziaływanie spin-orbita Dresselhausa, wówczas przewodnictwo spinowe zmienia znak ($\sigma_{xy}^{sz} = -e/8\pi$). Tak więc zmieniając napięcie bramkujące przyłożone prostopadle do płaszczyzny dwuwymiarowego gazu elektronowego (a co za tym idzie wartość stałej α) możemy zmieniać znak przewodnictwa spinowego (kierunek przepływu prądu spinowego w układzie). Powyższe własności dwuwymiarowego gazu elektronowego mogą znaleźć zastosowanie w urządzeniach spintronicznych nowej generacji.

Powyższe wyniki są zgodne z wynikami znanymi z literatury [93, 94]. Shen [93] podał związek między topologicznym spinowym przewodnictwem holowskim oraz fazą Berry'ego (γ) :

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e}{8\pi^2}\gamma\,,\tag{3.34}$$

gdzie $\gamma = \pi(\alpha^2 - \beta^2)/|\alpha^2 - \beta^2|.$

W pracy Sinitsyna i in. [94], wykorzystano natomiast teorię liniowej odpowiedzi Kubo. W limicie $\frac{1}{\tau} \rightarrow 0$ autorzy otrzymali wyrażenie na przewodnictwo spinowe dane przez (3.33). Ostre, nieciągłe przejście między poszczególnymi zakresami dla odpowiednich wartości holowskiego przewodnictwa spinowego autorzy tłumaczą właśnie zachowaniem związanym z przejściem do granicy $\frac{1}{\tau} \rightarrow 0$. Uwzględnienie skończonego czasu relaksacji w przybliżeniu Borna daje gładkie, choć bardzo gwałtowne przejście od jednego zakresu do drugiego.

Stosując (1.8) w limicie $\omega \to 0$ i dla przypadku słabego rozpraszania $(\frac{1}{\tau} \to 0)$ otrzymaliśmy analityczne wyniki na wkład topologiczny do holowskiego przewodnictwa spinowego. W Dodatku A, wkład topologiczny do spinowego przewodnictwa holowskiego został wyznaczony przy wykorzystaniu formuły Kubo-Stredy danej równaniami (1.9)-(1.13).

3.4 Rola domieszek w SEH

3.4.1 Wpływ obecności domieszek na topologiczny SEH w 2DEG

W niniejszym podrozdziale interesuje nas wpływ domieszek na spinowe przewodnictwo holowskie. Na początek rozważymy 2DEG z oddziaływaniem spin-orbita Rashby i w obecności rozmieszczonych przypadkowo domieszek. Hamiltonian możemy więc zapisać w postaci:

$$H = H_0 + V(\mathbf{r}), \qquad (3.35)$$

gdzie H_0 to hamiltonian niezaburzony, zawierający wkład od oddziaływania spin-orbita, a więc:

$$H_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + H_R \tag{3.36}$$

z H_R danym równaniem (3.11). Wartości własne H_0 są postaci: $E_{k\pm} = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \pm \alpha k$. Z kolei $V(\mathbf{r}) = \sum_i V_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$, to potencjał zaburzający, pochodzący od rozmieszczonych przypadkowo



RYSUNEK 3.5: Diagramy Feynmana opisujące holowskie przewodnictwo spinowe w obecności domieszek. Rysunek (a) przedstawia serię diagramów dających wkład do przewodnictwa: pierwszy z nich to tzw. diagram podstawowy opisujący wkład topologiczny do SEH (por. Dodatek A), kolejne związane są z procesami rozpraszania na domieszkach - diagram z pojedynczą przerywaną linią reprezentuje diagramy w których rozpraszanie odbywa się na pojedynczej domieszce, następne diagramy związane są z procesami rozproszeniowymi w których uczestniczą dwie, trzy, i więcej domieszek. Sumę tych diagramów możemy przedstawić jako diagram z zrenormalizowanym wierzchołkiem. Lewy wierzchołek tego diagramu odpowiada indukowanemu prądowi spinowemu, linie ciągłe reprezentują funkcje Greena, a prawy wierzchołek reprezentuje wkład od funkcji wierzchołkowej (rys. (b)). Rysunek (c) to graficzne przedstawienie równania na funkcję wierzchołkową Υ_y .

domieszek, których potencjał jest słaby i krótkozasięgowy. W związku z tym zakładając gaussowskie korelacje dostajemy, że średnia po konfiguracjach $\langle V_i \rangle = 0$ natomiast pierwszy moment statystyczny $\langle V_i^2 \rangle = V_0^2$.

Wykorzystując formułę Kubo-Stredy możemy zapisać, że spinowe przewodnictwo holowskie w tym przypadku będzie dane równaniem:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e\hbar}{2\pi} \text{Tr} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \langle \hat{j}_i^{s_n} G^R(\mu) \hat{v}_y G^A(\mu) \rangle \,. \tag{3.37}$$

W powyższym wyrażeniu, w tzw. przybliżeniu drabinkowym, średnią po konfiguracjach domieszek $\langle j_x^{s_z} G^R v_y G^A \rangle$ możemy zastąpić przez $j_x^{s_z} \langle G^R \rangle \Upsilon_y \langle G^A \rangle$, gdzie Υ_y jest funkcją wierzchołkową [44, 45], a $\langle G^{R/A} \rangle$ uśrednione po konfiguracjach funkcje Greena (dalej oznaczone jako $\mathcal{G}^{R/A}$). Energia własna w przybliżeniu Borna dana jest wyrażeniem:

$$\Sigma_{\mathbf{k}}^{R} = nV_{0}^{2} \int \frac{d^{2}\mathbf{k}}{(2\pi)^{2}} G_{\mathbf{k}}^{R}(\varepsilon) , \qquad (3.38)$$

nto koncentracja domieszek. Po wstawieniu jawnej postaci $G^R_{\bf k}$ do powyższego równania otrzymamy analityczne wyrażenie w następującej formie:

$$\Sigma_{\mathbf{k}}^{R} = -\frac{i}{4}n_{i}V_{0}^{2}(\nu_{+} + \nu_{-})\sigma_{0} = -i\Gamma\sigma_{0}. \qquad (3.39)$$

 ν_{\pm} to gęstości stanów na poziomie Fermiego dla pasm $E_{k\pm}$ (szczegółowe rachunki zamieszczono w Dodatku A). Wykorzystując równanie Dysona możemy wyznaczyć funkcję \mathcal{G}^R :

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}}^{R} = \left((G_{\mathbf{k}}^{R})^{-1} - \Sigma_{\mathbf{k}}^{R} \right)^{-1}.$$
(3.40)

Równanie na funkcję wierzchołkową, które przy pomocy diagramów przedstawione jest na rysunku 3.5(c), jest postaci:

$$\Upsilon_y = v_y + n_i V_0^2 \int \frac{dkk}{(2\pi)^2} \int d\phi \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^R(\varepsilon_F) \Upsilon_y \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^A.$$
(3.41)

Powyższe równanie, jest równaniem samozgodnym. Rozwiążemy je zakładając następującą postać funkcji wierzchołkowej:

$$\Upsilon_y = ak_y\sigma_0 + b\sigma_x + c\sigma_y. \tag{3.42}$$

Wstawiając (3.42) oraz jawną postać (3.40) do (3.41) otrzymujemy, że w limicie niskiej koncentracji domieszek: $a = \frac{\hbar}{m}$, b = c = 0. W związku z tym, funkcję wierzchołkową możemy zapisać w postaci:

$$\Upsilon_y = v_y + \gamma_y \sigma_x \,, \tag{3.43}$$

gdzie składowa prędkości $v_y = \frac{\hbar}{m} k_y + \frac{\alpha}{\hbar} \sigma_x$, natomiast γ_y jest poprawką do funkcji wierzchołkowej, która w przypadku limitu statycznego ($\omega \to 0$) i przy niskiej koncentracji domieszek wynosi: $\gamma_y = -\frac{\alpha}{\hbar}$.

Znając postać Υ_y możemy wyznaczyć holowskie przewodnictwo spinowe z (3.37):

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e\hbar}{2\pi} \int \frac{dkk}{(2\pi)^2} \int d\phi \operatorname{Tr}\left\{j_x^{s_z} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^R(\mu) \Upsilon_y \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^A(\mu)\right\} \,. \tag{3.44}$$

Wstawiając do powyższego równania (3.43) dostajemy:

$$\sigma_{xy}^{sz} = \frac{e\hbar}{2\pi} \operatorname{Tr} \int \frac{dkk}{(2\pi)^2} \int d\phi j_x^{sz} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^R(\mu) v_y \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^A(\mu) + \frac{e\hbar}{2\pi} \operatorname{Tr} \int \frac{dkk}{(2\pi)^2} \int d\phi j_x^{sz} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^R(\mu) \gamma_y \sigma_x \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^A(\mu).$$
(3.45)

Pierwszy składnik w powyższym równaniu to wkład od diagramu podstawowego $(\sigma_{xy}^{s_z p})$ odpowiedzialny za topologiczny wkład do przewodnictwa spinowego i jest równy $e/8\pi$, natomiast drugi człon, to wkład od diagramów drabinkowych $(\sigma_{xy}^{s_z d})$ wyrażony poprzez poprawkę do funkcji wierzchołkowej γ_y :

$$\sigma_{xy}^{s_z d} = \frac{e}{8\pi} \frac{\hbar}{\alpha} \gamma_y \,. \tag{3.46}$$

Otrzymujemy więc, że:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e}{8\pi} \frac{\alpha'}{\alpha}; \qquad \alpha' = \alpha + \hbar \gamma_y.$$
(3.47)

Wstawiając do powyższego wyrażenia otrzymaną wcześniej jawną postać na γ_y dostajemy ostatecznie, że $\sigma_{xy}^{s_z} = 0$. Otrzymany tu wynik jest zgodny z wynikami otrzymanymi przez Inoue i. in. [95]. Autorzy rozważyli, stosując formułę Kubo, wkład od domieszek do przewodnictwa spinowego również poprzez uwzględnienie funkcji wierzchołkowej i otrzymali w ogólnym, zależnym od częstotliwości, przypadku, że:

$$\alpha'(\omega) = \alpha + \hbar \gamma_y(\omega); \qquad \gamma_y(\omega) = -\frac{1}{\tau} \frac{\alpha}{-i\hbar\omega + \hbar/\tau}.$$
(3.48)

Jeśli położymy $\tau \to \infty$, to otrzymamy natychmiast, że $\alpha'(\omega) = \alpha$ i odtworzymy, słuszny w limicie balistycznym, wynik z pracy Sinovy i in. [37], a więc $\sigma_{xy}^{s_z} = e/8\pi$. Jeśli jednak najpierw położymy granicę $\omega \to 0$, to okaże się że wkład od funkcji wierzchołkowej, jak to zostało pokazane powyżej, wynosi $\gamma_y = -\frac{\alpha}{\hbar}$ i spinowy efekt Halla znika.

Tak więc obecność rozmieszczonych przypadkowo domieszek punktowych niszczy SEH. Prąd spinowy, w spinowym efekcie Halla, w dwuwymiarowym gazie elektronowym z oddziaływaniem spin-orbita Rashby jest związany z elektronami z pobliża powierzchni Fermiego (patrz Dodatek A). Jeśli rozpraszanie na domieszkach jest izotropowe, to każdy elektron z wektorem falowym \mathbf{k} będzie mógł być rozproszony do dowolnego, innego stanu opisanego przez wektor falowy \mathbf{k}' z jednakowym prawdopodobieństwem. Wobec tego średnia polaryzacja spinowa, związana z odchyleniem spinu elektronu od płaszczyzny dwuwymiarowego gazu elektronowego, znika i co za tym idzie spinowy efekt Halla również znika.

3.4.2 SEH indukowany oddziaływaniem spin-orbita domieszek

W tym podrozdziale omówimy wpływ oddziaływania spin-orbita generowanego przez domieszki na SEH w dwuwymiarowym gazie elektronowym. Rozważmy na początek model 2DEG, w którym pominiemy na razie wewnętrzne oddziaływanie spin orbita. Jednocząstkowy hamiltonian efektywny opisujący układ jest więc postaci: $H = H_0 + H_{imp}$ (H_0 to niezaburzony hamiltonian dla 2DEG, H_{imp} - zaburzenie, człon wynika z obecności domieszek). Jawna postać tego hamiltonianu dana jest w następującej formie [96–98]:

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(1 + i\frac{\lambda}{4} (\mathbf{k} \times \mathbf{k}') \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) \,. \tag{3.49}$$

Tak jak poprzednio zakładamy, że potencjał domieszki, $V(\mathbf{r})$, jest krótkozasięgowy. Średnia po konfiguracjach $\langle V(\mathbf{r}) \rangle$ wynosi zero, natomiast drugi i trzeci moment statystyczny wynoszą odpowiednio $\langle V(\mathbf{r}_1)V(\mathbf{r}_2) \rangle = nv_0^2 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \langle V(\mathbf{r}_1)V(\mathbf{r}_2)V(\mathbf{r}_3) \rangle = nv_0^2 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3)$. W tych wyrażeniach *n* to koncentracja domieszek, a $v_0 = \int d^3\mathbf{r}V(\mathbf{r}) = -(4\pi\hbar^2/m)f(\theta = 0), (f(\theta)$ amplituda rozpraszania). Funkcja Greena dla powyższego hamiltonianu, otrzymana stosując pierwsze przybliżenie Borna, jest postaci:

$$\mathcal{G}^{R/A} = \text{diag}\left[\frac{1}{\mu - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \frac{i}{2\tau_{\uparrow}}}, \frac{1}{\mu - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \frac{i}{2\tau_{\downarrow}}}\right],$$
(3.50)

gdzie $\tau_{\uparrow,\downarrow} = \hbar/2\pi N_{\uparrow,\downarrow} n v_0^2 \ (N_{\uparrow,\downarrow}$ - gęstość stanów nośników ze spinem "w górę", "w dół" na poziomie Fermiego; *n* - gęstość domieszek). Zewnętrzne pole elektryczne wprowadzamy do (3.49) korzystając z podstawienia $\mathbf{k} \to \mathbf{k} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}$ i otrzymujemy w konsekwencji:

$$H_A = \frac{\hbar^2}{2m} (k_\alpha - \frac{e}{\hbar} A_\alpha)^2 + V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + H_{so-A}, \qquad (3.51)$$

gdzie wkład opisujący rozpraszanie na domieszkach, który jest liniowy względem λ :

$$W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = i\frac{\lambda}{4} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} k_{\beta} k_{\gamma}' \sigma_{\alpha} \tag{3.52}$$

oraz człon opisujący sprzężenie zewnętrznego pola elektromagnetycznego z oddziaływaniem spinorbita:

$$H_{so-A} = -i\frac{\lambda e}{4\hbar} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} (k'_{\beta} - k_{\beta}) \sigma_{\gamma} A_{\alpha} \,. \tag{3.53}$$

Operator gęstości prądu ładunkoweg
o $j_{\alpha}=-\frac{\delta H_{A}}{\delta A_{\alpha}}$ przyjmuje postać:

$$j_{\alpha} = \frac{e\hbar}{m} (k_{\alpha} - \frac{e}{\hbar} A_{\alpha}) + i \frac{e}{4\hbar} \lambda V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} (k_{\beta}' - k_{\beta}) \sigma_{\gamma} = ev_{\alpha} \,. \tag{3.54}$$

Drugi składnik powyższej sumy jest wynikiem sprzęgania się pola elektrycznego z oddziaływaniem spin-orbita, co skutkuje pojawieniem się dodatkowego przyczynku do prędkości: $v_{\alpha} = v_{\alpha}^{0} + v_{\alpha}^{a}$, gdzie v_{α}^{0} - człon klasyczny, a v_{α}^{a} to tzw. prędkość anomalna, która zgodnie z powyższym równaniem wynosi $v_{\alpha}^{a} = i \frac{\lambda}{4\hbar} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} (k_{\beta}' - k_{\beta}) \sigma_{\gamma}$ Wykorzystując definicję operatora gęstości prądu spinowego (1.1) otrzymujemy:

$$j_{\alpha}^{s_z} = \frac{e\hbar^2}{2m} (k_{\alpha} - \frac{e}{\hbar} A_{\alpha}) \sigma_z + i \frac{e}{8} \lambda V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \epsilon_{\alpha\beta z} (k_{\beta}' - k_{\beta}).$$
(3.55)

Tak jak w przypadku prądu ładunkowego, drugi składnik w tym równaniu jest poprawką do prądu spinowego związaną z prędkością anomalną.

Proces typu skew scattering

Rozpraszanie typu *skew scattering* pojawia się gdy uwzględnimy w rachunku zaburzeń dla funkcji Greena wyraz trzeciego rzędu względem potencjału rozpraszającego. Rysunek 3.6(a) przedstawia diagramy dające wkład do spinowego przewodnictwa holowskiego związanego z tym



RYSUNEK 3.6: Diagramy opisujące holowskie przewodnictwo spinowe związane z procesem typu skew scattering (a). Anomalny wierzchołek (b). Diagramy opisujące proces typu side jump (c). Oznaczenia diagramów i ich struktura, jak na rysunku 3.6.

procesem. Trzy linie przerywane związane są z potencjałem rozpraszającym, natomiast krzyżykiem oznaczono wkład od domieszek, który jest liniowy względem λ i odpowiada członowi (3.52) w hamiltonianie. Przewodnictwo spinowe w limicie prądu stałego ($\omega = 0$) możemy zapisać jako sumę diagramów:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{\hbar}{2\pi} \operatorname{Tr} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{k}''} \sum_n D_n \,. \tag{3.56}$$

Wkład od pierwszego diagramu na rys. 3.6(a) można zapisać następująco

$$D_1 = -i \frac{e\hbar^3}{8m^2} \lambda n v_0^3 k_x^2 \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^R \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^A k_y^{\prime\prime 2} \mathcal{G}_{\mathbf{k}^{\prime\prime}}^R \mathcal{G}_{\mathbf{k}^{\prime\prime}}^A \mathcal{G}_{\mathbf{k}^{\prime\prime}}^R .$$
(3.57)

Po wyznaczeniu wkładu od drugiego diagramu otrzymujemy, że spinowe przewodnictwo holowskie wynosi:

$$\sigma_{xy}^{sz} = -i \frac{e\hbar^4 \lambda}{16\pi m^2} n v_0^3 \text{Tr} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{k}''} k_x^2 \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^R \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^A k_y''^2 \mathcal{G}_{\mathbf{k}''}^R \mathcal{G}_{\mathbf{k}''}^A (\mathcal{G}_{\mathbf{k}'}^R - \mathcal{G}_{\mathbf{k}'}^A) \,. \tag{3.58}$$

Otrzymaliśmy wyrażenie analogiczne do tego, które wyprowadzili Tse i DasSarma [97]. Autorzy na podstawie analogicznej zależności² otrzymali analityczne wyrażenie na spinowe przewodnictwo holowskie:

$$\sigma_{xy}^{s_z\,(SS)} = \frac{\pi e^2 \hbar^2}{16m^2} \lambda_0^2 v_0 \left(k_{F\uparrow}^4 N_{\uparrow}^2 \tau_{\uparrow} + k_{F\downarrow}^4 N_{\downarrow}^2 \tau_{\downarrow} \right). \tag{3.59}$$

Autorzy liczyli gęstość prądu spinowego przemnożoną przez ładunek elektronu, tak aby miała ona wymiar gęstości prądu elektrycznego, stąd e^2 w powyższym wzorze, natomiast λ_0^2 odpowiada wprowadzonej przez nas stałej λ . W przypadku SEH źródłem efektu jest prąd niespolaryzowanych elektronów wobec tego $n_{\uparrow} = n_{\downarrow} = n/2$ i w związku z tym $N_{\uparrow,\downarrow} = m/2\pi\hbar^2$.

 $^{^2 \}rm Różnica pomiędzy wyrażeniem 3.58 i odpowiadającym mu wyrażeniem w pracy [97] wynika z przyjętej przez autorów definicji prądu spinowego, która pozwoliła wyrazić gęstość prądu spinowego w jednostkach gęstości prądu ładunkowego$

Proces typu side jump

Źródłem procesu typu *side jump* jest anomalna prędkość, która generuje dodatkowy wkład do prądu ładunkowego i spinowego. Aby wyznaczyć spinowe przewodnictwo holowskie generowane przez ten efekt musimy rozważyć diagramy Feynmana zawierające prawy lub lewy anomalny wierzchołek, który reprezentuje sprzężenie oddziaływania spin-orbita z zewnętrznym polem elektrycznym (rys. 3.6(b)). Rysunek 3.6(c) przedstawia cztery diagramy, które należy uwzględnić szukając wkładu do spinowego przewodnictwa holowskiego pochodzącego od rozpraszania typu *side jump*. Postępując jak w poprzednim przypadku otrzymujemy, że [97]:

$$\sigma_{xy}^{s_z\,(SJ)} = \frac{e^2\hbar}{8m} \lambda_0^2 \left(k_{F\uparrow}^2 N_{\uparrow} + k_{F\downarrow}^2 N_{\downarrow} \right) \,. \tag{3.60}$$

Wyrażenia (3.59) oraz (3.60) są wyrażeniami analitycznymi opisującymi wkład do holowskiego przewodnictwa spinowego indukowanego procesami rozproszeniowymi w modelu opisującym domieszki z potencjałem krótkozasięgowym. Tse oraz DasSarma uważają jednak, że wyniki te będą słuszne również w przypadku, gdy potencjał domieszek nie jest ściśle krótkozasięgowy. Zastosujmy te wyrażenia do przypadku rozmieszczonych przypadkowo ekranowanych zjonizowanych domieszek. W pierwszym przybliżeniu Borna amplituda rozpraszania ekranowanego potencjału kulombowskiego w układzie dwuwymiarowym ma postać [97]:

$$f(\theta) = \frac{me^2}{\hbar^2 \epsilon_m (q + q_{TF})},$$
(3.61)

gdzie ϵ_m - stała dielektryczna, $q = 2k \sin(\theta/2)$, parametr ekranowania Thomasa-Fermiego $q_{TF} = 2\pi \frac{ne^2}{\epsilon_m \varepsilon_F}$ (ε_F - energia na poziomie Fermiego). Wykorzystując powyższą zależność na podstawie (3.59) i (3.60) otrzymamy [97]:

$$\sigma_{xy}^{s_z(SS)} = -\pi n e^2 \frac{\lambda_0^2 \varepsilon_F}{2\hbar^2} \tau , \qquad (3.62)$$

$$\sigma_{xy}^{s_z\,(SJ)} = \frac{e^2\lambda_0^2}{4\hbar}n\,. \tag{3.63}$$

Z powyższych zależności widzimy, że stosunek $\frac{\sigma_{xy}^{s_z(SJ)}}{\sigma_{xy}^{s_z(SS)}} \sim \frac{\hbar}{\tau \varepsilon_F}$. Ponieważ $\tau \sim (10^{-13} - 10^{-12}) s$, to oba procesy rozproszeniowe dają porównywalny wkład do przewodnictwa, gdy energia na poziomie Fermiego wynosi $\varepsilon_F \sim (1 - 10) meV$.

Spinowo-zależne procesy rozproszeniowe w 2DEG z oddziaływaniem spin-orbita Rashby

W kolejnej swojej pracy Tse i DasSarma [98] rozważali SEH w dwuwymiarowym gazie elektronowym z wewnętrznym oddziaływaniem spin-orbita typu Rashby oraz w obecności domieszek



RYSUNEK 3.7: Diagramy Feynmana wykorzystane do wyznaczenia holowskiego przewodnictwa spinowego. Diagramy A-H związane są z procesem typu *side jump*, natomiast diagramy I-P opisują rozpraszanie typu *skew scattering*. Linie ciągłe na diagramach reperezentują funkcje Greena, lewy wierzchołek opisuje prąd spinowy, a prawy - prąd ładunkowy. Linie przerywane odpowiadają potencjałowi rozpraszającemu. Rysunek pochodzi z pracy [98].

(które również są źródłem oddziaływania spin-orbita). Autorzy założyli w swoich rachunkach niską koncentrację domieszek ($\varepsilon_F \tau >> 1$) oraz zaniedbali diagramy związane ze słabą lokalizacją. Ponadto założono, że rozszczepienie zależności dyspersyjnej generowane oddziaływaniem Rashby jest małe. Podobnie jak poprzednio wykorzystana została metoda diagramowa. Na rysunku 3.7 przedstawiono diagramy jakie zostały rozważone przez autorów. Diagramy od A do H opisują proces typu side jump, a diagramy od I do P odpowiadają rozpraszaniu typu skew scattering. Zauważmy, że teraz hamiltonian niezaburzony, H_0 , zawiera dodatkowo człon opisujący oddziaływanie spin-orbita Rashby i w konsekwencji funkcje Greena $\mathcal{G}_{\mathbf{k}}^{R/A} = (\varepsilon_F - H_0 \pm i \frac{\hbar}{2\tau})^{-1}$ również zależą od tego sprzężenia. W przypadku procesu typu side jump oprócz omówionych w poprzednim podrozdziale diagramów (A, B, E, F) autorzy rozważyli także diagramy, które dodatkowo zawierają poprawki do funkcji wierzchołkowej związanej z prądem ładunkowym (diagramy C,D) lub z prądem spinowym (diagramy G, H). Po rozpisaniu tych diagramów oraz szczegółowych rachunkach autorzy otrzymali następujące wyniki. O ile σ_{xy}^{A+B} zawiera oprócz członu proporcjonalnego do λ_0^2 jeszcze człon proporcjonalny do $\alpha \lambda_0^2$, to poprawka do funkcji wierzchołkowej związanej z prądem spinowym całkowicie go niweluje i w konsekwencji możemy zapisać $\sigma_{xy}^{A+B+C+D} = \sigma_{xy}^{SJ}/2$, gdzie σ_{xy}^{SJ} zostało zdefiniowane wcześniej. Poprawka do funkcji

wierzchołkowej związanej z prądem spinowym powoduje także, że $\sigma_{xy}^{E+F} = -\sigma_{xy}^{G+H}$. Dla rozpraszania typu *skew scattering* pokazane zostało, że $\sigma_{xy}^{I+J+K+L} = -\sigma_{xy}^{M+N+O+P}$, a więc - całkowite wygaszanie tego procesu.

Podsumowując, w dwuwymiarowym gazie elektronowym z oddziaływaniem spin-orbita Rashby wkład topologiczny do przewodnictwa spinowego w SEH jest całkowicie niwelowany przez rozpraszanie na punktowych domieszkach, w wyniku uwzględnienia poprawki do funkcji wierzchołkowej związanej z prądem ładunkowym. Oddziaływanie spin-orbita od domieszek dodatkowo generuje spinowo-zależne procesy rozproszeniowe. Jak się jednak okazuje, uwzględnienie w rachunku zaburzeń poprawek do funkcji wierzchołkowych (związanych z prądem ładunkowym i prądem spinowym), prowadzi do całkowitego wygaszania rozpraszania typu *skew scattering*. Do spinowego efektu Halla daje wkład proces typu *side jump*. Należy jednak zauważyć, że w cytowanej tu pracy, autorzy wzięli pod uwagę rachunek zaburzeń z wyrazami do trzeciego rzędu względem potencjału rozpraszającego (dopiero wyrazy trzeciego rzędu względem potencjału rozpraszającego dają wkład do procesu typu *skew scattering*) oraz wyrazy najniższego rzędu względem stałej Rashby α . W związku z powyższym otrzymane wyniki są słuszne w limicie słabego oddziaływania spin-orbita Rashby oraz słabego oddziaływania spin-orbita od domieszek.

Podsumowanie

W niniejszym rozdziale rozważony został SEH w dwuwymiarowym gazie elektronowym ze stałym oddziaływaniem spin-orbita typu Rashby i Dresselhausa oraz w obecności domieszek. W podrozdziale 3.3 omówiony został wkład topologiczny do spinowego przewodnictwa holowskiego pochodzący od stałego oddziaływania spin-orbita Rashby i Dresselhausa. Stosując formulę (1.8) wyprowadzone zostało ogólne wyrażenie na spinowe przewodnictwo holowskie (równanie (3.23)) na podstawie którego rozważone zostały trzy przypadki: $\alpha \neq 0$ i $\beta = 0$, $\alpha = 0$ i $\beta \neq 0$ oraz $\alpha \neq 0$ i $\beta \neq 0$. Pierwszy przypadek to sytuacja, gdy w układzie dominuje oddziaływanie spin-orbita Rashby, a oddziaływanie Dresselhausa jest bardzo słabe i $\beta = 0$. W tej sytuacji pokazaliśmy, że spinowe przewodnictwo holowskie przyjmuje stałą i uniwersalną wartość $e/8\pi$ gdy poziom Fermiego znajduje się w obu podpasmach ($\mu > 0$) oraz zanika liniowo z malejącą gęstością cząstek, gdy $\mu < 0$. Otrzymaliśmy więc takie same wyniki jak autorzy pracy [37], którzy zastosowali w swoich rachunkach równanie Blocha oraz formułę Kubo. Drugi przypadek, to przypadek symetrycznej studni potencjału (stałe oddziaływanie Rashby w tej sytuacji znika $\alpha = 0$), w której istotne jest oddziaływanie spin-orbita Dresselhausa. Spinowe przewodnictwo holowskie przyjmuje wartość $-e/8\pi$ gdy $\mu>0,$ natomiast gdy obsadzone jest tylko jedno podpasmo ($\mu < 0$), podobnie jak w poprzednim przypadku spinowe przewodnictwo (jako bezwzględna wartość) zanika wraz ze spadkiem gęstości cząstek. W ogólnym przypadku, gdy oba oddziaływania spinowo-orbitalne są tego samego rzędu, spinowe przewodnictwo holowskie przyjmuje wartość $\pm e/8\pi$ - w zależności czy dominującym oddziaływaniem jest oddziaływanie Rashby czy Dresselhausa. SEH znika, na skutek współzawodnictwa tych oddziaływań spinowo-orbitalnych, gdy $\alpha = \beta$. Przypadek, ten został omówiony po raz pierwszy w pracy [94], gdzie stosowano nieco inny formalizm.

W podrozdziale 3.4 omówiony został wpływ domieszek na spinowe przewodnictwo holowskie. W tym podrozdziale zastosowana została formuła Kubo-Stredy. Rozwiązanie równania na funkcję wierzchołkowa i uwzględnienie w formule na przewodnictwo poprawki z nią związanej pozwoliło pokazać, że jeśli w 2DEG ze stałym oddziaływaniem Rashby znajdują się punktowe domieszki (które nie generują oddziaływania spin-orbita), to spinowy efekt Halla znika. Otrzymane wyniki sa zgodne z wynikami Inoue i in. [95], którzy na podstwie formuły Kubo otrzymali poprawkę od funkcji wierzchołkowej w limicie skończonych ω i τ . W dalszej części podrozdziału, na podstawie prac Tse i DasSarmy [97, 98], omówiono przypadek domieszek generujących oddziaływanie spin orbita. Najpierw omówiony został przypadek, gdy poza domieszkami nie ma innego źródła sprzężenia spin-orbita i SEH generowany jest tylko przez spinowo-zależne procesy rozproszeniowe (skew scattering i side jump). W tej sytuacji można otrzymać proste analityczne wyrażenia, na podstawie których można pokazać m.in., że proces typu side jump zależy tylko od koncentracji nośników i jest zupełnie niezależny od czasu relaksacji. W przypadku ogólnym, gdy w układzie poza domieszkami obecne jest również stałe oddziaływanie spin-orbita Rashby, Tse i DasSarma wykorzystując diagramowy rachunek zaburzeń zawierający wyrazy do trzeciego rzędu względem potencjału zaburzającego pokazali, że uwzględnienie funkcji wierzchołkowych (związanych z prądem ładunkowym i spinowym) prowadzi do całkowitego wygaszenia procesu typu skew scattering w rozważanym modelu.

Spinowy efekt Halla, w ogólności jest efektem złożonym, do którego prowadzi kilka różnych mechanizmów. W związku z tym jest niezwykle trudno przeprowadzić ilościowe obliczenia uwzględniające wszystkie mechanizmy prowadzące do SEH i traktujące je na równych prawach. Co więcej, eksperymentalnie jest bardzo trudno jednoznacznie stwierdzić, który mechanizm dominuje w badanym układzie i jeszcze trudniej "wydzielić" wkład poszczególnych efektów do całkowitego holowskiego przewodnictwa spinowego. Hankiewicz i Vignale [30, 99, 100] podjęli próbę analizy zachowań poszcególnych procesów prowadzących do SEH w zależności od parametrów, które mogą być kontrolowane w trakcie eksperymentu (częstotliwość pola elektrycznego, wartość pola magnetycznego, temperatura) dla tzw. rozszerzonego modelu Rashby (uwzględniającego oddziaływanie spin-orbita od domieszek, oddziaływanie Rashby oraz wpływ zewnętrznego pola magnetycznego). Przedstawione w zacytowanych pracach rachunki analityczne pokazują złożoność problemu, w sytuacji gdy chcemy uwzględnić wszystkie mechanizmy prowadzące do SEH.

Rozdział 4

Dwuwymiarowy gaz elektronowy: formalizm Keldysha i metoda równań kinetycznych

Spinowy efekt Halla jest badany teoretycznie przy pomocy różnych metod. W poprzednich rozdziałach wykorzystaliśmy formułę Kubo w limicie liniowej odpowiedzi oraz metody diagramowego rachunku zaburzeń. Rachunek zaburzeń oparty o diagramy Feynmana znacznie się komplikuje w przypadku układów silnie domieszkowanych, gdzie obserwujemy silne rozpraszanie na domieszkach, których potencjał znacznie odbiega od punktowego. W takiej sytuacji bardziej efektywny jest formalizm zaproponowany przez Keldysha [101, 102], który jednak prowadzi do bardzo złożonych równań, gdy zastosuje się go do SEH. W tym rozdziale zastosujemy formalizm Keldysha, w formie nieco zmodyfikowanej, wykorzystującej wycałkowane funkcje Keldysha (podobnie jak w przybliżeniu półklasycznym [46]). Metoda, w zasadzie, polega na zapisaniu równań kinetycznych i wyznaczeniu wignerowskiej funkcji rozkładu. Zastosowane podejście stanowi rozszerzenie podejścia zaproponowanego przez Mahana i Hanscha [47] na przypadek układów z oddziaływaniem spin-orbita.

W ostatnich latach, wykorzystywano wycałkowane funkcje Keldysha w podejściu półklasycznym do badań nad SEH [103–106]. Prezentowany tu formalizm zasadniczo różni się od metod wykorzystanych w zacytowanych powyżej pracach z uwagi na sposób w jaki otrzymuje się wycałkowane funkcje Keldysha. Proponowane w tym rozdziale podejście stanowi uogólnienie na przypadek dwóch powierzchni Fermiego. Podejście to, pozwala więc badać zakres silnego sprzężenia spin-orbita.

4.1 Model i opis metody

Rozważamy dwuwymiarowy gaz elektronowy z oddziaływaniem spin-orbita typu Rashby. Hamiltonian takiego układu, uwzględniający oddziaływanie elektronów z domieszkami, jest postaci:

$$H = H_0 + H_{imp} \tag{4.1}$$

gdzie

$$H_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \alpha \left(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x\right),\tag{4.2}$$

$$H_{imp} = V(\mathbf{r}) - \lambda \left[\nabla V(\mathbf{r})\right] \cdot \left[\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k}\right]$$
(4.3)

gdzie $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ są, tak jak poprzednio, macierzami Pauliego, $V(\mathbf{r}) = \sum_i v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ jest potencjałem pochodzącym od domieszek, α i λ są stałymi oddziaływania spin-orbita, natomiast operator $\mathbf{k} = -i\nabla$. W tym rozdziale położymy $\hbar \equiv 1$. Wartości własne hamiltonianu niezaburzonego:

$$E_{1,2}(k) = \varepsilon_k \pm \alpha^2 k^2; \qquad \varepsilon_k = \frac{k^2}{2m}$$
(4.4)

Pole elektromagnetyczne wprowadzamy do hamiltonianu (4.1) poprzez potencjał wektorowy dokonując transformacji operatora pędu: $\mathbf{k} \to \mathbf{k} - e\mathbf{A} \ (-i\nabla \to -i(\nabla - ie\mathbf{A}))$.

Równania na funkcje Greena

Stosujemy nierównowagowe funkcje Greena, które pozwolą znaleźć równania kinetyczne na spinowo-zależne funkcje rozkładu w przybliżeniu półklasycznym. Wykorzystamy macierz funkcji Greena wprowadzoną przez Keldysha do opisu procesów nierównowagowych [101, 102], zawie-rającą trzy funkcje Greena: opóźnioną - G^R , przedwczesną - G^A oraz funkcję Keldysha - G^{K-1} . Założymy także, że rozpraszanie na domieszkach jest słabe i możemy zastosować przybliżenie Borna.

Równanie na funkcje Greena możemy zapisać w następującej postaci:

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t_1} - H_{01}\right)\tilde{G}(\xi_1, \xi_2) = \delta(\xi_1, \xi_2)\tilde{I} + \int d\xi_3\tilde{\Sigma}(\xi_1, \xi_3)\tilde{G}(\xi_3, \xi_2)$$
(4.5)

gdzie $\xi = (\mathbf{r}, t)$, a \tilde{G} , $\tilde{\Sigma}$ jest odpowiednio macierzą funkcji Greena i energii własnej w przestrzeni spinowej i przestrzeni Keldysha:

$$\tilde{G} = \begin{pmatrix} G^R & G^K \\ 0 & G^A \end{pmatrix}, \qquad \tilde{\Sigma} = \begin{pmatrix} \Sigma^R & \Sigma^K \\ 0 & \Sigma^A \end{pmatrix}$$
(4.6)

¹Każda z tych trzech funkcji jest również macierzą w przestrzeni spinowej.

Wykorzystując jawną postać H_0 równanie (4.5) możemy zapisać następująco:

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\Delta_1}{2m} - i\frac{e}{mc} \mathbf{A}(t_1) \cdot \nabla_1 + i\alpha\sigma_x \nabla_{y_1} - i\alpha\sigma_y \nabla_{x_1} \right. \\ \left. + \alpha \frac{e}{c} \sigma_x A_y(t_1) - \alpha \frac{e}{c} \sigma_y A_x(t_1) \right) \, \tilde{G}(\xi_1, \xi_2) = \delta(\xi_1, \xi_2) \tilde{I} + \int d\xi_3 \tilde{\Sigma}(\xi_1, \xi_3) \tilde{G}(\xi_3, \xi_2),$$
(4.7)

Powyższe równanie ruchu jest zapisane dla zmiennych ξ_1 . Postępując w analogiczny sposób, możemy także zapisać równanie dla zmiennych ξ_2 :

$$\left(-i\frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{\Delta_2}{2m} + i\frac{e}{mc}\mathbf{A}(t_2)\cdot\nabla_2\right)\tilde{G}(\xi_1,\xi_2) - i\alpha\nabla_{y_2}\tilde{G}(\xi_1,\xi_2)\sigma_x + i\alpha\nabla_{x_2}\tilde{G}(\xi_1,\xi_2)\sigma_y + \alpha\frac{e}{c}A_y(t_2)\tilde{G}(\xi_1,\xi_2)\sigma_x - \alpha\frac{e}{c}A_x(t_2)\tilde{G}(\xi_1,\xi_2)\sigma_y = \delta(\xi_1,\xi_2)\tilde{I} + \int d\xi_3\tilde{G}(\xi_1,\xi_3)\tilde{\Sigma}(\xi_3,\xi_2)$$
(4.8)

Odejmując stronami (4.7) i (4.8) dostajemy:

$$\begin{pmatrix} i\left(\frac{\partial}{\partial t_{1}}-\frac{\partial}{\partial t_{2}}\right)+\frac{1}{2m}\left(\Delta_{1}-\Delta_{2}\right)-i\frac{e}{mc}\left(\mathbf{A}(t_{1})\cdot\nabla_{1}+\mathbf{A}(t_{2})\cdot\nabla_{2}\right)\right)\tilde{G}(\xi_{1},\xi_{2}) \\ +i\alpha\left(\sigma_{x}\frac{\partial\tilde{G}(\xi_{1},\xi_{2})}{\partial y_{1}}+\frac{\partial\tilde{G}(\xi_{1},\xi_{2})}{\partial y_{2}}\sigma_{x}\right)-i\alpha\left(\sigma_{y}\frac{\partial\tilde{G}(\xi_{1},\xi_{2})}{\partial x_{1}}+\frac{\partial\tilde{G}(\xi_{1},\xi_{2})}{\partial x_{2}}\sigma_{y}\right) \\ -\alpha\frac{e}{c}\left(\sigma_{y}A_{x}(t_{1})\tilde{G}(\xi_{1},\xi_{2})-A_{x}(f_{2})\tilde{G}(\xi_{1},\xi_{2})\sigma_{y}\right) \\ +\alpha\frac{e}{c}\left(\sigma_{x}A_{y}(t_{1})\tilde{G}(\xi_{1},\xi_{2})-A_{y}(t_{2})\tilde{G}(\xi_{1},\xi_{2})\sigma_{x}\right) \\ =\int d\xi_{3}\left(\tilde{\Sigma}(\xi_{1},\xi_{3})\tilde{G}(\xi_{3},\xi_{2})-\tilde{G}(\xi_{1},\xi_{3})\tilde{\Sigma}(\xi_{3},\xi_{2})\right)$$
(4.9)

Przejdziemy teraz do zmiennych wignerowskich. W tym celu należy najpierw dokonać przejścia do współrzędnych opisujących ruch środka masy (\mathbf{R} , T) oraz ruch względny (\mathbf{r} , t) stosując transformację zmiennych przestrzennych: $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, $2\mathbf{R} = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2$ oraz czasowych: $t = t_1 - t_2$, $2T = t_1 + t_2$. Następnie wykonuje się transformatę Fouriera od zmiennych \mathbf{r} i t do zmiennych \mathbf{k} i Ω . W konsekwencji dostajemy następujące równanie na funkcje Greena:

$$\left(\frac{\partial}{\partial T} + \frac{\mathbf{k}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial R} + \frac{e}{m} T \mathbf{E} \cdot \frac{\partial}{\partial R} + \frac{e}{m} \mathbf{E} \cdot \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial \Omega}\right) \tilde{G}_{\mathbf{k}\Omega} + i\alpha \left(k_y + eE_yT\right) \left[\sigma_x, \tilde{G}_{\mathbf{k}\Omega}\right]_{-}
-i\alpha \left(k_x + eE_xT\right) \left[\sigma_y, \tilde{G}_{\mathbf{k}\Omega}\right]_{-} + \frac{\alpha}{2} \left[\sigma_x, \frac{\partial \tilde{G}_{\mathbf{k}\Omega}}{\partial Y}\right]_{+} - \frac{\alpha}{2} \left[\sigma_y, \frac{\partial \tilde{G}_{\mathbf{k}\Omega}}{\partial X}\right]
- \frac{\alpha}{2} eE_x \left[\sigma_y, \frac{\partial \tilde{G}_{\mathbf{k}\Omega}}{\partial \Omega}\right]_{+} + \frac{\alpha}{2} eE_y \left[\sigma_x, \frac{\partial \tilde{G}_{\mathbf{k}\Omega}}{\partial \Omega}\right]_{+} + i \left[\tilde{\Sigma}_{k,\Omega}, \tilde{G}_{\mathbf{k}\Omega}\right]_{-} = 0 \quad (4.10)$$

Otrzymane równanie stanowi uogólnienie równania otrzymanego przez Mahana [47] na przypadek układu z oddziaływania spin-orbita.

W równaniu (4.10) prędkość elektronu jest zadana przez wyrażenie: $v_k = \frac{1}{m}(\mathbf{k} + e\mathbf{E}T)$, które jest zależne od czasu. Taka zależność od czasu nie ma tu sensu fizycznego, wobec czego

dokonujemy za Mahanem i Hanschem [47, 107, 108] następującego podstawienia:

$$\mathbf{k} + e\mathbf{E}T \longrightarrow \mathbf{K}
 \frac{\partial}{\partial T} \longrightarrow \frac{\partial}{\partial T} + e\mathbf{E} \cdot \nabla_k,$$
(4.11)

i w konsekwencji otrzymujemy równanie, które w limicie liniowym względem pola elektrycznego \mathbf{E} ma postać [109]:

$$\left(\frac{\partial}{\partial T} + e\mathbf{E}\cdot\nabla_{k} + \frac{1}{m}\mathbf{K}\cdot\frac{\partial}{\partial\mathbf{R}} + \frac{e}{m}\mathbf{E}\cdot\mathbf{K}\frac{\partial}{\partial\Omega}\right)\tilde{G}_{\mathbf{K}\Omega} + i\alpha K_{y}\left[\sigma_{x},\tilde{G}_{\mathbf{K}\Omega}\right]_{-} \\ -i\alpha K_{x}\left[\sigma_{y},\tilde{G}_{\mathbf{K}\Omega}\right]_{-} + \left[\sigma_{x},\frac{\partial\tilde{G}_{\mathbf{K}\Omega}}{\partial Y}\right]_{+}\frac{\alpha}{2} - \frac{\alpha}{2}\left[\sigma_{y},\frac{\partial\tilde{G}_{\mathbf{K}\Omega}}{\partial X}\right]_{+} - \frac{\alpha}{2}eE_{x}\left[\sigma_{y},\frac{\partial\tilde{G}_{\mathbf{K}\Omega}}{\partial\Omega}\right]_{+} \\ + \frac{\alpha}{2}eE_{y}\left[\sigma_{x},\frac{\partial\tilde{G}_{\mathbf{K}\Omega}}{\partial\Omega}\right]_{+} = -i\left[\tilde{\Sigma}_{\mathbf{K}\Omega},\tilde{G}_{\mathbf{K}\Omega}\right]_{-}$$

$$(4.12)$$

Równanie to opisuje dynamikę nierównowagową w układzie, który w ogólności może być niejednorodny. Jeśli założymy, że układ jest jednorodny i znajduje się w stanie stacjonarnym, to otrzymamy:

$$\left(e\mathbf{E}\cdot\nabla_{k} + \frac{e}{m}\mathbf{E}\cdot\mathbf{K}\frac{\partial}{\partial\Omega}\right)\tilde{G}_{\mathbf{K}\Omega} + i\alpha K_{y}\left[\sigma_{x},\tilde{G}_{\mathbf{K}\Omega}\right]_{-} - i\alpha K_{x}\left[\sigma_{y},\tilde{G}_{\mathbf{K}\Omega}\right]_{-} \\
-\frac{\alpha}{2}eE_{x}\left[\sigma_{y},\frac{\partial\tilde{G}_{\mathbf{K}\Omega}}{\partial\Omega}\right]_{+} + \frac{\alpha}{2}eE_{y}\left[\sigma_{x},\frac{\partial\tilde{G}_{\mathbf{K}\Omega}}{\partial\Omega}\right]_{+} = -i\left[\tilde{\Sigma}_{\mathbf{K}\Omega},\tilde{G}_{\mathbf{K}\Omega}\right]_{-}$$
(4.13)

Na podstawie tego równania znajdujemy równanie na pozadi
agonalny element macierzy \tilde{G} - na funkcję
 G^K :

$$\begin{pmatrix}
e\mathbf{E}\cdot\nabla_{k} + \frac{e}{m}\mathbf{E}\cdot\mathbf{k}\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\\
G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{K} + i\alpha k_{y}\left[\sigma_{x}, G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{K}\right]_{-} \\
-i\alpha k_{x}\left[\sigma_{y}, G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{K}\right]_{-} - \frac{\alpha}{2}eE_{x}\left[\sigma_{y}, \frac{\partial G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{K}}{\partial\varepsilon}\right]_{+} + \frac{\alpha}{2}eE_{y}\left[\sigma_{x}, \frac{\partial G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{K}}{\partial\varepsilon}\right]_{+} \\
= -i\left(\Sigma_{\mathbf{k}\varepsilon}^{R}G_{\mathbf{k},\varepsilon}^{K} + \Sigma_{\mathbf{k}\varepsilon}^{K}G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{A} - G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{R}\Sigma_{\mathbf{k}\varepsilon}^{K} - G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{K}\Sigma_{\mathbf{k}\varepsilon}^{A}\right) \tag{4.14}$$

Równanie to jest półklasycznym równaniem kinetycznym na funkcję Keldysha dla dwuwymiarowego gazu z oddziaływaniem spin-orbita Rashby. Jest to równanie ogólne, słuszne również, gdy weźmiemy pod uwagę rozpraszanie na fononach lub inne mechanizmy prowadzące do relaksacji, które mogą zostać włączone poprzez energię własną $\Sigma_{\varepsilon \mathbf{k}}$. Identyczne równanie otrzymamy jeśli pole elektryczne wprowadzimy poprzez potencjał skalarny, co pokazuje, że problem jest niezależny od wyboru cechowania. W powyższym równaniu oraz w dalszej części tego rozdziału dla uproszczenia zapisu \mathbf{K} zastąpiono przez \mathbf{k} , a Ω przez ε . Zakładamy małe odchylenie od równowagi, co oznacza, że funkcja Greena może być zapisana jako suma równowagowej funkcji Greena, $G^0_{\mathbf{k}\varepsilon}$, oraz składnika opisującego odchylenie od równowagi, $\delta G_{k\varepsilon}$, jak poniżej:

$$G_{\mathbf{k}\varepsilon} \simeq G^0_{\mathbf{k}\varepsilon} + \delta G_{k\varepsilon} \tag{4.15}$$

Równowagowe funkcje Greena $G^{0R}_{\mathbf{k}\varepsilon}$ i $G^{0A}_{\mathbf{k}\varepsilon}$ możemy wyznaczyć wykorzystując hamiltonian niezaburzony, H_0 , dany przez (4.2):

$$G^{0\,R,A}_{\mathbf{k}\varepsilon} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_k + \alpha \left(k_y \sigma_x - k_x \sigma_y\right)}{(\varepsilon - E_{1k} \pm i\delta_1)(\varepsilon - E_{2k} \pm i\delta_2)},\tag{4.16}$$

gdzie $\delta_{1,2}$ - małe liczby charakteryzujące dekoherencję stanów utworzonych w wyniku oddziaływania Rashby. Jeśli zaniedbamy przesunięcie energetyczne pasm związane z obecnością domieszek, to możemy uwzględnić tylko część urojoną funkcji Greena, którą możemy zapisać w następującej formie [109]:

$$G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{0R} = -i\frac{\pi}{2} \left(\left(1 + \mathbf{n}_k \cdot \boldsymbol{\sigma}\right) \delta(\varepsilon - E_{1k}) + \left(1 - \mathbf{n}_k \cdot \boldsymbol{\sigma}\right) \delta(\varepsilon - E_{2k}) \right)$$
(4.17)

oraz $G^{0A}_{\mathbf{k}\varepsilon} = -G^{0R}_{\mathbf{k}\varepsilon}$, natomiast $n_{\mathbf{k}}$ to wektor jednostkowy zdefiniowany następująco:

$$\mathbf{n}_{\mathbf{k}} = \left(\frac{\alpha k_y}{\lambda_k}, -\frac{\alpha k_x}{\lambda_k}, 0\right) ; \qquad \lambda_k = \alpha k .$$
(4.18)

Funkcja Keldysha, $G^{0K}_{\mathbf{k}\varepsilon}$, w równowadze jest natomiast związana z funkcją rozkładu Fermiego-Diraca $f(\varepsilon)$ następującą zależnością [101, 102]:

$$G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{0K} = \left[1 - 2f(\varepsilon)\right] \left(G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{0R} - G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{0A}\right)$$
(4.19)

Energię własną, związaną z rozpraszaniem na domieszkach możemy wyznaczyć na podstawie zależności:

$$\Sigma_{\mathbf{k}\varepsilon} = N_{\rm imp} \int \frac{d^2 \mathbf{k}'}{(2\pi)^2} v_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} G_{\mathbf{k}'\varepsilon} v_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^*, \qquad (4.20)$$

gdzie $N_{\rm imp}$ jest koncentracją domieszek, natomiast $v_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ element macierzowy potencjału domieszki. Wykorzystując (4.15) oraz fakt, że $[H_0, G^0_{\mathbf{k}\varepsilon}]_- = 0$ otrzymujemy w limicie liniowym względem \mathbf{E} równanie, które pozwala wyznaczyć nierównowagową poprawkę, $\delta G^K_{\mathbf{k}\varepsilon}$, do funkcji Keldysha $G^K_{\mathbf{k}\varepsilon} \simeq G^{0K}_{\mathbf{k}\varepsilon} + \delta G^K_{k\varepsilon}$ [109]:

$$\left(e\mathbf{E}\cdot\nabla_{k} + \frac{e}{m}\mathbf{E}\cdot\mathbf{k}\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\right)G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{0K} + i\alpha k_{y}\left[\sigma_{x},\delta G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{K}\right]_{-} \\ -i\alpha k_{x}\left[\sigma_{y},\delta G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{K}\right]_{-} - \frac{\alpha}{2}eE_{x}\left[\sigma_{y},\frac{\partial G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{0K}}{\partial\varepsilon}\right]_{+} + \frac{\alpha}{2}eE_{y}\left[\sigma_{x},\frac{\partial G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{0K}}{\partial\varepsilon}\right]_{+} \\ = -i\Sigma_{\mathbf{k}\varepsilon}^{0R}\delta G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{K} - i\,\delta\Sigma_{\mathbf{k}\varepsilon}^{K}\,G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{0A} + i\,G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{0R}\,\delta\Sigma_{\mathbf{k}\varepsilon}^{K} + i\,\delta G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{K}\,\Sigma_{\mathbf{k}\varepsilon}^{0A}$$
(4.21)

w którym $\Sigma^0_{{\bf k}\varepsilon}$ to równowagowa energia własna.

Możemy zapostulować rozwiązanie równania (4.21) w postaci:

$$\delta G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{K} = -i\pi \left[Q_{\mathbf{k}} \ \delta(\varepsilon - E_{1k}) + R_{\mathbf{k}} \ \delta(\varepsilon - E_{2k}) \right], \qquad (4.22)$$

gdzie funkcje $Q_{\mathbf{k}}$ i $R_{\mathbf{k}}$ są zdefiniowane na powierzchni $\varepsilon = E_{1,2k}$ i zależą tylko od kierunku wektora **k** na tej powierzchni:

$$Q_{\mathbf{k}} = Q_{0\mathbf{k}} + \mathbf{Q}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \tag{4.23}$$

$$R_{\mathbf{k}} = R_{0\mathbf{k}} + \mathbf{R}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \tag{4.24}$$

W związku z tym, aby wyznaczyć $\delta G_{\mathbf{k}\varepsilon}^K$ należy wyznaczyć $Q_{\mathbf{k}}$ i $R_{\mathbf{k}}$. Znając funkcję $G_{\mathbf{k}\varepsilon}^K$ możemy powiązać ją z wignerowską finkcją rozkładu a następnie wyznaczyć interesujące nas wielkości makroskopowe takie jak np. gęstość cząstek, prąd ładunkowy, prąd ciepła.

Prąd spinowy i holowskie przewodnictwo spinowe

Wignerowska funkcja rozkładu, $f(k, \varepsilon, R, T)$, jest związana z funkcją Greena $G^{<}$ poprzez następującą relację:

$$f(k,\varepsilon,R,T) = -iG^{<}(k,\varepsilon,R,T).$$
(4.25)

Gęstość prądu ładunkowego możemy zdefiniować poprzez funkcję Wignera:

$$j_{\mu}^{el} = e \operatorname{Tr} \int \frac{d^{D} \mathbf{k}}{(2\pi)^{D}} v_{\mu} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} f(k,\varepsilon,R,T)$$
(4.26)

i wobec tego, wstawiając (4.25) do powyższego równania, otrzymamy:

$$j^{el}_{\mu} = -ie \operatorname{Tr} \int \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} v_{\mu} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} G^{<}(k,\varepsilon,R,T) \,. \tag{4.27}$$

Stosując znane relacje między funkcjami Greena i funkcją spektralną 2 , A, znajdujemy:

$$G^{<} = \frac{1}{2}G^{K} + i\frac{1}{2}A \tag{4.28}$$

Funkcja spektralna, A, nie zależy od stanu układu, więc możemy ją pominąć gdy rozważamy wkład nierównowagowy [46] i w związku z tym:

$$j_{\mu}^{el} = -i\frac{1}{2}e\text{Tr}\int \frac{d^{D}\mathbf{k}}{(2\pi)^{D}}v_{\mu}\int \frac{d\varepsilon}{2\pi}G^{K}$$
(4.29)

²Wykorzystano tu relacje: $G^> - G^< = -iA$ oraz $G^> + G^< = G^K$.

Gęstość prądu spinowego możemy otrzymać w analogiczny sposób zamieniając w powyższych wyrażeniach v_{μ} na $[v_{\mu}, \sigma_z]_+/4$:

$$j^{s_z}_{\mu} = -i\frac{1}{8} \operatorname{Tr} \int \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} [v_{\mu}, \sigma_z]_+ \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} G^K$$
(4.30)

4.2 SEH w domieszkowanym dwuwymiarowym gazie elektronowym

Aby wyznaczyć spinowe przewodnictwo holowskie należy najpierw rozwiązać równanie (4.21), które po wykorzystaniu (4.22) sprowadza się do układu równań na podstawie których możemy wyznaczyć funkcje $Q_{\mathbf{k}}$ i $R_{\mathbf{k}}$. Załóżmy dla uproszczenia, że pole elektryczne skierowane jest w kierunku osi y: $\mathbf{E} = (0, E, 0)$ oraz że rozpraszanie na domieszkach nie zależy od spinu, a więc $\lambda = 0$, a potencjał $v_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ jest proporcjonalny do macierzy jednostkowej w przestrzeni spinowej. Biorąc pod uwagę powyższe założenia i zapisując równanie (4.21) w jawnej postaci całkujemy to równanie po ε . W konsekwencji otrzymujemy układ ośmiu sprzężonych równań na składowe wektorów $\tilde{Q}_{\mathbf{k}} = (Q_{\mathbf{k}0}, Q_{\mathbf{k}x}, Q_{\mathbf{k}y}, Q_{\mathbf{k}z})^{\mathrm{T}}$ i $\tilde{R}_{\mathbf{k}} = (R_{\mathbf{k}0}, R_{\mathbf{k}x}, R_{\mathbf{k}y}, R_{\mathbf{k}z})^{\mathrm{T}}$. Równania te mogą być rozwiązane, gdy założymy, że wszystkie średnie $\langle Q_{k\mu} \rangle$ oraz $\langle R_{k\mu} \rangle$ ($\mu = 0, x, y, z$) po orientacjach wektora falowego są znanymi funkcjami. Wykonując dalsze rachunki otrzymamy, że układ równań na $Q_{\mathbf{k}\mu}$ może być zapisany w następującej formie [109]:

$$\mathcal{M}_{1\mathbf{k}}\,\tilde{Q}_{\mathbf{k}} = A_{1\mathbf{k}}.\tag{4.31}$$

 $\mathcal{M}_{1\mathbf{k}}$ jest tutaj macierzą 4×4 następującej postaci:

$$\mathcal{M}_{1\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} 1/\tau_1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1/\tau_1 & 0 & 2\alpha k_x\\ 0 & 0 & 1/\tau_1 & 2\alpha k_y\\ 0 & -2\alpha k_x & -2\alpha k_y & 1/\tau_1 \end{pmatrix},$$
(4.32)

gdzie $1/\tau_1 = 1/\tau_{11} + 1/\tau_{12}$. Składowe wektora $A_{1\mathbf{k}}$ są zdefiniowane następująco:

$$A_{1\mathbf{k}0} = eE \frac{\partial \tilde{f}_1}{\partial E_{1k}} \frac{\partial E_{1k}}{\partial k_y} + \frac{\langle Q_{k0} \rangle}{\tau_{11}} + \frac{\mathbf{n}_{\mathbf{k}} \cdot \langle \mathbf{Q}_k \rangle}{\tau_{11}} + \frac{\langle R_{k'0} \rangle}{\tau_{12}} + \frac{\mathbf{n}_{\mathbf{k}} \cdot \langle \mathbf{R}_{k'} \rangle}{\tau_{12}}, \qquad (4.33)$$

$$A_{1\mathbf{k}\mu} = eE\tilde{f}_1 \frac{\partial n_{\mathbf{k}\mu}}{\partial k_y} + eE\frac{\partial\tilde{f}_1}{\partial E_{1k}} \frac{\partial E_{1k}}{\partial k_y} n_{\mathbf{k}\mu} \frac{\langle Q_{k\mu} \rangle}{\tau_{11}} + \frac{\langle R_{k'\mu} \rangle}{\tau_{12}} + \frac{n_{\mathbf{k}\mu} \langle Q_{k0} \rangle}{\tau_{11}} + \frac{n_{\mathbf{k}\mu} \langle R_{k'0} \rangle}{\tau_{12}}$$
(4.34)

indeks $\mu = x, y, z, \ \tilde{f}_{1k} \equiv 2f(E_{1k}) - 1$, gdzie $f(E_{1k})$ to funkcja rozkładu Fermiego-Diraca, natomiast k' spełnia warunek $E_{2k'} = E_{1k}$, a więc może być traktowane jako funkcja k. Wprowadziliśmy także wewnątrzpasmowe, τ_{11} , i międzypasmowe, τ_{12} , czasy relaksacji. Podobny układ równań możemy napisać dla $R_{\mathbf{k}'\mu}$. Po rozwiązaniu tych układów równań i uśrednieniu po kierunkach wektora \mathbf{k} (oraz \mathbf{k}') otrzymujemy układ ośmiu równań liniowych na $\tilde{Q}_{\mathbf{k}}$ i $\tilde{R}_{\mathbf{k}}$. Rozwiązanie tego układu równań pozwala nam znaleźć $Q_{\mathbf{k}'\mu}$ i $R_{\mathbf{k}'\mu}$.

Znając postać $\delta G_{\mathbf{k}\varepsilon}^{K}$ dla rozważanego przez nas modelu i wykorzystując (4.15), (4.22), otrzymujemy gęstość prądu spinowego płynącego w kierunku x [109]:

$$j_x = -\frac{e}{2} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \left[\frac{k_x}{m} \left(Q_{\mathbf{k}0} + R_{\mathbf{k}0} \right) - \alpha \left(Q_{\mathbf{k}y} + R_{\mathbf{k}y} \right) \right]$$
(4.35)

Przy założeniu, że nie ma przejść międzypasmowych $(1/\tau_{12} = 1/\tau_{21} = 0)$ oraz, że $\tau_{11} = \tau_{22} = \tau$ otrzymujemy [109]:

$$j_x^{s_z} = \frac{eE}{8\pi^2 m^2} \int dk \, k\mathcal{A} \,, \tag{4.36}$$

$$\mathcal{A} = \left(1 + \frac{k}{m\alpha}\right)\frac{\partial \tilde{f}_1}{\partial E_{1k}} + \left(1 - \frac{k}{m\alpha}\right)\frac{\partial \tilde{f}_2}{\partial E_{2k}} + \frac{1}{\alpha k}(\tilde{f}_1 - \tilde{f}_2).$$
(4.37)

Wykonując całkowanie (4.36) po k otrzymamy, że $j_x^{s_z} = 0$. To oznacza, że rozpraszanie elektronów na domieszkach wygasza SEH, nawet jeśli gęstość domieszek jest niska, a potencjał rozpraszający słaby. Wynik ten jest zgodny, z wynikami otrzymanymi wcześniej w literaturze [95, 110] przy pomocy innych metod, jak również z wynikami prezentowanymi w poprzednim rozdziale.

Podsumowanie

Podsumowując, w niniejszym rozdziale rozważono dwuwymiarowy gaz elektronowy z oddziaływaniem spin-orbita Rashby w obecności potencjału rozpraszającego od domieszek. W rachunkach wykorzystano formalizm Keldysha, który został zmodyfikowany tak, aby możliwe było przeanalizowanie przypadku dwóch dobrze rozseparowanych powierzchni Fermiego. Rozważania były ograniczone do przypadku małego odchylenia od równowagi i niskiej koncentracji domieszek. W ogólnym przypadku SEH w obecności domieszek jest redukowany w wyniku rozpraszania elektronów na domieszkach. Efekt ginie całkowicie, tylko gdy założymy szczególne warunki na wewnątrzpasmowe i międzypasmowe czasy relaksacji.

Rozdział 5

Spinowy efekt Halla w dwuwymiarowym gazie elektronowym indukowany fluktuacjami pola Rashby

W niniejszym rozdziale omówimy wpływ fluktuacji pola Rashby na spinowe przewodnictwo holowskie w dwuwymiarowym gazie elektronowym. W poprzednich rozdziałach omówiliśmy zachowanie przewodnictwa holowskiego w dwuwymiarowym gazie elektronowym z jednorodnym oddziaływaniem spin-orbita typu Rashby. Pokazaliśmy kluczową rolę obecności domieszek, które nawet w limicie niskich koncentracji, przy założeniu braku spinowo-zależnych efektów rozproszeniowych, niszczą SEH. Fluktuacje pola Rashby (które są spowodowane przypadkowym rozmieszczeniem lub pewnymi niejednorodnościami na ścianach studni kwantowej) odgrywają istotną rolę w transporcie spinowym.

Dynamika spinowa zdeterminowana fluktuacjami oddziaływania spin-orbita jest dość powszechna w symetrycznych studniach kwantowych [111], takich jak np. Si/SiGe [112] oraz Ga-As/AlGaAs wzrastających wzdłuż kierunku krystalograficznego (110) [113]. W przypadku fluktuującego pola Rashby w układzie bez domieszek, Moca i in. [87] pokazali przy pomocy analizy numerycznej opartej o model ciasnego wiązania dla skończonego układu, że SEH może być skończony. Okazuje się jednak, że w takich układach domieszki odgrywają mniej znaczącą rolę niż w przypadku układów ze stałym oddziaływaniem Rashby i SEH nie znika w limicie małej koncentracji domieszek. Rozważać będziemy dwuwymiarowy gaz elektronowy w symetrycznej studni kwantowej ze stałym oddziaływaniem spin-orbita Dresselhausa oraz z fluktuującym polem Rashby. Hamiltonian opisujący ten układ w przestrzeni wektora falowego jest postaci:

$$H_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = H^{0}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + H^{FR}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}.$$
 (5.1)

 $H^0_{\mathbf{kk'}}$ to jednocząstkowy hamiltonian niezaburzony zawierający człon kinetyczny oraz składnik opisujący oddziaływanie spin-orbita Dresselhausa:

$$H^{0}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{k^2}{2m} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \beta (\sigma_x k_x - \sigma_y k_y) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \,. \tag{5.2}$$

Człon $H_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{FR}$ opisuje fluktuacje pola Rashby i będzie traktowany w sposób perturbacyjny

$$H_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{FR} = \frac{\lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}{2} \left(\sigma_x (k_y + k'_y) - \sigma_y (k_x + k'_x) \right) \,. \tag{5.3}$$

W powyższych wyrażeniach, oraz w dalszej części tego rozdziału, aby zachować spójność z wyrażeniami z cytowanych prac, położymy $\hbar = 1$. Zakładać będziemy, że parametr oddziaływania Rashby $\lambda(\mathbf{r})$ jako średnia przestrzenna znika: $\langle \lambda(\mathbf{r}) \rangle = 0$, natomiast drugi moment statystyczny jest różny od zera $\langle \lambda(\mathbf{r})\lambda(\mathbf{r}') \rangle = C(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, a jego transformata Fouriera wynosi [75]

$$C_q = |\lambda_q|^2 = 2\pi \langle \lambda^2 \rangle R^2 e^{-qR} \,; \tag{5.4}$$

gdzie wektor $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ opisuje przekaz pędu w wyniku rozpraszania na fluktuacjach pola Rashby, a parametr R oznacza zasięg korelacji.

Na początek przeanalizujemy sytuację, gdy oddziaływanie spin-orbita typu Dresselhausa jest zaniedbywalnie małe i położymy $\beta = 0$, a następnie rozważymy przypadek, gdy $\beta \neq 0$

5.1 SEH w 2DEG indukowany fluktuacjami pola Rashby

Rozważamy przypadek dwuwymiarowego gazu elektronowego w symetrycznej studni kwantowej, w której oddziaływanie spin-orbita Dresselhausa jest zaniedbywalnie małe, natomiast przypadkowo rozmieszczone, w pobliżu ścian studni, donory będą indukowały lokalne fluktuujące pole Rashby. Problem ten został opisany w pracach Dugaev i in. [88, 114]. W tej sytuacji hamiltonian niezaburzony (5.2) zawiera tylko człon kinetyczny ($\beta = 0$). Zaburzenie związane z obecnością zewnętrznego pola elektromagnetycznego możemy uwzględnić poprzez dodatkowy człon w hamiltonianie $H_{\mathbf{kk}'}^{(A)} = -e\hat{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{A}$. Po wyznaczeniu operatora prędkości, $\hat{\mathbf{v}}$, otrzymamy [88, 114]:

$$H_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{(A)} = -\frac{e}{m}\mathbf{k}\cdot\mathbf{A}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \frac{e^2A^2}{2m}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - e\lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\sigma_x A_y - \sigma_y A_x)$$
(5.5)



RYSUNEK 5.1: Diagramy Feynmana dające wkład do gęstości prądu spinowego. Lewy wierzchołek odpowiada operatorowi gęstości prądu spinowego, a prawy wierzchołek opisuje zaburzenie związane z zewnętrznym polem elekromagnetycznym. Linia przerywana na wykresie oznacza korelator fluktuującego pola Rashby. Rysunek pochodzi z pracy [114].

W limicie liniowej odpowiedzi, drugi składnik powyższego równania będzie pominięty, natomiast trzeci składnik opisuje sprzężenie pola elektrycznego ze spinem elektronu poprzez fluktuacje pola Rashby i jest odpowiedzialny za pojawienie się anomalnego wierzchołka prądowego w diagramie Feynmana. W rachunkach wykorzystamy definicję operatora gęstości prądu spinowego (1.1) zapisanego tu w postaci $j_{\alpha}^{s_z} = \frac{1}{4e}[j_{\alpha}, \sigma_z]_+$, gdzie operator gęstości prądu elektrycznego [114]:

$$(j_{x,y})_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = -\frac{\partial H^{(A)}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}{\partial A_{x,y}} = \frac{e}{m} \left(k_{x,y} - eA_{x,y} \right) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \mp e\lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sigma_{y,x} \,. \tag{5.6}$$

Rozważamy SEH jako odpowiedź układu na zewnętrzne pole zadane przez potencjał wektorowy $\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}e^{-i\omega t}$. Gęstość prądu spinowego $j_{\alpha}^{s_z}(\omega)$ policzymy stosując formułę Kubo. Rysunek 5.1 przedstawia diagramy dające wkład do szukanej przez nas gęstości prądu spinowego. Zauważmy, że operator gęstości prądu spinowego nie posada wkładu od oddziaływania spin-orbity i wobec tego nie pojawiają się tu diagramy z lewym anomalnym wierzchołkiem. Zakładając, że pole elektryczne jest zorientowane wzdłuż osi y ($\mathbf{A} = A_y \hat{y}$), w wyniku SEH pojawi się w układzie prąd spinowy w kierunku osi x. Analizując lewy diagram na rys.5.1 otrzymujemy za autorami omawianych prac:

$$j_x^{s_z(1)}(\omega) = \frac{ie}{4m} \operatorname{Tr} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} k_x \sigma_z G_{\mathbf{k}}(\varepsilon + \omega) |\lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2 \left(\sigma_x (k_y + k'_y) - \sigma_y (k_x + k'_x) \right) \\ \times G_{\mathbf{k}}(\varepsilon + \omega) \sigma_x A_y G_{\mathbf{k}}(\varepsilon) , \qquad (5.7)$$

gdzie $G_{\mathbf{k}}(\varepsilon)$ jest funkcją Greena związaną z hamiltonianem niezaburzonym, proporcjonalną do macierzy jednostkowej w przestrzeni spinowej, natomiast indeks "(1)" informuje, że jest to wkład tylko od lewego diagramu z rys.5.1. Analogiczne wyrażenie możemy otrzymać dla prawego diagramu - $j_x^{s_z(2)}(\omega)$. Całkowita gęstość prądu spinowego jest więc sumą $j_x^{s_z}(\omega) = j_x^{s_z(1)}(\omega) + j_x^{s_z(2)}(\omega)$. Korzystając z relacji między transformatami Fouriera potencjału wektorowego i pola elektrycznego $\mathbf{A} = -i\frac{\mathbf{E}}{\omega}$ oraz wykonując całkowanie po energii - ε otrzymujemy w limicie $\omega \to 0$, że spinowe przewodnictwo holowskie dane jest przez następujące wyrażenie:

$$\sigma_{xy}^{sz} = \frac{ie}{4\pi m} \sum_{\mathbf{kq}} (2k_x^2 - k_x q_x) C_q G_{\mathbf{k}}^R (G_{\mathbf{k-q}}^R - G_{\mathbf{k-q}}^A) G_{\mathbf{k}}^A$$
(5.8)

Funkcje $G_{\mathbf{k}}^{R,A}$ są funkcjami Greena na poziomie Fermiego. Wykorzystując relację $G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{R} - G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{A} = -2\pi i \delta(\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})$ powyższe równanie możemy zapisać następująco:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{\pi e}{2m\Gamma} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \int \frac{d^2 \mathbf{q}}{(2\pi)^2} k_x (2k_x - q_x) C_q \delta(\varepsilon_k - \mu) \delta(\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}).$$
(5.9)

 $\Gamma = \frac{1}{2\tau}$, gdzie $\tau = (\tau_0^{-1} + \tau_s^{-1})^{-1}$ to całkowity czas relaksacji uwzględniający procesy relaksacji związane z rozpraszaniem na domieszkach $-\tau_0$ oraz z rozpraszaniem z odwróceniem spinu na fluktuacjach pola Rashby - τ_s . Po wykonaniu całkowania po kącie θ (kącie między wektorami **k** i **q**) otrzymamy:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e}{8\pi} \tau \frac{m}{\pi} \int_0^{2k_F} dq C_q \sqrt{4k_F^2 - q^2} \,. \tag{5.10}$$

Biorąc pod uwagę wyrażenie na czas relaksacji spinowej [115]:

$$\frac{1}{\tau_s} = \frac{m}{4\pi} \int_0^{2k_F} dq C_q \sqrt{4k_F^2 - q^2}$$
(5.11)

dostajemy:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e}{2\pi} \frac{\tau}{\tau_s} \,. \tag{5.12}$$

Wynik ten, z dokładnością do czynnika liczbowego¹, został, jak już wcześniej wspominaliśmy, po raz pierwszy otrzymany przez Dugaeva i in. [88, 114]. Zależność ta pokazuje, że spinowe przewodnictwo holowskie nie przyjmuje stałej - uniwersalnej wartości, tylko zależy od procesów relaksacji związanych z rozpraszaniem na domieszkach oraz fluktuacjach oddziaływania spinorbita. Co więcej, SEH nie znika, jak to ma miejsce w domieszkowanym dwuwymiarowym gazie elektronowym ze stałym oddziaływaniem spin-orbita.

Przedyskutujmy dokładniej otrzymany wynik. Wstawiając (5.4) do (5.10) otrzymamy:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e}{4\pi} \tau m \langle \lambda^2 \rangle \int_0^{2k_F R} dx \sqrt{4k_F^2 R^2 - x^2}$$
(5.13)

$$= \frac{e}{2} \tau m \langle \lambda^2 \rangle k_F R(I_1(2k_F R) - L_1(2k_F R)), \qquad (5.14)$$

gdzie $I_1(x)$ oraz $L_1(x)$ to odpowiednio funkcja specjalna Bessla i Struve'a. Na podstawie powyższego wyrażenia możemy znaleźć proste analityczne wyrażenia dla dwóch szczególnych limitów:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e}{2\pi} \tau m \langle \lambda^2 \rangle \begin{cases} \frac{\pi}{2} k_F^2 R^2 ; k_F R \ll 1 \\ k_F R ; k_F R \gg 1 \end{cases}$$
(5.15)

W limicie półklasycznym, długozasięgowych korelacji, $k_F R >> 1$ spinowe przewodnictwo holowskie zależy liniowo od $k_F R$ i dąży do stałej wartości $e/2\pi$. Sytuacji tej odpowiada niska koncentracja domieszek w układzie, która razem z niskimi temperaturami w układzie powodują,

¹Różnica między zależnością (5.12) a odpowiadającymi jej zależnościami w pracach [88, 114] wynika z różnic w definicji prądu spinowego lub korelatora.



RYSUNEK 5.2: Spinowe przewodnictwo holowskie w funkcji $k_F R$. Dla różnych czasów relaksacji związanych z rozpraszaniem na domieszkach τ_0 . Parametr τ_{s0} jest zdefiniowany przez zależność $\tau_{s0}^{-1} = m \langle \lambda \rangle, \ \sigma_0 = e/2\pi$. Na podstawie [114].

że $\tau \to \tau_s$. Limit $k_F R \ll 1$ wskazuje że układ jest w limicie silnie zanieczyszczonym (domieszkowanym) z bardzo długimi czasami relaksacji τ_s . W rezultacie spinowe przewodnictwo holowskie jest małe i dąży do zera jak $k_F^2 R^2$. Rysunek 5.2 przedstawia spinowe przewodnictwo holowskie unormowane do $\sigma_0 = e/2\pi$ w funkcji $2k_F R$ dla różnych wartości czasów relaksacji związanych z rozpraszaniem na domieszkach τ_0 .

5.2 SEH w 2DEG z oddziaływaniem spin-orbita Dresselhausa oraz z fluktuującym polem Rashby

Omówimy teraz przypadek bardziej ogólny i założymy, że $\beta \neq 0$ [91]. Hamiltonian niezaburzony (5.2) posiada teraz dwie wartości własne $E_{k\pm} = \frac{k^2}{2m} \pm \beta k$. Funkcje Greena dla hamiltonianu $H^0_{\mathbf{kk'}}$ wzięte na poziomie Fermiego możemy zapisać w postaci:

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}}^{R} = \mathcal{G}_{\mathbf{k}0}^{R}\sigma_{0} + \mathcal{G}_{\mathbf{k}x}^{R}\sigma_{x} + \mathcal{G}_{\mathbf{k}y}^{R}\sigma_{y}, \qquad (5.16)$$

gdzie

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}0}^{R} = \frac{1}{2} \left(\mathcal{G}_{\mathbf{k}+}^{R} + \mathcal{G}_{\mathbf{k}-}^{R} \right), \quad \mathcal{G}_{\mathbf{k}x}^{R} = \frac{1}{2} \cos \phi \left(\mathcal{G}_{\mathbf{k}+}^{R} - \mathcal{G}_{\mathbf{k}-}^{R} \right), \quad \mathcal{G}_{\mathbf{k}y}^{R} = -\frac{1}{2} \sin \phi \left(\mathcal{G}_{\mathbf{k}+}^{R} - \mathcal{G}_{\mathbf{k}-}^{R} \right), \quad (5.17)$$

przy czym

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}\pm}^R = \frac{1}{\mu - E_{k\pm} + i\Gamma},\tag{5.18}$$



RYSUNEK 5.3: Diagramy Feynmana dające wkład do spinowego przewodnictwa holowskiego w limicie prądu stałego.

natomiast ϕ jest współrzędną kątową wektora **k**. Γ jest równe 1/2 τ , gdzie τ to czas relaksacji. Zakładać będziemy, że Γ jest parametrem fenomenologicznym. Operator gęstości prądu ładunkowego jest natomiast dany następującym wyrażeniem:

$$j_{x(y)} = \frac{\partial H_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}{\partial k_{x(y)}} = \frac{e}{m} k_{x(y)} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \pm \beta e \sigma_{x(y)} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \mp e \lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sigma_{y(x)} \,. \tag{5.19}$$

Spinowe przewodnictwo holowskie zostanie wyznaczone przy pomocy formuły Kubo-Stredy wprowadzonej w Rozdziale 1:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \sigma_{xy}^{s_z I} + \sigma_{xy}^{s_z II}, \tag{5.20}$$

gdzie $\sigma_{xy}^{s_z II}$ to wkład do przewodnictwa spinowego od stanów elektronowych poniżej poziomu Fermiego, który jednak znika w rozważanym przez nas problemie. Tak więc, całkowite spinowe przewodnictwo holowskie będzie związane tylko z $\sigma_{xy}^{s_z I}$, danym przez (1.11). Wkład ten można wyrazić poprzez serię diagramów Feynmana, co zapisujemy następująco:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e}{2\pi} \text{Tr} \sum_{\mathbf{kk}'} (D_1 + D_2 + D_3).$$
(5.21)

Rysunek 5.3 przedstawia rozważane przez nas diagramy. Pierwszy z tych diagramów, to omawiany w Dodatku A diagram podstawowy związany z topologicznym wkładem od SEH, który omawialiśmy w podrozdziale 3.3. Dostajemy więc na podstawie wcześniejszych rachunków, że:

$$\sigma_{xy}^{s_z p} = \frac{e}{2\pi} \operatorname{Tr} \sum_{\mathbf{kk'}} D_1 = -\frac{e}{8\pi}, \qquad (5.22)$$

co pozwala nam zapisać:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{e}{8\pi} + \delta \sigma_{xy}^{s_z}.$$
(5.23)

Musimy więc znaleźć wkład do spinowego przewodnictwa holowskiego $\delta \sigma_{xy}^{s_z}$:

$$\delta \sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e}{2\pi} \operatorname{Tr} \sum_{\mathbf{kk'}} (D_2 + D_3) \,. \tag{5.24}$$

Rozpisując diagramy i wykonując operację śladu, dostajemy:

$$\delta\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e}{2\pi} \sum_{\mathbf{kk'}} \frac{k_x}{2m} (k_y + k'_y) \frac{|\lambda_{\mathbf{kk'}}|^2}{2} (T_1 + T_3) - \frac{e}{2\pi} \sum_{\mathbf{kk'}} \frac{k_x}{2m} (k_x + k'_x) \frac{|\lambda_{\mathbf{kk'}}|^2}{2} (T_2 + T_4), \quad (5.25)$$

gdzie funkcje T_1-T_4 są zdefiniowane następująco:

$$T_{1} + T_{3} = i\frac{1}{2} \left(\cos\phi\sin\phi' + \sin\phi\cos\phi'\right) \\ \times \left(G_{\mathbf{k}+}^{A}G_{\mathbf{k}-}^{R} - G_{\mathbf{k}-}^{A}G_{\mathbf{k}+}^{R}\right) \left(G_{\mathbf{k}'-}^{A} - G_{\mathbf{k}'+}^{A} + G_{\mathbf{k}'-}^{R} - G_{\mathbf{k}'+}^{R}\right) , \qquad (5.26)$$
$$T_{2} + T_{4} = -i\frac{1}{2} \left(\cos\phi\cos\phi' - \sin\phi\sin\phi'\right)$$

$$\times \left(G_{\mathbf{k}+}^{A} G_{\mathbf{k}-}^{R} - G_{\mathbf{k}-}^{A} G_{\mathbf{k}+}^{R} \right) \left(G_{\mathbf{k}'+}^{A} - G_{\mathbf{k}'-}^{A} + G_{\mathbf{k}'-}^{R} - G_{\mathbf{k}'-}^{R} \right) + i \left(G_{\mathbf{k}+}^{R} G_{\mathbf{k}-}^{A} + G_{\mathbf{k}-}^{R} G_{\mathbf{k}+}^{A} \right) \left(G_{\mathbf{k}'0}^{A} - G_{\mathbf{k}'0}^{R} \right) , \qquad (5.27)$$

gdzie ϕ i ϕ' , to odpowiednio współrzędne kątowe wektorów **k** i **k'**. Dokonując zamiany zmiennych związanej z faktem, że **k'** = **k** – **q**, oraz całkując po kącie ϕ znajdujemy:

$$\delta \sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e\Gamma\sqrt{2}}{16\pi^2} \int dqq \int d\theta \int dk \, k \frac{C_q}{4m} \frac{k(2k-q\cos\theta)}{(\varepsilon_F - \varepsilon_k)^2 + 2m\beta^2 \varepsilon_k} \times \left[|F_1| \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_1) + |F_2| \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_2) \right] \left[\delta(\varepsilon_F - E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}+}) + \delta(\varepsilon_F - E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-}) \right].$$
(5.28)

W powyższym wyrażeniu $\varepsilon_k = k^2/2m$, kąt θ jest kątem pomiędzy wektorami **k** i **q**, a funkcja F_i (i = 1, 2) jest postaci:

$$F_i = \frac{\left(2m\beta^2\varepsilon_i + (\varepsilon_i - \varepsilon_F)^2\right)^{3/2}}{(\varepsilon_i - \varepsilon_F)^3 + 3m\beta^2(\varepsilon_i^2 - \varepsilon_F^2) - 2m^2\beta^4\varepsilon_i},$$
(5.29)

z ε_i danymi równaniem:

$$\varepsilon_{1,2} = m\beta^2 + \varepsilon_F \mp \sqrt{m^2\beta^4 + 2m\beta^2\varepsilon_F} \,. \tag{5.30}$$

W kolejnym kroku wyrażamy delty Diraca $\delta(\varepsilon_F - E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\pm})$ przy pomocy delt $\delta(\theta - \theta_n)$, gdzie θ_n $(n = 1 \div 8)$ są rozwiązaniami równań $\varepsilon_F - E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\pm} = 0$. Całkowanie po q wykonane zostało numerycznie.

Na rysunku 5.4(a) przedstawiony został wkład $\delta \sigma_{xy}^{sz}$ w funkcji parametru oddziaływania spin-orbita Dresselhausa β . Zależność ta zmierza do zera dla dość dużych parametrów β . Na rysunku 5.4(b) wkład do spinowego przewodnictwa holowskiego związany z obecnością fluktuacji



RYSUNEK 5.4: Wkład $\delta \sigma_{xy}^{s_z}$ do spinowego przewodnictwa holowskiego jako funkcja parametru oddziaływania spin-orbita typu Dresselhausa β dla wskazanych wartości R i μ . Pozostałe parametry : $\sqrt{\langle \lambda^2 \rangle} = 1.5 \cdot 10^{-12} \, eVm$, $\Gamma = 0.5 \, meV$, and $m = 0.05 m_0$.

pola Rashby został wykreślony w zależności od parametru R, który opisuje zasięg korelacji fluktuującego pola spinowoorbitalnego. W limicie długozasięgowych korelacji ($k_F R >> 1$) spinowe przewodnictwo holowskie jest liniową funkcją R, natomiast dla $k_F R \ll 1$ składnik $\delta \sigma_{xy}^{s_z}$ zmierza do zera jak R^2 . Tak więc, $\delta \sigma_{xy}^{s_z}$ wykazuje podobne zachowanie do spinowego przewodnictwa holowskiego jakie otrzymujemy w dwuwymiarowym gazie elektronowym, w którym jedynym oddziaływaniem spin-orbita jest fluktuujące pole Rashby. Swego rodzaju współzawodnictwo między oddziaływaniem spin-orbita Dresselhausa i fluktuacjami pola Rashby powoduje, że dla dostatecznie silnego oddziaływania typu Dresselhausa spinowe przewodnictwo holowskie wykazuje stałą uniwersalną wartość.

Podsumowanie

W tym rozdziale omówiony został spinowy efekt Halla związany z obecnością fluktuującego pola Rashby. W pierwszej jego części odtworzone zostały rachunki oraz wyniki dotyczące SEH indukowanego tylko przez fluktuacje pola Rashby, które zostały zawarte w pracach [88, 114], a następnie omówiony został przypadek ogólniejszy - gdy w układzie poza fluktuującym polem spinowo-orbitalnym obecne jest oddziaływanie Dresselhausa. Pokazane zostało, że same fluktuacje pola Rashby, prowadzą do SEH, ze spinowym przewodnictwem holowskim zdeterminowanym przez całkowity czas relaksacji oraz czas relaksacji związany z odwróceniem spinu. Czas relaksacji spinowej zależy w tym przypadku od charakteru fluktuacji, który opisany jest przez funkcję korelacji, C_q , dla parametru oddziaływania Rashby $\lambda_{\mathbf{kk'}}$. Jeśli w układzie obecne jest również oddziaływanie spin-orbita Dresselhausa, wówczas obserwujemy w limicie dużych β wygaszenie wkładu do przewodnictwa spinowego pochodzącego od fluktuacji pola Rashby. W obu rozważanych przypadkach widać, że wkład do spinowego przewodnictwa holowskiego pochodzący od fluktuacji pola Rashby jest w limicie korelacji długozasięgowych ($k_F R >> 1$) liniową funkcją parametru R, opisującego zasięg korelacji, natomiast w limicie $k_F R \ll 1$ wkład ten zmierza do zera jak R^2 .

Część III

Spinowy efekt Halla w grafenie i silicenie

Rozdział 6

Spinowy efekt Halla w atomowej monowarstwie grafenu

Przez wiele lat panowało przekonanie, że nie jest możliwe otrzymanie stabilnych termodynamicznie kryształów dwuwymiarowych [116–118]. Jak się jednak okazało, choć dwuwymiarowe kryształy nie wzrastają naturalnie, to możliwe jest ich sztuczne wytworzenie.

W 2004 roku otrzymano po raz pierwszy dwuwymiarowy kryształ zbudowany z atomów węgla - grafen [119]. Elektronowa struktura pasmowa dla stanów niskoenergetycznych ma charakter liniowy. Poziom Fermiego w czystym grafenie leży dokładnie w punktach zetknięcia się pasma walencyjnego i przewodnictwa - w punktach Diraca, gdzie gęstość stanów znika. Tak więc, niskoenergetyczne stany elektronowe w grafenie mogą być opisane przez równanie Diraca dla bezmasowych fermionów, które poruszają się ze stalą prędkością. Fakt ten pozwolił przenieść wiele znanych z kwantowej elektrodynamiki efektów do fizyki ciała stałego [120–123]. Grafen wykazuje wiele ciekawych własności transportowych [124, 125]. Przykładając napięcie bramkujące możemy kontrolować położenie poziomu Fermiego przesuwając go w głąb pasma walencyjnego lub przewodnictwa, co również pozwala zmieniać własności transportowe i kontrolować koncentrację nośników. Grafen charakteryzuje się również wysoką ruchliwością, długą średnią drogą swobodną, wysokim przewodnictwem elektrycznym i termicznym. Z uwagi na swoje własności transportowe grafen jest również interesującym materiałem dla spintroniki [126, 127]. W tym oraz następnych rozdziałach omówimy SEH w atomowej monowarstwie oraz podwójnej warstwie grafenu.


RYSUNEK 6.1: (a) Wektory prymitywnych translacji, (b) wektory położenia najbliższych sąsiadów oraz (c) wektory położenia następnych najbliższych sąsiadów dla sieci heksagonalnej.

6.1 Hamiltonian w modelu ciasnego wiązania oraz hamiltoniany efektywne opisujące grafen

Grafen jest dwuwymiarową siecią krystaliczną typu plastra miodu zbudowaną z atomów węgla. Sieć ta może być rozpatrywana jako sieć zbudowana z dwóch przenikających się podsieci (A oraz B) utworzonych przez trójkątne sieci Bravais'go [124, 125, 128]. Wektory prymitywnych translacji sieciowych wybieramy następująco:

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2} \left(-1, \sqrt{3} \right) \tag{6.1}$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2} \left(1, \sqrt{3} \right) \,, \tag{6.2}$$

gdzie $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a$ jest stałą sieci. W związku z powyższym wektory podstawowe sieci odwrotnej są postaci:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \left(-1, \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \tag{6.3}$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \,. \tag{6.4}$$

Pierwsza strefa Brillouina jest sześciokątem ograniczonym przez sześć punktów K. Punkty te tworzą dwie nierównoważne grupy zwyczajowo oznaczane jako K i K'. Tak więc dwa nieekwiwalentne punkty Diraca możemy wybrać jako:

$$\mathbf{K} = \frac{4\pi}{3a} (-1,0) \text{ oraz } \mathbf{K}' = \frac{4\pi}{3a} (1,0)$$
(6.5)

Każdy atom węgla, z danej podsieci, jest związany z swoimi trzema najbliższymi sąsiadami (atomami węgla z drugiej podsieci) poprzez wiązanie typu σ . Wiązanie to jest wynikiem hybrydyzacji typu sp^2 orbitali 2s, $2p_x$ oraz $2p_y$. Czwarty orbital, $2p_z$, zorientowany prostopadle do płaszczyzny grafenu przekrywa się z pozostałymi orbitalami $2p_z$ tworząc słabe wiązanie typu π . Własności transportowe grafenu są w głównej mierze zdeterminowane przez zdelokalizowane elektrony π [125]. W modelu ciasnego wiązania dla grafenu zakładamy, że elektrony są zlokalizowane wokół węzłów sieci i mogą przeskakiwać pomiędzy najbliższymi sąsiadami (a więc rozważamy przeskoki pomiędzy podsieciami). Hamiltonian nieoddziałujących elektronów definiujemy następująco [124, 125, 128]:

$$\mathcal{H}_0 = -t \sum_{\sigma,i} \left[a_{i,\sigma}^{\dagger} b_{i,\sigma} + b_{i,\sigma}^{\dagger} a_{i,\sigma} \right] , \qquad (6.6)$$

gdzie $a_{i,\sigma}^{\dagger}$ $(b_{i,\sigma}^{\dagger})$ jest operatorem kreacji elektronu o spinie σ na orbitalu π atomu węgla z podsieci A (B) leżącego w *i*-tej komórce elementarnej, natomiast *t* jest całką przeskoku. Na podstawie rysunku 6.1, widać, że hamiltonian ten możemy zapisać w postaci [129]:

$$\mathcal{H}_{0} = -t \sum_{i,j,\sigma} \left[a_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{R}_{i}) b_{\sigma}(\mathbf{R}_{i} + \boldsymbol{\delta}_{j}) + b_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{R}_{i} + \boldsymbol{\delta}_{j}) a_{\sigma}(\mathbf{R}_{i}) \right] \,. \tag{6.7}$$

Indeks j = 1, 2, 3 - przebiega wektory położenia najbliższych sąsiadów *i*-tego atomu węgla z podsieci A:

$$\boldsymbol{\delta}_{1} = \frac{a}{\sqrt{3}}(0,1), \qquad \boldsymbol{\delta}_{2} = \frac{a}{\sqrt{3}}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right), \qquad \boldsymbol{\delta}_{3} = \frac{a}{\sqrt{3}}\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right). \tag{6.8}$$

Dokonajmy transformaty Fouriera [128]:

$$c_{i,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i}$$
(6.9)

$$c_{i,\sigma}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{i}} , \qquad (6.10)$$

przy czym $c_{i,\sigma}$ to albo $a_{i,\sigma}$ albo $b_{i,\sigma}$ w zależności czy *i* numeruje węzeł z podsieci A czy B, natomiast N jest liczbą komórek elementarnych. Wykorzystując tożsamość $\frac{1}{N} \sum_{i} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot R_i} = \delta(\mathbf{k}'-\mathbf{k})$ otrzymujemy, że hamiltonian (6.7) przyjmuje postać:

$$\mathcal{H}_{0} = -t \sum_{\mathbf{k},j,\sigma} \left[a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_{j}} b_{\mathbf{k}\sigma} + b_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_{j}} a_{\mathbf{k}\sigma} \right]$$
(6.11)

$$= -t \sum_{\mathbf{k}\sigma} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\sigma} \\ b_{\mathbf{k}\sigma} \end{pmatrix}^{\dagger} \begin{pmatrix} 0 & h_{\mathbf{k}} \\ h_{\mathbf{k}}^{*} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\sigma} \\ b_{\mathbf{k}\sigma} \end{pmatrix}$$
(6.12)

Ostatecznie, uciąglając k możemy zapisać [124, 129, 130]:

$$\mathcal{H}_0 = \int d^2 \mathbf{k} \psi^{\dagger}(\mathbf{k}) H_0 \psi(\mathbf{k}) \quad H_0 = \begin{pmatrix} 0 & h_{0\mathbf{k}} S_0 \\ h_{0\mathbf{k}}^* S_0 & 0 \end{pmatrix}$$
(6.13)

przy czym $\psi^{\dagger}(\mathbf{k}) = [a_{\uparrow}(\mathbf{k}), a_{\downarrow}(\mathbf{k}), b_{\uparrow}(\mathbf{k}), b_{\downarrow}(\mathbf{k})], S_0$ jest macierzą jednostkową w przestrzeni spinowej, natomiast $h_{0\mathbf{k}} = -th_{\mathbf{k}}; h_{\mathbf{k}} = \sum_{j} e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_{j}}$. Wykorzystując (6.8) dostajemy:

$$h_{\mathbf{k}} = e^{i\frac{a}{\sqrt{3}}k_y} \left(1 + 2\cos(\frac{a}{2}k_x)e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y} \right).$$
(6.14)

Równanie własne jest postaci:

$$\det \left[E\sigma_0 - \begin{pmatrix} 0 & h_{0\mathbf{k}} \\ h_{0\mathbf{k}}^* & 0 \end{pmatrix} \right] = 0 \tag{6.15}$$

$$E^2 - |h_{0\mathbf{k}}|^2 = 0 \tag{6.16}$$

W powyższym wyrażeniu σ_0 jest macierzą jednostkową w przestrzeni pseudospinu (podsieci). Ponieważ:

$$|h_{0\mathbf{k}}|^2 = h_{0\mathbf{k}}h_{0\mathbf{k}}^* = 1 + 4\cos^2\left(\frac{a}{2}k_x\right) + 4\cos\left(\frac{a}{2}k_x\right)\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right)$$
(6.17)

$$= 3 + 2\cos\left(ak_x\right) + 4\cos\left(\frac{a}{2}k_x\right)\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right), \qquad (6.18)$$

to wartości własne hamiltonianu \mathcal{H}_0 przyjmują postaci [124, 125, 128]:

$$E = \pm t \left(3 + 2\cos\left(ak_x\right) + 4\cos\left(\frac{a}{2}k_x\right)\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) \right)^{1/2} . \tag{6.19}$$

Oczywiście pełen opis struktury pasmowej grafenu powinien zawierać także pasma σ . Niemniej jednak własności transportowe grafenu są w większości przypadków zdeterminowane przez niskoenergetyczne stany z pobliża punktów K i w dalszych rozważaniach nie będziemy wychodzili poza opis struktury pasmowej wykorzystujący orbitale π . Szczegółowy opis struktury pasmowej wykorzystujący obliczenia z pierwszych zasad można znaleźć m.in w pracy Gmitra i in. [131, 132].

Rysunek 6.2 przedstawia zależność dyspersyjną grafenu wykreśloną na podstawie powyższej zależności. Pasma stykają się w punktach K - tzw. punktach Diraca. W punkcie styku pasm leży też poziom Fermiego - dla czystego grafenu (bez domieszek) pasmo π (pasmo walencyjne) jest całkowicie zapełnione podczas gdy pasmo π^* (pasmo przewodnictwa) jest całkowicie puste. Na rysunku widać również, że zależność dyspersyjna w okolicy punktów Diraca ma charakter liniowy, dzięki czemu grafen wykazuje wiele ciekawych własności transportowych [120, 122, 124, 125].

Zapiszmy $h_{\mathbf{k}}$ podstawiając $\mathbf{k} \to \mathbf{K} + \mathbf{k}$ i rozwińmy w szereg wokół punktu \mathbf{K} oraz \mathbf{K}' . Dostaniemy wówczas, że $h_{\mathbf{k}} = -\frac{a\sqrt{3}}{2}(k_x \mp ik_y) + \dots$ Hamiltonian efektywny będzie postaci [124, 125, 128]:

$$\mathcal{H}_0^{K(K')} = \int d^2 \mathbf{k} \psi^{\dagger}(\mathbf{k}) H_0^{K(K')} \psi(\mathbf{k}); \qquad H_0^{K(K')} = v \begin{pmatrix} 0 & k_x \mp i k_y \\ k_x \pm i k_y & 0 \end{pmatrix}, \qquad (6.20)$$



RYSUNEK 6.2: Zależność dyspersyjna wzdłuż $k_y = 0$ dla grafenu otrzymana na podstawie modelu ciasnego wiązania, zaznaczono oba punkty K na krawędzi pierwszej strefy Brillouina (a). Zależność dyspersyjna w bliskim sąsiedztwie jednego z punktów K wykreślona na podstawie modelu ciasnego wiązania (linia ciągła) oraz modelu opartego o hamiltonian $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ (b).

gdzie $v = \hbar v_F = t \frac{a\sqrt{3}}{2\hbar} (v_F$ - prędkość elektronu na poziomie Fermiego). Hamiltonian $H_0^{K(K')}$ możemy zapisać:

$$H_0^{K(K')} = v_F \boldsymbol{\sigma}^{(*)} \cdot \mathbf{k}, \qquad (6.21)$$

gdzie $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ wektor zbudowany z macierzy Pauliego działających w przestrzeni podsieci. Natychmiast otrzymujemy, że zależność dyspersyjna w najbliższym sąsiedztwie punktów K ma postać

$$E = \pm vk. \tag{6.22}$$

Relatywistyczne wyrażenie na energię otrzymane na podstawie równania Diraca ma postać $E^2 = m^2 c^4 + \hbar^2 c^2 k^2$ i dla cząstek bezmasowych daje $E = \pm \hbar ck$. Tak więc, niskoenergetyczne wzbudzenia elektronowe na sieci typu plastra miodu zachowują się jak bezmasowe cząstki relatywistyczne z prędkością Fermiego v_F pełniącą rolę prędkości światła [120, 122].

Oddziaływanie spin-orbita grafenu (jako idealnej sieci bez domieszek, defektów) nie łamie symetrii inwersji w heksagonalnej sieci grafenu, w związku z tym pasma elektronowe w obecności tego oddziaływania są nadal spinowo-zdegenerowane. To tak zwane wewnętrzne oddziaływanie spin-orbita grafenu daje wkład do hamiltonianu typu oddziaływania z następnymi najbliższymi sąsiadami [129, 130, 133, 134]:

$$\mathcal{H}_{ISO} = it' \sum_{\langle \langle i,j \rangle \rangle} \nu_{ij} c_i^{\dagger} S_z c_j , \qquad (6.23)$$

gdzie t' jest całką przeskoku pomiędzy następnymi najbliższymi sąsiadami, c_i zgodnie z wprowadzoną wcześniej notacją jest operatorem anihilacji a_i lub b_i w zależności czy węzeł i znajduje się w podsieci A czy B, $\nu_{ij} = \pm 1$ w zależności od tego czy przeskok do następnego najbliższego sąsiada odbywa się przeciwnie czy zgodnie z ruchem wskazówek zegara, S_z jest z-ową macierzą Pauliego w przestrzeni spinu. Wiedząc, że wektory łączące dany węzeł z jego następnymi najbliższymi sąsiadami mają postać:

$$\delta_{1,4}' = \pm \mathbf{a}_1 \quad \delta_{2,5}' = \pm \mathbf{a}_2 \quad \delta_{3,6}' = \pm (\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1), \qquad (6.24)$$

możemy rozpisać powyższy hamiltonian, a następnie, postępując tak jak dla członu \mathcal{H}_0 , dokonać transformaty Fouriera. Otrzymamy wtedy, że [129, 130]:

$$\mathcal{H}_{ISO} = \int d^2 \mathbf{k} \, \psi(\mathbf{k})^{\dagger} H_{ISO} \psi(\mathbf{k}) \quad H_{ISO} = \begin{pmatrix} h_{so} S_z & 0\\ 0 & -h_{so} S_z \end{pmatrix}, \tag{6.25}$$

przy czym $h_{so} = -2t' (\sin(ak_x) - 2\sin(ak_x/2) \cos(bk_y))$ i $b = a\sqrt{3}/2$. Niskoenergetyczne przybliżenie otrzymane przy pomocy metody $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ dla powyższego wyrażenia [134]:

$$\mathcal{H}_{ISO}^{K(K')} = \int d^2 \mathbf{k} \psi^{\dagger}(\mathbf{k}) H_{ISO}^{K(K')} \psi(\mathbf{k}); \qquad H_{ISO}^{K(K')} = \pm \Delta_{so} \sigma_z S_z, \tag{6.26}$$

gdzie $\Delta_{so} = 3\sqrt{3}t'$.

Jeśli nastąpi złamanie symetrii inwersji $z \to -z$ w grafenie, wówczas mamy do czynienia z oddziaływaniem spin-orbita typu Rashby. Taka sytuacja ma miejsce np. wtedy gdy grafen leży na podłożu indukującym takie oddziaływanie lub w obecności zewnętrznego pola elektrycznego skierowanego prostopadle do płaszczyzny grafenu. Hamiltonian w modelu ciasnego wiązania opisujący ten wkład ma postać [129, 134, 135]:

$$\mathcal{H}_R = i \sum_{ij} c_i^{\dagger} (\mathbf{u}_{ij} \cdot \mathbf{S}) c_j + h.c. \,. \tag{6.27}$$

Hamiltonian ten ma postać oddziaływania z najbliższymi sąsiadami, gdzie **S** jest operatorem spinu zbudowanym z macierzy Pauliego, wektor \mathbf{u}_{ij} zdefiniowany jest przez iloczyn wektorowy efektywnego pola elektrycznego \mathcal{E} skierowanego prostopadle do płaszczyzny grafenu oraz wektora $\delta_{ij} = \delta_j - \delta_i : \mathbf{u}_{ij} \sim \mathcal{E} \times \delta_{ij} = -t_R \hat{\mathbf{z}} \times \delta_{ij}$ [129, 135]. Rozpisując powyższy człon oraz wykonując transformatę Fouriera otrzymamy [135]:

$$\mathcal{H}_R = t_R \int d^2 \mathbf{k} \, \psi(\mathbf{k})^{\dagger} H_R \psi(\mathbf{k}) \quad H_R = \begin{pmatrix} 0 & R \\ R^{\dagger} & 0 \end{pmatrix}, \qquad (6.28)$$

gdzie

$$R = \begin{pmatrix} 0 & i\phi_+ \\ -i\phi_- & 0 \end{pmatrix}, \tag{6.29}$$

natomiast funkcje ϕ_{\pm} są postaci:

$$\phi_{\pm} = \lambda_R \mathrm{e}^{i2k_y b/3} \left(1 + 2\cos(\frac{a}{2}k_x \pm \frac{2}{3}\pi) \mathrm{e}^{-ik_y b} \right) \,. \tag{6.30}$$

Przy powyższym zapisie widać od razu, że oddziaływanie spinowo-orbitalne typu Rashby sprzęga ze sobą najbliższych sąsiadów o przeciwnych spinach. Co więcej, o ile wewnętrzne oddziaływanie spin-orbita znosi degenerację w punktach K indukując przerwę energetyczną $2\Delta_{so}$, to oddziaływanie Rashby ją zmniejsza lub prowadzi do jej całkowitego zamknięcia w przypadku gdy jest oddziaływaniem dominującym [134]. Hamiltonian Rashby otrzymany przy pomocy metody $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ przyjmuje postać [134]:

$$\mathcal{H}_{R}^{K(K')} = \int d^{2}\mathbf{k}\psi^{\dagger}(\mathbf{k})H_{R}^{K(K')}\psi(\mathbf{k}); \qquad H_{R}^{K(K')} = \lambda_{R}\left(\pm\sigma_{x}S_{y} - \sigma_{y}S_{x}\right).$$
(6.31)

Stała oddziaływania Rashby $\lambda_R = \frac{3}{2}t_R$.

6.2 Spinowy efekt Halla w pojedynczej warstwie grafenu

W rozdziale tym omówimy wkład topologiczny do spinowego przewodnictwa holowskiego w grafenie z wewnętrznym oddziaływaniem spin-orbita oraz z oddziaływaniem spin-orbita typu Rashby [136–138]. Podczas wyznaczania wkładu topologicznego do spinowego przewodnictwa holowskiego, zarówno w modelu Kane'a jak i w modelu ciasnego wiązania, będziemy postępować według opisanego poniżej algorytmu. W obliczeniach wykorzystamy formułę na spinowe przewodnictwo holowskie wprowadzoną w Rozdziale 1 i daną równaniem (1.8). Po wyznaczeniu jawnych postaci funkcji Greena $G(\varepsilon)$ oraz operatorów prędkości ($\hat{v}_{x,y} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial k_{x,y}}$) obliczamy ślad w wyrażeniu (1.8):

$$D(\varepsilon + \omega, \varepsilon) = \operatorname{Tr}\{[v_x, s_z]_+ g_{\mathbf{k}}(\varepsilon + \omega)v_y g_{\mathbf{k}}(\varepsilon)\}, \qquad (6.32)$$

gdzie $g_{\mathbf{k}}(\varepsilon)$ jest mianownikiem funkcji Green
a $G_{\mathbf{k}}(\varepsilon)$. Rozwijając Dwzględem
 ω możemy zapisać, że:

$$D(\varepsilon + \omega, \varepsilon) \simeq i\omega\chi(\varepsilon)$$
. (6.33)

W związku z powyższym, w limicie $\omega \to 0$ równanie (1.8) przyjmuje postać:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = i\frac{e}{2} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \mathcal{F}(\varepsilon), \qquad (6.34)$$

gdzie

$$\mathcal{F}(\varepsilon) = \frac{\chi(\varepsilon)}{\prod_{n=1}^{2} (\varepsilon - E_n + \mu + i\delta \operatorname{sign} \varepsilon)^2}.$$
(6.35)

Wykonując całkowanie $\mathcal{F}(\varepsilon)$ po energii, ε , przy wykorzystaniu twierdzenia o residuach otrzymujemy wyrażenie:

$$\int d\varepsilon \mathcal{F}(\varepsilon) = 2\pi i \sum_{n} R_n f(E_n) , \qquad (6.36)$$

w którym R_n to residua związane z odpowiednimi pasmami zależności dyspersyjnej (*n* - odpowiada liczbie wartości własnych hamiltonianu), f(E) - funkcja rozkładu Fermiego (dla T = 0

K). Ostatecznie spinowe przewodnictwo holowskie daje się przedstawić w następującej postaci:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{e}{2} \sum_n \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} R_n f(E_n) \,. \tag{6.37}$$

6.2.1 Grafen z wewnętrznym oddziaływaniem spin-orbita

Na początek przeanalizujemy przypadek, gdy oddziaływanie spinowo-orbitalne Rashby jest zaniedbywalnie małe, a spinowy efekt Halla indukowany jest tylko wewnętrznym oddziaływaniem spin-orbita grafenu ($\lambda_R = 0$ oraz $\Delta_{so} \neq 0$).

Model Kane'a

Rozważamy hamiltonian otrzymany w ramach przybliżenia $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ dla pojedynczego punktu K pierwszej strefy Brillouina:

$$H^{K} = H_{0}^{K} + H_{ISO}^{K} \,, \tag{6.38}$$

w którym H_0^K i H_{ISO}^K są zdefiniowane odpowiednio przez równania (6.21) i (6.26). Wartości własne tego hamiltonianu są zdegenerowane i przyjmują postać:

$$E_{1,2}(k) = \pm \varepsilon_k , \quad \varepsilon_k = \sqrt{\Delta_{SO}^2 + v^2 k^2} . \tag{6.39}$$

Postępując zgodnie z opisanym powyżej algorytmem, w limicie $\omega \to 0$ znajdujemy jawną postać funkcji \mathcal{F} :

$$\mathcal{F}(\varepsilon) = \frac{4 v^2 \Delta_{so}}{(\varepsilon - \sqrt{\Delta_{so}^2 + v^2 k^2} + \mu + i\delta \operatorname{sgn} \varepsilon)^2} \times \frac{1}{(\varepsilon + \sqrt{\Delta_{so}^2 + v^2 k^2} + \mu + i\delta \operatorname{sgn} \varepsilon)^2}.$$
(6.40)

Po wyznaczeniu biegunów i wykonaniu całkowania po ε , znajdujemy, że w limicie T = 0K spinowe przewodnictwo holowskie można zapisać w postaci:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \sigma_{xy}^{s_z,0} \mp \delta \sigma_{xy}^{s_z}.$$
(6.41)

W powyższym równaniu $\sigma_{xy}^{s_z,0}$ jest wkładem do przewodnictwa od całkowicie zapełnionego pasma walencyjnego, a $\delta \sigma_{xy}^{s_z}$ to odpowiednio składnik związany z pustą częścią pasma walencyjnego - gdy w równaniu postawimy "—" lub zapełnioną częścią pasma przewodnictwa - gdy w równaniu postawimy znak "+". Wkład $\delta \sigma_{xy}^{s_z}$ daje się policzyć analitycznie:

$$\delta\sigma_{xy}^{s_z} = \pm \frac{e\Delta_{so}}{4\pi} \left[\frac{1}{\sqrt{\Delta_{so}^2 + v^2 k^2}} \right]_0^{k_F} = \mp \frac{e}{4\pi} \left(1 - \frac{\Delta_{so}}{\sqrt{\Delta_{so}^2 + v^2 k_F^2}} \right) , \qquad (6.42)$$



RYSUNEK 6.3: Spinowe przewodnictwo holowskie dla grafenu bez oddziaływania spin-orbita Rashby dla zadanego parametru Δ_{so} . Wstawka przedstawia spektrum energetyczne w sąsiedztwie punktu Diraca dla przypadku, gdy $\Delta_{SO} = 0.01$ meV. Parametr $v = \hbar v_F$, gdzie $v_F = 0.833 \times 10^6$ m/s.

górny/dolny znak odnosi się do sytuacji, gdy poziom Fermiego leży odpowiednio w paśmie walencyjnym/przewodnictwa. Składnik $\sigma_{xy}^{s_z,0}$ przyjmuje natomiast wartość:

$$\sigma_{xy}^{s_z,0} = -\frac{e \, v^2 \Delta_{so}}{4\pi} \, \int_0^\infty \frac{k \, dk}{(\Delta_{so}^2 + v^2 k^2)^{3/2}} = -\frac{e}{4\pi} \,. \tag{6.43}$$

W związku z powyższym dostajemy, że:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{e\Delta_{so}}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{\Delta_{so}^2 + v^2 k_F^2}} \,. \tag{6.44}$$

Ponieważ $k_F = \frac{\sqrt{\mu^2 - \Delta_{so}^2}}{v}$, to ostatecznie:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{e}{4\pi} \frac{\Delta_{so}}{|\mu|} \tag{6.45}$$

dla $|\mu| > \Delta_{so}$ oraz

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{e}{4\pi}\,,\tag{6.46}$$

gdy poziom Fermiego znajduje się w przerwie energetycznej, tj. $|\mu| < \Delta_{so}$. Przypomnijmy, że prezentowane tu wyniki zostały otrzymane dla jednego punktu K, i aby uwzględnić wkład do spinowego przewodnictwa holowskiego od obu punktów K należy otrzymane wyrażenia przemnożyć przez czynnik 2. Otrzymane tu wyniki są zgodne z wynikami otrzymanymi wcześniej w literaturze [139, 140].

Rysunek 6.3 przedstawia spinowe przewodnictwo holowskie w funkcji wartości potencjału



RYSUNEK 6.4: Spinowe przewodnictwo holowskie dla grafenu z wewnętrznym oddziaływaniem spin-orbita. Wyniki otrzymane w ramach modelu ciasnego wiązania (kropki) pokrywają się z zależnością wykreśloną na podstawie modelu Kane'a. Przyjęto $t'/t = 0.15 \times 10^{-3}$.

chemicznego, względem środka przerwy energetycznej. Gdy poziom Fermiego znajduje się wewnątrz przerwy energetycznej obserwujemy stałą, skwantowaną wartość przewodnictwa spinowego. Natomiast, jeśli poziom Fermiego znajduje się w paśmie walencyjnym lub przewodnictwa, to wówczas obserwujemy zmniejszenie bezwzględnej wartości przewodnictwa spinowego w SEH wraz ze wzrostem μ . Zależność jest symetryczna względem zmiany znaku μ . Wstawka przedstawia zależność dyspersyjną grafenu w bliskim sąsiedztwie punktu Diraca, wykreśloną dla wartości parametru $v_F = 0.833 \cdot 10^6 \text{m/s}$ (na podstawie Gmitra i in. [131]).

Model ciasnego wiązania

Wkład topologiczny do przewodnictwa spinowego w SEH zależy także od stanów poniżej poziomu Fermiego. Znajomość całej struktury pasmowej oraz jej wykorzystanie w rachunkach powinno więc mieć istotny wpływ przy poprawnym opisie efektu. Rozważmy więc grafen z wewnętrznym oddziaływaniem spin-orbita w ramach modelu ciasnego wiązania. Hamiltonian:

$$H = H_0 + H_{ISO} \tag{6.47}$$

dany jest teraz przez równania (6.13) i (6.25). Po wyznaczeniu operatorów prędkości oraz funkcji Greena, otrzymamy na podstawie (1.8), że w limicie prądu stałego spinowe przewodnictwo holowskie dane jest przez (7.33) z funkcją \mathcal{F} w postaci:

$$\mathcal{F}(\varepsilon, \mathbf{k}) = \zeta \frac{\left(9 + \cos(2ak_x) - 8\cos(ak_x/2)\cos(\sqrt{3}ak_y/2) + 2\cos(ak_x)(-2 + \cos(\sqrt{3}ak_y))\right)}{(\varepsilon - E_1 + \mu + i\delta\operatorname{sgn}\varepsilon)^2 (\varepsilon - E_2 + \mu + i\delta\operatorname{sgn}\varepsilon)^2},$$
(6.48)

gdzie $\zeta = \frac{162a^2t^2\Delta_{SO}}{729}$. W kolejnym kroku należy wykonać całkowanie po ε . Końcowym krokiem jest całkowanie po wektorze falowym, które zostało wykonane numerycznie.

Rysunek 6.4 przedstawia spinowe przewodnictwo holowskie w funkcji położenia poziomu Fermiego otrzymane na podstawie modelu ciasnego wiązania (kropki) oraz przy pomocy hamiltonianu Kane'a (linia ciągła). Obserwujemy idealną zgodność otrzymanych wyników.

6.2.2 Grafen z oddziaływaniem spinowo-orbitalnym typu Rashby

Wewnętrzne oddziaływanie spin-orbita w grafenie jest bardzo słabe. Oddziaływanie Rashby, które zależy od podłoża, na którym znajduje się grafen może przyjmować względnie duże wartości. Rozważmy więc sytuację, w której oddziaływanie spin-orbita Rashby dominuje a wewnętrzne oddziaływanie spinowo-orbitalne grafenu możemy pominąć, $\Delta_{so} = 0$.

Hamiltonian w modelu Kane'a dla pojedynczego punktu K będzie teraz postaci:

$$H^{K} = H_{0}^{K} + H_{R}^{K}, (6.49)$$

w którym poszczególne składniki są dane równaniami (6.21) oraz (6.31). Hamiltonian ten ma następujące wartości własne:

$$E_1(\mathbf{k}) = \lambda_R + (\lambda_R^2 + v^2 k^2)^{1/2}, \tag{6.50}$$

$$E_2(\mathbf{k}) = \lambda_R - (\lambda_R^2 + v^2 k^2)^{1/2}, \qquad (6.51)$$

$$E_3(\mathbf{k}) = -\lambda_R + (\lambda_R^2 + v^2 k^2)^{1/2}, \tag{6.52}$$

$$E_4(\mathbf{k}) = -\lambda_R - (\lambda_R^2 + v^2 k^2)^{1/2}.$$
(6.53)

Stany $E_1(\mathbf{k})$ oraz $E_3(\mathbf{k})$ odpowiadają pasmom walencyjnym natomiast stany $E_2(\mathbf{k})$ i $E_4(\mathbf{k})$ odpowiadają pasmom przewodnictwa. Postępując zgodnie z opisaną wyżej procedurą możemy otrzymać w ramach modelu Kane'a proste analityczne zależności na spinowe przewodnictwo holowskie.

Przypadek gdy $|\mu| > 2 \lambda_R$

Gdy poziom Fermiego przecina oba pasma walencyjne, tj. $\mu < -2 \lambda_R$, wówczas wycałkowanie (10.8) po ε prowadzi do następującego wyrażenia na przewodnictwo spinowe:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e \, v^2}{16\pi\lambda_R} \int dk \, \frac{2\lambda_R^2 k + v^2 k^3}{(v^2 k^2 + \lambda_R^2)^{3/2}} \, [f(E_2) - f(E_4)],\tag{6.54}$$

gdzie $f(E_n)$ jest funkcją rozkładu Fermiego-Diraca (zakładamy, że T = 0). Zgodnie z notacją wprowadzoną w poprzednim podrozdziale:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \sigma_{xy}^{s_z \, 0} \mp \delta \sigma_{xy}^{s_z} \,, \tag{6.55}$$



RYSUNEK 6.5: Spinowe przewodnictwo holowskie dla grafenu z oddziaływaniem spin-orbita Rashby dla wybranych wartości parametru λ_R . Pozostałe parametry przyjęto takie same jak dla rys. 6.3. Wstawka przedstawia zależność dyspersyjną w sąsiedztwie punktu K, dla $\lambda_R = 0.01$ meV.

znajdujemy, że:

$$\sigma_{xy}^{s_z,0} = 0\,, \tag{6.56}$$

natomiast

$$\delta \sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{e}{4\pi} \frac{\mu^2}{2(\mu^2 - \lambda_R^2)} \,. \tag{6.57}$$

Tak jak poprzednio $\sigma_{xy}^{s_z,0}$ jest wkładem do spinowego przewodnictwa związanym z całkowicie wypełnionym pasmem walencyjnym, a przyczynek $\delta \sigma_{xy}^{s_z}$ jest związany z pustą częścią pasma walencyjnego. W tym przypadku wkłady do przewodnictwa spinowego od obu całkowicie wypełnionych pasm walencyjnych znoszą się całkowicie, w związku z czym $\sigma_{xy}^{s_z,0} = 0$.

Gdy poziom Fermiego przecina oba pasma przewodnictwa, $\mu > 2 \lambda_R$, wówczas wkład do przewodnictwa spinowego $\delta \sigma_{xy}^{s_z}$ wyraża się również wzorem (6.57). Tak więc, całkowite (topologiczne) przewodnictwo spinowe dla przypadku $|\mu| > 2 \lambda_R$ możemy zapisać następująco:

$$\sigma_{xy}^{sz} = \frac{\mu^2}{2(\mu^2 - \lambda_R^2)} \frac{e}{4\pi}, \qquad (6.58)$$

gdy poziom Fermiego przecina pasma przewodnictwa, (tj. $\mu > 2 \lambda_R$), oraz

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{\mu^2}{2(\mu^2 - \lambda_R^2)} \frac{e}{4\pi}$$
(6.59)

gdy poziom Fermiego przecina pasma walencyjne ($\mu < 2 \lambda_R$).



RYSUNEK 6.6: Spinowe przewodnictwo holowskie w funkcji położenia poziomu Fermiego wykreślone na podstawie wyników otrzymanych w modelu ciasnego wiązania (kropki) oraz przy wykorzystaniu hamiltonianu $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

Przypadek gdy $|\mu| < 2 \lambda_R$

W przypadku gdy $|\mu| < 2 \lambda_R$ poziom Fermiego przecina tylko jedno pasmo przewodnictwa lub jedno pasmo walencyjne. Wykonując podobne rachunki jak powyżej otrzymamy wyrażenie na spinowe przewodnictwo w SEH następującej postaci:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{\mu(\mu + 2\lambda_R)}{4\lambda_R(\mu + \lambda_R)} \frac{e}{4\pi} \,. \tag{6.60}$$

Powyższe wyrażenie jest słuszne, gdy poziom Fermiego znajduje się w paśmie przewodnictwa, natomiast gdy poziom Fermiego przecina pasmo walencyjne:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{\mu(\mu - 2\lambda_R)}{4\lambda_R(\mu - \lambda_R)} \frac{e}{4\pi}.$$
(6.61)

Rysunek 6.5 przedstawia spinowe przewodnictwo holowskie w funkcji wartości potencjału chemicznego. Powyższe wyrażenia analityczne są przemnożone przez czynnik 2, tak aby uwzględnić wkład od drugiego punktu Diraca. Zauważmy, że w tym przypadku przewodnictwo spinowe w limicie $\mu \to -\infty$ dąży do $\sigma_{xy}^{s_z} = -e/4\pi$, natomiast gdy $\mu \to \infty$ przewodnictwo spinowe dąży do $\sigma_{xy}^{s_z} = e/4\pi$. Tak więc, przewodnictwo spinowe zachowuje się teraz antysymetrycznie względem zmiany znaku μ . Mamy tu zatem zupełnie inne zachowanie się przewodnictwo spinowe dąży do zera gdy $\mu \to \pm \infty$, a zależność jest symetryczna względem zmiany znaku potencjału chemicznego.

Na rysunku 6.6 zostały przedstawione wyniki otrzymane w modelu ciasnego wiązania. W rozważaniach wykorzystano hamiltonian postaci $H = H_0 + H_R$ dany przez zależności (6.13),



RYSUNEK 6.7: (a) Spinowe przewodnictwo holowskie σ_{xy}^s w funkcji położenia poziomu Fermiego ϵ_F w przypadku izotropowym - $t_1 = t_2 = t_3$. (b) Zależność dyspersyjna w przypadku izotropowym wykreślona wzdłuż punktów wysokiej symetrii przy wartości $\lambda_R = 0.05t$. (c) Wykres gęstościowy przedstawiający płaszczyzny izoenergetyczne dla pierwszej strefy Brillouina (również w przypadku izotropowym); $\lambda_R = 0.01t_3$. Rysunek pochodzi z pracy [141].

(6.28). Obliczenia wykonano według przedstawionego wcześniej algorytmu. Rysunek 6.6 pokazuje wyraźną różnicę pomiędzy modelem kontinuum a modelem ciasnego wiązania. Przeskok pomiędzy wartością $\sigma_{xy}^{s_z}$ równą $\pm e/4\pi$ a $\pm e/8\pi$ związany jest ze zmianą topologii powierzchni Fermiego. Szczegółowo wynik ten został przeanalizowany w pracy Liu i in. [141].

Autorzy pracy [141] rozważyli model uogólnionej sieci typu plastra miodu, opisanej modelem ciasnego wiązania zawierającym oddziaływanie spin-orbita typu Rashby. Uogólnienie polega na wprowadzeniu do modelu naprężeń jedno-osiowych. Efekt ten modyfikuje całki przeskoku pomiędzy najbliższymi sąsiadami. W związku z tym, zamiast jednej całki przeskoku t, w rozważanym w niniejszej pracy hamiltonianie H_0 , model uogólniony zawiera trzy całki przeskoku (oznaczone odpowiednio t_1 , t_2 , t_3 dla przeskoku do pierwszego, drugiego i trzeciego najbliższego sąsiada)¹.

W pierwszej kolejności autorzy rozważają właśnie przypadek izotropowy, tj. $t_1 = t_2 = t_3$. Przewodnictwo w SEH otrzymane numerycznie na podstawie modelu ciasnego wiązania przedstawia rysunek 6.7 (a). Wyniki przedstawione na rysunku 6.6 zgadzają się z wynikami otrzymanymi w omawianej pracy. Na rysunku 6.7 (b) przedstawiona jest struktura pasmowa omawianego modelu. Degeneracja spinowa jest zniesiona poza punktami Γ i M dla których symetria względem odwrócenia czasu narzuca degenerację spinową. Największe rozszczepienie obserwujemy w okolicy punktów K. Gdy poziom Fermiego znajduje się w okolicy punktu Γ wówczas zależność dyspersyjna jest paraboliczna, a powierzchnia Fermiego zbudowana jest z zamkniętych pętli. Stany elektronowe dolnych pasm w okolicy punktu Γ mogą być opisane hamiltonianem efektywnym $H_1^{\Gamma} = -3 + \frac{3}{4}k^2 + i\lambda_R \frac{3}{2}(k_-\sigma_+ - k_+\sigma_-)$ (gdzie $\sigma_{\pm} = (\sigma_x \pm \sigma_y)/2$). Ta postać hamiltonianu efektywnego jest podobna do hamiltonianu opisującego dwuwymiarowy gaz elektronowy z oddziaływaniem Rashby. Oba modele maja podobną topologię powierzchni Fermiego oraz taką

¹Dalej zastosujemy użyte oryginalnie oznaczenia. Przyjęto wartość $t_3 \equiv 1$, również stałą sieci $a \equiv 1$. Przewodnictwo spinowe $\sigma_{xy}^{s_z}$ oznaczane jest jako σ_{xy}^s , μ odpowiada ϵ_F , e jest tu natomiast ładunkiem elementarnym a nie, tak jak w całej rozprawie, ładunkiem elektronu.

samą fazę Berry'ego. Nic więc dziwnego, że przewodnictwo spinowe w obszarze $\epsilon_F \in (-3, -1)$ (w jednostkach t_3) przyjmuje wartość $-e/8\pi$. W punkcie $\epsilon_F = -1$ następuje skok przewodnictwa spinowego i w przedziale $-1 < \epsilon_F < 0$ obserwujemy, że $\sigma_{xy}^s = +e/4\pi$. Skok ten związany jest ze zmianą fazy Berry'ego, a więc ze zmianą topologii powierzchni Fermiego. Dla wartości $\epsilon_F \in (-3, -1)$ główny wkład do przewodnictwa mają stany elektronowe z sąsiedztwa punktów K z dirakowskim spektrum energetycznym. Na rysunku 6.7(c) widzimy, że powierzchnia Fermiego złożona jest z sześciu nie połączonych ze sobą segmentów zlokalizowanych w okolicy punktów K.

W omawianej pracy został także szczegółowo przeanalizowany przypadek gdy $t_1 \neq t_2$ i $t_2 = t_3$. W tej sytuacji obserwujemy wiele różnych topologii powierzchni Fermiego. Co więcej w zależności od relacji pomiędzy całkami przeskoku obserwujemy pojawienie się przerwy energetycznej lub jej brak. Jeśli spełniona jest relacja trójkąta: $|t_a/t_b - 1| \leq t_c/t_b \leq |t_a/t_b + 1|$ (t_a, t_b, t_c dowolna konfiguracja t_1, t_2, t_3), to w układzie nie obserwujemy przerwy energetycznej.

6.2.3 Grafen z oddziaływaniami spin-orbita obu typów

Rozważymy teraz przypadek ogólny, gdy oba oddziaływania spinowo-orbitalne - wewnętrzne oraz Rashby - są niezerowe. Współzawodnictwo pomiędzy tymi oddziaływaniami w układzie prowadzi do interesującego zachowania się spinowego przewodnictwa holowskiego.W tym przypadku wyrażenia analityczne są dość skomplikowane wobec czego poniżej przedstawione są tylko zależności numeryczne.

A. $\lambda_R > \Delta_{so}$

W sytuacji gdy λ_R jest znacznie większa od Δ_{so} przewodnictwo spinowe jest zdeterminowane przez oddziaływanie spin-orbita Rashby (rys. 6.8). Gdy wartość Δ_{so} rośnie, współzawodnictwo obu oddziaływań prowadzi do anomalnego zachowania spinowego przewodnictwa holowskiego przejawiającego się rozbieżnością w punkcie $\mu = \Delta_{so}$, a więc w punkcie gdzie stykają się pasmo walencyjne z pasmem przewodnictwa (por. wstawka na rysunku 6.8). W okolicy punktu $\mu = \Delta_{so}$ zachowanie przewodnictwa spinowego możemy przybliżyć przez ($\Delta_{so}/2\lambda_R$) $\ln[-\Delta_{so} - \lambda_R + \sqrt{(\lambda_R + \mu)^2}]$, gdy zbliżamy się do punktu osobliwego z prawej strony ($\mu > \Delta_{so}$) oraz $(\Delta_{so}/2\lambda_R) \ln[\Delta_{so} - \lambda_R + \sqrt{(\lambda_R - \mu)^2}]$, gdy zbliżamy się do osobliwości z lewej strony ($\mu < \Delta_{so}$).

B. $\lambda_R < \Delta_{so}$

Rozważmy sytuację przeciwną, tzn. λ_R mniejsze do Δ_{so} . Przypadek ten jest przedstawiony na rysunku 6.9 dla $\lambda_R = 0.01$ meV oraz trzech różnych wartości Δ_{so} (większych od λ_R). Krzywa przedstawiająca zależność spinowego przewodnictwa holowskiego w funkcji wartości potencjału



RYSUNEK 6.8: Spinowe przewodnictwo holowskie w funkcji położenia poziomu Fermiego dla $\lambda_R = 0.1 \text{meV}$ oraz wybranych wartości Δ_{SO} , $\Delta_{SO} < \lambda_R$. Wstawka przedstawia zależńość dyspersyjną w okolicy punktu Diraca dla $\Delta_{SO} = 0.01 \text{meV}$. Parametr v przyjęto jak na rysunku 6.3.



RYSUNEK 6.9: Spinowe przewodnictwo holowskie w funkcji położenia poziomu Fermiego dla $\lambda_R = 0.01$ meV oraz wybranych wartości Δ_{SO} , $\Delta_{SO} > \lambda_R$. Wstawka przedstawia zależność dyspersyjną w sąsiedztwie punktu Diraca dla $\Delta_{SO} = 0.05$ meV. Parametr v przyjęto jak na rysunku 6.3.

chemicznego przypomina zależność dla przypadku $\lambda_R = 0$. Współzawodnictwo między oddziaływaniami spinowo-orbitalnymi prowadzi jednak do pojawienia się małego zagięcia (bardziej widocznego dla mniejszych wartości Δ_{so} zmierzających do λ_R) po stronie ujemnych wartości potencjału chemicznego. Zagięcie to jest związane z rozszczepieniem pasma walencyjnego w wyniku obecności oddziaływania Rashby.



RYSUNEK 6.10: Spinowe przewodnictwo holowskie wykreślone w funkcji położenia poziomu Fermiego dla $\lambda_R = \Delta_{SO}$. Wstawka przedstawia zależność dyspersyjną w sąsiedztwie punktu K dla $\lambda_R = \Delta_{SO} = 0.01$ meV. Parametr v przyjęto jak na rysunku 6.3. Linie pionowe wskazują miejsce występowania rozbieżności.

C. $\lambda_R = \Delta_{so}$

Gdy $\lambda_R = \Delta_{so}$ otrzymujemy proste analityczne wyrażenia. W tym szczególnym przypadku minima pasm przewodnictwa nachodzą na maksimum jednego z pasm walencyjnych. Odpowiednie wyrażenia opisujące holowskie przewodnictwo spinowe w tej sytuacji zebrane są poniżej:

Dla $\mu < -3\Delta_{so}$, przewodnictwo spinowe dane jest wyrażeniem

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{\mu}{\mu + \Delta_{so}} \cdot \frac{e}{4\pi} \tag{6.62}$$

Zależność ta jest słuszna w zakresie energii ograniczonym przez maksimum niższego pasma walencyjnego.

 $Gdy - 3\Delta_{so} < \mu < \Delta_{so}$, otrzymujemy

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \left[\frac{\mu}{2\Delta_{SO}} + \ln\left(\frac{\Delta_{SO} - \mu}{4\Delta_{SO}}\right)\right] \frac{e}{4\pi}.$$
(6.63)

Powyższe wyrażenie jest słuszne gdy potencjał chemiczny przyjmuje wartości z zakresu wyznaczonego przez maksimum niższego pasma walencyjnego i minimum pasm przewodnictwa. Wyrażenie to prowadzi do rozbieżności w spinowym przewodnictwie holowskim gdy poziom Fermiego zbliża się od strony niższych wartości do wartości Δ_{so} .

Dla $\mu > \Delta_{so}$ przewodnictwo jest równe

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{\mu}{\mu + \Delta_{SO}} \frac{e}{4\pi} \,. \tag{6.64}$$

Zależność ta daje skończoną wartość przewodnictwa spinowego w całym zakresie jego stosowalności; również w punkcie $\mu = \Delta_{so}$.

Przewodnictwo spinowe w przypadku gdy $\lambda_R = \Delta_{so}$ przedstawia rysunek 6.10. W punkcie $\mu = \lambda_R = \Delta_{SO}$ widoczne jest anomalne zachowanie spinowego przewodnictwa holowskiego. Gdy wartość potencjału chemicznego μ zbliża się do $\mu = \lambda_R = \Delta_{so}$ od prawej strony ($\mu > \Delta_{SO}$) przewodnictwo posiada skończoną wartość, natomiast gdy zbliżamy się do punktu $\mu = \lambda_R = \Delta_{so}$ od lewej strony ($\mu; \Delta_{SO}$) zależność wykazuje osobliwość. Pionowe linie na rysunku 6.10 wskazują punkty w których pojawia się osobliwość.

Cortijo i in. [142] analizowali grafen w modelu Kane'a pod kątem faz topologicznych jakie mogą się pojawić w układzie. Odtworzyli oni przedstawione tu wyniki oraz uzupełnili je o kilka dodatkowych przypadków. Autorzy wskazują, że anomalne zachowanie spinowego przewodnictwa holowskiego obserwujemy, gdy poziom Fermiego przechodzi przez punkt, w którym pasma energetyczne się przekrywają (w wyniku zamknięcia przerwy energetycznej). Rozbieżność generowana jest wówczas przez stany elektronowe z $\mathbf{k} = 0$.

Podsumowanie

Podsumowując, w rozdziale tym, omówiony został wkład topologiczny do spinowego przewodnictwa holowskiego w atomowej monowarstwie grafenu. W rozważaniach wykorzystano model ciasnego wiązania oraz model Kane'a opisujący niskoenergetyczne stany w pobliżu punktów K. W przypadku grafenu z wewnętrznym oddziaływaniem spinowo-orbitalnym (zaniedbywalnie małe oddziaływanie Rashby) otrzymano na podstawie formuły (1.8) wyniki zgodne z wynikami otrzymanymi na podstawie innego formalizmu, które znalazły się we wcześniejszych pracach Schenga i in. [140] oraz Sinitsyna i in. [139]. W tym przypadku, gdy poziom Fermiego leży wewnątrz przerwy energetycznej spinowe przewodnictwo holowskie przyjmuje stałą skwantowaną wartość $-2e/4\pi$. W sytuacji, gdy w układzie dominuje oddziaływanie spin-orbita typu Rashby, a wewnętrzne oddziaływanie spin-orbita możemy zaniedbać, pokazane zostało asymetryczne, względem zmiany znaku potencjału chemicznego, zachowanie spinowego przewodnictwa holowskiego. W przypadku ogólnym, gdy oba oddziaływania spinowo-orbitalne są niezerowe, współzawodnictwo pomiędzy tymi oddziaływaniami prowadzi do anomalnego zachowania spinowego przewodnictwa holowskiego w funkcji położenia poziomu Fermiego. Pokazane zostało również, że w przypadku grafenu z wewnętrznym oddziaływaniem spin-orbita wyniki otrzymane w ramach

Rozdział 7

Spinowy efekt Halla w podwójnej warstwie grafenowej

W niniejszym rozdziale omówimy wkład topologiczny do spinowego efektu Halla w podwójnej warstwie grafenowej z wewnętrznym oddziaływaniem spin-orbita [138, 143]. W rozważaniach uwzględnimy wpływ napięcia bramkującego, przyłożonego prostopadle do płaszczyzny tych warstw, na spinowy efekt Halla. Pokażemy, że przy pewnej wartości napięcia bramkującego obserwuje się przejście układu z tzw. fazy izolatora spinowego do fazy klasycznego izolatora.

7.1 Hamiltonian w modelu ciasnego wiązania oraz modele efektywne opisujące podwójną warstwę grafenową

Postać hamiltonianu opisującego podwójną warstwę grafenu będzie zależała od wzajemnej konfiguracji monoatomowych warstw. W przypadku grafenu mamy dwie możliwości. Jeśli węzły sieci jednej warstwy leżą dokładnie nad węzłami sieci drugiej warstwy, np. A_1/B_1 nad A_2/B_2 , to mówimy o konfiguracji typu AA. Natomiast, gdy węzeł z podsieci A_1 leży dokładnie nad węzłem B_2 mówimy o konfiguracji typu AB (konfiguracji Bernala) [124].

W przypadku konfiguracji typu Bernala, w pierwszym przybliżeniu, możemy założyć sprzężenie pomiędzy warstwami tylko poprzez całkę przeskoku pomiędzy węzłami A_1 i B_2 . W tym przypadku bardzo łatwo możemy uogólnić model hamiltonianu dla pojedynczej warstwy grafenowej do przypadku podwójnej warstwy. Hamiltonian w modelu ciasnego wiązania będzie postaci[124, 129]:

$$\mathcal{H}_{BL} = \int d^2 \mathbf{k} \, \psi(\mathbf{k})^{\dagger} H_{BL} \psi(\mathbf{k}), \ H_{BL} = \begin{pmatrix} H + V & \Gamma \\ \Gamma^{\dagger} & H - V \end{pmatrix}.$$
(7.1)



RYSUNEK 7.1: Schemat podwójnej warstwy grafenowej. W pierwszym przybliżeniu zakładamy sprzężenie między warstwami opisane całką przeskoku γ_1 pomiędzy atomem z podsieci A (atom niebieski) pierwszej warstwy z atomem z podsieci B (atom czerwony) drugiej warstwy(a). Zależność dyspersyjna dla podwójnej warstwy grafenowej otrzymana na podstawie modelu ciasnego wiązania dla $k_y = 0, t = 2.9eV, t'/t = 10^{-5}, \gamma_1/t = 0.069, V = 0$ (b). Spektrum energetyczne otrzymane w ramach modelu ciasnego wiązania (linie ciągłe) oraz przy wykorzystaniu hamiltonianu $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ (linie przerywane) w pobliżu punktu K' dla V = 0 (c) oraz dla V/t = 0.01(e). Parametry dla modelu efektywnego (wyrażone przez parametry modelu ciasnego wiązania) przyjmują wartości: $\Delta_{so} = 0.15meV, v = 3.516 \times 10^{-10}eVm$. Stany elektronowe z bliskiego sąsiedztwa przerwy energetycznej dla przypadku z rysunku (c) przedstawiono na rysunku (d), a dla przypadku z rysunku (e) na rysunku (f).

W powyższym równaniu H jest hamiltonianem atomowej monowarstwy grafenu, a element macierzowy Γ odpowiada za sprzężenie między warstwami:

$$\Gamma = \begin{pmatrix} 0 & \gamma_1 S_0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$
(7.2)

Dla podwójnej warstwy grafenowej istnieje możliwość kontrolowania struktury pasmowej przykładając, prostopadle do płaszczyzny warstw grafenowych, napięcie bramkujące [125, 129, 144, 145]. Powyższy model również uwzględnia możliwość przyłożenia napięcia bramkującego poprzez parametr V - napięcie w jednostkach energetycznych. Wartości własne hamiltonianu 7.1 gdy hamiltonian monowarstwy grafenowej uwzględnia wewnętrze oddziaływanie spin-orbita $H = H_0 + H_{ISO}$ (H_0 oraz H_{ISO} zostały zdefiniowane w poprzednim rozdziale - równania (6.13) i (6.25)), a V = 0 mają postać:

$$E_{1,2} = \mp \left[h_{so}^2 + \frac{1}{2} \left(\gamma_1^2 + 2h_0^2 - \gamma_1 \sqrt{\gamma_1^2 + 4h_0^2} \right) \right]^{1/2}, \tag{7.3}$$

$$E_{3,4} = \mp \left[h_{so}^2 + \frac{1}{2} \left(\gamma_1^2 + 2h_0^2 + \gamma_1 \sqrt{\gamma_1^2 + 4h_0^2} \right) \right]^{1/2}.$$
(7.4)

Rysunek 7.1(b) przedstawia zależność dyspersyjną otrzymaną na podstawie powyższych zależności wzdłuż k_x ($k_y = 0$). Widzimy, że również w przypadku podwójnej warstwy grafenowej zależność dyspersyjna w sąsiedztwie punktów K ma niemal liniowy charakter. Przyłożenie napięcia bramkującego ($V \neq 0$) powoduje złamanie symetrii inwersji przestrzennej ($\hat{z} \rightarrow -\hat{z}; \hat{z}$ jest wersorem wyznaczającym kierunek osi prostopadłej do płaszczyzny w której leży podwójna warstwa grafenowa), co skutkuje zniesieniem degeneracji. W tej sytuacji wartości własne są postaci:

$$E_{1,2} = \mp \left[h_0^2 + h_{so}^2 + V^2 + \frac{\gamma_1^2}{2} - \frac{1}{2} \left[(\gamma_1^2 - 4Vh_{so})^2 + 4(\gamma_1^2 + 4V^2)h_0^2 \right]^{1/2} \right]^{1/2},$$
(7.5)

$$E_{1',2'} = \mp \left[h_0^2 + h_{so}^2 + V^2 + \frac{\gamma_1^2}{2} - \frac{1}{2} \left[(\gamma_1^2 + 4Vh_{so})^2 + 4(\gamma_1^2 + 4V^2)h_0^2 \right]^{1/2} \right]^{1/2},$$
(7.6)

$$E_{3,4} = \mp \left[h_0^2 + h_{so}^2 + V^2 + \frac{\gamma_1^2}{2} + \frac{1}{2} \left[(\gamma_1^2 - 4Vh_{so})^2 + 4(\gamma_1^2 + 4V^2)h_0^2 \right]^{1/2} \right]^{1/2},$$
(7.7)

$$E_{3',4'} = \mp \left[h_0^2 + h_{so}^2 + V^2 + \frac{\gamma_1^2}{2} + \frac{1}{2} \left[(\gamma_1^2 + 4Vh_{so})^2 + 4(\gamma_1^2 + 4V^2)h_0^2 \right]^{1/2} \right]^{1/2}.$$
 (7.8)

Gdy interesują nas stany elektronowe położone w bliskim sąsiedztwie punktów Diraca, zasadne jest stosowanie modeli efektywnych.

Hamiltonian otrzymany metodą k \cdot p

Postępując podobnie jak w poprzednim rozdziale, możemy rozwinąć powyższy hamiltonian względem punktu K(K'). Otrzymamy wówczas [146, 147]:

$$H_{BL}^{K} = \mathcal{T}_{0} \otimes H^{K} + V\mathcal{T}_{z} \otimes \sigma_{0} \otimes S_{0} - \frac{\gamma_{1}}{2} (\mathcal{T}_{x} \otimes \sigma_{x} \otimes S_{0} - \mathcal{T}_{y} \otimes \sigma_{y} \otimes S_{0}),$$
(7.9)

Pierwszy człon odpowiada wkładowi od dwóch niesprzężonych warstw grafenu (każda z warstw opisana jest hamiltonianem Kane'a H^K), drugi człon uwzględnia napięcie przyłożone pomiędzy warstwy grafenowe, a trzeci składnik opisuje sprzężenie między warstwami. W powyższych wyrażeniach \mathcal{T}_{α} oznacza odpowiednio macierz jednostkową ($\alpha = 0$) oraz macierze Pauliego ($\alpha = 1, 2, 3$) zdefiniowane w przestrzeni warstw, natomiast macierze σ_{α} oraz S_{α} to tak jak w poprzednim rozdziale macierze jednostkowe oraz macierze Pauliego odpowiednio w przestrzeni podsieci i spinu. Wartości własne (7.9) w sytuacji gdy $H^K = H_0^K + H_{ISO}^K$ oraz V = 0:

$$E_{1,2} = \mp \left[k^2 v^2 + \frac{\gamma_1^2}{2} + \Delta_{so}^2 - \frac{\gamma_1}{2} \sqrt{4k^2 v^2 + \gamma_1^2} \right]^{1/2},$$
(7.10)

$$E_{3,4} = \mp \left[k^2 v^2 + \frac{\gamma_1^2}{2} + \Delta_{so}^2 + \frac{\gamma_1}{2} \sqrt{4k^2 v^2 + \gamma_1^2} \right]^{1/2}.$$
 (7.11)

Powyższe wartości własne zostały wykreślone na rysunku 7.1(c), (d). W bliskim sąsiedztwie punktu K wartości własne otrzymane na podstawie modelu $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ dokładnie odtwarzają zachowanie wartości własnych otrzymanych na podstawie modelu ciasnego wiązania. W obecności napięcia bramkującego model efektywny prowadzi do zależności dyspersyjnej opisanej następująco:

$$E_{1,2} = \mp \left[v^2 k^2 + \Delta_{so}^2 + V^2 + \frac{\gamma_1^2}{2} - \frac{1}{2} \left[(\gamma_1^2 - 4V\Delta_{so})^2 + 4v^2 k^2 (\gamma_1^2 + 4V^2) \right]^{1/2} \right]^{1/2}, \quad (7.12)$$

$$E_{1',2'} = \mp \left[v^2 k^2 + \Delta_{so}^2 + V^2 + \frac{\gamma_1^2}{2} - \frac{1}{2} \left[(\gamma_1^2 + 4V\Delta_{so})^2 + 4v^2 k^2 (\gamma_1^2 + 4V^2) \right]^{1/2} \right]^{1/2}, \quad (7.13)$$

$$E_{3,4} = \mp \left[v^2 k^2 + \Delta_{so}^2 + V^2 + \frac{\gamma_1^2}{2} + \frac{1}{2} \left[(\gamma_1^2 - 4V\Delta_{so})^2 + 4v^2 k^2 (\gamma_1^2 + 4V^2) \right]^{1/2} \right]^{1/2}, \quad (7.14)$$

$$E_{3',4'} = \mp \left[v^2 k^2 + \Delta_{so}^2 + V^2 + \frac{\gamma_1^2}{2} + \frac{1}{2} \left[(\gamma_1^2 + 4V\Delta_{so})^2 + 4v^2 k^2 (\gamma_1^2 + 4V^2) \right]^{1/2} \right]^{1/2}.$$
 (7.15)

Rysunek 7.1(b) przedstawia zależność dyspersyjną dla podwójnej warstwy grafenowej wzdłuż k_x ($k_y = 0$). Widać, że w okolicy punktów K zależność dyspersyjna ma liniowy charakter. Na rysunku 7.1(b) przedstawiono zależność dyspersyjną w pobliżu punktu K wykreśloną na podstawie modelu ciasnego wiązania oraz modelu $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

Zredukowany model niskoenergetyczny

Z zależności przedstawionych na rysunku 7.1(c)-(f) wynika, że odległość między pasmami E_3 i E_4 (lub dla $V \neq 0$: $E_{3,3'}$ oraz $E_{4,4'}$) jest znacznie większa od odległości pomiędzy pasmami E_1 i E_2 (lub $E_{1,1'}$ i $E_{2,2'}$). Jeśli więc interesuje nas transport związany ze stanami w najbliższym sąsiedztwie przerwy energetycznej, wówczas możemy dokonać dalszej redukcji hamiltonianu. Zredukowany hamiltonian będzie opisywał pasma z najbliższego sąsiedztwa przerwy energetycznej ($E_{1,1'}$ oraz $E_{2,2'}$), natomiast informacja o pozostałych pasmach (leżących dalej od przerwy energetycznej) będzie zawarta jedynie w efektywnych parametrach tego modelu.

Aby dokonać redukcji hamiltonianu posłużymy się metodą opartą o funkcje Greena [125, 146]. Hamiltonian (7.9) w bazie $[b_1, a_2, b_2, a_1]$ przyjmuje formę:

$$H_{BL}^{K} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix},$$
(7.16)

gdzie:

$$H_{11} = \begin{pmatrix} VS_0 - \Delta_{so}S_z & 0\\ 0 & -VS_0 + \Delta_{so}S_z \end{pmatrix},$$
 (7.17)

$$H_{22} = \begin{pmatrix} -VS_0 - \Delta_{so}S_z & \gamma_1 \\ \gamma_1 & VS_0 + \Delta_{so}S_z \end{pmatrix},$$
(7.18)

$$H_{12} = H_{21} = \begin{pmatrix} 0 & vk_+ \\ vk_- & 0 \end{pmatrix}.$$
 (7.19)

Z hamiltonianem (7.16) związana jest funkcja Greena:

$$G = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix}.$$
 (7.20)

Element macierzowy G_{11} opisuje stany nisko
energetyczne. Możemy też zapisać:

$$G^0_{\alpha\alpha} = (H_{\alpha\alpha} - \varepsilon)^{-1} \,. \tag{7.21}$$

Z drugiej strony funkcja Greena (7.20) zdefiniowana jest równaniem:

$$G = \left(\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 \\ 0 & \varepsilon \end{pmatrix} \right)^{-1}$$
(7.22)

$$= \begin{pmatrix} H_{11} - \varepsilon & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} - \varepsilon \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} G_{11}^{0} - 1 & H_{12} \\ H_{21} & G_{22}^{0} \end{pmatrix}^{-1}.$$
 (7.23)

Otrzymujemy więc, że:

$$G = \frac{1}{G_{11}^{0} {}^{-1}G_{22}^{0} {}^{-1} - H_{21}H_{12}} \begin{pmatrix} G_{11}^{0} {}^{-1} {}^{-1}H_{12} \\ -H_{21} {}^{-1}G_{22}^{0} {}^{-1} \end{pmatrix},$$
(7.24)

$$G_{11} = \frac{G_{22}^{0^{-1}}}{G_{11}^{0^{-1}}G_{22}^{0^{-1}} - H_{21}H_{12}}.$$
(7.25)

Powyższe równanie po przekształceniach daje się zapisać następująco:

$$G_{11}^{-1} = G_{11}^{0}^{-1} - H_{12}G_{22}^{0}H_{21}.$$
(7.26)

Ponieważ $G_{11}^{0}^{-1} = H_{11} - \varepsilon$, to dostajemy:

$$H^r = H_{11} - H_{12} G_{22}^0 H_{21} \,. \tag{7.27}$$

Powyższe wyrażenie przyjmuje więc następującą jawną postać:

$$H^{r} = \begin{bmatrix} \Delta_{so} + V & 0 & -\frac{\hbar^{2}k_{-}^{2}}{2m} & 0\\ 0 & -\Delta_{so} + V & 0 & -\frac{\hbar^{2}k_{-}^{2}}{2m}\\ -\frac{\hbar^{2}k_{+}^{2}}{2m} & 0 & -\Delta_{so} - V & 0\\ 0 & -\frac{\hbar^{2}k_{+}^{2}}{2m} & 0 & \Delta_{so} - V \end{bmatrix}.$$
 (7.28)

W dalszej części tego rozdziału wykorzystamy omówione modele do opisu przewodnictwa w spinowym efekcie Halla i dokonamy porównania otrzymanych wyników.

7.2 SEH indukowany wewnętrznym oddziaływaniem SO

Na początek rozważamy sytuację gdy V = 0. W celu wyznaczenia spinowego przewodnictwa holowskiego skorzystamy z wyrażenia (1.8) i zapiszemy je w następującej postaci:

$$\sigma_{xy}^{s_z}(\omega) = \frac{e}{2\omega} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} D(\varepsilon + \omega, \varepsilon) \prod_{n=1}^4 [\varepsilon - E_n + \omega + \mu + i\delta \operatorname{sign}(\varepsilon)]^{-2} \times \prod_{m=1}^4 [\varepsilon - E_m + \mu + i\delta \operatorname{sign}(\varepsilon)]^{-2}.$$
(7.29)

W powyższym równaniu $D(\varepsilon + \omega, \varepsilon)$ jest zdefiniowane następująco

$$D(\varepsilon + \omega, \varepsilon) = \operatorname{Tr}\{[v_x, s_z]_+ g_{\mathbf{k}}(\varepsilon + \omega)v_y g_{\mathbf{k}}(\varepsilon)\},$$
(7.30)

gdzie $g_{\mathbf{k}}(\varepsilon)$ to mianownik funkcji Green
a $G_{\mathbf{k}}(\varepsilon)$. Pierwsze dwa wyrazy rozwinięci
a $D(\varepsilon + \omega, \varepsilon)$ w szereg względem ω dają nam

$$D(\varepsilon + \omega, \varepsilon) \simeq i\omega\chi(\varepsilon),$$
 (7.31)

gdzie

$$\chi(\varepsilon) = 8v^{2}\Delta_{so} \left\{ v^{2}k^{2} \left[v^{2}k^{2} + 2(\Delta^{2} - (\varepsilon + \mu)^{2}) \right] + (\Delta_{so}^{2} - (\varepsilon + \mu)^{2})(\gamma_{1}^{2} + \Delta_{so}^{2} - (\varepsilon + \mu)^{2}) \right\}^{2} \times \left\{ (\Delta_{so}^{2} - (\varepsilon + \mu)^{2})(\gamma_{1}^{2} + \Delta_{so}^{2} - (\varepsilon + \mu)^{2}) + v^{2}k^{2} \left[v^{2}k^{2} + 2(\gamma_{1}^{2} + \Delta_{so}^{2} - (\varepsilon + \mu)^{2}) \right] \right\}.$$
 (7.32)

W limicie $\omega \rightarrow 0$ otrzymujemy następujące wyrażenie na przewodnictwo w SEH

$$\sigma_{xy}^{s_z} = i\frac{e}{2} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \mathcal{F}(\varepsilon), \qquad (7.33)$$

$$\mathcal{F}(\varepsilon) = \frac{\chi(\varepsilon)}{\prod_{n=1}^{4} [(\varepsilon - E_n + \mu + i\delta \operatorname{sign}(\varepsilon)]^4}.$$
(7.34)

Całkując względem ε dostajemy

$$\int d\varepsilon \mathcal{F}(\varepsilon) = 2\pi i \sum_{n} R_n f(E_n), \qquad (7.35)$$

gdzie f(E)-to funkcja rozkładu Fermiego-Diraca (tu dla T = 0K), R_n (n = 1 - 4) residua związane z odpowiednimi pasmami elektronowymi, które mają następującą postać:

$$R_{1,2} = \pm \frac{4\sqrt{2}v^2 \Delta_{so} \left[2v^2 k^2 (\gamma_1 + \xi) + \gamma_1 (\gamma_1^2 - \gamma_1 \xi + 2\Delta_{so}^2)\right]}{\xi^3 \left(2v^2 k^2 + \gamma_1^2 - \gamma_1 \xi + 2\Delta_{so}^2\right)^{3/2}}$$
(7.36)

$$R_{3,4} = \pm \frac{8\sqrt{2}v^2 \Delta_{so}L}{\xi^3 \left(2v^2 k^2 + \gamma_1^2 + \gamma_1 \xi + 2\Delta_{so}^2\right)^{5/2}}$$
(7.37)

w powyższym wyrażeniu:

$$L = -v^{2}k^{2}(3\gamma_{1}^{3} + \gamma_{1}^{2}\xi + 4\gamma_{1}\Delta_{so}^{2} - 2\xi\Delta_{so}^{2}) + 2v^{4}k^{4}(\gamma_{1} + \xi) -\gamma_{1}(\gamma_{1}^{4} + \gamma_{1}^{3}\xi + 2\gamma_{1}^{2}\Delta_{so}^{2} + 2\gamma_{1}\xi\Delta_{so}^{2} + 2\Delta_{so}^{4}),$$
(7.38)

natomiast $\xi = \sqrt{4v^2k^2 + \gamma_1^2}$. Tak więc spinowe przewodnictwo może być zapisane następująco:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{e}{4\pi} \sum_n \int kR_n f(E_n) dk.$$
(7.39)

Wykorzystując całki nieoznaczone:

$$\int kR_1 dk = -\frac{\sqrt{2}(\gamma_1 + \xi)\Delta_{so}}{\xi(2v^2k^2 + \gamma_1^2 - \gamma_1\xi + 2\Delta_{so}^2)^{1/2}},$$
(7.40)

$$\int kR_3 dk = \frac{\sqrt{2}(\gamma_1 - \xi)\Delta_{so}}{\xi(2v^2k^2 + \gamma_1^2 + \gamma_1\xi + 2\Delta_{so}^2)^{1/2}},$$
(7.41)

i biorąc odpowiednie granice całkowania, możemy znaleźć ostateczne wyrażenie na spinowe przewodnictwo holowskie. I tak, gdy poziom Fermiego znajduje się wewnątrz przerwy energetycznej, $|\mu| < \Delta_{so}$, otrzymujemy:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -2\frac{e}{4\pi}.\tag{7.42}$$

Natomiast gdy $\Delta_{so} < |\mu| < \sqrt{\gamma_1^2 + \Delta_{so}^2}$

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{2\left(\gamma_1 + \sqrt{\mu^2 - \Delta_{so}^2}\right)}{2\sqrt{\mu^2 - \Delta_{so}^2} + \gamma_1} \frac{\Delta_{so}}{|\mu|} \frac{e}{4\pi}.$$
(7.43)

W przypadku gdy $|\mu|>\sqrt{\gamma_1^2+\Delta_{so}^2}$ dostajemy:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{2(\mu^2 - \Delta_{so}^2) - \gamma_1^2}{4(\mu^2 - \Delta_{so}^2) - \gamma_1^2} \frac{4\Delta_{so}}{|\mu|} \frac{e}{4\pi}.$$
(7.44)



RYSUNEK 7.2: Spinowe przewodnictwo holowskie w funkcji położenia poziomu Fermiego dla V = 0; pozostałe parametry jak na rys. 7.1. Uwzględniono wkład od obu punktów K. Linia ciągła reprezentuje wyniki otrzymane w modelu $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, natomiast kółka reprezentują wyniki otrzymane w ramach modelu ciasnego wiązania.

Ogólne zachowanie się spinowego przewodnictwa jako funkcji położenia poziomu Fermiego dla podwójnej warstwy grafenu jest podobne do przewodnictwa w SEH dla pojedynczej warstwy grafenu. Zatem, gdy poziom Fermiego leży poza przerwą, wraz ze wzrostem $|\mu|$ przewodnictwo spinowe zmierza do zera, natomiast jeśli poziom Fermiego znajduje się wewnątrz przerwy energetycznej obserwujemy stałą uniwersalną wartość przewodnictwa spinowego, które jednak przyjmuje dwa razy większą wartość niż w przypadku atomowej monowarstwy grafenu. Zachowanie to przedstawione jest na rysunku (7.2). Przypomnijmy, że o ile przedstawione wyrażenia odpowiadają tylko wkładowi od jednego punktu K, to na rysunku przedstawiony jest wkład od obu punktów Diraca.

W ramach modelu ciasnego wiązania obliczenie przewodnictwa spinowego przebiega analogicznie. Z uwagi na dość duże i skomplikowane wyrażenia przedstawiono tylko wyniki numeryczne (rys. (7.2)). Widzimy, że w tym przypadku również oba modele dają niemal identyczne wyniki.

7.3 Wpływ napięcia bramkującego

W obecności napięcia bramkującego, $V \neq 0$, degeneracja pasm jest zniesiona i musimy wziąć pod uwagę osiem różnych pasm. Postępując analogicznie jak poprzednio, równanie (7.34) wymaga modyfikacji i przyjmuje postać:

$$\mathcal{F}(\varepsilon) = \frac{\chi(\varepsilon)}{\prod_{n=1}^{8} [\varepsilon - E_n + \mu + i\delta \operatorname{sign}(\varepsilon)]^2}$$
(7.45)



RYSUNEK 7.3: Spinowe przewodnictwo holowskie w funkcji napięcia bramkującego V oraz położenia poziomu Fermiego μ . Uwzględniono wkład od obu punktów Diraca. Wykorzystano parametry jak na rys.7.1 Linia przerywana odpowiada wartości V, dla której obserwujemy przejście z fazy spinowego izolatora topologicznego do fazy konwencjonalnego izolatora, w której spinowe przewodnictwo holowskie znika wewnątrz przerwy energetycznej.



RYSUNEK 7.4: Spinowe przewodnictwo holowskie w funkcji napięcia bramkującego V dla wybranych położeń poziomu Fermiego. Linie są przekrojami rys. 7.3 wzdłuż ustalonych μ . Pozostałe parametry jak na rys. 7.1.

ze zdefiniowaną na nowo funkcją $\chi(\varepsilon)$. I znowuż, tak jak poprzednio otrzymujemy pewne wyrażenia analityczne. Z uwagi na znaczną komplikację tych wyrażeń (wynikającą z zniesienia degeneracji) pokażemy tu tylko wyniki numeryczne. Rozważania w tym rozdziale ograniczymy tylko do modelu Kane'a.

Na rysunku 7.3 przedstawione zostało spinowe przewodnictwo holowskie jako funkcja położenia poziomu Fermiego μ oraz napięcia bramkującego V. Dla V = 0 otrzymujemy rezultaty analogiczne jak w poprzednim podrozdziale. Wraz ze wzrostem V, zakres wartości μ , dla których przewodnictwo spinowe przyjmuje stałą skwantowaną wartość zmniejsza się i w punkcie $V = \Delta_{so}$ obserwujemy przejście (przy $\mu = 0$) od $\sigma_{xy}^{s_z} = -4(e/4\pi)$ do $\sigma_{xy}^{s_z} = 0$. To zachowanie jest przedstawione wyraźniej na rysunku 7.4, gdzie zaprezentowane są pewne przekroje wykresu 7.3 wzdłuż wybranych wartości μ . Swego rodzaju przejście fazowe opisane powyżej jest wyraźnie



RYSUNEK 7.5: Spinowe przewodnictwo holowskie w funkcji potencjału chemicznego μ dla wybranych wartości napięcia bramkującego V. Linie są przekrojami rys.7.3 wzdłuż ustalonych V. Pozostałe parametry jak na rys.7.1.



RYSUNEK 7.6: Zależność dyspersyjna dla podwójnej warstwy grafenu w najbliższym sąsiedztwie przerwy energetycznej dla różnych wartości V. Na rysunku widoczna jest zmiana szerokości przerwy wraz ze wzrostem napięcia oraz jej zamknięcie dla krytycznej wartości V. Pozostałe parametry jak na rys.7.1.

widoczne dla przekroju odpowiadającemu $\mu = 0$. Przejście z fazy tak zwanego izolatora topologicznego (obserwowanej dla małych napięć) do fazy klasycznego izolatora (w zakresie wyższych napięć) jest także widoczne na rysunku 7.5, gdzie przedstawione są pewne przekroje wykresu 7.3 dla pewnych - ustalonych wartości V. Wykres ten pokazuje jak zmienia się ze wzrostem V obszar w którym obserwujemy skwantowaną wartość σ_{xy}^{sz} . W miarę wzrostu wartości V, począwszy od V = 0, szerokość przedziału, w którym σ_{xy}^{sz} jest skwantowane zmniejsza się i w końcu znika przy pewnej krytycznej wartości V. Spinowe przewodnictwo holowskie zmienia wartość z $\sigma_{xy}^{s_z} = -4(e/4\pi)$, obserwowanej dla napięć mniejszych od napięcia krytycznego, na $\sigma_{xy}^{s_z} = 0$ dla napięć większych od napięcia krytycznego. Na podstawie analizy wykresów 7.3 - 7.5 możemy także zauważyć, że przerwa energetyczna zmniejsza się wraz ze wzrostem V. Przy pewnej krytycznej wartości V znika zupełnie, a następnie przy dalszym wzroście V otwiera się ponownie. Sytuację tą ilustruje rysunek 7.6, na którym przedstawione zostało spektrum energetyczne podwójnej warstwy grafenowej w bliskim sąsiedztwie krawędzi pasma walencyjnego i przewodnictwa dla różnych wartości V.

7.4 Spinowy efekt Halla w podwójnej warstwie grafenu - rozważania w ramach modelu efektywnego - zredukowanego

Jeśli rozważamy transport elektronowy związany ze stanami elektronowymi w bliskim sąsiedztwie punktu Diraca, wówczas możemy do jego opisu wykorzystać zredukowany model efektywny omówiony w podrozdziale 7.1. Model ten pozwala znaleźć analityczne wyrażenia na przewodnictwo, nawet w bardziej skomplikowanych sytuacjach. Poniżej przeanalizujemy kilka przypadków szczególnych.

Przypadek V = 0

Wartości własne hamiltonianu (7.28) przyjmują postać:

$$E_{1,2} = \mp \left[\Delta_{so}^2 + \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right)^2 \right]^{1/2}.$$
 (7.46)

Stosując wcześniej wprowadzoną notację znajdujemy, że:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = i \frac{e}{2} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{\chi(\varepsilon)}{\prod_{n=1}^{n=2} [\varepsilon - E_n + \mu + i\delta \operatorname{sgn}(\varepsilon)]^4},\tag{7.47}$$

gdzie

$$\chi(\varepsilon) = \frac{4\Delta_{so}\hbar^4 k^2}{m^2} \left[\Delta_{so}^2 - (\varepsilon + \mu)^2 + \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)^2 \right]^2.$$
(7.48)

Całkując po ε a następnie po ${\bf k},$ otrzymujemy analityczne wyrażenie na holowskie przewodnictwo spinowe:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{2\Delta_{so}}{|\mu|} \frac{e}{4\pi} \tag{7.49}$$

dla $|\mu| > \Delta_{so}$ oraz

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -2\frac{e}{4\pi} \tag{7.50}$$

gdy poziom Fermiego leży w przerwie energetycznej, $|\mu| < \Delta_{so}$.

Przypadek z $V \neq 0$

Niezerowe napięcie bramkujące prowadzi, do rozszczepienia pasm. W tej sytuacji wartości własne (7.28) są postaci:

$$E_{1,2} = \mp \left[(V + \Delta_{so})^2 + \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)^2 \right]^{1/2}, \qquad (7.51)$$

$$E_{1',2'} = \mp \left[(V - \Delta_{so})^2 + \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)^2 \right]^{1/2}.$$
(7.52)

Model efektywny i w tym przypadku pozwala otrzymać analityczne rozwiązania na holowskie przewodnictwo spinowe. Gdy $|\mu| > (V + \Delta_{so})$, znajdujemy że

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{e}{4\pi} \frac{2\Delta_{so}}{|\mu|}.\tag{7.53}$$

Dla $|V - \Delta_{so}| < |\mu| < (V + \Delta_{so}),$

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{e}{4\pi} \left(1 - \frac{V - \Delta_{so}}{|\mu|} \right) \tag{7.54}$$

oraz, gdy μ leży w przerwie energetycznej:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = 0 \quad \text{for} \quad V > \Delta_{so} \tag{7.55}$$

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -2\frac{e}{4\pi} \quad \text{for} \quad V < \Delta_{so}. \tag{7.56}$$

Zależności holowskiego przewodnictwa spinowego w funkcji położenia poziomu Fermiego oraz napięcia bramkującego V dokładnie odtwarzają wyniki zaprezentowane na rysunkach 7.3 - 7.5.

Przypadek $\Delta_{so}^{(1)} \neq \Delta_{so}^{(2)}$ oraz V = 0

Założymy teraz różne parametry oddziaływania spin-orbita w obu płaszczyznach atomowych ($\Delta_{so}^{(1)} \neq \Delta_{so}^{(2)}$). Różne wartości tych parametrów mogą być m. in. konsekwencją przeskoków pomiędzy następnymi najbliższymi sąsiadami w obecności oddziaływania nadwymiany z udziałem atomów z sąsiedniej warstwy atomowej.



RYSUNEK 7.7: Spinowe przewodnictwo holowskie obliczone dla V = 0, $\Delta_{so}^{(1)} = 0.15$ meV i $\Delta_{so}^{(2)}$ jak na wykresie.



RYSUNEK 7.8: Spinowe przewodnictwo holowskie dla $\Delta_{so}^{(1)} = 0.15 \text{ meV}$ oraz $\Delta_{so}^{(2)}$ jak na wykresie. Część (a) odpowiada wartości napięcia $V = 0.1\Delta_{so}^{(1)}$, a część (b) odpowiada wartości napięcia $V = \Delta_{so}^{(1)}$.

W przypadku gd
y $\Delta_{so}^{(1)} \neq \Delta_{so}^{(2)}$ (gdzie $\Delta_{so}^{(1)} > \Delta_{so}^{(2)}$) znajdujemy, że dl
a $|\mu| > \Delta_{so}^{(1)}$:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{4|\mu|(\Delta_{so}^{(1)} + \Delta_{so}^{(2)})}{4\mu^2 - (\Delta_{so}^{(1)} - \Delta_{so}^{(2)})^2} \frac{e}{4\pi},\tag{7.57}$$

natomiast, gdy $\Delta_{so}^{(2)} < |\mu| < \Delta_{so}^{(1)}$:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{2\left(|\mu| + \Delta_{so}^{(1)}\right)}{2|\mu| + \left(\Delta_{so}^{(1)} - \Delta_{so}^{(2)}\right)} \frac{e}{4\pi}.$$
(7.58)

Jeśli μ znajduje się w przerwie energetycznej, wówczas $\sigma_{xy}^{s_z}=-2e/4\pi.$

Wyniki numeryczne odpowiadające powyższym wyrażeniom przedstawione są na rysunku 7.7 Spinowe przewodnictwo holowskie jest stałe wewnątrz przerwy energetycznej, która teraz jest zdeterminowana przez mniejszy z parametrów oddziaływania spin-orbita. Na wykresie obserwujemy również specyficzne zagięcie związane z większym z parametrów sprzężenia.

Przypadek $\Delta_{so}^{(1)} \neq \Delta_{so}^{(2)}$ i $V \neq 0$

Nawet w ramach modelu zredukowanego wyrażenia analityczne dla tego przypadku są dość rozbudowane. Rysunek 7.8 przedstawia wyniki numeryczne. Współzawodnictwo między wpływem napięcia V i asymetrią w sprzężenia spinowoorbitalnego prowadzi do pewnej asymetrii w spinowym przewodnictwie. Asymetria ta jest bezpośrednio związana z asymetrią jaką obserwujemy w tym przypadku w zależności dyspersyjnej względem E = 0. Podobnie jak w przypadku symetrycznej zależności dyspersyjnej znajdujemy przejście z fazy topologicznego izolatora spinowego do fazy normalnego izolatora.

7.5 SEH w podwójnej warstwie grafenu w konfiguracji AA

Na zakończenie tego rozdziału omówimy podwójną warstwę grafenową w konfiguracji AA. O ile konfiguracja AA nie występuje w naturalnym graficie, to taka konfiguracja występuje bardzo często podczas procesu zaginania pojedynczej warstwy grafenowej [148, 149]. Rozważamy grafen, aczkolwiek istnieje obecnie cała klasa dwuwymiarowych kryształów, których niskoenergetyczna struktura pasmowa jest zbliżona do struktury pasmowej grafenu i w związku z tym przedstawimy wyniki numeryczne przyjmując szerszy zakresu parametrów charakteryzujących układ.

Do opisu podwójnej warstwy grafenowej w konfiguracji AA, wykorzystamy hamiltonian efektywny otrzymany metodą $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ [147]:

$$H_{AA}^{K} = \mathcal{T}_0 H^K + V \mathcal{T}_z \sigma_0 S_0 + \gamma_1 \mathcal{T}_x \sigma_0 S_0.$$

$$(7.59)$$

Wartości własne tego hamiltonianu pod nieobecność napięcia bramkującego mają postać:

$$E_{1,3} = -\gamma_1 \mp \left(\Delta_{so}^2 + v^2 k^2\right)^{1/2} , \qquad (7.60)$$



RYSUNEK 7.9: Zależność dyspersyjna dla podwójnej warstwy grafenowej w konfiguracji AA w sąsiedztwie punktu K.

$$E_{2,4} = \gamma_1 \mp \left(\Delta_{so}^2 + v^2 k^2\right)^{1/2} . \tag{7.61}$$

Jeśli włączymy napięcie bramkujące, to otrzymamy:

$$E_{1,3} = -\left[v^2k^2 + \Delta_{so}^2 + V^2 + \gamma_1^2 \mp 2\left[(V^2 + \gamma_1^2)(v^2k^2 + \Delta_{so}^2)\right]^{1/2}\right]^{1/2}, \quad (7.62)$$

$$E_{2,4} = \left[v^2 k^2 + \Delta_{so}^2 + V^2 + \gamma_1^2 \mp 2 \left[(V^2 + \gamma_1^2) (v^2 k^2 + \Delta_{so}^2) \right]^{1/2} \right]^{1/2} .$$
(7.63)

Rysunek 7.9 przedstawia zależność dyspersyjną dla rozważanego modelu. Widać wyraźnie, że w sytuacji gdy $\gamma_1 > \Delta_{so}$ pasmo przewodnictwa przecina się z pasmem walencyjnym i rozważana podwójna warstwa nie jest izolatorem i wykazuje cechy półmetalu. Po wyznaczeniu funkcji Greena oraz operatora gęstości prądu spinowego i operatora prędkości dla hamiltonianu (7.59) obliczamy spinowe przewodnictwo holowskie na podstawie wyrażenia (1.8) i zgodnie ze stosowaną powyżej procedurą.

Rysunek 7.10(a) przedstawia spinowe przewodnictwo holowskie w funkcji parametru wewnętrznego oddziaływania spin-orbita oraz położenia poziomu Fermiego. Jeśli parametr Δ_{so} jest bardzo mały (tak jak w przypadku grafenu), wówczas spinowe przewodnictwo holowskie jest równe zero prawie na całym obszarze z wyjątkiem zakresu $\mu = (\pm \gamma_1 - \Delta_{so}; \pm \gamma_1 + \Delta_{so})$ i ich bliskiego sąsiedztwa. W punkcie $\mu = \pm \gamma_1$ spinowe przewodnictwo początkowo przyjmuje wartość równą $-e/2\pi$. Sytuacja ta jest także przedstawiona na rysunku 7.10(b), gdzie spinowe przewodnictwo holowskie jest wykreślone w funkcji wartości parametru Δ_{so} dla wybranych wartości potencjału chemicznego. Linia niebieska na tym wykresie odpowiada wartości potencjału chemicznego równej γ_1 . Wraz ze wzrostem Δ_{so} obserwujemy liniowy wzrost przewodnictwa od wartości $-e/2\pi$, a następnie od pewnej wartości Δ_{so} obserwujemy stałą wartość przewodnictwa polowskie dla wartości potencjału chemicznego $\mu = 0$ wzrasta liniowo od zera do ustalonej wartości $-e/\pi$, którą przyjmuje dla $\Delta_{so} \ge \gamma_1$.



RYSUNEK 7.10: (a) Wkład topologiczny do spinowego przewodnictwa holowskiego w funkcji położenia poziomu Fermiego oraz stosunku Δ_{so}/γ_1 . (b) Przekroje przez rysunek (a) dla wybranych wartości μ . Przyjęto t = 2.9eV, $\gamma_1 = 0.2eV$.

Widzimy więc, że przy zmianie stosunku Δ_{so}/γ_1 zmienia się topologia struktury pasmowej rozważanego układu. Dla $\Delta_{so} < \gamma$ spinowe przewodnictwo holowskie nie jest skwantowane, a układ jest półmetaliczny. Jeśli jednak $\Delta_{so} > \gamma_1$, to układ staje się izolatorem, z skwntowaną wartością spinowego przewodnictwa holowskiego, równą $-e/\pi$, wewnątrz przerwy energetycznej. Widać to wyraźnie na rysunku 7.10(a) oraz na rysunkach 7.11(a), (b) na których przedstawiono spinowe przewodnictwo holowskie w funkcji położenia poziomu Fermiego dla wybranych wartości Δ_{so} .

Pokazaliśmy więc, że zmieniając stosunek parametrów Δ_{so}/γ_1 w modelu dwóch warstw monoatomowych grafenu w konfiguracji AA możemy zaobserwować przejście układu z fazy półmetalicznej do fazy izolatora spinowego, co ma swoje bezpośrednie odzwierciedlenie w zachowaniu się spinowego przewodnictwa holowskiego.

W grafenie wewnętrzne oddziaływanie spin-orbita jest bardzo małe i co więcej, dla dwóch swobodnych warstw grafenowych $\gamma_1 > \Delta_{so}$. Jeśli jednak założymy, że mamy do czynienia z dwoma warstwami monoatomowymi, których wzajemna odległość może być kontrolowana, to



RYSUNEK 7.11: Wkład topologiczny do spinowego przewodnictwa holowskiego w funkcji położenia poziomu Fermiego dla wybranych wartości Δ_{so} (a). Rysunek (b) stanowi powiększenie rysunku (a) dla zakresu μ z przedziału (0.18 - 0.22) eV. Przyjęto t = 2.9eV, $\gamma_1 = 0.2eV$.

parametr γ_1 będzie ulegał zmianie. Tak więc przypadek z $\gamma_1 < \Delta_{so}$ odpowiada sytuacji bardzo słabego sprzężenia między warstwami. Dla $\gamma_1 = 0$ warstwy nie są ze sobą sprzężone - transport odbywa się przez dwie połączone równolegle i odizolowane od siebie monowarstwy atomowe. Mamy więc, sytuację dwóch warstw, z których każda wykazuje własności spinowego izolatora ze skwantowanym spinowym przewodnictwem holowskim wewnątrz przerwy energetycznej.

Podsumowanie

Rozdział ten poświęcony był spinowemu efektowi Halla w podwójnej warstwie grafenowej. Znaczna część rozdziału dotyczy SEH w podwójnej warstwie grafenu w konfiguracji AB z wewnętrznym oddziaływaniem spinowo-orbitalnym. W rachunkach wykorzystano model ciasnego wiązania i modele efektywne - oparte o hamiltonian otrzymany przy pomocy metody $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ oraz zredukowany hamiltonian niskoenergetyczny. Na podstawie modeli efektywnych udało się otrzymać wyrażenia analityczne opisujące spinowe przewodnictwo holowskie w rozważanych przypadkach. Zależność spinowego przewodnictwa holowskiego w funkcji położenia poziomu Fermiego przypomina jakościowo odpowiednia zależność dla atomowej monowarstwy grafenu, przy czym, gdy poziom Fermiego leży wewnątrz przerwy energetycznej spinowe przewodnictwo holowskie jest dwa razy większe niż w przypadku pojedynczej warstwy. Pokazane zostało również swego rodzaju kwantowe przejście fazowe, z fazy spinowego izolatora do fazy konwencjonalnego izolatora (ze spinowym przewodnictwem holowskim równym zero, gdy poziom Fermiego leży w przerwie energetycznej), które zachodzi przy pewnej krytycznej wartości napięcia bramkujacego przyłożonego pomiędzy płaszczyzny grafenowe. W ramach modelu niskoenergetycznego rozważony został także przypadek układu z asymetrią związaną z różnym sprzężeniem spin-orbita w każdej z warstw grafenowych. W tej sytuacji przerwa energetyczna jest zdeterminowana przez mniejszy z parametrów oddziaływania spin-orbita. Oddziaływanie spin-orbita w drugiej warstwie grafenu (warstwie z większym parametrem sprzężenia spin-orbita) prowadzi natomiast do charakterystycznego zagięcia na wykresie spinowego przewodnictwa holowskiego w funkcji położenia poziomu Fermiego. Przyłożenie napięcia bramkującego pomiędzy warstwy grafenu prowadzi również i w tym przypadku do przejścia z fazy izolatora spinowego (realizującej się przy niskich napięciach) do fazy konwencjonalnego izolatora, którą obserwujemy przy wyższych napięciach. Na zakończenie tego rozdziału przedyskutowany został także przypadek podwójnej warstwy grafenowej w konfiguracji AA, w ramach modelu opartego o hamiltonian $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Spinowe przewodnictwo holowskie, w przypadku gdy parametr sprzężenia między warstwami, γ_1 , jest większy od parametru sprzężenia spin-orbita, Δ_{so} , jest bardzo słabe prawie w całym zakresie wartości potencjału chemicznego poza okolicą punktu $\mu = \pm \gamma_1$, gdzie obserwujemy piki. W miarę zwiększania wartości stosunku Δ_{so}/γ_1 piki te rosną i poszerzają się, aż dla $\Delta_{so}/\gamma_1 = 1$ następuje otwarcie przerwy energetycznej w punkcie K. Obserwujemy przejście z fazy półmetalicznej do fazy spinowego izolatora, ze stałą i skwantowaną wartością spinowego przewodnictwa holowskiego dla położenia poziomu Fermiego wewnątrz przerwy energetycznej.
Rozdział 8

Spinowy efekt Halla w grafenie indukowany fluktuacjami pola Rashby

Wewnętrzne oddziaływanie spin-orbita w grafenie jest bardzo słabe [131], przez co eksperymentalna weryfikacja spinowego efektu Halla wewnątrz przerwy energetycznej, idukowanej tym oddziaływaniem, oraz w jej bliskim sąsiedztwie są obecnie niezmiernie trudne. Oddziaływanie spin-orbita typu Rashby, które pojawia się w grafenie silnie zależy od podłoża na którym jest on osadzony i może być względnie duże. Oprócz stałego oddziaływania Rashby w grafenie obserwujemy także fluktuujące pole Rashby, którego źródłem może być np. pofałdowana struktura warstwy grafenowej, domieszki, obecność adatomów na powierzchni grafenu lub sprzężenie elektron-fonon w podłożu [150–153].

Wpływ fluktuacji pola Rashby na spinową relaksację był analizowany w ramach dwóch różnych modeli opisujących te fluktuacje [152, 154]. W tym rozdziale omówimy spinowy efekt Halla w grafenie indukowany fluktuacjami pola Rashby. Rozważymy dwie różne funkcje korelacji dla parametru oddziaływania spin-orbita Rashby i pokażemy, że spinowe przewodnictwo holowskie zależy od stosunku całkowitego czasu relaksacji w układzie do czasu relaksacji spinowej [90], która jest zdeterminowana właśnie przez korelator parametru oddziaływania Rashby.



RYSUNEK 8.1: Diagramy Feynmana w limicie prądu stałego, dające wkład do spinowego przewodnictwa holowskiego w rozważanym problemie.

Rozważamy pojedynczą warstwę grafenu w ramach modelu Kane'a. Ponieważ wewnętrzne oddziaływanie spin-orbita grafenu jest małe, więc zostanie pominięte w dalszych rachunkach. Hamiltonian opisujący niskoenergetyczne stany elektronowe w pobliżu punktu K pierwszej strefy Brillouina jest teraz postaci $H^K = H_0^K + V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^K$. Hamiltonian niezaburzony dla grafenu H_0^K został zdefiniowany w Rozdziale 6 i dany jest równaniem (6.21). Człon $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^K$ opisuje fluktuujące pole Rashby, które związane jest głównie z własnościami podłoża, ale może być także skutkiem pofałdowanej struktury płaszczyzny grafenowej. Hamiltonian $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^K$ zdefiniowany jest więc przez (6.31), przy czym zamiast stałej oddziaływania Rashby λ_R wprowadzimy zmienny w przestrzeni parametr oddziaływania $\lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$. Zakładamy, że uśrednione oddziaływanie spin-orbita Rashby znika, ale parametr tego sprzężenia λ fluktuuje w przestrzeni. W związku z tym pierwszy i drugi moment statystyczny dla $\lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ wynoszą odpowiednio $\langle\lambda_{\mathbf{q}}\rangle = 0$, $\langle\lambda_{\mathbf{q}}^2\rangle = C_{\mathbf{q}} \neq 0$, gdzie $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k'}$.

W rachunkach wykorzystamy omówioną w Rozdziale 1 formułę Kubo-Stredy:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \sigma_{xy}^{s_z I} + \sigma_{xy}^{s_z II}.$$
(8.1)

Składnik $\sigma_{xy}^{s_z II}$ jako tzw. wkład topologiczny do spinowego przewodnictwa holowskiego, który pochodzi od wszystkich stanów poniżej poziomu Fermiego, w rozważanym przypadku wynosi zero¹. $\sigma_{xy}^{s_z I}$, które dane jest wyrażeniem (1.11), związane jest ze stanami na poziomie Fermiego. Ten wkład do spinowego przewodnictwa holowskiego wyznaczymy przy pomocy diagramowego rachunku zaburzeń Feynmana. Tak więc, spinowe przewodnictwo holowskie możemy zapisać następująco:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e\hbar}{2\pi} \text{Tr} \sum_{\mathbf{k}\,\mathbf{k}'} \sum_{n=1}^4 D_n \equiv \sigma_{xy}^{s_z(1)} + \sigma_{xy}^{s_z(2)} + \sigma_{xy}^{s_z(3+4)}.$$
(8.2)

 $^{{}^1\}sigma_{xy}^{s_z\,II}\neq 0$ tylko wewnątrz przerwy energetycznej indukowanej wewnętrznym oddziaływaniem spin-orbita, które tu zaniedbujemy.

 D_n to wyrażenie jakie otrzymamy po rozpisaniu *n*-tego diagramu z rysunku 8.1. Składnik $\sigma_{xy}^{s_z(1)}$ związany jest z wkładem do przewodnictwa od diagramu podstawowego (D_1) i jest częścią wkładu topologicznego do spinowego efektu Halla. Ponieważ jednak hamiltonian niezaburzony nie zawiera żadnego oddziaływania spin-orbita, więc wkład od diagramu D_1 znika, $\sigma_{xy}^{s_z(1)} = 0$. Drugi składnik w równaniu (8.2) jest postaci:

$$\sigma_{xy}^{s_z(2)} = \frac{e\hbar}{2\pi} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{d^2 \mathbf{k}'}{(2\pi)^2} \operatorname{Tr} \left[j_x^{s_z} G_{\mathbf{k}}^R V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} G_{\mathbf{k}'}^R v_y G_{\mathbf{k}'}^A V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}}^A \right].$$
(8.3)

Przewodnictwo spinowe związane z diagramami D_3 i D_4 możemy zapisać następująco:

$$\sigma_{xy}^{s_z(3+4)} = \frac{e\hbar}{2\pi} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{d^2 \mathbf{k}'}{(2\pi)^2} \operatorname{Tr} \left[j_x^{s_z} G_{\mathbf{k}}^R v_y G_{\mathbf{k}}^A V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} G_{\mathbf{k}'}^A V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}}^A + j_x^{s_z} G_{\mathbf{k}}^R V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} G_{\mathbf{k}'}^R V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}}^R v_y G_{\mathbf{k}}^A \right].$$
(8.4)

W powyższych równaniach operator gęstości prądu spinowego oraz prędkości dane są wyrażeniami:

$$j_x^{s_z} = \frac{v}{2} \begin{pmatrix} 0 & S_z \\ S_z & 0 \end{pmatrix}, \qquad v_y = i \frac{v}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & -S_0 \\ S_0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{8.5}$$

w których S_0 , S_z to macierz jednostkowa oraz z-owa macierz Pauliego w przestrzeni spinowej. Funkcje $G_{\mathbf{k}}^{R(A)}(\mu)$ to opóźniona i przedwczesna funkcja Greena na poziomie Fermiego - μ : $G_{\mathbf{k}}^{R(A)} = \left[(\mu \pm i\Gamma) - H_0^K \right]^{-1}$; $\Gamma = \hbar/2\tau$. Zakładamy, że τ jest całkowitym czasem relaksacji, związanym zarówno z rozpraszaniem na domieszkach jak i z rozpraszaniem spinu na fluktuacjach pola Rashby τ_s i w związku z tym możemy zapisać: $1/\tau = 1/\tau_i + 1/\tau_s$. Zatem, dla niskich koncentracji domieszek rozpraszanie na fluktuacjach pola Rashby jest dominującym mechanizmem prowadzącym do relaksacji ($\tau \to \tau_s$).

Aby wyznaczyć czas relaksacji spinowej τ_s policzymy energię własną:

$$\Sigma^R = \int \frac{d^2 \mathbf{k}'}{(2\pi)^2} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} G^{0R}_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}.$$
(8.6)

Wstawiając jawną postać funkcji Green
a $G^{0R}_{{\bf k}'}$ związanej z H^K_0 otrzymujemy:

$$\Sigma^{R} = 4\varepsilon_{F}M \int \frac{d^{2}\mathbf{k}'}{(2\pi)^{2}} \frac{\langle \lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{2} \rangle}{(\varepsilon_{F} - E_{1k'} + i0^{+})(\varepsilon_{F} - E_{2k'} + i0^{+})}, \qquad (8.7)$$

gdzie $E_{1,2} = \pm vk \equiv \pm \varepsilon_{\mathbf{k}}$, a macierz M:

$$M = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(S_0 - S_z) & 0\\ 0 & \frac{1}{2}(S_0 + S_z) \end{pmatrix}.$$
 (8.8)

Wykorzystując, że $\mathbf{k}' = \mathbf{k} - \mathbf{q}$ otrzymamy:

$$\Sigma^{R} = -i\frac{M}{2\pi} \int dq \ q \int d\theta \ C_{q} \ \delta(\varepsilon_{F} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})$$
$$= -iM\frac{k_{F}}{\pi v} \int_{0}^{2k_{F}} dq \frac{2C_{q}}{\sqrt{4k_{F}^{2} - q^{2}}},$$
(8.9)

Ponieważ energia własna związana jest z czasem relaksacji poprzez następującą relację:

$$\Sigma^R = -i\Gamma_s M,\tag{8.10}$$

gdzie $\Gamma_s = \hbar/2\tau_s$, to przyrównując (8.10) do (8.9) otrzymamy jawne wyrażenie na τ_s , które zależy od definicji korelatora $C_q[152, 154]$:

$$\frac{1}{\tau_s} = \frac{4k_F}{\pi v} \int dq \frac{C_q}{\sqrt{4k_F^2 - q^2}}.$$
(8.11)

Zapisując (8.3) przy wykorzystaniu jawnej postaci funkcji Greena oraz (8.5), a także wykonując operację śladu znajdujemy:

$$\sigma_{xy}^{s_z(2)} = \frac{e}{2\pi} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{d^2 \mathbf{k}'}{(2\pi)^2} \frac{16|\lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2 v^4 (k_x k'_x - k_y k'_y) \varepsilon_F \Gamma}{\left(\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 - (\varepsilon_F - i\Gamma)^2\right) (\varepsilon_{\mathbf{k}'}^2 - (\varepsilon_F - i\Gamma)^2)} \times \frac{1}{\left(\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 - (\varepsilon_F + i\Gamma)^2\right) (\varepsilon_{\mathbf{k}'}^2 - (\varepsilon_F + i\Gamma)^2)}.$$
(8.12)

Wykonując całkowanie po kącie otrzymamy, że $\sigma_{xy}^{s_z(2)} = 0$. Czyli spinowe przewodnictwo holowskie dane jest przez (8.4). W limicie niskiej koncentracji domieszek otrzymujemy:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e}{4\pi^2} \frac{v^2 \varepsilon_F}{\Gamma} \int dq \ q \int dk \ k \int d\theta \ C_q \ \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 - \varepsilon_F^2) \ \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^2 - \varepsilon_F^2). \tag{8.13}$$

Ostatecznie spinowe przewodnictwo holowskie możemy zapisać następująco:

$$\sigma_{xy}^{sz} = \frac{e}{4\pi^2} \frac{\varepsilon_F}{\Gamma} \int_0^{2k_F} dq \frac{C_q}{v^2 \sqrt{4k_F^2 - q^2}}.$$
(8.14)

Wykorzystując (8.11) oraz uwzględniając wkład od drugiego punktu K dostajemy [90]:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e}{4\pi} \frac{\tau}{\tau_s}.$$
(8.15)

Tak więc, spinowe przewodnictwo holowskie związane z fluktuacjami pola Rashby w grafenie, w ogólności, nie przyjmuje stałej - uniwersalnej wartości. Widzimy również, że potencjał rozpraszający choć redukuje przewodnictwo spinowe, to nie prowadzi do całkowitego wygaszenia efektu. Na podstawie powyższych rachunków widać, że spinowe przewodnictwo holowskie zależy od jawnej postaci C_q . W pracy [154] założono funkcję korelacji dla parametru oddziaływania spin-orbita Rashby w postaci:

$$C_q^{(1)} = 2\pi \langle \lambda^2 \rangle R^2 e^{-qR}.$$
(8.16)

Fluktuacje opisane przez powyższy korelator związane są z pofałdowaną strukturą grafenu lub z domieszkami, które mogą się pojawić na jego powierzchni. Wykorzystując powyższą funkcję korelacji otrzymamy następujące wyrażenie na spinowe przewodnictwo holowskie (dla jednego punktu K):

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e}{4\Gamma v} \langle \lambda^2 \rangle k_F R^2 \left(I_0(2k_F R) - L_0(2k_F R) \right), \qquad (8.17)$$

gdzie I_0 oraz L_0 to odpowiednio zmodyfikowane funkcje Bessela i Struve'a zerowego rzędu. Na podstawie powyższej zależności możemy otrzymać proste analityczne wyniki dla dwóch szczególnych przypadków:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e}{4\pi} \frac{\langle \lambda^2 \rangle}{v\Gamma} R \begin{cases} \pi k_F R & ; k_F R \ll 1 \\ 1 & ; k_F R \gg 1 \end{cases}$$

$$(8.18)$$

Zhang i Wu [152] zaproponowali inną postać korelatora C_q , która może opisywać sytuację w której adatomy są przypadkowo rozmieszczone na powierzchni grafenu oraz między płaszczyzną grafenową a podłożem:

$$C_q^{(2)} = 4\pi^2 n \langle \lambda^2 \rangle R^4 e^{-q^2 R^2}.$$
(8.19)

gdzie n jest koncentracją domieszek. Odpowiadające powyższej funkcji korelacji spinowe przewodnictwo holowskie (dla jednego punktu K) przyjmuje teraz formę:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{en}{2v\Gamma} \langle \lambda^2 \rangle k_F R^4 \pi I_0(2k_F^2 R^2) e^{-2k_F^2 R^2}.$$
(8.20)

Także w tym przypadku otrzymujemy proste wyrażenia w szczególnych przypadkach:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{en}{2v\Gamma} \langle \lambda^2 \rangle R^3 \begin{cases} \pi k_F R & ; k_F R \ll 1 \\ \frac{\sqrt{\pi}}{2} & ; k_F R \gg 1 \end{cases}$$
(8.21)

Na rysunkach 8.2 i 8.3 przedstawione są wyniki numeryczne dla dowolnego zakresu $k_F R$, na których uwzględniono wkład od obu punktów K pierwszej strefy Brillouina. Rysunek 8.2 przedstawia spinowe przewodnictwo holowskie w funkcji $k_F R$ dla kilku ustalonych długości korelacji R. Wykres 8.2(a) odpowiada funkcji korelacji, C_q , zdefiniowanej równaniem (8.16), a wykres 8.2(b) wykreślony został dla funkcji korelacji danej przez (8.19). Na rysunku 8.3 przedstawiono z kolei spinowe przewodnictwo holowskie w funkcji $k_F R$, gdy ustalona jest wartość wektora falowego na powierzchni Fermiego k_F . (Tak jak poprzednio część (a) rysunku wykreślona została dla korelatora zdefiniowanego przez (8.16), a część (b) dla korelatora danego równaniem (8.19)).



RYSUNEK 8.2: Spinowe przewodnictwo holowskie jako funkcja $k_F R$ dla ustalonej wartości R. Wykres (a) odpowiada funkcji korelacji zdefiniowanej równaniem (8.16), a wykres (b) wykreślony został dla funkcji korelacji danej przez (8.19). Na wykresach uwzględniono wkład od obu punktów K. Przyjęto następujące wartości parametrów $\langle \lambda^2 \rangle = 25 \times 10^{-9} \text{ eV}^2, v = 3.516 \times 10^{-10} \text{eVm}, n = 3 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$, and $\Gamma = 6.58 \times 10^{-8} \text{ eV}$.

Na podstawie obu rysunków możemy wnioskować, że spinowe przewodnictwo holowskie znika gdy wartość wektora falowego k_F lub długość korelacji R zmierzają do zera. Aby zrozumieć takie zachowanie należy pamiętać, że wartość $k_F = 0$ odpowiada sytuacji, gdy poziom Fermiego leży w punktach Diraca, gdzie znika gęstość stanów. W limicie R = 0 długość fali elektronu na powierzchni Fermiego jest znacznie większa niż zakresy korelacji dla oddziaływania spin-orbita. Te dwa limity odpowiadają wyrażeniom analitycznym (8.18) i (8.21). Gdy $k_F R$ wzrasta, przy ustalonym R spinowe przewodnictwo początkowo wzrasta z $k_F R$ i po osiągnięciu maksymalnej wartości zmierza do limitu $k_F R \gg 1$ zgodnie z wyrażeniami (8.18) i (8.21), który to jednak zależy od wartości R. Jeśli ustalona jest wartość wektora falowego k_F spinowe przewodnictwo holowskie wzrasta wraz ze wzrostem $k_F R$, a szybkość tego wzrostu zależy od wartości k_F .



RYSUNEK 8.3: Spinowe przewodnictwo holowskie jako funkcja $k_F R$ dla ustalonego k_F . Wykreślone przy wykorzystaniu definicji korelatora danego przez (8.16) - rys. (a) oraz (8.19) - rys. (b). Przyjęto wartości parametrów jak na rys. 8.2.

Podsumowanie

W rozdziale tym przeanalizowaliśmy SEH indukowany fluktuacjami pola Rashby w pojedynczej warstwie grafenowej. Założyliśmy, że jednorodne pole Rashby w układzie znika. W rachunkach wykorzystaliśmy dwie różne funkcje korelacji dla parametru oddziaływania Rashby, które odpowiadają dwóm różnym sytuacjom fizycznym (fluktuacje oddziaływania spin-orbita pochodzą od pofałdowanej struktury grafenu lub są związane z obecnością domieszek po obu stronach warstwy grafenowej). Pokazaliśmy, że spinowe przewodnictwo holowskie nie przyjmuje stałej wartości, tylko wynosi $(e/4\pi)(\tau/\tau_s)$ niezależnie od wyboru definicji korelatora. Stałą - uniwersalną wartość obserwujemy tylko w przypadku, gdy τ i τ_s są równe, a więc, gdy w układzie poza fluktuacjami pola Rashby nie występują inne mechanizmy relaksacji. Obecność potencjału rozpraszającego osłabia SEH, ale nie wygasza go całkowicie - podobnie jak w przypadku dwuwymiarowego gazu elektronowego z fluktuującym polem Rashby.

Rozdział 9

Spinowy efekt Halla w silicenie

Otrzymany w 2004 roku grafen [119] zapoczątkował intensywne badania nad dwuwymiarowymi kryształami oraz technikami ich wytwarzania. Badania te bardzo szybko zaowocowały obserwacją takich dwuwymiarowych materiałów jak BN oraz MoS_2 [155]. W 2010 roku udało się otrzymać stabilny dwuwymiarowy kryształ krzemu - silicen [156, 157], który podobnie jak grafen, charakteryzuje się liniową zależnością dyspersyjną w pobliżu położenia poziomu Fermiego, natomiast jego przerwa energetyczna, indukowana wewnętrznym oddziaływaniem spin-orbita, jest znacznie większa niż w grafenie. Wymienione cechy silicenu oraz jego kompatybilność z konwencjonalną, opartą na krzemie, elektroniką czynią ten materiał interesującym dla elektroniki spinowej.

W niniejszym rozdziale omówimy spinowy efekt Halla w silicenie indukowany jego wewnętrznym oddziaływaniem spinowo-orbitalnym [158]. Pokażemy, że podobnie jak w przypadku grafenu, spinowe przewodnictwo holowskie przyjmuje stałą wartość gdy poziom Fermiego znajduje się wewnątrz przerwy energetycznej. Omówimy również wpływ napięcia bramkującego na spinowe przewodnictwo holowskie w tym materiale.

9.1 Model ciasnego wiązania oraz model efektywny dla silicenu

Atomy krzemu w silicenie tworzą strukturę typu plastra miodu zawierającą dwie podsieci. W odróżnieniu od struktury krystalicznej grafenu, te dwie podsieci są rozsunięte względem siebie, w kierunku normalnym do płaszczyzny kryształu. W rezultacie sieć krystaliczna silicenu jest lekko pozaginana w sposób pokazany na rysunku 9.1(a).

Silicen posiada wiele własności zbliżonych do grafenu. Na rysunku 9.1(b) przedstawiona jest otrzymana metodą *ab initio* [160] struktura pasmowa silicenu oraz odpowiadająca jej gęstość stanów. Podobnie jak w przypadku grafenu obserwujemy liniową zależność dyspersyjną w pobliżu



RYSUNEK 9.1: Sieć atomowa silicenu. Wzajemna konfiguracja najbliższych sąsiadów, widok warstwy z boku oraz z góry(a). Struktura pasmowa oraz gęstość stanów dla silicenu otrzymane metodą *ab initio* (b). Rysunek (a) pochodzi z pracy [159], a rysunek (b) - z pracy [160].

punktów K, gdzie stykają się pasmo walencyjne i przewodnictwa. Wewnętrzne oddziaływanie spin-orbita otwiera przerwę energetyczną w punktach Diraca. Z uwagi na pozaginany charakter struktury krystalograficznej, wewnętrzne oddziaływanie spin orbita silicenu jest znacznie większe niż w grafenie, a związana z nim przerwa energetyczna wynosi około 1.5 meV [161, 162].

Zagięcia struktury krystalograficznej silicenu mają jeszcze dwie ważne konsekwencje: obecność tzw. wewnętrznego oddziaływanie spin-orbita typu Rashby oraz możliwość kontrolowania jego struktury pasmowej przyłożonym w kierunku prostopadłym do płaszczyzny podłoża polem elektrycznym (napięciem bramkującym) [159, 162].

Hamiltonian w modelu ciasnego wiązania opisujący silicen przyjmuje postać [159, 163]:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \alpha} c^{\dagger}_{i\alpha} c_{j\alpha} + i \frac{\lambda_{so}}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle \langle i,j \rangle \rangle \alpha\beta} \nu_{ij} c^{\dagger}_{i\alpha} (S_z)_{\alpha\beta} c_{j\beta} + i\lambda_{R1} \sum_{\langle i,j \rangle \alpha\beta} c^{\dagger}_{i\alpha} \left(\mathbf{S} \times \hat{\mathbf{d}}_{ij} \right)^z_{\alpha\beta} c_{j\beta} - i \frac{2}{3} \lambda_{R2} \sum_{\langle \langle i,j \rangle \rangle \alpha\beta} \mu_i c^{\dagger}_{i\alpha} \left(\mathbf{S} \times \hat{\mathbf{d}}_{ij} \right)^z_{\alpha\beta} c_{j\beta} + V \sum_{i\alpha} \mu_i c^{\dagger}_{i\alpha} c_{i\alpha} , \qquad (9.1)$$

w którym $c_{i\alpha}^{\dagger}$ - operator kreacji elektronu o spinie α w węźle *i*, a $\langle i, j \rangle / \langle \langle i, j \rangle \rangle$ wskazują, że

sumowanie przebiega odpowiednio po najbliższych sąsiadach lub następnych najbliższych sąsiadach. Pierwszy wyraz w powyższym hamiltonianie opisuje przeskoki elektronu z węzła *i*-tego na *j*-ty z całką przeskoku t = 1.6eV. Drugi wyraz opisuje wewnętrzne oddziaływanie spin-orbita z parametrem oddziaływania $\lambda_{so} = 3.9meV$, $\nu_{ij} = \pm 1$ w zależności czy przeskok do następnego najbliższego sąsiada odbywa się przeciwnie czy zgodnie z ruchem wskazówek zegara; **S** wektor macierzy Pauliego w przestrzeni spinu. Kolejne dwa wyrazy związane są z oddziaływaniem spin-orbita typu Rashby. Pierwszy z nich opisuje oddziaływanie spin-orbita Rashby związane z obecnością zewnętrznego pola elektrycznego $\lambda_{R1} = \lambda_{R1}(E_z)$, drugi – tzw. wewnetrzne oddziaływanie spin-orbita Rashby z parametrem $\lambda_{R2} = 0.7meV$, $\mu_i = \pm 1$ odpowiednio dla węzła atomu z podsieci A(B). W obu tych wyrazach pojawia się wersor $\hat{\mathbf{d}}_{ij} = \mathbf{d}_{ij}/d_{ij}$, gdzie wektor \mathbf{d}_{ij} jest wektorem łączącym atom *i*-ty z *j*-tym z tej samej podsieci. Ostatni składnik opisuje wpływ napięcia bramkującego $V = lE_z$ związanego z przyłożeniem pola elektrycznego E_z prostopadle do płaszczyzny silicenu; l = 0.23Å (2*l* - odległość między podsieciami).

Podobnie jak dla grafenu, możemy na podstawie modelu ciasnego wiązania wyprowadzić niskoenergetyczny hamiltonian opisujący stany z bliskiego sąsiedztwa punktów K strefy Brillouina. Hamiltonian ten przyjmuje następującą postać [159, 163]:

$$H^{K,K'} = v\left(\eta k_x \sigma_x + k_y \sigma_y\right) + \eta \sigma_z h_{11} + \frac{\lambda_{R1}}{2} \left(\eta \sigma_x S_y - \sigma_y S_x\right) + V \sigma_z; \qquad (9.2)$$

$$h_{11} = \lambda_{so}S_z + a\lambda_{R2}\left(k_yS_x - k_xS_y\right) \,. \tag{9.3}$$

W powyższym wyrażeniu $v = \hbar v_F$ z $v_F = \frac{\sqrt{3}}{2\hbar}at$, macierze σ_i (i = x, y, z) oznaczają macierze Pauliego w przestrzeni podsieci (pseudospinu), $\eta = \pm 1$ odpowiednio dla punktu K/K', stała sieci a = 3.86Å.

9.2 Topologiczny spinowy efekt Halla w silicenie

Rozważymy topologiczny spinowy efekt Halla związany z obecnością wewnętrznych oddziaływań spinowo-orbitalnych. W obliczeniach wykorzystamy model efektywny opisany hamiltonianem (9.2).

SEH w przypadku gdy V = 0

W obliczeniach wykorzystamy formułę na spinowe przewodnictwo holowskie daną równaniem (1.8). Obliczając funkcję Greena dla hamiltonianu (9.2) z V = 0, $\lambda_{R1}(0) = 0$, oraz operatory prędkości i prądu spinowego, a następnie postępując zgodnie z algorytmem opisanym w Rozdziale 6 i 7 otrzymamy, że spinowe przewodnictwo holowskie dane jest następującymi wyrażeniami (dla jednego punktu K):

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{v^2 \lambda_{so}}{|\mu| (v^2 + a^2 \lambda_{R2}^2)} \frac{e}{4\pi}, \qquad (9.4)$$

gdy poziom Fermiego μ (mierzony od środka przerwy energetycznej) leży w paśmie walencyjnym lub przewodnictwa, natomiast jeśli poziom Fermiego znajduje się w przerwie energetycznej otrzymamy:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{v^2}{v^2 + a^2 \lambda_{R2}^2} \frac{e}{4\pi} \,. \tag{9.5}$$

Widzimy więc, że z uwagi na obecność wewnętrznego oddziaływania spin-orbita typu Rashby spinowe przewodnictwo holowskie wewnątrz przerwy energetycznej nie przyjmuje wartości skwantowanej. Niemniej jednak parametr λ_{R2} jest mały w porównaniu z stałą opisującą wewnętrzne oddziaływanie spin-orbita, co więcej oddziaływanie to znika w $\mathbf{k} = 0$ (patrz postać (9.2)). Zakładając wyżej wymienione wartości dla wielkości występujących w równaniu (9.5) otrzymamy, że $\sigma_{xy}^{sz}(\lambda_{R2} = 0) - \sigma_{xy}^{sz}(\lambda_{R2} \neq 0) \approx 10^{-7} \frac{4}{4\pi}$. Tak więc, wpływ wewnętrznego oddziaływania spin-orbita typu Rashby jest mały i w dalszej części rozdziału będziemy zakładać $\lambda_{R2} = 0$. W związku z tym równania (9.4) i (9.5) przyjmą następującą formę:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{\lambda_{so}}{|\mu|} \frac{e}{4\pi},\tag{9.6}$$

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{e}{4\pi} \tag{9.7}$$

odpowiednio dla położenia poziomu Fermiego w paśmie walencyjnym lub przewodnictwa oraz dla μ wewnątrz przerwy energetycznej.

SEH w obecności napięcia bramkującego

Rozważmy teraz przypadek swobodnej warstwy silicenu¹ w zewnętrznym polu elektrycznym prostopadłym do jego płaszczyzny. Również w tym przypadku znajdujemy proste analityczne rozwiązania. Otrzymujemy, że

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{\lambda_{so}}{|\mu|} \frac{e}{4\pi} \tag{9.8}$$

jeśli poziom Fermiego przecina oba pasma walencyjne lub oba pasma przewodnictwa, a więc gdy $|\mu| > |V| + \lambda_{so}$. Jeśli poziom Fermiego przecina tylko jedno pasmo walencyjne lub przewodnictwa, czyli $|V| + \lambda_{so} > |\mu| > ||V| - \lambda_{so}|$, to spinowe przewodnictwo dane jest zależnością

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{|V| - \lambda_{so}}{|\mu|} \right) \frac{e}{4\pi}.$$
(9.9)

¹Pomijamy oddziaływanie z podłożem - a więc rozważamy przypadek bez zewnętrznego oddziaływania spinorbita Rashby.



RYSUNEK 9.2: Spinowe napięcie holowskie w funkcji napięcia bramkującego V prostopadłego do płaszczyzny silicenu oraz położenia poziomu Fermiego μ . Uwzględniono wkład od obu punktów K. Wykres wykonano dla parametrów: $v = \hbar v_F$ with $v_F = 5.52 \cdot 10^5$ m/s, and $\lambda_{so} = 3.9$ meV.

Gdy poziom Fermiego leży w przerwie energetycznej, $|\mu| < ||V| - \lambda_{so}|$, otrzymamy:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -\frac{e}{4\pi}.\tag{9.10}$$

Spinowe przewodnictwo holowskie w funkcji napięcia V oraz położenia poziomu Fermiego μ zostało pokazane na rysunku 9.2 (uwzględniono na nim wkład od obu punktów K). Na wykresie widzimy, że przerwa energetyczna, wewnątrz której spinowe przewodnictwo holowskie przyjmuje stałą skwantowaną wartość, zmniejsza się wraz ze wzrostem wartości napięcia |V|. Dla pewnej krytycznej wartości |V| przerwa energetyczna znika, a następnie przy zwiększaniu |V| otwiera się ponownie. Spinowe przewodnictwo holowskie wewnątrz przerwy przy napięciach większych od krytycznego znika. Zachowanie to jest również dobrze widoczne na rysunku 9.3, który przedstawia wybrane przekroje rysunku 9.2.



RYSUNEK 9.3: Wybrane przekroje rys.9.2 dla wybranych wartości napięcia V.

Podobnie jak w przypadku podwójnej warstwy grafenowej obserwujemy swego rodzaju topologiczne przejście fazowe z fazy spinowego izolatora (obserwowanej dla wartości napięć |V|mniejszych od pewnej wartości krytycznej, w której spinowe przewodnictwo holowskie dla μ wewnątrz przerwy energetycznej przyjmuje skwantowaną wartość) do fazy konwencjonalnego izolatora (dla napięć większych od napięcia krytycznego, w której spinowe przewodnictwo holowskie znika gdy poziom Fermiego leży wewnątrz przerwy energetycznej).

Podsumowanie

Podsumowując, otrzymaliśmy analityczne wyrażenia na spinowe przewodnictwo holowskie w silicenie z wewnętrznym oddziaływaniem spin-orbita. Pokazaliśmy również, że wewnętrzne oddziaływanie spin-orbita Rashby ma niewielki wpływ na SEH i w związku z tym spinowe przewodnictwo jest skwantowane gdy poziom Fermiego leży wewnątrz przerwy energetycznej. W obecności napięcia bramkującego obserwujemy, tak jak w przypadku podwójnej warstwy grafenowej, przejście z fazy izolatora spinowego do fazy konwencjonalnego izolatora.

Część IV

Spinowy efekt Halla w półprzewodnikach IV-VI

Rozdział 10

Spinowy efekt Halla w półprzewodnikach IV-VI

W poprzednich rozdziałach omówiony został spinowy efekt Halla w układach dwuwymiarowych. Efekt ten występuje również w układach trójwymiarowych. W niniejszym rozdziale omówimy przypadek układu trójwymiarowego w którym oddziaływanie spin-orbita indukuje SEH.

W 2004 roku Murakami i in. [15] zasugerowali dwie klasy materiałów półprzewodnikowych, w których możliwe jest zaobserwowanie skończonego spinowego przewodnictwa holowskiego tzw. fazy izolatora spinowego, gdy w układzie nie płynie prąd ładunkowy. Materiały te, to np. bezprzerwowe półprzewodniki II-VI oraz wykazujące wąską przerwę energetyczną półprzewodniki IV-VI. Zaproponowane izolatory spinowe, poprzez analogię do kwantowego efektu Halla, powinny charakteryzować się bezstratnym transportem spinowego prądu holowskiego. W odróżnieniu od kwantowego efektu Halla, transport ten może odbywać się w układach trójwymiarowych i pod nieobecność pola magnetycznego. Spinowe przewodnictwo holowskie powinno w tym przypadku przyjmować skończone, choć nie koniecznie skwantowane wartości oraz silnie zależeć od struktury pasmowej.

W tym rozdziale rozważymy SEH w półprzewodnikach IV-VI [164]. Półprzewodniki te zbudowane są przez atomy pierwiastków z grupy IV (Pb, Sn, Ge - metale) oraz chalikogenki (Te, Se, S) i krystalizują w strukturze typu NaCl. Struktura soli kuchennej (w odróżnieniu od struktury typu blendy-cynkowej charakterystycznej dla półprzewodników III-V) zachowuje symetrię względem inwersji, przez co ekstrema pasm pojawiają się dokładnie w punktach Γ , L i X strefy Brillouina. Zachowana jest także dwukrotna degeneracja Kramersa we wszystkich punktach strefy Brillouina. Ta grupa półprzewodników charakteryzuje się silnym oddziaływaniem spin-orbita, które prowadzi do pojawienia się w punkcie L wąskiej przerwy energetycznej (0.15 - 0.3 eV) oraz silnej nieparaboliczności pasm walencyjnych i przewodnictwa w bliskim sąsiedztwie punktu L. Tak więc, struktura pasmowa w pobliżu każdego punktu L przypomina zależność dla masywnych fermionów Diraca w przestrzeni trójwymiarowej.

Zależność dyspersyjna w pobliżu punktu L jest dobrze opisana przez sześciopasmowy model otrzymany przy pomocy metody $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ przez Mitchella i Wallisa oraz Dimmocka. Model ten pozwala opisać sprzężenie pomiędzy najniższym pasmem przewodnictwa oraz bliskimi pasmami, a także pomiędzy najwyższym pasmem walencyjnym i najbliższymi pasmami.

Poniżej wyznaczymy wkład topologiczny do spinowego przewodnictwa holowskiego i pokażemy słuszność postawionej w pracy [15] tezy w odniesieniu do półprzewodników IV-VI.

10.1 Model efektywny dla półprzewodników IV-VI

Zależność dyspersyjna dla niskoenergetycznych stanów w pobliżu punktu L pierwszej strefy Brillouina dla półprzewodniki IV-VI może być opisana efektywnym hamiltonianem wyprowadzonym przez Dimmocka [165]:

$$H = \begin{pmatrix} \Delta + \alpha_1^t (k_x^2 + k_y^2) + \alpha_1^l k_z^2 & v_0^t (\sigma_x k_x + \sigma_y k_y) + v_0^l \sigma_z k_z \\ v_0^t (\sigma_x k_x + \sigma_y k_y) + v_0^l \sigma_z k_z & -\Delta - \alpha_2^t (k_x^2 + k_y^2) - \alpha_2^l k_z^2 \end{pmatrix}.$$
 (10.1)

W powyższym hamiltonianie Δ to połowa przerwy energetycznej, parametry $v_0^{t,l}$ - opisują efektywne sprzężenie pasm wynikające z oddziaływania spin-orbita, $\alpha_1^{t,l}, \alpha_1^{t,l}$ - współczynniki charakteryzujące energię kinetyczną odpowiednio w paśmie przewodnictwa i walencyjnym, które są zależne od mas efektywnych elektronów i dziur. Jak widać zarówno parametry opisujące sprzężenie pasm oraz współczynniki kinetyczne wykazują anizotropię (zawierając składowe podłużne i poprzeczne). Oś z pokrywa się z kierunkiem krystalograficznym (111), a więc przechodzi przez punkt L.

Hamiltonian (10.1) opisuje spektrum energetyczne w pobliżu jednego punktu L. W przypadku rozważanej klasy półprzewodników istnieją cztery nieekwiwalentne punkty L i wkład od każdego z nich należy uwzgędnić w rachunkach. Kiedy pasma energetyczne są izotropowe $(\alpha_{1,2}^t = \alpha_{1,2}^l, v_0^t = v_0^l)$, każdy z punktów L daje jednakowy wkład do przewodnictwa i wówczas uwzględnienie wkładu od pozostałych punktów L sprowadza się do przemnożenia otrzymanych wyników przez czynnik p = 4. Jak się jednak okazuje, wiele półprzewodników IV-VI (np. PbTe, SnTe) wykazuje silną anizotropię $(v_0^t/v_0^l \simeq 10$ [165]). W przypadku bardzo silnej anizotropii wkład od pozostałych punktów L może być niewielki (przy wybranym kierunku krystalograficznym) i $p \simeq 1$. Tak, więc w ogólności spodziewamy się, że wynik otrzymany dla jednego punktu L należy przemnożyć przez pewien czynnik p, który jest liczbą z przedziału $\langle 1; 4 \rangle$. Jak już wspomnieliśmy półprzewodniki charakteryzują się dużą asymetrią parametrów związanych z masą efektywną nośników. Aby zbadać wpływ tej asymetrii, zdefiniujmy nowe parametry:

$$\alpha = \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2}, \qquad \beta = \frac{\alpha_1 - \alpha_2}{2}.$$
(10.2)

Dla przypadku pasm symetrycznych otrzymujemy wówczas $\beta^{l,t} = 0$. Hamiltonian Dimmocka zapisany przez te nowe zmienne jest postaci:

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix},$$
 (10.3)

gdzie

$$H_{11} = \Delta + \alpha^t (k_x^2 + k_y^2) + \alpha^l k_z^2 + \beta^t (k_x^2 + k_y^2) + \beta^l k_z^2, \qquad (10.4)$$

$$H_{22} = -\Delta - \alpha^t (k_x^2 + k_y^2) - \alpha^l k_z^2 + \beta^t (k_x^2 + k_y^2) + \beta^l k_z^2, \qquad (10.5)$$

$$H_{12} = H_{21} = v_0^t \left(\sigma_x k_x + \sigma_y k_y \right) + v_0^l \sigma_z k_z \,. \tag{10.6}$$

10.2 Topologiczny spinowy efekt Halla

Do wyznaczenia wkładu topologicznego do spinowego przewodnictwa holowskiego wykorzystamy formułę (1.8). Operator prędkości przyjmuje następującą postać:

$$v_{x,y} = \frac{v_0^t}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_{x,y} \\ \sigma_{x,y} & 0 \end{pmatrix} + \frac{2}{\hbar} \alpha^t k_{x,y} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} + \frac{2}{\hbar} \beta^t k_{x,y} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}.$$
 (10.7)

W obliczeniach stosujemy definicję prądu spinowego daną równaniem (1.1). Wstawiając do (1.8) jawne postaci operatorów $j_x^{s_z}$, v_y oraz funkcji Greena $G_{\mathbf{k}}(\varepsilon)$ otrzymamy w limicie $\omega \to 0$:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = -i4ev_0^{t\,2}\beta^t \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{k_x^2}{(\varepsilon - E_1 + \mu + i\delta\,\operatorname{sign}\varepsilon)^2(\varepsilon - E_2 + \mu + i\delta\,\operatorname{sign}\varepsilon)^2},\tag{10.8}$$

gdzie $E_{1,2}$ to wartości własne hamiltonianu (10.3):

$$E_1 = -\sqrt{v_0^l^2 k_z^2 + v_0^t^2 k_t^2 + (\Delta + k_z^2 \alpha^l + k_t^2 \alpha^t)^2} + k_z^2 \beta^l + k_t^2 \beta^t$$
(10.9)

$$E_2 = \sqrt{v_0^l^2 k_z^2 + v_0^t^2 k_t^2 + (\Delta + k_z^2 \alpha^l + k_t^2 \alpha^t)^2 + k_z^2 \beta^l + k_t^2 \beta^t}, \qquad (10.10)$$

gdzie $k_t^2 = k_x^2 + k_y^2$.

Już na podstawie równania (10.8) widać, że spinowe przewodnictwo holowskie znika, gdy parametr opisujący sprzężenie pasm $v_0^t = 0$. Poza tym, efekt znika, gdy $\beta^t = 0$, a więc gdy



RYSUNEK 10.1: Zależność dyspersyjna dla rozważanego modelu dla wybranych wartości parametru sprzężenia pasm v_0 . Pozostałe parametry: $\Delta = 0.05 \, eV$, $\alpha = 6 \, \hbar^2/2m_0 = 2.29 \times 10^{-19} \, \text{eV} \, \text{m}^2$, $\beta = 0.45 \, \hbar^2/2m_0 = 1.72 \times 10^{-20} \, \text{eV} \, \text{m}^2$ (m_0 -masa spoczynkowa elektronu).

wartości składowej poprzecznej (płaszczyzna (x, y)) tensora masy efektywnej dla elektronów i dziur są takie same.

SEH dla przypadku pasm izotropowych

Rozważymy najpierw przypadek pasm przestrzennie izotropowych: $v_0^l = v_0^t = v_0$, $\alpha^l = \alpha^t = \alpha$, $\beta^l = \beta^t = \beta$. Zależności dyspersyjne dla pasma walencyjnego i przewodnictwa możemy teraz zapisać następująco:

$$E_1 = -\sqrt{v_0^2 k^2 + (\Delta + k^2 \alpha)^2} + k^2 \beta = -E_0 + k^2 \beta$$
$$E_2 = \sqrt{v_0^2 k^2 + (\Delta + k^2 \alpha)^2} + k^2 \beta = E_0 + k^2 \beta.$$

Na rysunku 10.1 wykreślono spektrum energetyczne dla powyższych wyrażeń dla trzech wartości v_0 . Sprzężenie między pasmami wprowadza silniejszą nieparaboliczność pasm oraz prowadzi do redukcji gęstości stanów na poziomie Fermiego μ .

Wykonując całkowanie po ε w (10.8) otrzymujemy, że:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \sigma_{xy}^{s_z \, v} + \sigma_{xy}^{s_z \, c} \,, \tag{10.11}$$

gdzie $\sigma_{xy}^{s_z v}$, $\sigma_{xy}^{s_z c}$ reprezentują wkład od pasma walencyjnego (v) oraz pasma przewodnictwa (v) i są dane równaniem:

$$\sigma_{xy}^{s_z v,c} = \pm e v_0^2 \beta \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f(E_{v,c}) \frac{k_x^2}{E_0^3}.$$
 (10.12)

W powyższym równaniu $f(E_{v,c})$ to funkcja rozkładu Fermiego-Diraca odpowiednio dla pasma walencyjnego i przewodnictwa (dla T = 0K).



RYSUNEK 10.2: Wkład $\Delta \sigma_{xy}^{s_z}$ do spinowego przewodnictwa holowskiego jako funkcja położenia poziomu Fermiego. Zależności wykreślono dla podanych na rysunku wartości Δ . Parametry α i β wybrano jak na rys. 10.1, natomiast $v_0 = 5 \times 10^{-10} \,\mathrm{eV}\,\mathrm{m}$.

Równanie (10.11) możemy zapisać w następującej formie:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \sigma_{xy}^{0\,s_z} - \Delta \sigma_{xy}^{s_z} \,. \tag{10.13}$$

Składnik $\sigma_{xy}^{0\,s_z}$ jest wkładem do spinowego przewodnictwa holowskiego pochodzącym od całkowicie zapełnionego pasma walencyjnego, natomiast $\Delta \sigma_{xy}^{s_z}$ związany jest z pustą częścią pasma walencyjnego lub zapełnioną częścią pasma przewodnictwa i wyraża się wzorem:

$$\Delta \sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e v_0^2 \beta}{6\pi^2} \int_0^{k_F} dk \frac{k^4}{[v_0^2 k^2 + (\Delta + k^2 \alpha)^2]^{3/2}}.$$
 (10.14)

Chociaż równanie wygląda na symetryczne względem środka przerwy energetycznej, to w rzeczywistości prowadzi do asymetrycznego zachowania. Asymetria ta wynika z jawnej postaci wektora Fermiego k_F , który jest rzeczywistym i dodatnim rozwiązaniem równania:

$$(\alpha^2 - \beta^2)k_F^4 + \left(v_0^2 + 2(\alpha\Delta + \beta\mu)\right)k_F^2 + \Delta^2 - \mu^2 = 0$$
(10.15)

i ma różne wartości gdy poziom Fermiego usytuowany jest symetrycznie po przeciwnych stronach przerwy energetycznej.

Na rysunku 10.2 przedstawiony został wkład $\Delta \sigma_{xy}^{sz}$ do spinowego przewodnictwa holowskiego jako funkcja położenia poziomu Fermiego. Na rysunku widoczna jest asymetria między $\Delta \sigma_{xy}^{sz}$ dla μ leżącego w paśmie walencyjnym i $\Delta \sigma_{xy}^{sz}$ dla μ w paśmie przewodnictwa. Zgodnie z definicją $\Delta \sigma_{xy}^{sz}$ znika gdy poziom Fermiego leży w maksimum pasma walencyjego lub w minimum pasma przewodnictwa oraz wewnątrz przerwy energetycznej.

Rysunek 10.3 przedstawia $\Delta \sigma_{xy}^{s_z}$ jako funkcję parametru v_0 dla wybranych położeń poziomu Fermiego. Również na tym rysunku widoczna jest asymetria między pasmem walencyjnym i



RYSUNEK 10.3: Wkład $\Delta \sigma_{xy}^{s_z}$ do spinowego przewodnictwa holowskiego jako funkcja parametru sprzężenia v_0 , dla wybranych wartości potencjału chemicznego μ w paśmie walencyjnym (z lewej) i w paśmie przewodnictwa (z prawej). Parametry α i β wybrano jak na rys. 10.1, natomiast $\Delta = 0.05 \, {\rm eV}.$

przewodnictwa. Na przedstawionych zależnościach widzimy także, że $\Delta \sigma_{xy}^{s_z}$ osiąga maksimum dla pewnej wartości v_0 , a następnie wraz ze wzrostem parametru sprzężenia zmierza do zera. Również gdy parametr v_0 zmierza do zera przewodnictwo spinowe znika. Zachowanie to staje się zrozumiałe gdy przypomnimy sobie, że dla ustalonej wartości potencjału chemicznego μ wraz ze wzrostem v_0 zmniejsza się liczba nośników (gęstość stanów) co jest wynikiem mocniejszego odchylenia od parabolicznego charakteru zależności dyspersyjnej (por. rys.10.1).

Równanie (10.13) opisujące całkowite topologiczne spinowe przewodnictwo holowskie oprócz składnika $\Delta \sigma_{xy}^{s_z}$ zawiera również składnik $\sigma_{xy}^{0 \ s_z}$ dany równaniem:

$$\sigma_{xy}^{0\,s_z} = \frac{e\,\beta\,k_W\left(k_W^2(v_0^2 + 2\alpha\Delta) + 2\Delta\left(\Delta - v_0^4\sqrt{k_W^4\alpha^2 + \Delta^2 + k_W^2(v_0^2 + 2\alpha\Delta)}\right)\right)}{6\pi^2\,v_0^2(v_0^2 + 4\alpha\Delta)\sqrt{k_W^4\alpha^2 + \Delta^2 + k_W^2(v_0^2 + 2\alpha\Delta)}}\,,\qquad(10.16)$$

w którym k_W - wektor odcięcia, będący rozwiązaniem równania:

$$(\alpha^2 - \beta^2)k_W^4 + \left(v_0^2 + 2(\alpha\Delta - \beta W)\right)k_W^2 + \Delta^2 - W^2 = 0, \qquad (10.17)$$

gdzie W jest szerokością pasma. W limicie $\Delta \rightarrow 0$ i dla skończonej szerokości pasma otrzymujemy prostą formułę analityczną:

$$\sigma_{xy}^{0\,s_z} = \frac{ev_0^2\beta}{6\pi^2} \int_0^{k_W} dk \frac{k}{[v_0^2 + \alpha^2 k^2]^{3/2}} = \frac{ev_0\beta k_W^2}{12\pi^2 (v_0^2 + \frac{1}{2}\alpha^2 k_W^2)}.$$
(10.18)

Jeśli położymy $k_W \to \infty$, to otrzymamy:

$$\sigma_{xy}^{0\ s_z} = \frac{ev_0\beta}{6\pi^2\alpha^2}.$$
 (10.19)

SEH dla przypadku pasm przestrzennie anizotropowych

Przypadek bardziej ogólny dotyczy sytuacji, gdy pasma są przestrzennie asymetryczne. Wyrażenie opisujące wkład $\Delta \sigma_{xy}^{s_z}$ do spinowego przewodnictwa jest teraz postaci:

$$\Delta \sigma_{xy}^{s_z} = \frac{e v_0^{t^2} \beta^t}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{k_F} dk \frac{k^4 \sin^3\theta \, \cos^2\phi}{\xi(k)} \tag{10.20}$$

z funkcją $\xi(k) = [v_0^{l^2} k^2 \cos^2\theta + v_0^{t^2} k^2 \sin^2\theta + (\Delta + \alpha^l k^2 \cos^2\theta + \alpha^t k^2 \sin^2\theta)^2]^{3/2}.$

Przeskalujemy wektor falowy :

$$k'_{x} = k_{x} \frac{v_{0}^{t}}{\tilde{v}_{0}}, \quad k'_{y} = k_{y} \frac{v_{0}^{t}}{\tilde{v}_{0}}, \quad k'_{z} = k_{z} \frac{v_{0}^{l}}{\tilde{v}_{0}}; \quad \tilde{v}_{0} = [(v_{0}^{t})^{2} v_{0}^{l}]^{1/3}$$
(10.21)

i założymy dodatkowo, że spełnione są następujące relacje:

$$\frac{v_0^{t^2}}{v_0^2} \cong \frac{\alpha^t}{\alpha} \cong \frac{\beta^t}{\beta}, \quad \frac{v_0^{l^2}}{v_0^2} \cong \frac{\alpha^l}{\alpha} \cong \frac{\beta^l}{\beta}.$$

W tej sytuacji wyrażenia opisujące zależność dyspersyjną przybierają formę:

$$E_1 = -\sqrt{\tilde{v}_0^2 k'^2 + (\Delta + k'^2 \alpha)^2} + k'^2 \beta = -E'_0 + k'^2 \beta$$
$$E_2 = \sqrt{\tilde{v}_0^2 k'^2 + (\Delta + k'^2 \alpha)^2} + k'^2 \beta = E'_0 + k'^2 \beta.$$

Dokonując zamiany zmiennych całkowania w (10.20) otrzymamy:

$$\Delta \sigma_{xy}^{sz} = \frac{e v_0^{t\,3} \beta}{6\pi^2 v_0^l} \int_0^{k'_F} \frac{k'^4}{[\tilde{v}_0^2 k'^2 + (\Delta + k'^2 \alpha)^2]^{3/2}} \tag{10.22}$$

Widzimy więc, że poprzez zamianę zmiennych $(\{k_x, k_y, k_z\} \rightarrow \{k'_x, k'_y, k'_z\})$ dokonaliśmy mapowania układu z anizotropowymi pasmami na układ izotropowy, sprowadzając tym samym rachunki, do tych przedstawionych powyżej.

Podsumowanie

W rozdziale tym rozważyliśmy wkład topologiczny do SEH w półprzewodnikach IV-VI, który jest związany z wewnętrznym oddziaływaniem spin-orbita tych materiałów. Na podstawie modelu efektywnego, zaproponowanego przez Dimmocka, pokazaliśmy, że spinowe przewodnictwo holowskie dla położenia poziomu Fermiego wewnątrz przerwy energetycznej jest niezerowe.

124

Przedstawione w tym rozdziale wyrażenia, dla przypadku słabej oraz silnej anizotropii, biorą pod uwagę wkład od jednego punktu L. Wkład od pozostałych punktów L nie zmieni jakościowo otrzymanych tu wyników, pod warunkiem, że wybierzemy płaszczyznę (x, y) jako prostpadłą do kierunku krystalograficznego (111). Przypomnijmy również, że o ile obecność domieszek w układzie może silnie modyfikować spinowe przewodnictwo holowskie, związane z wkładem od stanów na poziomie Fermiego, gdy poziom ten leży wewnątrz pasma walencyjnego lub przewodnictwa, to nie zmieni on wkładu topologicznego.

Podsumowanie

Badania dotyczące indukowanych oddziaływaniem spin-orbita poprzecznych efektów transportowych cieszą się obecnie bardzo dużym zainteresowaniem, szczególnie w kontekście dalszego rozwoju elektroniki spinowej. W efektach tych upatruje się m.in. możliwość ograniczenia strat energii, zwiększenia efektywności i szybkości pracy oraz możliwość dalszej miniaturyzacji szeroko rozumianych tzw. urządzeń spintronicznych, które mają stać się wsparciem lub alternatywą dla konwencjonalnej elektroniki.

Niniejsza praca została poświęcona teoretycznym badaniom transportu spinowego indukowanego spinowym efektem Halla w wybranych modelowych układach. Badania te koncentrowały się wokół wyznaczenia i badania zachowania spinowego przewodnictwa holowskiego nie tylko w dwuwymiarowych układach, takich jak heterostruktury półprzewodnikowe, grafen i silicen, ale również w trójwymiarowym - objętościowym materiale - w półprzewodnikach IV-VI.

Praca została podzielona na cztery części. Część pierwsza (Rozdział 1 i 2) stanowi wprowadzenie w tematykę podjętą w rozprawie. W Rozdziale 1 nakreślone zostały zarówno mechanizmy prowadzące do spinowego efektu Halla oraz została wprowadzona definicja prądu spinowego i formalizm wykorzystany w obliczeniach spinowego przewodnictwa holowskiego. Rozdział 2 stanowi przegląd najważniejszych prac eksperymentalnych, w których spinowy efekt Halla został zmierzony.

Część druga niniejszej rozprawy opisuje SEH w dwuwymiarowym gazie elektronowym jako podstawowym modelu opisującym niskowymiarowe struktury półprzewodnikowe, takie jak studnie kwantowe czy heterozłącza.

Rozdział 3 dotyczy SEH w dwuwymiarowym gazie elektronowym w obecności stałego oddziaływania spin-orbita Rashby i Dresselhausa oraz domieszek. W rozdziale tym omówione zostały, w dużej mierze na podstawie własnych rachunków autora rozprawy, wyniki otrzymane wcześniej w literaturze. Rozdział ten stanowi także swego rodzaju ilustrację stosowanych w dalszych częściach pracy metod wyznaczania spinowego przewodnictwa holowskiego, opartych o równowagowy formalizm funkcji Greena oraz teorię liniowej odpowiedzi. Pokazano, że dwuwymiarowy gaz z jednorodnym oddziaływaniem spinowo-orbitalnym Rashby wykazuje, w szerokich zakresach koncentracji nośników i wartości parametru sprzężenia, stałą uniwersalną wartość spinowego przewodnictwa holowskiego. Jeśli w układzie pojawią się punktowe domieszki, to efekt ginie. Analogiczne zachowanie obserwujemy, dla przypadku 2DEG z oddziaływaniem spinorbita Dresselhausa. Jeśli domieszki generują oddziaływanie spinowo-orbitalne, wówczas wkład do spinowego przewodnictwa holowskiego dają spinowo-zależne procesy rozproszeniowe - *skew scattering* i *side jump*.

W Rozdziale 4 zaproponowany został opis SEH (oraz innych efektów transportowych zachodzących w układzie z oddziaływaniem spin-orbita) w ramach nierównowagowego formalizmu Keldysha. Metoda stanowi uogólnienie i uzupełnienie wcześniejszych teorii na przypadek dwóch powierzchni Fermiego pozwalając badać zakres silnego sprzężenia spinowo-orbitalnego. W ramach zaproponowanego formalizmu przedyskutowany został spinowy efekt Halla w obecności potencjału rozpraszającego od domieszek.

W ostatnim rozdziale dotyczącym dwuwymiarowego gazu elektronowego przedyskutowany został SEH indukowany fluktuacjami pola Rashby. Najpierw odtworzono otrzymane wcześniej w literaturze wyniki dla przypadku, gdy w układzie poza fluktuującym wokół zera polem Rashby nie ma innego oddziaływania spinowo-orbitalnego. W tej sytuacji SEH, choć nie przyjmuje uniwersalnej wartości, to jednak jest niezerowy i zależy od całkowitego oraz spinowego czasu relaksacji. Następnie omówiony został przypadek bardziej ogólny, gdy w układzie poza fluktuacjami pola Rashby (wokół zerowej wartości średniej) istnieje oddziaływanie spin-orbita typu Dresselhausa. W tej sytuacji współzawodnictwo między tymi oddziaływaniami prowadzi do wygaszenia wkładu do przewodnictwa spinowego, pochodzącego od fluktuującego pola Rashby przy odpowiednio dużym parametrze sprzężenia Dresselhausa.

Część trzecia poświęcona została SEH w grafenie i silicenie, a więc cieszącym się obecnie dużą popularnością dwuwymiarowym kryształom z grupy IVA. W części tej został szczegółowo omówiony wkład topologiczny do SEH oraz rola domieszek generujących fluktuujące pole spinowo-orbitalne.

W przypadku monowarstwy atomowej oraz podwójnej warstwy grafenu (Rozdział 6 i 7), mając na uwadze fakt, że wkład topologiczny do spinowego przewodnictwa holowskiego zależy także od stanów elektronowych poniżej poziomu Fermiego, w obliczeniach wykorzystano poza modelami efektywnymi, również model ciasnego wiązania pozwalający opisać bardziej szczegółowo spektrum energetyczne tego materiału. W przypadku topologicznego spinowego efektu Halla w atomowej monowarstwie grafenowej oraz w podwójnej warstwie grafenowej (w ułożeniu typu Bernala) z wewnętrznym oddziaływaniem spin-orbita do opisu wykorzystany został hamiltonian efektywny oraz model ciasnego wiązania. Spinowe przewodnictwo holowskie w monowarstwie atomowej przyjmuje stałą i skwantowaną wartość wewnątrz przerwy energetycznej, natomiast dla położenia poziomu Fermiego μ w paśmie walencyjnym lub przewodnictwa spinowe przewodnictwo holowskie zachowuje się symetrycznie względem zmiany znaku $\mu \rightarrow -\mu$ oraz zmierza do zera dla dużych wartości $|\mu|$. Podobne zachowanie wykazuje spinowe przewodnictwo holowskie dla podwójnej warstwy grafenowej. W tym przypadku skwantowana wartość spinowego przewodnictwa wewnątrz przerwy energetycznej jest dwa razy większa niż w przypadku monowarstwy grafenu. Pokazane zostało także, że wyniki dla spinowego przewodnictwa holowskiego w pojedynczej i podwójnej warstwie grafenu z wewnętrznym oddziaływaniem spin-orbita otrzymane w ramach modelu ciasnego wiązania i modelu efektywnego są niemalże identyczne.

Omówiony został także przypadek podwójnej warstwy grafenowej w obecności napięcia bramkującego przyłożonego prostopadle do płaszczyzny warstw. W tej sytuacji obserwuje się pewne kwantowe przejście fazowe od tzw. spinowego izolatora (dla którego spinowe przewodnictwo holowskie dla poziomu Fermiego wewnątrz przerwy energetycznej wynosi $\sigma_{xy}^{s_z} = -4e/4\pi$) do fazy konwencjonalnego izolatora ($\sigma_{xy}^{s_z} = 0$ dla położenia poziomu Fermiego wewnątrz przerwy energetycznej). W przypadku podwójnej warstwy grafenu, w ramach niskoenergetycznego modelu efektywnego, zbadany został także przypadek, w którym każda warstwa grafenowa posiada inną wartość stałej oddziaływania spin-orbita. Współzawodnictwo pomiędzy przykładanym napięciem i asymetrią w sprzężeniu spin-orbita prowadzi do wyraźnej asymetrii w zachowaniu się zależności holowskiego przewodnictwa spinowego w funkcji wartości potencjału chemicznego. W tej sytuacji również obserwuje się przejście od fazy spinowego izolatora do fazy konwencjonalnego izolatora.

W przypadku monowarstwy grafenu z oddziaływaniem spin-orbita typu Rashby (gdy wewnętrzne oddziaływanie spin-orbita jest zaniedbywalnie małe) obserwuje się pewną różnicę w wynikach na holowskie przewodnictwo spinowe otrzymanych na podstawie modelu ciasnego wiązania i modelu Kane'a. W modelu ciasnego wiązania obserwuje się dodatkowy skok i zmianę znaku przewodnictwa spinowego gdy poziom Fermiego przechodzi przez lokalne ekstrema zależności dyspersyjnej w okolicy punktu M strefy Brillouina. W obu modelach obserwujemy asymetryczne zachowanie spinowego przewodnictwa holowskiego względem zmiany znaku potencjału chemicznego.

W ramach modelu Kane'a, przeanalizowana została także sytuacja, gdy oba oddziaływania spinowo-orbitalne są niezerowe. W tym przypadku współzawodnictwo obu oddziaływań prowadzi do anomalnego zachowania spinowego przewodnictwa holowskiego w funkcji położenia poziomu Fermiego. W szczególności, dla pewnego zakresu parametrów oddziaływań spin-orbita, spinowe przewodnictwo holowskie wykazuje osobliwość dla $\mu = \Delta_{so}$.

W Rozdziale 8 omówiony został SEH w grafenie indukowany fluktuacjami oddziaływania spin-orbita Rashby. W rozważaniach wykorzystane zostały dwie funkcje korelacji dla parametru oddziaływania Rashby uwzględniające dwie różne sytuacje fizyczne. Jedna z tych funkcji opisuje fluktuacje indukowane pofałdowaną strukturą swobodnej warstwy grafenowej, natomiast drugi korelator modeluje sytuację gdy domieszki są rozmieszczone przypadkowo na powierzchni grafenu oraz pomiędzy podłożem i warstwą grafenową. Pokazano, że w sytuacji gdy oddziaływanie Rashby jako średnia przestrzenna znika, spinowe przewodnictwo holowskie wynosi $(e/4\pi)(\tau/\tau_s)$ niezależnie od formy korelatora i tylko w przypadku gdy całkowity czas relaksacji jest równy czasowi relaksacji związanemu z odwróceniem spinu, to spinowe przewodnictwo holowskie osiąga stałą wartość równą $e/4\pi$. Otrzymane wyniki pokazują, że o ile rozpraszanie na domieszkach osłabia spinowy efekt Halla, to jednak nie wygasza go całkowicie.

Na zakończenie części trzeciej, w Rozdziale 9, rozważony został SEH w dwuwymiarowym krysztale krzemu - silicenie. Atomy, krzemu tworzą strukturę typu plastra miodu, przy czym dwie trójkątne podsieci tworzące tą strukturę są rozsunięte przestrzennie, w kierunku prostopadłym do płaszczyzny kryształu. To sprawia, że zależność dyspersyjna silicenu może być kontrolowana elektrycznie, dzięki przyłożeniu do jego podsieci różnicy potencjałów. Rozważony został SEH w silicenie z wewnętrznym oddziaływaniem spin-orbita oraz w obecności napięcia bramkującego. Rachunki zostały przeprowadzone w ramach modelu niskoenergetycznego, co umożliwiło otrzymanie wyników analitycznych. Pokazano, że przy zaniedbywalnie małym oddziaływaniu Rashby, spinowe przewodnictwo holowskie przyjmuje skwantowaną wartość, gdy poziom Fermiego, μ , leży wewnątrz przerwy energetycznej i wynosi, podobnie jak w monowarstwie grafenowej, $-2e/4\pi$. Jeśli poziom Fermiego leży w paśmie walencyjnym lub przewodnictwa, to spinowe przewodnictwo zanika wraz ze wzrostem wartości $|\mu|$. Gdy przyłożyne jest napięcie bramkujące, zaobserwowano przejście z fazy spinowego izolatora do fazy klasycznego izolatora - dla wartości napięć większych od pewnej wartości krytycznej. Takie zachowanie spinowego przewodnictwa holowskiego jest podobne do zachowania zaobserwowanego w podwójnej warstwie grafenowej.

Ostatnia część rozprawy, Rozdział 10, dotyczy topologicznego wkładu do spinowego przewodnictwa holowskiego w półprzewodnikach IV-VI. Półprzewodniki te należą do grupy półprzewodników z wąską przerwą energetyczną i silnym oddziaływaniem spinowo-orbitalnym. Zależność dyspersyjna w pobliżu punktu L strefy Brillouina ma liniowy charakter. Jest to jedyny rozdział w niniejszej rozprawie, w którym rozważony został transport spinowy w układzie trójwymiarowym. Wyniki pokazują, że półprzewodniki te należą do grupy izolatorów spinowych, wykazując niezerowe spinowe przewodnictwo holowskie gdy poziom Fermiego znajduje się wewnątrz przerwy energetycznej, stanowiąc potwierdzenie postawionej na ten temat hipotezy.

Na zakończenie należy zauważyć, że przedstawione tu wyniki nie wyczerpują podjętego tematu. Na dalsze badania zasługuje m.in. podwójna warstwa grafenowa oraz silicen z oddziaływaniem spin-orbita Rashby. Również wpływ fluktuacji oddziaływania spin-orbita na SEH nie jest jeszcze zbadany w pełni. Spinowy efekt Halla stał się punktem wyjścia do dalszych badań nad spinowo-zależnymi poprzecznymi efektami transportowymi. Na uwagę zasługują tu między innymi indukowane temperaturą "efekty Halla". Wśród tych efektów wyróżnić można np. anomalny i spinowy efekt Nernsta. Interesujący wydaje się być także indukowany termicznie magnonowy efekt Halla. Autorka niniejszej rozprawy jest obecnie w trakcie obliczeń niektórych z wymienionych tu problemów, natomiast pozostałymi ma nadzieję zająć się w najbliższej przyszłości.

Summary

At the beginning of the seventies Dyakonov and Perel showed that a system with strong spin-orbit interaction should reveal transverse spin current and spin accumulation in the presence of external electric field. This phenomenon is now called the spin Hall effect (SHE).

The spin Hall effect strongly depends on the type of spin-orbit coupling and may be either of intrinsic or extrinsic origin. The extrinsic SHE is associated with scattering mechanisms (skew scattering and side jump) on impurities and other defects, while the intrinsic SHE is a consequence of a nontrivial trajectory of charge carriers in the momentum space due to the spin-orbit contribution of a perfect crystal lattice to the corresponding band structure. This contribution to SHE will be referred to as the topological one. Spin current originating from the topological SHE might be dissipationless. Under these circumstances, research on a new class of materials, the so-called spin insulators, has been initiated. In spin insulators it is possible to observe spin current even if chemical potential is inside an energy gap.

The aim of this thesis is a theoretical analysis of spin Hall effect in some model systems, like two dimensional electron gas, atomic monolayer of graphene and silicene, bilayer graphene and IV-VI semiconductors. The research has been focused on the examination of how various types of spin-orbit interactions in pure systems (without impurities or defects) affect spin transport (spin Hall conductivity), and how the presence of impurities modifies the spin Hall current.

The thesis consist of four parts. The first part contains introductory remarks. The Chapter 1 is about the spin Hall effect and its microscopic origin. There are also some remarks on the definition of spin current and formalism used in this thesis. The Chapter 2 is an overview of the experimental research on the spin Hall effect.

The Part II (chapters 3-5) is devoted to spin Hall effect in two-dimensional electron gas. In Chapter 3 the intrinsic spin Hall effect due to constant (spatially uniform) Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling is discussed. The role of impurities is also considered in this chapter. The results obtained in Chapter 3 are well known from earlier theoretical works, but have been obtained by a different method. This chapter is aimed at presenting more precisely the formalism (formula (1.8), the Kubo-Streda formula, the Feynman diagrams) that is used in further parts of the thesis. The Chapter 4 contains reformulated Keldysh method that may be applied to system with well separated Fermi surfaces for spin-up and spin-down electrons. To check this formalism it was applied to the problem of spin Hall effect in two-dimensional electron gas with constant Rashba coupling and in the presence of impurities. The Chapter 5 is devoted to spin Hall effect in the presence of fluctuating Rashba field. After discussion of results available in recent literature, this chapter includes analysis of the two-dimensional electron gas with constant Dresselhaus coupling and random Rashba field. The Kubo formalism and Feynman diagrams for the Green functions have been used to solve this problem. It is shown (fig.5.4) that the contribution to spin Hall conductivity due to random Rashba field is a linear function of the parameter R (describing correlation length of the field) in the limit of long-range correlations, but in the case of short-range correlations it is suppressed and vanishes as R^2 . It is also shown that this contribution is suppressed for sufficiently strong Dresselhaus spin-orbit coupling.

The third part of this thesis treats of spin Hall effect in atomic monolayer graphene, bilayer graphene (so called AB and AA stacking) and two-dimensional lattice of silicon atoms - silicene. In Chaters 6 and 7, among others, the topological spin Hall effect in a single-layer and bilayer graphene in Bernal stacking with intrinsic spin-orbit interaction is considered. To describe the relevant electronic spectrum, simplified effective Hamiltonians as well as the full tight-binding Hamiltonians have been assumed. Spin Hall conductivities obtained in both models almost coincide both for the monolayer graphene as well as for the bilayer graphene (with AB stacking). Thus, to describe intrinsic SHE in these systems one may take the effective Hamiltonians that allow derivation of some analytical results. For the Fermi level in the energy gap of a bilayer graphene the spin Hall conductivity is twice as large as that for a single-layer graphene. When external voltage is applied between the two atomic sheets, one finds a transition from the spin Hall insulator phase to the conventional insulator. This transition is depicted in fig. 7.3. As voltage increases, the range of quantized spin Hall conductivity shrinks and at some value of V there is a transition from the spin hall conductivity equal to $-4(e/4\pi)$ to the spin hall conductivity equal to 0. The possibility of different spin-orbit coupling parameters in the two atomic sheets in the framework of low-energy effective Hamiltonian has been considered in Chapter 7. In this case the interplay of the effects due to the vertical voltage V and asymmetry in the spin-orbit coupling leads to some asymmetry in conductivity with respect to the sign reversal of the Fermi level. This asymmetry appears due to the asymmetry of the energy spectrum with respect to the reflection in the plane E = 0. As in the case with equal spin-orbit parameters, the similar transition from the spin Hall insulator phase to the conventional insulator behavior is observed (figs. 7.7,7.8). At the end of Chapter 7 the case of AA stacking bilayer graphene is discussed. The spin Hall effect due to a constant Rashba coupling in single layer graphene is studied in Chapter 6. Some difference between the spin Hall conductivity obtained in the tight binding model and that obtained for the Kane Hamiltonian is observed in this case (fig. 6.6). However, in the close neighborhood of the Dirac points, the approach based on the effective Hamiltonian is justified. In the framework of the Kane Hamiltonian, the topological contribution to the spin Hall effect assuming both intrinsic and Rashba spin-orbit interaction is also calculated. Chapter 8 concerns the spin Hall effect created by fluctuating Rashba spin-orbit interaction. When the Rashba parameter vanishes on average, it is shown that the spin Hall conductivity is nonzero (figs. 8.2, 8.3) and depends on the total and spin relaxation times. Based on this calculation it is evident that potential scattering by defects suppresses the spin Hall effect but does not suppress it to zero. In Chapter 9 it is shown that in silicene with an external gate voltage there is a transition from the spin Hall insulator phase (with quantized spin Hall conductivity when the Fermi level is inside the energy gap) at low bias to the conventional insulator behavior at higher voltages (with zero spin Hall conductivity when Fermi level is inside the gap) - similar to the transition observed in the case of bilayer graphene (figs. 9.2, 9.3).

The last part concerns the spin Hall effect in three-dimensional system like IV-VI semiconductors. The topological spin Hall conductivity is calculated using linear response theory and equilibrium Green functions. Due to strong spin-orbit interaction and peculiar electronic spectrum in this class of semiconductors, the spin Hall conductivity is nonzero even if the Fermi level lies inside the energy gap. Thus, according with earlier predictions, IV-VI semiconductors are spin insulators.

Dodatek A

Wkład topologiczny do SEH w 2DEG: formuła Kubo-Stredy

W Rozdziale 3 omówiony został wkład topologiczny do spinowego przewodnictwa holowskiego dla dwuwymiarowego gazu elektronowego ze stałym oddziaływaniem spin-orbita Rashby i Dresselhausa. Na podstawie formuły (1.8) otrzymaliśmy znane z literatury wyrażenia (3.26), (3.29) i (3.33).

Wyrażenie (1.8) jest równoważne z formułą Kubo-Stredy i daje te same wyniki. W niniejszym dodatku przeanalizujemy 2DEG z oddziaływaniem spin-orbita typu Rashby stosując formułę Kubo-Stredy i przedyskutujemy sens fizyczny wkładu topologicznego do SEH.

Efektywny hamiltonian jednocząstkowy dla 2DEG z oddziaływaniem Rashby jest postaci:

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \alpha (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x), \qquad (A.1)$$

a jego wartości własne wynoszą:

$$E_{k\pm} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \alpha k \,. \tag{A.2}$$

Funkcja Greena odpowiadająca (A.1) jest postaci:

$$G_{\mathbf{k}}^{R}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon - \frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m} + \alpha(\sigma_{x}k_{y} - \sigma_{y}k_{x})}{(\varepsilon - E_{k+} + i0^{+})(\varepsilon - E_{k-} + i0^{+})}$$
(A.3)

i może być zapisana w następującej formie:

$$G_{\mathbf{k}}^{R}(\varepsilon) = G_{\mathbf{k}0}^{0R}(\varepsilon)\sigma_{0} + G_{\mathbf{k}x}^{R}(\varepsilon)\sigma_{x} + G_{\mathbf{k}y}^{R}(\varepsilon)\sigma_{y}$$
(A.4)

gdzie:

$$G_{\mathbf{k}0}^{R}(\varepsilon) = \frac{1}{2} \left(G_{\mathbf{k}+}^{R}(\varepsilon) + G_{\mathbf{k}-}^{R}(\varepsilon) \right) , \qquad (A.5)$$

$$G_{\mathbf{k}x}^{R}(\varepsilon) = \frac{1}{2}\sin(\phi) \left(G_{\mathbf{k}+}^{R}(\varepsilon) - G_{\mathbf{k}-}^{R}(\varepsilon) \right) , \qquad (A.6)$$

$$G^{R}_{\mathbf{k}y}(\varepsilon) = -\frac{1}{2}\cos(\phi) \left(G^{R}_{\mathbf{k}+}(\varepsilon) - G^{R}_{\mathbf{k}-}(\varepsilon) \right) , \qquad (A.7)$$

przy czym:

$$G^{R}_{\mathbf{k}\pm} = \frac{1}{\varepsilon - E_{k\pm} + i0^{+}}.$$
 (A.8)

Zakładając obecność domieszek, które wprowadzają punktowy, krótkozasięgowy potencjał rozpraszający (jak w podrozdziale 3.4.1) obliczamy w pierwszym przybliżeniu Borna energię własną:

$$\Sigma_{\mathbf{k}}^{R} = n_{i} V_{0}^{2} \int \frac{d^{2} \mathbf{k}}{(2\pi)^{2}} G_{\mathbf{k}}^{R}(\varepsilon) \,. \tag{A.9}$$

Powyższe wyrażenie przyjmuje prostą analityczną formę:

$$\Sigma_{\mathbf{k}}^{R} = -\frac{i}{4} n_{i} V_{0}^{2} (\nu_{+} + \nu_{-}) \sigma_{0} = -i \Gamma \sigma_{0} , \qquad (A.10)$$

gdzie $\nu_{\pm} = \frac{mk}{\hbar^2 k \pm \alpha m}$ to gęstości stanów odpowiednio dla podpasma E_{\pm} , a n_i - koncentracja domieszek. Uśrednioną po konfiguracjach funkcję Greena wyznaczamy z zależności:

$$\left[\mathcal{G}^{R}\right]^{-1} = \varepsilon - H = \varepsilon - H_{0} - \Sigma^{R} = \left[G^{R}\right]^{-1} - \Sigma^{R}$$
(A.11)

i otrzymujemy:

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}}^{R}(\varepsilon) = \frac{\left(\varepsilon - \frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m} + i\Gamma\right)\sigma_{0} + \alpha(\sigma_{x}k_{y} - \sigma_{y}k_{x})}{\left(\varepsilon - E_{k+} + i\Gamma\right)\left(\varepsilon - E_{k-} + i\Gamma\right)}.$$
(A.12)

Tak jak poprzednio

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}}^{R}(\varepsilon) = \mathcal{G}_{\mathbf{k}0}^{R}(\varepsilon)\sigma_{0} + \mathcal{G}_{\mathbf{k}x}^{R}(\varepsilon)\sigma_{x} + \mathcal{G}_{\mathbf{k}y}^{R}(\varepsilon)\sigma_{y}$$
(A.13)

gdzie:

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}0}^{R}(\varepsilon) = \frac{1}{2} \left(\mathcal{G}_{\mathbf{k}+}^{R}(\varepsilon) + \mathcal{G}_{\mathbf{k}-}^{R}(\varepsilon) \right) , \qquad (A.14)$$

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}x}^{R}(\varepsilon) = \frac{1}{2}\sin(\phi)\left(\mathcal{G}_{\mathbf{k}+}^{R}(\varepsilon) - \mathcal{G}_{\mathbf{k}-}^{R}(\varepsilon)\right), \qquad (A.15)$$

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}y}^{R}(\varepsilon) = -\frac{1}{2}\cos(\phi) \left(\mathcal{G}_{\mathbf{k}+}^{R}(\varepsilon) - \mathcal{G}_{\mathbf{k}-}^{R}(\varepsilon) \right) , \qquad (A.16)$$

natomiast

$$\mathcal{G}^{R}_{\mathbf{k}\pm} = \frac{1}{\varepsilon - E_{k\pm} + i\Gamma} \,. \tag{A.17}$$

Na podstawie (A.1) otrzymujemy wyrażenia na operatory prędkości:

$$v_x = \frac{\hbar}{m} k_x \sigma_0 - \frac{\alpha}{\hbar} \sigma_y \qquad v_y = \frac{\hbar}{m} k_x \sigma_0 + \frac{\alpha}{\hbar} \sigma_x \,.$$
 (A.18)

Operator gęstości prądu spinowego, zgodnie z definicją (1.1), przyjmuje postać:

$$\hat{j}_x^{s_z} = \frac{\hbar^2}{2m} k_x \sigma_z \,. \tag{A.19}$$

Tak więc szukamy wkładu topologicznego do spinowego przewodnictwa holowskiego na podstawie formuły Kubo-Stredy:

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \sigma_{xy}^{s_z I} + \sigma_{xy}^{s_z II} . \tag{A.20}$$

Zgodnie z poczynionymi w Rozdziale 1 uwagami, $\sigma_{xy}^{s_z I}$ sprowadza się w zasadzie do obliczenia $\sigma_{xy}^{s_z I(a)}$, które dane jest równaniem (1.11). Stosując diagramowy rachunek zaburzeń Feynmana możemy zapisać:

$$\sigma_{xy}^{s_z I} \approx \sigma_{xy}^{s_z I(a)} = \sigma_{xy}^{s_z Ip} + \sigma_{xy}^{s_z Id} + \sigma_{xy}^{s_z SJ} + \sigma_{xy}^{s_z SS}, \qquad (A.21)$$

Kolejne składniki w powyższym równaniu, to odpowiednio wkład od diagramu podstawowego, wkład od sumy diagramów drabinkowych, diagramy związane z procesem typu *side jump* i *skew scattering*. Diagramy te przedstawione zostały w Rozdziale 1 na rysunku 1.3. Wkład topologiczny do SEH, to wkład, który nie jest związany z procesami rozpraszania, a więc: $\sigma_{xy}^{s_z Ip} + \sigma_{xy}^{s_z II}$.

Rozważmy najpierw składnik $\sigma_{xy}^{s_z\,II},$ który zgodnie z (1.13) jest postaci $^1\!\!:$

$$\sigma_{xy}^{s_z II} = \frac{e\hbar}{4\pi} \int d\varepsilon f(\varepsilon) \operatorname{Tr} \left\{ \hat{j}_x^{s_z} G^R(\varepsilon) v_y \frac{\partial G^R(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} - j_x^{s_z} \frac{\partial G^R(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v_y G^R(\varepsilon) - j_x^{s_z} \frac{\partial G^A(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v_y G^A(\varepsilon) + j_x^{s_z} G^A(\varepsilon) v_y \frac{\partial G^A(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right\}.$$
(A.22)

Wykorzystując (A4)-(A8) oraz fakt, że

$$\frac{\partial G_{\pm}}{\partial \varepsilon} = -G_{\pm}^2 \,, \tag{A.23}$$

oraz

$$G_{+}^{R}G_{-}^{R}(G_{+}^{R}-G_{-}^{R}) - G_{+}^{A}G_{-}^{A}(G_{+}^{A}-G_{-}^{A}) = 2i\operatorname{Im}\left\{G_{+}^{R}G_{-}^{R}(G_{+}^{R}-G_{-}^{R})\right\}$$
(A.24)

dostajemy:

$$\sigma_{xy}^{s_z II} = -\frac{e\hbar^2}{2\pi} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi^2)} \int d\varepsilon \frac{\alpha k}{m} \cos^2(\phi) f(\varepsilon) \operatorname{Im} \left\{ G_{\mathbf{k}+}^R G_{\mathbf{k}-}^R (G_{\mathbf{k}+}^R - G_{\mathbf{k}-}^R) \right\} \,. \tag{A.25}$$

¹Ponieważ, zgodnie z tym co zostało napisane w Rozdziale 1, w limicie niskiej koncentracji domieszek tylko wolny od domieszek wkład do $\sigma_{xy}^{s_z II}$ jest istotny, więc od razu zamiast funkcji \mathcal{G} położono funkcje G

Po zapisani
u G^R_\pm w jawnej postaci powyższe wyrażenie daje się zapisać w następującej formie:

$$\sigma_{xy}^{s_z II} = -\frac{e\hbar^2}{2\pi} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi^2)} \int d\varepsilon \frac{\alpha k}{m} \cos^2(\phi) f(\varepsilon) (E_{k+} - E_{k-}) \\ \times \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{(\varepsilon - E_{k+} + i\delta)^2 (\varepsilon - E_{k-} + i\delta)^2} \right\}.$$
(A.26)

Wykonując całkowania po ε dostajemy:

$$\sigma_{xy}^{s_z II} = -\frac{e\hbar^2}{2\pi} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi^2)} \frac{\alpha k}{m} \cos^2(\phi) (E_{k+} - E_{k-}) \\ \times \left[\operatorname{Im} \left\{ \frac{\pi \delta(E_{k+} - \mu)}{(E_{k+} - E_{k-})^2} + \frac{\pi \delta(E_{k-} - \mu)}{(\varepsilon - E_{k-} + i\delta)^2} \right\} \\ - \frac{2}{(E_{k+} - E_{k-})^3} \operatorname{Im} \left\{ \ln(E_{k+} - \mu - i\delta) - \ln(E_{k-} - \mu - i\delta) \right\} \right] \\ = \mathcal{I}_1 + \mathcal{I}_2.$$
(A.27)

Całkując po wektorze falowym otrzymamy ostatecznie, że

$$\mathcal{I}_1 = -\frac{e}{8\pi} = -\mathcal{I}_2 \,. \tag{A.28}$$

W związku z tym:

$$\sigma_{xy}^{s_z II} = 0. (A.29)$$

Czyli, dla dwuwymiarowego gazu elektronowego z oddziaływaniem spin-orbita Rashby $\sigma_{xy}^{s_z II}$, a więc składnik związany z topologią struktury pasmowej, który zależy od stanów poniżej poziomu Fermiego, znika.

Obliczmy teraz wkład od diagramu podstawowego:

$$\sigma_{xy}^{s_z Ip} = \frac{e\hbar}{2\pi} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \operatorname{Tr}\{j_x^{s_z} \mathcal{G}^R(\mu) v_y \mathcal{G}^A(\mu)\}.$$
(A.30)

Wyrażenie to przyjmuje postać:

$$\sigma_{xy}^{s_z Ip} = i \frac{e\hbar^2}{4\pi} \int \frac{dkk}{2\pi} \frac{\alpha k}{2m} \left(\mathcal{G}_{\mathbf{k}+}^R(\mu) \mathcal{G}_{\mathbf{k}-}^A(\mu) - \mathcal{G}_{\mathbf{k}-}^R(\mu) \mathcal{G}_{\mathbf{k}+}^A(\mu) \right) \,. \tag{A.31}$$

Ponieważ całka:

$$\frac{1}{2\pi} \int dk k \frac{\alpha k}{2m} \left(\mathcal{G}_{\mathbf{k}+}^{R}(\mu) \mathcal{G}_{\mathbf{k}-}^{A}(\mu) - \mathcal{G}_{\mathbf{k}-}^{R}(\mu) \mathcal{G}_{\mathbf{k}+}^{A}(\mu) \right) = -i \frac{1}{4m} (\nu_{+} + \nu_{-}), \qquad (A.32)$$

gdzie w powyższym wyrażeniu ν_{\pm} są gęstościami stanów na poziomie Fermiego. Wykonując drobne przekształcenia algebraiczne otrzymamy:

$$\sigma_{xy}^{s_z Ip} = \frac{e}{8\pi}.\tag{A.33}$$

Widać więc, że wkład topologiczny do spinowego przewodnictwa holowskiego

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \sigma_{xy}^{s_z Ip} + \sigma_{xy}^{s_z II} = \frac{e}{8\pi} \,. \tag{A.34}$$

Otrzymaliśmy identyczny wynik, jak w Rozdziale 3, gdzie stosowaliśmy formułę (1.8). Na podstawie powyższych rachunków widoczne jest od razu pochodzenie uniwersalnej wartości spinowego przewodnictwa holowskiego w omawianym modelu. Tak zwany wkład topologiczny związany jest w ogólności z wkładem $\sigma_{xy}^{s_z II}$ generowanym przez topologię struktury pasmowej (mającym czysto kwantowy charakter) oraz wkładem do spinowego przewodnictwa (nie zależnym od procesów rozproszeniowych) pochodzącym od stanów elektronowych na poziomie Fermiego. Ponieważ w przypadku 2DEG $\sigma_{xy}^{s_z II}$ znika, nie dziwi więc tak silna - prowadząca do całkowitego wygaszania efektu - odpowiedź spinowego przewodnictwa holowskiego na obecność domieszek w układzie.

Lista publikacji

- A. Dyrdał, V. K. Dugaev and J. Barnaś, Anomalous Hall effect in IV-VI magnetic semiconductors, Phys. Rev. B 78, 245208 (2008)
- A. Dyrdał, V. K. Dugaev, J. Barnaś, B. Brodowska, W. Dobrowolski, Anomalous Hall Effect in IV - VI Semiconductors, Acta Phys. Pol. A 115, 7 (2009)
- A. Dyrdał, V. K. Dugaev, J. Barnaś, Spin Hall Effect in IV VI semiconductors, Europhys. Lett. 85, 67004 (2009)
- A. Dyrdał and V. K. Dugaev and J. Barnaś, Spin Hall effect in a system of Dirac fermions in the honeycomb lattice with intrinsic and Rashba spin-orbit interaction, Phys. Rev. B 80, 155444 (2009)
- A. Dyrdał, J. Barnaś, Intrinsic Spin Hall and Spin Nernst Effects in Single-Layer Graphene: Tight-Binding vs. Effective Model, Acta Phys. Pol. A 121, 1198 (2012)
- A. Dyrdał, J. Barnaś, Intrinsic contribution to spin Hall and spin Nernst effects in a bilayer graphene, J. Phys.: Condens. Matter 24, 275302 (2012)
- A. Dyrdał, J. Barnaś, Intrinsic spin Hall effect in silicene: transition from spin Hall to normal insulator, Phys. Status Solidi Rapid Research Lett. 6, 340 (2012)
- A. Dyrdał and J. Barnaś, Spin Hall effect in graphene due to random Rashba field, Phys. Rev. B 86, 161410(R) (2012)
- A. Dyrdał, J. Barnaś, Spin Hall Effect in a Two-Dimensional Electron Gas with Constant Dresselhaus and Random Rashba Spin-Orbit Interactions, Acta Phys. Pol. A 122, 1016 (2012)
- A. Dyrdał, J. Barnaś, V. I. Ivanov and V. K. Dugaev, Spin Hall effect in a two-dimensional electron gas with Rashba spin-orbit interaction: semiclassical Keldysh approach, Acta Phys. Pol. A 122, 1059 (2012)
- A. Dyrdał, J. Barnaś, Intrinsic Spin Hall and Spin Nernst effect in monolayer and bilayer graphene, J. Nanosci. Nanotechnol. 12, 9051 (2012)

Bibliografia

- [1] E. Hall, On the "Rotational Coefficient" in nickel and cobalt, Phil. Mag. 12, 157 (1881).
- M. I. Dyakonov and V. I. Perel, Possibility of orienting electron spins with current, ZhETF Pis. Red. 13, 657 (1971).
- [3] M. I. Dyakonov and V. I. Perel, Phys. Lett. A 35, 459 (1971).
- [4] J. E. Hirsch, Spin Hall effect, Phys. Rev. Lett. 83, 1834 (1999).
- [5] R. Karplus and J. Luttinger, Hall Effect in Ferromagnetics, Phys. Rev. 95, 1154 (1954).
- [6] M. V. Berry, Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes, Proc. R. Soc. London, Ser. A 392, 45 (1984).
- [7] G. Sundaram and Q. Niu, Wave-packet dynamics in slowly perturbed crystals: Gradient corrections and Berry-phase effects, Phys. Rev. B 59, 14915 (1999).
- [8] J. Smit, The spontaneous hall effect in ferromagnetics I, Physica (Amsterdam) 21, 877 (1955).
- [9] J. Smit, The spontaneous hall effect in ferromagnetics II, Physica (Amsterdam) 24, 39 (1958).
- [10] L. Berger, Side-Jump Mechanism for the Hall Effect of Ferromagnets, Phys. Rev. B 2, 4559 (1970).
- [11] L. Berger, Application of the Side-Jump Model to the Hall Effect and Nernst Effect in Ferromagnets, Phys. Rev. B 5, 1862 (1972).
- [12] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, Observation of the spin Hall effect in semiconductors, Science 306, 1910 (2004).
- [13] L. Liu, T. Moriyama, D. C. Ralph, and R. A. Buhrman, Spin-Torque Ferromagnetic Resonance Induced by the Spin Hall Effect, Phys. Rev. Lett. 106, 036601 (2011).
- [14] K. Uchida, S. Takahashi, K. Harii, J. Ieda, W. Koshibae, K. Ando, S. Meakawa, and E. Saitoh, Observation of the spin Seebeck effec, Nature 455, 778 (2008).
- [15] S. Murakami, N. Nagaosa, and S.-C. Zhang, Spin-Hall Insulator, Phys. Rev. Lett. 93, 156804 (2004).
- [16] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, *Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells*, Science **318**, 766 (2007).
- [17] L. Fu and C. L. Kane, Topological insulators with inversion symmetry, Phys. Rev. B 76, 045302 (2007).
- [18] X.-L. Qi, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, Topological field theory of time-reversal invariant insulators, Phys. Rev. B 78, 195424 (2008).
- [19] D. Xiao, Y. Yao, Z. Fang, and Q. Niu, Berry-Phase Effect in Anomalous Thermoelectric Transport, Phys. Rev. Lett. 97, 026603 (2006).
- [20] S. Zhang, S. Tewari, and S. D. Sarma, Berry-phase-mediated topological thermoelectric transport in gapped single and bilayer graphene, Phys. Rev. B 79, 245424 (2009).
- [21] C.-P. Chuu, M.-C. Chang, and Q. Niu, Semiclassical dynamics and transport of the Dirac spin, Solid State Commun. 150, 533 (2010).
- [22] Y. Onose, T. Ideue, H. Katsura, Y. Shiomi, N. Nagaosa, and Y. Tokura, Observation of the Magnon Hall Effect, Science 329, 297 (2010).
- [23] E. Hall, On a New Action of the Magnet on Electric Currents, Amer. J. Math. 2, 287 (1879).
- [24] N. Nagaosa, A New State of Quantum Matter, Science 318, 758 (2007).
- [25] N. A. Sinitsyn, Semiclassical theories of the anomalous Hall effect, J. Phys.:Cond. Matt. 20, 023201 (2008).
- [26] N. Nagaosa, J. Sinova, S. Onoda, A. H. MacDonald, and N. P. Ong, Anomalous Hall Effect, Rev. Mod. Phys. 82, 1539 (2010).
- [27] A. Crepieux and P. Bruno, Theory of the anomalous Hall effect from the Kubo formula and the Dirac equation, Phys. Rev. B 64, 014416 (2001).
- [28] M. I. Dyakonov and A. V. Khaetskii, Spin Hall effect, in *Spin Physics in Semiconductors*, edited by M. I. Dyakonov, chapter 8, Springer, Berlin, 2008.
- [29] H. A. Engel, E. I. Rashba, and B. I. Halperin, Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials, in Spintronics and Magnetoelectronics, edited by H. Kronmuller and S. Parkin, volume 5, John Willey, New York, 2007.
- [30] G. Vignale, Ten Years of Spin Hall Effect, J. Supercond. Nov. Magn. 23, 3 (2010).

- [31] P. Nozieres and C. Lewiner, A simple theory of the anomalous Hall effect in semiconductors, J. Phys. (Paris) 34, 901 (1973).
- [32] N. F. Mott, The electrical conductivity of transition metals, Proc. Roy. Soc. (London) A 153, 699 (1936).
- [33] I. Zutić, J. Fabian, and S. D. Sarma, Spintronics: Fundamentals and applications, Rev. Mod. Phys. 76, 323 (2004).
- [34] J. F. Gregg, I. Petej, E. Jouguelet, and C. Dennis, Spin electronics a review, J. Phys. D: Appl. Phys. 35, R121 (2002).
- [35] J. Shi, P. Zhang, D. Xiao, and Q. Niu, Proper Definition of Spin Current in Spin-Orbit Coupled Systems, Phys. Rev. Lett. 96, 076604 (2006).
- [36] S. Murakami, N. Nagaosa, and S. C. Zhang, Dissipationless Quantum Spin Current at Room Temperature, Science 301, 1348 (2003).
- [37] J. Sinova, D. Culcer, Q. Niu, N. A. Sinitsyn, T. Jungwirth, and A. H. MacDonald, Universal Intrinsic Spin Hall Effect, Phys. Rev. Lett. 92, 126603 (2004).
- [38] J. Schliemann and D. Loss, Dissipation effects in spin-Hall transport of electrons and holes, Phys. Rev. B 69, 165315 (2004).
- [39] J. Schliemann and D. Loss, Spin-Hall transport of heavy holes in III-V semiconductor quantum wells, Phys. Rev. B 71, 085308 (2005).
- [40] D. Culcer, J. Sinova, N. A. Sinitsyn, T. Jungwirth, A. H. MacDonald, and Q. Niu, Semiclassical Spin Transport in Spin-Orbit-Coupled Bands, Phys. Rev. Lett. 93, 046602 (2004).
- [41] S. Murakami, N. Nagaosa, and S.-C. Zhang, SU(2) non-Abelian holonomy and dissipationless spin current in semiconductors, Phys. Rev. B 69, 235206 (2004).
- [42] N. Sugimoto, S. Onoda, S. Murakami, and N. Nagaosa, Spin Hall effect of a conserved current: Conditions for a nonzero spin Hall current, Phys. Rev. B 73, 113305 (2006).
- [43] R. Kubo, A General Expression for the Conductivity Tensor, Can. J. Phys. 34, 1274 (1956).
- [44] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, and I. E. Dzyaloshinski, Methods of quantum field theory in statistical physics, Dover, Nev York, 1963.
- [45] G. D. Mahan, Many Particle Physics, Plenum Press, New York, 1990.
- [46] J. Rammer and H. Smith, Quantum field-theoretical methods in transport theory of metals, Rev. Mod. Phys. 58, 323 (1986).

- [47] G. D. Mahan, Quantum transport equation for electric and magnetic fields, Physics Reports (Rev. Sect. Lett.) 58, 251, North–Holland, Amsterdam (1987).
- [48] J. Rammer, Quantum Transport Theory, Westview Press, a Member of the Perseus Books Group, 2004.
- [49] V. K. Dugaev, P. Bruno, M. Taillefumier, B. Canals, and C. Lacroix, Anomalous Hall effect in a two-dimensional electron gas with spin-orbit interaction, Phys. Rev. B 71, 224423 (2005).
- [50] N. A. Sinitsyn, A. H. MacDonald, T. Jungwirth, V. K. Dugaev, and J. Sinova, Anomalous Hall effect in a two-dimensional Dirac band: The link between the Kubo-Streda formula and the semiclassical Boltzmann equation approach, Phys. Rev. B 75, 045315 (2007).
- [51] T. S. Nunner, N. A. Sinitsyn, M. F. Borunda, V. K. Dugaev, A. A. Kovalev, A. Abanov, C. Timm, T. Jungwirth, J. Inoue, A. H. MacDonald, and J. Sinova, *Anomalous Hall effect* in a two-dimensional electron gas, Phys. Rev. B 76, 235312 (2007).
- [52] L. Smrecka and P. Streda, Transport coefficients in strong magnetic fields, J. Phys. C: Solid State Phys. 10, 1977 (1977).
- [53] P. Streda, Theory of quantised Hall conductivity in two dimensions, J. Phys. C: Solid State Phys. 15, L717 (1982).
- [54] A. Bastin, C. Lawinier, O. Betbeder-Matiber, and P. Nozieres, Quantum oscillations of the Hall effect of a fermion gas with random impurity scattering, J. Phys. Chem. Solids 32, 1811 (1971).
- [55] M.-F. Yang and M.-C. Chang, Streda-like formula in the spin Hall effect, Phys. Rev. B 73, 073304 (2006).
- [56] J. Wunderlich, B.-G. Park, A. C. Irvine, L. P. Zarbo, E. Rozkotova, P. Nemec, V. Novak, J. Sinova, and T. Jungwirth, *Spin Hall Effect transistor*, Science **330**, 1801 (2010).
- [57] S. Zhang, Spin Hall effect in the presence of spin diffusion, Phys. Rev. Lett. 85, 393 (2000).
- [58] C. Brüne, A. Roth, E. G. Novik, M. König, H. Buhmann, E. Hankiewicz, W. Hanke, J. Sinova, and L. Molenkamp, *Evidence for the ballistic intrinsic spin Hall effect in HgTe nanostructures*, Nature Physics 6, 448 (2010).
- [59] M. Johnson and R. H. Silsbee, Interfacial charge-spin coupling: Injection and detection of spin magnetization in metals, Phys. Rev. Lett. 55, 1790 (1985).
- [60] M. I. Dyakonov, editor, Spin Physics in Semiconductors, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2008.

- [61] N. P. Stern, S. Ghosh, G. Xiang, M. Zhu, N. Samarth, and D. D. Awschalom, Current-Induced Polarization and the Spin Hall Effect at Room Temperature, Phys. Rev. Lett. 97, 126603 (2006).
- [62] J. Wunderlich, B. Kaestner, J. Sinova, and T. Jungwirth, Experimental observation of the spin Hall effect in a two-dimensional hole gases, Phys. Rev. Lett. 94, 047204 (2005).
- [63] J.Wunderlich, A. C. Irvine, J. Sinova, B. G. Park, L. P. Zarbo, X. L. Xu, B. Kaestner, V. Novak, and T. Jungwirth, *Spin-injection Hall effect in a planar photovoltaic cell*, Nature Physics 5, 675 (2009).
- [64] S. Datta and B. Das, *Electronic analog of the electro-optic modulator*, Appl. Phys. Lett. 56, 665 (1990).
- [65] S. O. Valenzuela and M. Tinkham, Direct electronic measurement of the spin Hall effect, Nature 442, 176 (2006).
- [66] T. Kimura, Y. Otani, T. Sato, S. Takahashi, and S. Maekawa, *Room-temperature reversible spin Hall effect*, Phys. Rev. Lett. **98**, 156601 (2007).
- [67] T. Kimura and Y. Otani, Large Spin Accumulation in a Permalloy-Silver Lateral Spin Valve, Phys. Rev. Lett. 99, 196604 (2007).
- [68] S. Maekawa, editor, Concepts in Spin Electronics, Oxford University, 2006.
- [69] R. W. Kelsall, I. W. Hamley, and M. Geoghegan, editors, *Nanotechnlogie*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2009.
- [70] H. Ibach and H. Luth, Fizyka Ciała Stałego, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa1996.
- [71] E. Blount, Formalisms of Band Theory, Solid State Physics 13, 305 (1962).
- [72] E. O. Kane, Semiconductors and Semimetals, Academic Press, New York, 1966.
- [73] G. L. Bir and G. E. Pikus, Symetria i odkształcenia w półprzewodnikach, PWN, Warszawa 1977.
- [74] R. Winkler, Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2003.
- [75] M. M. Glazov, E. Y. Sherman, and V. K. Dugaev, Two-dimensional electron gas with spin-orbit coupling disorder, Physica E 42, 2157 (2010).
- [76] E. I. Rashba, Properies of semiconductors with an extremum loop. I. Cyclotron and combinational resonance in a magnetic field perpendicular to the plane of the loop, Sov. Phys. Solid. State 2, 1109 (1960).

- [77] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. 39, 66 (1984).
- [78] G. Dresselhaus, Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures, Phys. Rev. 100, 580 (1955).
- [79] J. Nitta, T. Akazaki, and H. Takayanagi, Gate Control of Spin-Orbit Interaction in an Inverted In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As Heterostructure, Phys. Rev. Lett. **78**, 1335 (1997).
- [80] J. B. Miller, D. Zumbuhl, C. Marcus, Y. B. Lyanda-Geller, D. Goldhaber-Gordon, K. Campman, and A. C. Gossard, *Gate-Controlled Spin-Orbit Quantum Interference Effects in Lateral Transport*, Phys. Rev. Lett. **90**, 076807 (2003).
- [81] S. Ganichev, V. Belkov, L. Golub, E. Ivchenko, P. Schneider, S. Giglberger, J. Eroms, J. DeBoeck, G. Borghs, W. Wegscheider, D. Weiss, and W. Prettl, *Experimental Separation* of Rashba and Dresselhaus Spin-Splittings in Semiconductor Quantum Wells, Phys. Rev. Lett. 92, 256601 (2004).
- [82] S. Faniel, T. Matsuura, S. Mineshige, Y. Sekine, and T. Koga, Determination of spin-orbit coefficients in semiconductor quantum wells, Phys. Rev. B 83, 115309 (2011).
- [83] E. I. Rashba, Electron spin operation by electric fields: spin dynamics and spin injection, Physica E 20, 189 (2004).
- [84] E. Y. Sherman, Minimum of spin-orbit coupling in two-dimensional structures, Phys. Rev. B 67, 161303(R) (2003).
- [85] Y. Tserkovnyak and S. Akhanjee, Spin-selective localization due to intrinsic spin-orbit coupling, Phys. Rev. B 79, 085114 (2009).
- [86] I. D. Vagner, A. S. Rozhavsky, P. Wyder, and A. Y. Zyuzin, Is the Magnetic Field Necessary for the Aharonov-Bohm Effect in Mesoscopics?, Phys. Rev. Lett. 80, 2417 (1998).
- [87] C. P. Moca, D. C. Marinescu, and S. Filip, Spin Hall effect in a symmetric quantum well by random Rashba field, Phys. Rev. B 77, 193302 (2008).
- [88] V. K. Dugaev, M. Inglot, E. Y. Sherman, and J. Barnaś, Robust to impurity-scattering spin Hall effect in two-dimensional electron gas, Phys. Rev. B 82, 121310(R) (2010).
- [89] V. I. Ivanov, V. K. Dugaev, E. Y. Sherman, and J. Barnaś, Nonlinear spin Hall effect in GaAs (110) quantum wells, Phys. Rev. B 84, 085326 (2011).
- [90] <u>A. Dyrdał</u> and J. Barnaś, Spin Hall effect in graphene due to random Rashba field, Phys. Rev. B 86, 161410(R) (2012).

- [91] <u>A. Dyrdał</u> and J. Barnaś, Spin Hall Effect in a Two-Dimensional Electron Gas with Constant Dresselhaus and Random Rashba Spin-Orbit Interactions, Acta Phys. Pol. A 122, 1016 (2012).
- [92] F. W. Byron and R. W. Fuller, Matematyka w fizyce klasycznej i kwantowej, Państwowe Wydawnictwo Naukowe, 1973.
- [93] S.-Q. Shen, Spin Hall effect and Berry phase in two-dimensional electron gas, Phys. Rev. B 70, 081311 (2004).
- [94] N. A. Sinitsyn, E. M. Hankiewicz, W. Teizer, and J. Sinova, Spin Hall and spin-diagonal conductivity in the presence of Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling, arXiv:condmat/0310315v1; Phys. Rev. B 70, 081312 (2004).
- [95] J.-I. Inoue, G. W. Bauer, and L. W. Molenkamp, Suppression of the persistent spin Hall current by defect scattering, Phys. Rev. B 70, 041303 (2004).
- [96] V. K. Dugaev, A. Crepieux, and P. Bruno, Localization corrections to the anomalous Hall effect in a ferromagnet, Phys. Rev. B 64, 104411 (2001).
- [97] W.-K. Tse and S. D. Sarma, Intrinsic spin Hall effect in the presence of extrinsic spin-orbit scattering, Phys. Rev. B 74, 245309 (2006).
- [98] W.-K. Tse and S. D. Sarma, Spin Hall Effect in Doped Semiconductor Structures, Phys. Rev. Lett. 96, 056601 (2006).
- [99] E. M. Hankiewicz and G. Vignale, Phase Diagram of the Spin Hall Effect, Phys. Rev. Lett. 100, 026602 (2008).
- [100] E. M. Hankiewicz and G. Vignale, Spin-Hall effect and spin-Coulomb drag in doped semiconductors, J. Phys.:Condens. Matter 21, 253202 (2009).
- [101] L. V. Keldysh, Diagram technique for nonequilibrium processes, Zh. Eksp. Teor. Fiz 47, 1515 (1964); Sov. Phys. JETP 20, 1018 (1965).
- [102] E. M. Lifshitz and L. P. Pitaevskii, *Physical Kinetics*, Nauka (1979).
- [103] E. G. Mishchenko and B. I. Halperin, Transport equations for a two-dimensional electron gas with spin-orbit interaction, Phys. Rev. B 68, 045317 (Jul 2003).
- [104] E. G. Mishchenko, A. V. Shytov, and B. I. Halperin, Spin Current and Polarization in Impure Two-Dimensional Electron Systems with Spin-Orbit Coupling, Phys. Rev. Lett. 93, 226602 (2004).
- [105] A. V. Shytov, E. G. Mishchenko, H.-A. Engel, and B. I. Halperin, Small-angle impurity scattering and the spin Hall conductivity in two-dimensional semiconductor systems, Phys. Rev. B 73, 075316 (Feb 2006).

- [106] R. Raimondi, C. Gorini, P. Schwab, and M. Dzierzawa, Quasiclassical approach to the spin Hall effect in the two-dimensional electron gas, Phys. Rev. B 74, 035340 (2006).
- [107] W. Hansch and G. Mahan, Transport Equation for Many-Particle Systems, Phys. Rev. B 28, 1902 (1983).
- [108] G. Mahan and W. Hansch, New Transport Equation for Many Particle Systems, J. Phys. F 13, L47 (1983).
- [109] <u>A. Dyrdał</u>, J. Barnaś, V. I. Ivanov, and V. K. Dugaev, Spin Hall effect in a two-dimensional electron gas with Rashba spin-orbit interaction: semiclassical Keldysh approach, Acta Phys. Pol. A **122**, 1059 (2012).
- [110] O. V. Dimitrova, Spin-Hall conductivity in a two-dimensional Rashba electron gas, Phys. Rev. B 71, 245327 (2005).
- [111] E. Y. Sherman, Random spin-orbit coupling and spin relaxation in symmetric quantum wells, Appl. Phys. Lett. 82, 209 (2003).
- [112] L. E. Golub and E. L. Ivchenko, Spin splitting in symmetrical SiGe quantum wells, Phys. Rev. B 69, 115333 (2004).
- [113] V. V. Bel'kov, P. Olbrich, S. A. Tarasenko, D. Schuh, W. Wegscheider, T. Korn, C. Schüller,
 D. Weiss, W. Prettl, and S. D. Ganichev, Symmetry and Spin Dephasing in (110)-Grown Quantum Wells, Phys. Rev. Lett. 100, 176806 (2008).
- [114] V. K. Dugaev, M. Inglot, E. Y. Sherman, and J. Barnaś, Spin Hall effect and spin current generation in two-dimensional systems with random Rashba spin-orbit couplin, J. Mag. Mag. Mater. 324, 3573 (2012).
- [115] V. K. Dugaev, E. Y. Sherman, V. I. Ivanov, and J. Barnaś, Spin relaxation and combined resonance in two-dimensional electron systems with spin-orbit disorder, Phys. Rev. B 80, 081301(R) (2009).
- [116] R. Peierls, Quelques proprietes typiques des corpses solides, Ann. Inst. H. Poincare 3, 177 (1935).
- [117] L. D. Landau, Zur Theorie der phasenumwandlungen II, Phys. Z. Sowjetunion 11, 26 (1937).
- [118] N. D. Mermin, Crystalline order in two dimensions, Phys. Rev. 176, 250 (1968).
- [119] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. MOrozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*, Science **306**, 666 (2004).

- [120] A. K. Geim and K. S. Novoselov, The rise of graphene, Nature Materials 6, 183 (2007).
- [121] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Chiral tunneling and Klein paradox in graphene*, Nature Physics 2, 620 (2006).
- [122] M. I. Katsnelson, Graphene: carbon in two dimensions, Materials Today 10, 20 (2007).
- [123] A. K. Geim, Graphene: Status and Prospects, Science 324, 1530 (2009).
- [124] A. H. C. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *The electronic properties of graphene*, Rev. Mod. Phys. 81, 109 (2009).
- [125] D. S. L. Abergel, V. Apalkov, J. Berashevich, K. Ziegler, and T. Chakraborty, Properties of graphene: a theoretical perspective, Advances in Physics 59, 261 (2010).
- [126] D. Pesin and A. H. MacDonald, Spintronics and pseudospintronics in graphene and topological insulators, Nature Materials 11, 409 (2012).
- [127] P. Seneor, B. Dlubak, M.-B. Martin, A. A, H. Jaffres, and A. Fert, Spintronics with graphene, MRS Bulletin 37, 1245 (2012).
- [128] N. M. R. Peres, J. N. B. Rodrigues, T. Stauber, and J. M. B. L. dos Santos, *Dirac electrons in graphene-based quantum wires and quantum dots*, J. Phys.:Cond. Matter. **21**, 344202 (2009).
- [129] R. van Gelderen and C. M. Smith, Rashba and intrinsic spin-orbit interactions in biased bilayer graphene, Phys. Rev. B 81, 125435 (2010).
- [130] M. Zarea and N. Sandler, Quantum spin Hall phase in neutral zigzag graphene ribbons, Physica B: Cond. Matt. 404, 2694 (2009).
- [131] M. Gmitra, S. Konschuh, C. Ertler, C. Ambrosch-Draxl, and J. Fabian, Band-structure topologies of graphene: Spin-orbit coupling effects from first principles, Phys. Rev. B 80, 235431 (2009).
- [132] S. Konschuh, M. Gmitra, and J. Fabian, Tight-binding theory of the spin-orbit coupling in graphene, Phys. Rev. B 82, 245412 (2010).
- [133] G. Dresselhaus and M. S. Dresselhaus, Spin-Orbit Interaction in Graphite, Phys. Rev. 140, A401 (1965).
- [134] C. L. Kane and E. J. Mele, Quantum Spin Hall Effect in Graphene, Phys. Rev. Lett 95, 226801 (2005).
- [135] M. Zarea and N. Sandler, Rashba spin-orbit interaction in graphene and zigzag nanoribbons, Phys. Rev. B 79, 165442 (2009).

- [136] <u>A. Dyrdał</u>, V. K. Dugaev, and J. Barnaś, Spin Hall effect in a system of Dirac fermions in the honeycomb lattice with intrinsic and Rashba spin-orbit interaction, Phys. Rev. B 80, 155444 (2009).
- [137] <u>A. Dyrdał</u> and J. Barnaś, Intrinsic Spin Hall and Spin Nernst Effects in Single-Layer Graphene: Tight-Binding vs. Effective Model, Acta Phys. Pol. A **121**, 1198 (2012).
- [138] <u>A. Dyrdał</u> and J. Barnaś, Spin Hall and Spin Nernst Effects Due to Intrinsic Spin-Orbit Coupling in Monolayer and Bilayer Graphene, J. Nanosci. Nanotechnol. **12**, 9051 (2012).
- [139] N. A. Sinitsyn, J. E. Hill, H. Min, J. Sinova, and A. H. MacDonald, Charge and Spin Hall Conductivity in Metallic Graphene, Phys. Rev. Lett. 97, 106804 (2006).
- [140] L. Sheng, D. Sheng, C. Ting, and F. Haldane, Nondissipative Spin Hall Effect via Quantized Edge Transport, Phys. Rev. Lett 95, 136602 (2005).
- [141] G. Liu, Z. Wang, and S.-S. Li, Spin-Hall effect in the generalized honeycomb lattice with Rashba spin-orbit interaction, Phys. Lett. A 373, 2091 (2009).
- [142] A. Cortijo, A. G. Grushin, and M. A. H. Vozmediano, Topological insulating phases in monolayer and bilayer graphene: An effective action approach, Phys. Rev. B 82, 195438 (2010).
- [143] <u>A. Dyrdał</u> and J. Barnaś, Intrinsic contribution to spin Hall and spin Nernst effects in a bilayer graphene, J. Phys.: Condens. Matter 24, 275302 (2012).
- [144] E. McCan, D. S. L. Abergel, and V. I. Fal'ko, *Electrons in bilayer graphene*, Solid State Comm. 143, 110 (2007).
- [145] E. McCann, D. S. L. Abergel, and V. I. Fal'ko, The low energy electronic band structure of bilayer graphene, European Physical Journal-Special Topics 148, 91 (2007).
- [146] E. McCann and V. Fal'ko, Landau-Level Degeneracy and Quantum Hall Effect in a Graphite Bilayer, Phys. Rev. Lett. 96, 086805 (2006).
- [147] E. Prada, P. San-Jose, L. Brey, and H. A. Fertig, Band topology and the quantum spin Hall effect in bilayer graphene, Solid State Comm. 151, 1075 (2011).
- [148] H.-V. Roy, C. Kallinger, and K. Sattler, Study of single and multiple foldings of graphitic sheets, Surface Science 407, 1 (1997).
- [149] Z. Liu, K. Suenaga, P. J. F. Harris, and S. Iijima, Open and Closed Edges of Graphene Layers, Phys. Rev. Lett. 102, 015501 (2009).
- [150] D. Huertas-Hernando, F. Guinea, and A. Brataas, Spin relaxation times in disordered graphene, Eur. Phys. J. Spec. Top. 148, 177 (2007).

- [151] C. Ertler, S. Konschuh, M. Gmitra, and J. Fabian, *Electron spin relaxation in graphene: The role of the substrate*, Phys. Rev. B 80, 041405(R) (2009).
- [152] P. Zhang and M. W. Wu, Electron spin relaxation in graphene with random Rashba field: comparison of the Dyakonov-Perel and Elliott-Yafet-like mechanisms, New. J. Phys. 14, 033015 (2012).
- [153] H. Jiang, Z. Qiao, H. Liu, J. Shi, and Q. Niu, Stabilizing Topological Phases in Graphene via Random Adsorption, Phys. Rev. Lett. 109, 116803 (2012).
- [154] V. K. Dugaev, E. Y. Sherman, and J. Barnaś, Spin dephasing and pumping in graphene due to random spin-orbit interaction, Phys. Rev. B 83, 085306 (2011).
- [155] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, and A. K. Geim, *Two-dimensional atomic crystals*, PNAS **102**, 10451 (2005).
- [156] B. Aufray, A. Kara, S. Vizzini, H. Oughaddou, C. Léandri, B. Ealet, and G. L. Lay, Graphene-like silicon nanoribbons on Ag (110): A possible formation of silicene, Appl. Phys. Lett. 96, 183102 (2010).
- [157] B. Lalmi, H. Oughaddou, H. Enriquez, A. Kara, S. Vizzini, B. Ealet, and B. Aufray, *Epitaxial growth of a silicene sheet*, Appl. Phys. Lett. 97, 223109 (2010).
- [158] <u>A. Dyrdał</u> and J. Barnaś, Intrinsic spin Hall effect in silicene: transition from spin Hall to normal insulator, Phys. Status Solidi Rapid Research Lett. 6, 340 (2012).
- [159] C.-C. Liu, H. Jiang, and Y. Yao, Low-energy effective Hamiltonian involving spin-orbit coupling in silicene and two-dimensional germanium and tin, Phys. Rev. B 84, 195430 (2011).
- [160] S. Lebegue and O. Eriksson, Electronic structure of two-dimensional crystals from ab initio theory, Phys. Rev. B 79, 115409 (2009).
- [161] C.-C. Liu, W. Feng, and Y. Yao, Quantum Spin Hall Effect in Silicene and Two-Dimensional Germanium, Phys. Rev. Lett. 107, 076802 (2011).
- [162] N. D. Drummond, V. Z'olyomi, and V. I. Fal'ko, *Electrically tunable band gap in silicene*, Phys. Rev. B 85, 075423 (2012).
- [163] M. Ezawa, Valley-Polarized Metals and Quantum Anomalous Hall Effects in Silicene, Phys. Rev. Lett. 109, 055502 (2012).
- [164] <u>A. Dyrdał</u>, V. K. Dugaev, and J. Barnaś, Spin Hall Effect in IV VI semiconductors, EPL 85, 67004 (2009).
- [165] G. Nimtz and B. Schlicht, Narrow Gap Lead Salt in Narrow Gap Semiconductors, Springer Tracts in Modern Physics 98, 1 (Springer, Berlin 1983).

Oświadczenie

Ja, niżej podpisana Anna Dyrdał, doktorantka Wydziału Fizyki Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu oświadczam, że przedkładaną rozprawę doktorską pt. Spinowy efekt Halla napisałam samodzielnie. Oznacza to, że przy pisaniu pracy, poza niezbędnymi konsultacjami, nie korzystałam z pomocy innych osób, a w szczególności nie zlecałam opracowania rozprawy lub jej istotnych części innym osobom, ani nie odpisywałam tej rozprawy lub jej istotnych części od innych osób.

Równocześnie wyrażam zgodę na to, że gdyby powyższe oświadczenie okazało się nieprawdziwe, decyzja o nadaniu mi stopnia naukowego doktora zostanie cofnięta.

Anna Dyrdał

Poznań, dn. 9 kwietnia 2013