

Microscopic Analysis of Lattice Distortion Effects in Rashba Systems

著者 : Yuuki Ogawa, Takumi Funato, and Hiroshi Kohno

アブスト

我々は、強結合モデルに基づいて、三次元ラシュバ系における動的格子歪みの効果を理論的に研究した。反転対称性の破れた四方格子上のsp電子系を考慮し、格子歪みはホッピング積分と結晶軸の変調を通じて組み込まれている。pzまたはsに由来するバンドに対する有効ハミルトニアンは、ラシュバ変調項を含むことが判明し、これによりラシュバ電流、四重極電流、垂直電流、螺旋性電流など、さまざまなタイプのスピン電流が誘導される。これらの結果は、局所座標変換法によって得られたものと比較されている。

研究背景・問題意識

- スピントロニクス応用において、スピнкаレントは重要な役割を果たす。スピнкаレントの実験的な生成方法はいくつかあるが、スピン軌道相互作用(SOI)を介したスピнкаレント生成のメカニズムは依然として未解決の問題。
- 表面弾性波(SAW)を用いたスピнкаレント生成においては、空間反転対称性の破れがあるためにRashba SOIが主要なスピン軌道相互作用になりうる。Rashba SOIはスピンモーメントロッキングにより、効率的なスピнкаレント生成を可能にする。
- パリティ混成を伴う多軌道特性を持つバンドにおいて、Rashba SOIが効果的なSOIとして現れる。これに着目して、多軌道強結合モデルから出発してラシュバ系における格子ゆがみの効果を調べられないか？

研究目的

- 3次元Rashba系における格子ひずみの効果を微視的に研究し、スピнкаレント生成を調べる。

モデル

c軸に沿って反転対称性が破れた正方格子上のs, p電子の強結合モデルから出発する。ハミルトニアンは

$$H = H_{\text{kin}} + H_{\text{CF}} + H_{\text{odd}} + H_{\text{so}}$$

となる。ここで

$$H_{\text{kin}} = \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{m,n} \left((E_{mn} + \delta E_{mn}) c_{im}^\dagger c_{jn} + \text{H.c.} \right), H_{\text{CF}} = \sum_i \left(\Delta \left(c_{ix}^\dagger c_{ix} + c_{iy}^\dagger c_{iy} \right) - E_s c_{is}^\dagger c_{is} \right), H_{\text{odd}} = V_0 \sum_i \left(c_{is}^\dagger c_{ic} + \text{H.c.} \right), H_{\text{so}} = \frac{\lambda}{2} \sum_i c_i^\dagger (\mathbf{l} \cdot \boldsymbol{\sigma}) c_i.$$

である。 H_{kin} の中に格子ゆがみの効果 δE_{mn} が入っている。

- 無摂動ハミルトニアンは

$$H(k) = \begin{pmatrix} \epsilon_s - E_s & V_0 - iV_z & -iV_x & -iV_y & V_0 + iV_z & \epsilon_z & i\lambda'\sigma_y & -i\lambda'\sigma_x & iV_x & -i\lambda'\sigma_y & \epsilon_x + \Delta & i\lambda'\sigma_z & iV_y & i\lambda'\sigma_x & -i\lambda'\sigma_z & \epsilon_y + \Delta \end{pmatrix}$$

で与える。

- H_{kin} に対する変調は

$$\delta H_{\text{kin}}(k; q) = \begin{pmatrix} \delta\epsilon_s & -\delta V_z & -\delta V_x & -\delta V_y & \delta V_z & \delta\epsilon_z & \delta W_{zx} & \delta W_{yz} & \delta V_x & \delta W_{zx} & \delta\epsilon_x & \delta W_{xy} & \delta V_y & \delta W_{yz} & \delta W_{xy} & \delta\epsilon_y \end{pmatrix}, \quad (\delta\epsilon_m, \delta V_{m'}, \delta W_{m'n'}) = \sum_R (E_{mn}^i$$

で与えられる。

- また格子歪みにより結晶軸の局所回転が引き起こされることがある。この効果は

$$\delta H_{\text{rot}}(k; q) = V_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 & \theta_q^y & -\theta_q^x & 0 & 0 & 0 & 0 & \theta_q^y & 0 & 0 & 0 & -\theta_q^x & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

で取り入れられる。

- ここからさらにハミルトニアンの簡単化を行う。化学ポテンシャル μ がpz、sレベル付近にあると仮定して、高エネルギー領域にある p_x, p_y を排除する。無摂動ハミルトニアンは

$$H_{\text{eff}}(k) = \epsilon_z(k) + \alpha_R a \left(\sin(k_x a) \sigma_y - \sin(k_y a) \sigma_x \right) \simeq E_Z + \frac{k_x^2 + k_y^2}{2m_{\parallel}} + \frac{\tilde{k}_z^2}{2m_z} + \alpha_R (k_x \sigma_y - k_y \sigma_x),$$

と書くことができる。摂動ハミルトニアンも同様の方法で

$$\delta H_{\text{eff}}(k; q) = - \sum_{m=1}^7 \phi_m(k) \Xi_m(q) e^{-i\omega t}$$

なお ϕ_1, ϕ_2 に関する変調は化学ポテンシャルに吸収され

$$\frac{\delta\mu}{\mu} = \left(C_{\parallel}^0 - \frac{n - n_1}{\mu\nu} \right) (u_{xx} + u_{yy}) + \left(C_z^0 - \frac{n}{\mu\nu} \right) u_{zz}$$

となる。他の ϕ_m に関しては表を参照。

Table I. Definition of lattice distortion modes, Ξ_m , and electronic modes, ϕ_m , mutually coupled through $\delta\mathcal{H}_{\text{eff}}$. The induced spin currents are shown in the fifth row. Ξ_m 's are expressed in terms of the strain tensor, $u_{ij} = \frac{1}{2}(\xi_{j,i} + \xi_{i,j})$, and the local rotation angle, $\theta^z = \frac{1}{2}(\xi_{y,x} - \xi_{x,y})$, around z axis. We introduced $(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_x \boldsymbol{\sigma}) = (\tau_x)_{ia} k_i \sigma_a = k_x \sigma^x + k_y \sigma^y$, $(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_z \boldsymbol{\sigma}) = (\tau_z)_{ia} k_i \sigma_a = k_x \sigma^x - k_y \sigma^y$, $(\mathbf{k}_{\parallel} \boldsymbol{\sigma}) = k_x \sigma^x + k_y \sigma^y$, $\mathcal{H}_{\parallel}^{(1/2)}(\mathbf{k}) = \frac{k_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}} + \beta \alpha_R (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\sigma})^z$, and $\frac{2}{m} = \frac{1}{m_{\parallel}} + \frac{1}{m_{\perp}}$. We also list ϕ'_m obtained by local coordinate transformation.^{12,21} The bottom row shows the type of SAW (with propagation direction $\mathbf{q} \parallel \hat{x}$) that induces the respective spin currents (see Eqs. (20) and (21)).

m	1	2	3	4	(5, 6)	7
Ξ_m	$u_{xx} + u_{yy}$	u_{zz}	$u_{xx} - u_{yy}$	u_{xy}	(u_{xz}, u_{yz})	θ^z
ϕ_m	$\mathcal{H}_{\parallel}^{(1)}(\mathbf{k}) - \mu C_{\parallel}$	$\frac{k_{\perp}^2}{m_{\perp}} - \mu C_{\perp}$	$\frac{k_{\perp}^2 - k_{\parallel}^2}{2m_{\perp}} + \alpha_R (\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_x \boldsymbol{\sigma})$	$\alpha_R (\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_z \boldsymbol{\sigma})$	$-\alpha_R \bar{k}_z (\hat{z} \times \boldsymbol{\sigma})$	$\alpha_R (\mathbf{k}_{\parallel} \boldsymbol{\sigma})$
ϕ'_m	$\mathcal{H}_{\parallel}^{(1/2)}(\mathbf{k})$	$\frac{k_{\perp}^2}{m_{\perp}} + \alpha_R (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\sigma})^z$	$\frac{k_{\perp}^2 - k_{\parallel}^2}{2m_{\perp}} + \frac{\alpha_R}{2} (\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_x \boldsymbol{\sigma})$	$\frac{2k_x k_y}{m_{\parallel}} - \alpha_R (\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_z \boldsymbol{\sigma})$	$(\frac{2k_x}{m_{\parallel}} - \alpha_R \sigma^z \hat{z} \times) \mathbf{k}_{\parallel}$	$\alpha_R (\mathbf{k}_{\parallel} \boldsymbol{\sigma})$
$\langle j_{k,i}^{\alpha} \rangle$	$T_1 \epsilon_{i\alpha}$	$T_2 \epsilon_{i\alpha}$	$T_3 (\tau_x)_{i\alpha}$	$T_4 (\tau_z)_{i\alpha}$	$T_5 \delta_{iz} (-\delta_{\alpha y}, \delta_{\alpha x})$	$T_7 \delta_{i\alpha}^{\parallel}$
SAW	Rayleigh	Rayleigh	Rayleigh	shear	(Rayleigh, shear)	shear

- ハミルトニアンが設定出来たら、久保公式により、スピncレントを計算する。

$$\langle j_{s,i}^{\alpha} \rangle \equiv \frac{1}{2} \left\langle \frac{\partial}{\partial k_i} H_{\text{eff}}(\mathbf{k}) \right\rangle \sigma^{\alpha} + \tilde{k}_i \sigma^{\alpha} + \alpha_R \epsilon_{i\alpha} \sigma^{\alpha},$$

$$\langle j_{s,i}^{\alpha}(q) \rangle_{\omega} = \frac{i\omega}{2\pi V} \sum_m \sum_k \text{tr} (j_{s,i}^{\alpha} G_k^R \phi_m G_k^A) \Xi_m(q),$$

ボルン近似で散乱時間 τ を評価するために δ 関数不純物ポテンシャルを導入した。

$$\frac{1}{2} \langle j_{s,i}^{\alpha} \rangle \tau = \epsilon_{i\alpha} \left[T_1 (\dot{u}_{xx} + \dot{u}_{yy}) + T_2 \dot{u}_{zz} \right] + T_3 (\tau_x)_{i\alpha} (\dot{u}_{xx} - \dot{u}_{yy}) + T_4 (\tau_z)_{i\alpha} \dot{u}_{xy} + T_5 \delta_{iz} (\delta_{\alpha y} \dot{u}_{xz} - \delta_{\alpha x} \dot{u}_{yz}) + T_7 \delta_{i\alpha}^{\parallel} \dot{\theta}_z$$

で、スピncレントの主要な寄与が与えられる。

- T_1, T_2 はラシバスピncレントと呼ばれ、未変形のラシバ系における平衡スピnc電流と同じスピncレントパターンを共有する。 T_3, T_4 は面談船団変形から生じ、四重極パターンを示す。 T_5 は垂直せん断変形によって生じ、垂直スピnc電流と呼ばれる。

結果

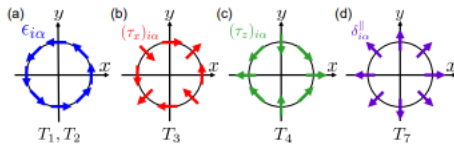
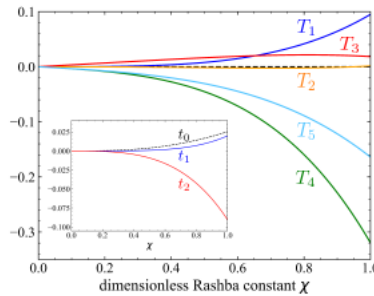


Fig. 2. 2D spin-current patterns generated by lattice distortions. Each arrow indicates spin direction, and its position viewed from the origin indicates flow direction. (a) Rashba spin current. (b,c) Quadrupolar spin currents. (d) Helicity current.



- 上記の計算結果を2種類の表面弾性波に適用する。レイリー波

$$\begin{aligned} \delta R = & (\delta R_x, 0, \delta R_z) e^{i(qx - \omega t)} e^{iq'z} \end{aligned}$$

に対しては

$$j_{s,i}^{\alpha} = \frac{1}{2} j_{s0} \tau \left[\epsilon_{i\alpha} \left(T_1 + T_3 \right) \dot{u}_{xx} + T_2 \dot{u}_{zz} \right] + T_5 \delta_{iz} \delta_{\alpha y} \dot{u}_{xz} + T_7 \delta_{i\alpha}^{\parallel} \dot{\theta}_z$$

- レイリー波

$$\delta R \propto y e^{i(qx - \omega t)} e^{q'z}$$

に対しては

$$j_{s,i}^{\alpha} = \frac{1}{2} j_{s0} \tau \left[(T_4 + T_7) \delta_{i\alpha}^{\parallel} \dot{u}_{xz} - T_5 \delta_{iz} \delta_{\alpha y} \dot{u}_{xz} \right]$$

が得られる。ところで、これらの2つの場合で、スピncレントパターンのすべてが包含されている。

- 垂直スピncレントはスピnc渦度結合によって誘導されるスピnc電流と同じスピncレントパターンを持っており、同様の方法で検出できる可能性がある。その条件は $\mu\tau \geq 1$ である。

感想・メモ

- 「高エネルギー」バンドの順次除去という手順がよくわからなかったのだが、例えばフェルミエネルギー近傍のバンドだけ考える、ということだろうか。