

# Wstęp do spintroniki - tranzystor spinowy.

P. Wójcik

3 kwietnia 2022; ostatnia aktualizacja 16 maja 2024

## 1 Wstęp

Korzystając z pakietu KWANT wykonamy symulacje dwóch prototypów tranzystora spinowego zaproponowanych w ciągu ostatnich lat. Jedna z nich oparta jest na zmiennym polu magnetycznym pochodzącym od ferromagnetycznych pasków, gdzie parametrem sterującym jest zewnętrzne pole magnetyczne, zaś druga z architektur wykorzystuje oddziaływanie spin-orbita do kontroli spinu w kanale przewodzenia, a parametrem sterującym w tym przypadku jest pole elektryczne.

W mechanice kwantowej równanie opisujące elektron z uwzględnieniem spinu nosi nazwę równania Pauliego i dla układu 2D przyjmuje postać

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + \frac{1}{2} g \mu_B \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \alpha (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) \right) \Psi(x, y) = E \Psi(x, y), \quad (1)$$

gdzie  $m^*$  to masa efektywna,  $g$  to czynnik Landego,  $\mu_B$  to magneton Bohra,  $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$  to wektor pola magnetycznego,  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  to wektor macierzy Pauliego,  $k_{x(y)} = -i\partial/\partial x(y)$  to operatory pędu (wektora falowego), zaś  $\alpha$  to stała oddziaływania spin-orbita.

Poszczególne wyrazy w Hamiltonianie (1) noszą nazwę wyrazu kinetycznego, oddziaływania Zeemana oraz oddziaływania spin-orbita (SO). Macierze Pauliego to macierze  $2 \times 2$  w postaci

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

A zatem, równanie Pauliego w postaci macierzowej przyjmuje postać

$$\begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + \frac{1}{2} g \mu_B B_z & \frac{1}{2} g \mu_B (B_x - i B_y) + \alpha (k_y + i k_x) \\ \frac{1}{2} g \mu_B (B_x + i B_y) + \alpha (k_y - i k_x) & -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{1}{2} g \mu_B B_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi^\uparrow(x, y) \\ \psi^\downarrow(x, y) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi^\uparrow(x, y) \\ \psi^\downarrow(x, y) \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Dyskretyzując równanie (1) na siatce kwadratowej  $(i, j)$  z  $\Delta x = \Delta y$  oraz wykorzystując trójpunktowe przybliżenie drugiej pochodnej oraz centralną postać pierwszej pochodnej, otrzymujemy

$$\begin{aligned} t \mathbb{I}_{2 \times 2} (4\Psi_{i,j} - \Psi_{i+1,j} - \Psi_{i-1,j} - \Psi_{i,j+1} - \Psi_{i,j-1}) + \frac{1}{2} g \mu_B (B_x \sigma_x + B_y \sigma_y + B_z \sigma_z) \Psi_{i,j} \\ + i t_{SO} \sigma_y (\Psi_{i+1,j} - \Psi_{i-1,j}) - i t_{SO} \sigma_x (\Psi_{i,j+1} - \Psi_{i,j-1}) = E \Psi_{i,j} \end{aligned} \quad (4)$$

gdzie  $t = \frac{\hbar^2}{2m^* \Delta x^2}$ ,  $t_{SO} = \frac{\alpha}{2\Delta x}$ ,  $\Psi_{i,j} = \Psi(x_i, y_j) = (\psi^\uparrow(x_i, y_j), \psi^\downarrow(x_i, y_j))^T$ , zaś  $\mathbb{I}_{2 \times 2}$  jest macierzą jednostkową o wymiarze  $2 \times 2$ . Zakładając, że  $\Psi_{i,j} = |\Psi_{i,j}\rangle$  i mnożąc przed  $\langle \Psi_{i,j}|$  otrzymujemy równanie

$$\begin{aligned} t \mathbb{I}_{2 \times 2} (4|\Psi_{i,j}\rangle \langle \Psi_{i,j}| - |\Psi_{i+1,j}\rangle \langle \Psi_{i,j}| - |\Psi_{i-1,j}\rangle \langle \Psi_{i,j}| - |\Psi_{i,j+1}\rangle \langle \Psi_{i,j}| - |\Psi_{i,j-1}\rangle \langle \Psi_{i,j}|) \\ + \frac{1}{2} \mu_B g (B_x \sigma_x + B_y \sigma_y + B_z \sigma_z) |\Psi_{i,j}\rangle \langle \Psi_{i,j}| \\ + i t_{SO} \sigma_y (|\Psi_{i+1,j}\rangle \langle \Psi_{i,j}| - |\Psi_{i-1,j}\rangle \langle \Psi_{i,j}|) - i t_{SO} \sigma_x (|\Psi_{i,j+1}\rangle \langle \Psi_{i,j}| - |\Psi_{i,j-1}\rangle \langle \Psi_{i,j}|) = E |\Psi_{i,j}\rangle \langle \Psi_{i,j}|, \end{aligned} \quad (5)$$

które wyznaczają poszczególne energie przeskoiku nawezłowego oraz między najbliższymi sąsiadami. W rozpatrywanym przypadku mają one formę macierzy o wymiarze  $2 \times 2$ .

## 2 Implementacja układu w pakiecie KWANT

Implementując układ w pakiecie KWANT należy założyć, że:

1. funkcje `onsite()` oraz `hopping()` zwracają macierze o wymiarze  $2 \times 2$  będące energiami przeskoku,
2. pracujemy na kwadratowej siatce o wymiarze  $\Delta x = \Delta y$ . Postać Hamiltonianu (3) wskazuje, że w tym przypadku na każdym z węzłów mamy dwa orbitale, jeden odpowiadający elektronowi o spinie up i jeden odpowiadający elektronowi o spinie down. Aby to uwzględnić, definiując układ należy ustawić `norbs = 2`

```
lat=kwant.lattice.square(dx, norbs=2)
```

3. jeśli w kontakcie chcemy rozróżniać stany zdegenerowane ze względu na orbitalne stopnie swobody (w naszym przypadku ze względu na spin) i pozwala na to postać Hamiltonianu (ma on charakter blokowy), w poszczególnych kontaktach możemy zdefiniować parametr `conservation_law`. Podstawiamy pod niego macierz kwadratową o rozmiarze odpowiadającym liczbie orbitali na węźle i wartościach własnych różnych dla różnych separowalnych bloków (orbitali). W rozpatrywanym przypadku, gdy w kontakcie nie ma pola magnetycznego ani oddziaływania spin-orbita

```
left_lead=kwant.Builder(kwant.TranslationalSymmetry((-dx, 0)),conservation_law=sigma_law)
```

gdzie macierz `sigma_law` może mieć postać (konieczny komentarz prowadzącego podczas zajęć)

$$\sigma_{law} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix},$$

4. gdy w kontaktach zdefiniujemy zmienną `conservation_law`, przy obliczaniu współczynnika transmisji możemy odwoływać się nie tylko do numeru kontaktu, ale również do numeru orbitala w danym kontakcie. Przykładowy kod

```
sys=make_system(nw)
smatrix = kwant.smatrix(sys, energy)
tup_down=smatrix.transmission((1,1), (0,0))
```

realizuje obliczenie współczynnika transmisji dla elektronu o spinie up wstrzykniętego do układu z kontaktu o numerze 0 do kontaktu o numerze 1 i spinie down, przy czym w zapisie  $(i, j)$ ,  $i$  to numer kontaktu, zaś  $j$  to numer orbitalu,

5. obliczając gęstość elektronów lub prądu w określonym orbitalu używamy odpowiednio funkcji `kwant.operator.Density()` oraz `kwant.operator.Current()`. Przykład z obliczaniem gęstości elektronów o spinie up i down, a także sumy obu z nich przedstawiono poniżej

```
sys = make_system(nw)
wave_f=kwant.wave_function(sys,nw.energy)(0)

density_up=tinyarray.array([[1,0],\
                             [0,0]])

density_down=tinyarray.array([[0,0],\
                              [0,1]])

density_both=tinyarray.array([[1,0],\
                              [0,1]])
```

```

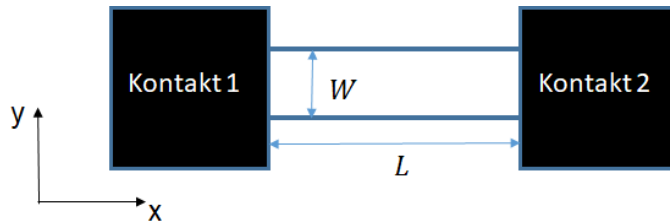
density_up_op=kwant.operator.Density(sys,density_up)
density_down_op=kwant.operator.Density(sys,density_down)
density_both_op=kwant.operator.Density(sys,density_both)

density_up_map=density_up_op(wave_f[0])
density_down_map=density_down_op(wave_f[0])
density_both_map=density_both_op(wave_f[0])

```

### 3 Precesja spinu w zewnętrznym polu magnetycznym

Proszę rozpatrzyć nanodrut 2D o długości  $L$  i szerokości  $W$  w zewnętrznym polu magnetycznym  $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$ .



Rysunek 1: Schemat nanodrutu.

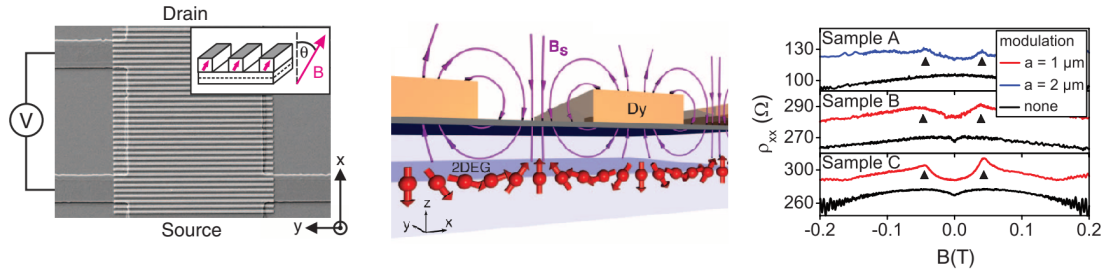
Dla takiego układu proszę:

1. policzyć relacje dyspersji  $E(k)$  w kontakcie bez obecności pola magnetycznego,
2. policzyć relacje dyspersji  $E(k)$  w kontakcie dla  $B = 1$  T zakładając, że pole magnetyczne przyłożone jest kolejno w kierunku osi  $x$ ,  $y$  oraz  $z$ . Czy zaobserwowane rozszczepienie Zeemana zależy od kierunku przyłożenia pola magnetycznego?
3. przyłożyć do układu pole  $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$ , gdzie  $B_z = 1$  T i policzyć konduktancje w funkcji energii padającego elektronu,
4. przyłożyć do układu pole  $\mathbf{B} = (0, B_y, B_z)$ , gdzie  $B_z = 0.1$  T przyłożone jest w całym urządzeniu (łącznie z kontaktami), zaś pole  $B_y$  przyłożone jest jedynie w obszarze  $[0.2, 0.8] L$ . Dla energii Fermiego odpowiadającej najniższemu stanowi (dla obu spinów,  $E = 5$  meV) wyznaczyć współczynniki transmisji  $T_{up \leftarrow up}$ ,  $T_{down \leftarrow up}$ ,  $T_{up \leftarrow down}$  oraz  $T_{down \leftarrow down}$  w funkcji pola magnetycznego  $B_y$  w zakresie od  $[0, 1]$  T,
5. dla układu z 4. pokazać jak wygląda gęstość ładunku o spinie up i spinie down w nanourządzeniu dla elektronu wstrzykniętego w najniższym pasmie i pola  $B_y = 0.6$  T,
6. dla układu z 4. pokazać jak wygląda gęstość spinu  $s_x, s_y, s_z$  w nanourządzeniu dla elektronu wstrzykniętego w najniższym pasmie i pola  $B_z = 0.6$  T.

Obliczenia wykonać dla  $L = 2000$  nm,  $W = 100$  nm,  $g = -50$ ,  $m^* = 0.014$  oraz  $\Delta x = 4$  nm. Magneton Bohra w jednostkach atomowych  $\mu_B = 0.5$  a.u.

### 4 Tranzystor spinowy oparty na ferromagnetycznych paskach

Spróbujemy zasymulować działanie tranzystora przedstawionego w pracy Science, 337, 324-32 (2012). Schemat układu i wyniki eksperymentalne przedstawiono na rysunku 2. Układ składa się z dwuwymiarowego gazu elektronowego (2DEG) w (Cd,Mn)Te, nad którym umieszczono ferromagnetyczne paski dysprozu wytwarzające helikane pole magnetyczne w obszarze 2DEG. W eksperymencie zmieniano zewnętrzne pole magnetyczne przyłożone w kierunku prostopadłym do 2DEG,  $\mathbf{B}_{ext} = (0, 0, B_{ext})$  i zaobserwowano piki rezystancji (spadek konduktancji) dla wartości zewnętrznego pola magnetycznego odpowiadającego wartości pola helikalnego  $B_h$ . Na rysunku 2 widoczny jest pik rezystancji dla pola  $B_{ext} = 50$  mT.



Rysunek 2: Schemat tranzystora spinowego opartego na helikalnym polu magnetycznym pochodzącym od ferromagnetycznych pasków dysprozu wraz z wynikami eksperymentu, na których wyraźnie widoczny jest wzrost rezystancji kanału dla pola  $\mathbf{B}_{ext} = B_h$  - źródło: Science, 337, 324-32 (2012).

Do obliczeń proszę założyć, że pole helikalne ma postać

$$\mathbf{B} = B_h \left[ \sin \left( \frac{2\pi(x - x_0)}{a} \right), 0, \cos \left( \frac{2\pi(x - x_0)}{a} \right) \right], \quad (6)$$

przy czym  $B_h = 50$  mT,  $a = L$ ,  $x_0 = L/2$ . Ponadto, założyć długość nanodrutu  $L = 1000$  nm, szerokość  $W = 30$  nm,  $\Delta x = 1$  nm oraz masę efektywną i czynnik Landego CdTe,  $m^* = 0.1$  oraz  $g = 200$ . Zarówno pole helikalne jak i pole zewnętrzne  $\mathbf{B}_{ext} = (0, 0, B_{ext})$  przyłożone jest w całym obszarze nanourządzenia wraz z kontaktami.

Dla tak zdefiniowanego układu:

1. obliczyć relacje dyspersji  $E(k)$  w lewym kontakcie zakładając, że  $B_{ext} = 0$ . Powinniśmy zaobserwować rozszczepienie Zeemana pochodzące od pola helikalnego  $B_h$ ,
2. obliczyć konduktancje w funkcji pola  $B_{ext}$  w przedziale  $[0, 100]$  mT zakładając, że do układu wstrzykujemy elektron o energii zlokalizowanej dokładnie w połowie spinowo rozszczepionego stanu podstawowego ( $E = 3.5$  meV), związanego z kwantyzacją w kierunku poprzecznym. Podobnie jak w eksperymencie powinniśmy obserwować nagły spadek konduktancji dla  $B_{ext} \approx B_h$ .

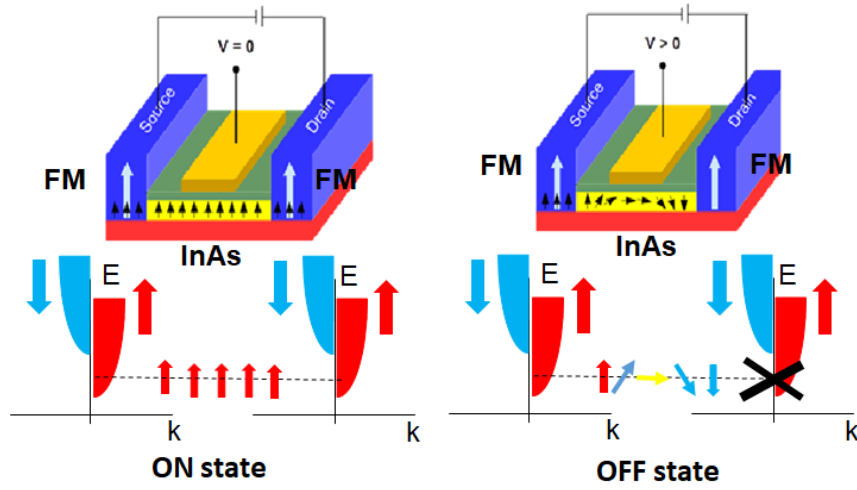
## 5 Tranzystor spinowy oparty na oddziaływaniu spin-orbita

Tranzystor spinowy analizowany w zadaniu powyżej posiada jedną poważną wadę, która czyni go mało użytecznym jeśli chodzi o wielkoskalowe zastosowania, a mianowicie przełączanie pomiędzy stanem wysokiej i niskiej rezystancji odbywa się za pomocą zewnętrznego pola magnetycznego. Dlatego stale poszukuje się innych metod kontroli spinu. Jedną z nich opartą jest na oddziaływaniu spin-orbita typu Rashby, które występuje w materiałach półprzewodnikowych. Hamiltonian oddziaływania SO typu Rashby ma postać

$$H_{RSO} = \alpha(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y) = (\alpha k_y, -\alpha k_x) \cdot (\sigma_x, \sigma_y). \quad (7)$$

Zauważmy, że  $H_{RSO}$  przypomina postacią efekt Zeemana, w którym efektywne pole magnetyczne  $B_{RSO} = (\alpha k_y, -\alpha k_x)$ , a zatem, podobnie jak w przypadku pola magnetycznego, powinniśmy obserwować precesję spinu wokół efektywnego pola  $B_{RSO}$ , które jest prostopadłe do kierunku propagacji elektronu. Co ciekawe, parameter  $\alpha$  jest regulowany zewnętrznym polem elektrycznym, które może pochodzić od elektrody bramki.

Wykorzystując to zjawisko, w roku 1990 Datta i Das [Appl. Phys. Lett. 56, 665 (1990)] zaproponowali nową ideę tranzystora opartą na oddziaływaniu SO do kontroli spinu - patrz rys. 3. W urządzeniu tym spinowo spolaryzowane elektrony z ferromagnetycznego kontaktu wstrzykiwane są do półprzewodnikowego kanału z silnym oddziaływaniem SO. Przykładając odpowiednie napięcie do elektrody bramki regulujemy pole elektryczne w kanale, a tym samym wartość współczynnika  $\alpha$ . Dzięki oddziaływaniu spin-orbita, w obszarze silnego pola elektrycznego elektron zaczyna wykonywać precesje wokół efektywnego pola  $B_{RSO}$ . Liczba obrotów które wykona spin elektronu zależy od wielkości tego pola, a zatem od współczynnika  $\alpha$ , który jest regulowany napięciem bramki. Jeśli elektron wykona całkowitą wielokrotność obrotów wychodzi z kanału z tym samym spinem i może zostać zaabsorbowany przez ferromagnetyczny dren. Jeżeli jednak wykona on nieparzystą wielokrotność połówek



Rysunek 3: Schemat tranzystora spinowego opartego na oddziaływaniu spin-orbita. Spinowo spolaryzowany elektron z ferromagnetycznego źródła wstrzykiwany jest do półprzewodnikowego kanału. Jego spin kontrolowany jest zewnętrznym polem elektrycznym pochodzącym od elektrody bramki poprzez oddziaływanie SO. W zależności od stanu spinowego elektronu na wyjściu układ znajduje się w stanie wysokiej lub niskiej rezystancji.

obrotu wyjdzie z kanału ze spinem przeciwnym, a zatem nie będzie mógł być zaabsorbowany przez ferromagnetyczny dren, ponieważ w ferromagnetyku nie ma stanów elektronowych dla elektronów o spinie down. W ten sposób, regulując napięcie bramki regulujemy parametr  $\alpha$  i możemy przełączać układ ze stanu, w którym płynie prąd (niskiej rezystancji) do stanu, w którym prąd jest całkowicie blokowany (stan niskiej rezystancji), otrzymując akcję tranzystorową.

Całkowity prąd przepływający przez nanourządzenie jest sumą prądów elektronów o dwóch różnych spinach

$$G = \frac{1+P}{2}G^{up} + \frac{1-P}{2}G^{down}, \quad (8)$$

gdzie  $P$  jest polaryzacją kontaktów  $P \in [0, 1]$  oraz

$$G^{up} = \frac{e^2}{h} \left( \frac{1+P}{2}T_{up \leftarrow up} + \frac{1-P}{2}T_{up \leftarrow down} \right), \quad (9)$$

$$G^{down} = \frac{e^2}{h} \left( \frac{1+P}{2}T_{down \leftarrow up} + \frac{1-P}{2}T_{down \leftarrow down} \right). \quad (10)$$

W ramach zadania proszę rozpatrzyć nanodrut o długości  $L$  i szerokości  $W$  i obliczyć następujące wielkości:

1. relacje dyspersji w kontakcie  $E(k)$  zakładając, że oddziaływanie SO występuje w całym urządzeniu (wraz z kontaktami),
2. konduktancje w funkcji energii padającego elektronu zakładając, że oddziaływanie SO występuje w całym urządzeniu (wraz z kontaktami),
3. współczynniki transmisji  $T_{up \leftarrow up}$ ,  $T_{down \leftarrow up}$ ,  $T_{up \leftarrow down}$  oraz  $T_{down \leftarrow down}$  w funkcji parametru  $\alpha$  zakładając, że oddziaływanie SO występuje w obszarze  $[0.2, 0.8] L$  oraz że elektron jest wstrzyknięty w najniższym pasmie poprzecznym ( $E = 5$  meV), parametr  $\alpha$  zmieniać w zakresie  $[0, 50]$  meVnm
4. dla układu z punktu 3, konduktancje  $G$ ,  $G^{up}$  oraz  $G^{down}$  w funkcji parametru  $\alpha$  dla elektronu wstrzykniętego w najniższym pasmie poprzecznym, przyjmując kolejno  $P = 0.2, 0.4, 1$ ,
5. dla układu z punktu 3, gęstość elektronów o spinie up i down oraz gęstość spinu  $s_x, s_y, s_z$  w nanourządzeniu dla elektronu wstrzykniętego w najniższym pasmie poprzecznym oraz parametru  $\alpha$  odpowiadającemu całkowitemu obrotowi spinu.

Obliczenia proszę wykonać na następujących parametrach:  $L = 800$  nm,  $W = 100$  nm,  $\Delta x = 4$  nm,  $m^* = 0.014$ ,  $g = -50$ ,  $\alpha = 50$  meVnm ( $\alpha$  podane dla podpunktów 1 i 2).