

**FAKULTA ELEKTROTECHNIKY A INFORMATIKY STU V BRATISLAVE**  
Študijný program Fyzikálne inžinierstvo



**Bc. František Horváth**

# **Spinový Hallov jav – indukcia spinovej polarizácie spin-orbitálnou interakciou**

**Diplomová práca**

Vedúci diplomovej práce: doc. Ing. Peter Bokes, PhD.

Máj, 2009

## ANOTÁCIA

Slovenská Technická Univerzita v Bratislave  
FAKULTA ELEKTROTECHNIKY A INFORMATIKY

Študijný program: Fyzikálne inžinierstvo

Autor: Bc. František Horváth

Názov diplomovej práce: Spinový Hallov jav – indukcia spinovej polarizácie spin-orbitálnou interakciou

Vedúci diplomovej práce: doc. Ing. Peter Bokes, PhD.

Dátum odovzdania: Máj, 2009

Spinový Hallov jav je jav, pri ktorom dochádza k separácii elektrónov s rôznou orientáciou spinu pri prechode elektrického prúdu vzorkou. Existuje niekoľko dôvodov pre takéto správanie – prítomnosť spin-orbitálnej interakcie a pôsobenie vnútorného indukovaného magnetického poľa. Spinový Hallov jav bol experimentálne pozorovaný v polovodičových vzorkách, ktoré obsahujú dvojrozmerný elektrónový plyn. Cieľom tejto práce je študovať spinovú polarizáciu spôsobenú spin-orbitálnou interakciou a nenulovým elektrickým prúdom v dvojrozmernom elektrónovom plyne, nachádzajúcom sa v GaAs/GaAlAs kvantovej jame.

## ANNOTATION

Slovak University of Technology in Bratislava  
FACULTY OF ELECTRICAL ENGINEERING AND INFORMATION TECHNOLOGY

Degree Course: Physical engineering

Author: Bc. František Horváth

Title of the diploma thesis: Spin Hall Effect - spin polarisation induced by spin-orbit interaction

Supervisor: doc. Ing. Peter Bokes, PhD.

Year of the submission: May, 2009

Spin Hall Effect is a phenomenon where spin separation is induced by nonzero electric current. There are at least two reasons for such a behaviour - the presence of spin-orbit interactions and/or the action of the internal induced magnetic field. The Spin Hall effect has been experimentally observed in wires containing 2D electron gas. The aim of this project is to model the appearance of spin-polarisation due to spin-orbit interaction and nonzero electrical current in 2D electron gas confined in GaAs/GaAlAs quantum well.

**Pod'akovanie:**

Chcel by som poďakovať doc. Ing. Petrovi Bokesovi, PhD. za čas, ktorý mi venoval a za diskusie o nielen odborných problémoch.

## **Vyhlásenie**

Čestne vyhlasujem, že som diplomovú prácu vypracoval samostatne a použil som len literatúru, ktorú uvádzam v zozname.

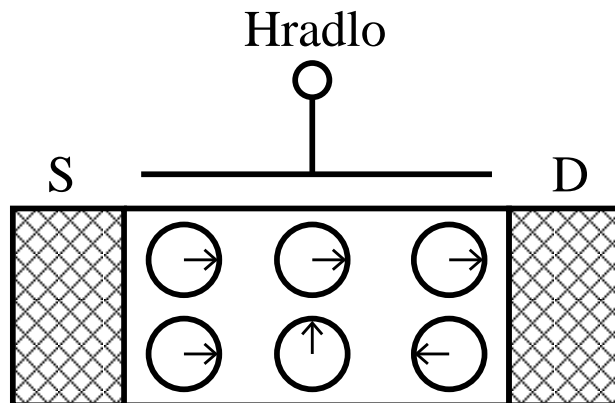
V Bratislave, dňa 22.5.2009

# Obsah

|  |    |
|--|----|
| Úvod   | 2  |
| 1 Dvojrozmerný elektrónový plyn                    | 5  |
| 2 Model vzorky                                     | 7  |
| 3 Elektrónová hustota                              | 10 |
| 4 Jednoduchý model hrany vzorky                    | 13 |
| 4.1 Viazané stavy . . . . .                        | 14 |
| 4.2 Rozptylové stavy . . . . .                     | 17 |
| 5 Korekcia k jednoduchému modelu hrany vzorky      | 20 |
| 5.1 Potenciálna energia pri hrane vzorky . . . . . | 20 |
| 5.2 Viazané stavy . . . . .                        | 23 |
| 5.3 Rozptylové stavy . . . . .                     | 25 |
| 6 Výpočet spinovej polarizácie a magnetizácie      | 26 |
| 7 Záver  | 29 |
| A Separácia premenných                             | 30 |
| B Výpočet elektrónovej hustoty                     | 31 |
| C Podmienky spojitosti pre viazané stavy           | 33 |
| D Podmienky spojitosti pre rozptylové stavy        | 34 |
| E Závislosť magnetizácie od hraníc integrovania    | 35 |
| Zoznam bibliografických odkazov                    | 36 |

## Úvod

Spintronika predstavuje v súčasnosti nový odbor modernej elektroniky, kde nie elektrický náboj elektrónu, ale jeho spin hrá dominantnú úlohu [4]. Zatiaľ čo spintronika založená na kovových materiáloch si už našla svoje miesto v priemysle - jav gigantickej magnetorezistencie (GMR) je využívaný pri čítaní informácií z pamäťových médií - polovodičová spintronika sa ešte nedokázala takto uplatniť. Najžiadanejším zariadením v polovodičovej spintronike je spinový tranzistor. Bolo navrhnutých niekoľko spinových tranzistorov s rôznymi výhodami a nevýhodami, ale bez experimentálnej demonštrácie sa teoretické návrhy ťažko posudzujú.



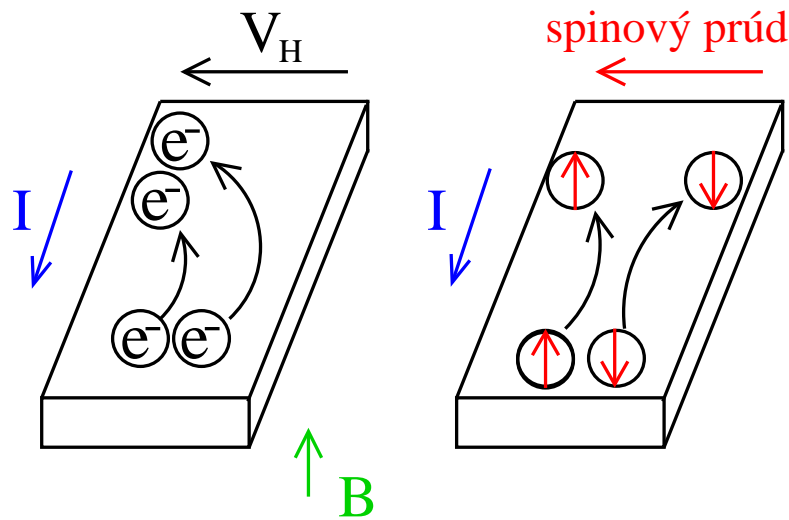
Obrázok 1: Schématické znázornenie spinového tranzistora. “S” (Source) predstavuje zdrojovú a “D” (Drain) odtokovú elektródu vyrobenú z feromagnetického materiálu. Spiny elektrónov vykonávajú precesný pohyb vplyvom spin-orbitálnej interakcie, ktorej veľkosť je riadená hradlom. V závislosti od rýchlosti precesie spin buď precesuje veľmi pomaly (alebo v párnych násobkoch  $\pi$ ), v tomto prípade elektróny budú vstupovať do odtokovej elektródy (ON) alebo v nepárnych násobkoch  $\pi$ , čo spôsobí odrazenie elektrónu späť (OFF).

Tzv. Datta-Das spinový tranzistor, obrázok 1, využíva Rashbovu spin-orbitálnu interakciu na jeho riadenie [12]. Zdrojová a odtoková elektróda sú z feromagnetického materiálu. Transportný kanál tvorí dvojrozmerný elektrónový plyn. Vrchné hradlo určuje veľkosť spin-orbitálnej interakcie. Elektróny injektované s hybnosťou paralelnou s transportným kanálom cítia efektívne magnetické pole, vplyvom spin-orbitálnej interakcie, ktoré je kolmé k ich pohybu. Spiny elektrónov potom vykonávajú precesný pohyb s jednou frekvenciou, za predpokladu jednorozmerného balistického transportu. V závislosti od rýchlosti precesie spin buď precesuje veľmi pomaly (alebo v

párnych násobkoch  $\pi$ ), v tomto prípade elektróny budú vstupovať do odto-  
kovej elektródy (ON) alebo v nepárnych násobkoch  $\pi$ , čo spôsobí odrazenie  
elektrónu späť (OFF).

Sľubnú metódu, pomocou ktorej možno priestorovo separovať elektróny  
s rôznou orientáciou spinu bez použitia magnetického poľa, predstavuje spi-  
nový Hallov jav. Tento jav by mohol byť využitý pri injekcii, manipulácii  
a detekcii spinovo polarizovaných elektrónov v polovodičových zariadeniach,  
ktoré by sa používali v spintronike.

Už v roku 1971 Michel D'yakonov a Vladimir Perel' poukázali na to,  
že kvantová vlastnosť elektrónu, spin elektrónu, môže viesť k novej forme  
Hallého javu, ktorý je spôsobený spin-orbitálnou interakciou [10].



Obrázok 2: V klasickom Hallovom jave (vľavo) sú elektróny v prítomnosti  
magnetického poľa vytláčané k hrane tenkej vzorky. To spôsobí vznik napä-  
tia  $V_H$ , ktoré je úmerné veľkosti prúdu a magnetického poľa. V spinovom  
Hallovom jave (vpravo) elektróny so spinom “hore” sú vychylované na jednu  
stranu vzorky a elektróny so spinom “dole” na opačnú stranu. Dôsledkom  
toho je spinový prúd, ktorý je kolmý na smer elektrického prúdu. Spinový  
Hallov jav nastáva aj bez prítomnosti magnetického poľa.

Termín spinový Hallov jav bol zavedený na základe podobnosti s klasic-  
kým Hallovým javom, pri ktorom elektróny pohybujúce sa vo vodiči, ktorý  
má tvar tenkého pásika, v prítomnosti kolmého magnetického poľa sú vy-  
tláčané k jednej hrane vodiča. To spôsobí vznik napätia, ktoré je úmerné  
veľkosti prúdu a magnetického poľa. Pri spinovom Hallovom jave dochádza  
pri prechode elektrického prúdu cez vodič k odkloneniu elektrónov so spinom



“hore” na jednu stranu vodiča a elektrónov so spinom “dole” na druhú stranu vodiča. Výsledkom je spinový prúd, ktorý je kolmý na smer tečúceho prúdu. Na vytvorenie spinového Hallovhov javu nie je potrebné žiadne magnetické pole (obrázok 2).

Experimentálne bol Spinový Hallov jav pozorovaný na základe javu zvanom Kerrova rotácia [10]. Pri tomto jave dochádza k rotácii roviny polarizovaného svetelného lúča, ktorý dopadá kolmo na vzorku. Polarizačná os odrazeného lúča od materiálu sa pootočí o uhol, ktorého veľkosť je úmerná magnetizácii materiálu, takže z merania sa môže určiť relatívny počet elektrónov so spinom “hore” a “dole”. Efekt spinovej polarizácie je veľmi malý, iba jeden elektrón z 10 000 je spinovo polarizovaný. Experimenty boli vykonané pri teplotách 30K na vzorkách vyrobených z  $n$ -GaAs a  $n$ -InGaAs filmov narastených na polovodičovom substráte.

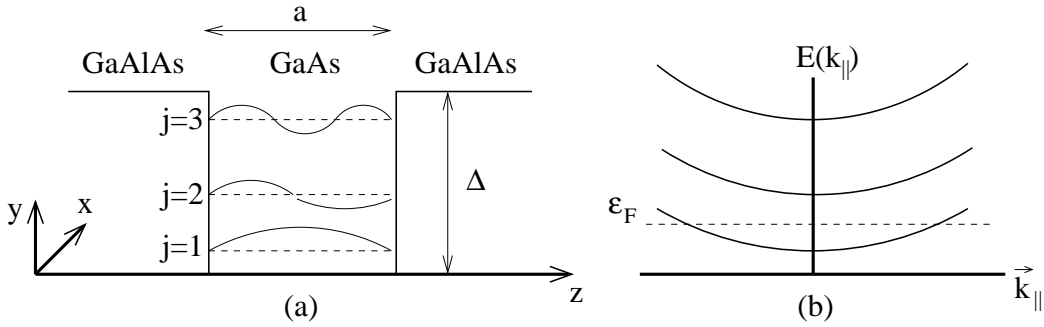
Odklonenie elektrónov s opačnou orientáciou spinu k rôznym hranám vodiča je spôsobené spinovo závislým rozptylom na nečistotách. Tento typ spinového Hallovhov javu sa označuje ako *extrinzičný*. Nedávno sa ukázalo, že môže existovať aj iný mechanizmus vzniku spinového Hallovhov javu. Označuje sa ako *intrinzičný* spinový Hallov jav a je spôsobený kryštálovou štruktúrou materiálu, pričom nastáva aj bez prítomnosti nečistôt [10].

V našej práci sa budeme zaoberať vplyvom hrán vzorky v dvojrozmerných polovodičových štruktúrach na spinovú polarizáciu. Potenciálna energia od hrany vzorky predstavuje určitú poruchu vzhľadom na potenciálnu energiu od ideálnej mriežky. Predpokladáme, že ak porucha spôsobená nečistotami vytvára spinovú polarizáciu, tak aj porucha, ktorú predstavuje hrana systému môže viesť k podobnému javu.

V kapitole 1 popíšeme základné vlastnosti dvojrozmerného elektrónového plynu. V kapitole 2 zavedieme model vzorky, ktorý budeme uvažovať pri výpočtoch. Kapitola 3 je venovaná výpočtu elektrónovej hustoty v dvojrozmerných štruktúrach. V ďalších kapitolách 4 a 5 sa budeme zaoberať modelovaním hrany vzorky vhodným tvarom potenciálnej energie a v kapitole 6 ukážeme výsledky spinovej polarizácie, ktoré sme vypočítali pre náš model.

# 1 Dvozmerný elektrónový plyn

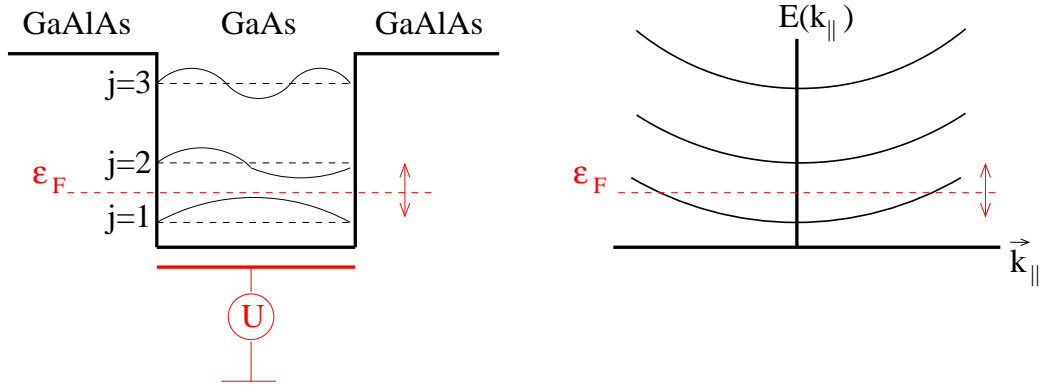
Dvozmerný elektrónový plyn (2DEG) tvorí základ pre vytvorenie nanoštruktúr, na ktorých sa jav prúdom indukovanej spinovej polarizácie pozoruje. Je jeden z najdôležitejších nízkorozmerných systémov pre elektrónový transport [1]. Vytvára základ pre poľom riadený tranzistor, ktorý v skratke označujeme ako HEMT (high electron mobility transistor).



Obrázok 3: Schematické znázornenie elektrónových subpásov v jednorozmernej GaAs-GaAlAs kvantovej jame. (a) Kvantované energetické hladiny a vlnové funkcie v smere osi  $z$ , kolmom na rovinu jamy. (b) Závislosť energie od vlnového čísla elektrónu v kvantovej jame. V tomto prípade je obsadený len najnižší subpás.

HEMT je tvorený heteroštruktúrou, v ktorej sa jedna vrstva (GaAs) pripraví veľmi čistá a táto sa obloží dvoma vrstvami (GaAlAs), ktoré sa vhodne nadopujú na vrstvy n-typu, obrázok (3a). Niektoré elektróny prejdú z GaAlAs vrstiev do potenciálovej jamy v GaAs vrstve, kde stratia svoju energiu zrážkami s fonónmi. Elektrón nemá dostatočnú energiu na to, aby “unikol” z jamy, tak ostane v nej viazaný. Odseparovaním elektrónov od donorov sa vytvorí vrstva s vysokou pohyblivosťou elektrónov.

Energia elektrónu je potom daná vlnovým vektorom  $\vec{k}_{||}$  v rovine x-y a diskretným indexom  $j = 1, 2, \dots$ , ktorý zodpovedá energii obsadenej hladiny v potenciálovej jame v smere osi  $z$ . Celkové energetické spektrum, obrázok (3b), sa skladá zo súboru dvozmerných subpásov pre každú hodnotu  $j$ . Podľa kvantovej mechaniky sa dna subpásov nachádzajú pri energiách  $E_j = \frac{\hbar^2}{2m_b a^2} j^2$ , kde  $a$  je šírka jamy. Ak  $a$  bude dostatočne malé, nastane situácia, kedy energetický rozdiel medzi dvoma najnižšími subpásmi je oveľa väčší ako charakteristická kinetická energia v rovine pohybu. V takomto prípade sa všetky elektróny nachádzajú na najnižšom subpáse a ich kinetická energia závisí len na dvozmernom vlnovom vektore  $\vec{k}_{||}$ . Ak elektróny nemajú dostatočnú energiu na obsadenie vyšších subpásov, dostávame 2DEG.



Obrázok 4: Schematicky zobrazená zmena elektrónovej hustoty elektrickým potenciálom  $U$  na hradlovej elektróde, čím meníme vodivosť v dvojrozmernom elektrónovom plyne.

Podobne ako pri ostatných, poľom riadených tranzistoroch, aj pri HEMT meníme hustotu elektrónov a tým aj vodivosť vrstvy napätím na hradlovej elektróde <sup>1</sup>. Schematicky je zmena elektrónovej hustoty zobrazená na obrázku 4.

Typické elektrónové hustoty sú  $n_{2D} \sim 10^{12} \text{cm}^{-2}$ , pre ktoré je Fermiho vlnová dĺžka rovná,  $\lambda_F = \sqrt{2\pi/n} \sim 0.02 \mu\text{m}$  [10]. V bežných atómových jednotkách (a.u.) platí

$$n_{2D} \sim 2.5 \times 10^{-5} \quad (1)$$

$$k_F \sim 1.2 \times 10^{-2}, \quad k_F = \sqrt{2\pi n_{2D}} \quad (2)$$

$$E_F \sim 0.8 \times 10^{-4}, \quad E_F = \pi n_{2D}. \quad (3)$$

<sup>1</sup>Hustotu elektrónov môžeme meniť v rozsahu od  $10^9 \text{cm}^{-2}$  až po  $10^{12} \text{cm}^{-2}$ .

## 2 Model vzorky

Aby sme mohli vypočítať spinovú polarizáciu, musíme poznať elektrónovú vlnovú funkciu, ktorú nájdeme z riešenia jednočasticovej Schrödingerovej rovnice (SchR) v priblížení efektívnej hmotnosti

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (4)$$

v rámci ktorého je Hamiltonián daný v tvare

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_{eff}}\Delta_{\vec{r}} + U(\vec{r}), \quad (5)$$

kde  $\Delta_{\vec{r}} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  a  $U(\vec{r})$  je v priestore pomaly sa meniaci potenciálna energia, daná rozdielom aktuálnej celkovej potenciálnej energie elektrónov v látke a celkovej potenciálnej energii v ideálnom kryštáli. Vo vzťahu (5) nevystupuje periodická potenciálna energia kryštalickej mriežky, jej vplyv je zahrnutý v efektívnej hmotnosti  $m_{eff}$  [5].

Budeme uvažovať, že potenciálna energia  $U(\vec{r})$  sa skladá z dvoch častí: nerelativistickej časti  $V(\vec{r})$ , ktorá je dominantná a malej relativistickej korekcie rádu  $\frac{v^2}{c^2}$ , kde  $v$  je rýchlosť elektrónu a  $c$  je rýchlosť svetla vo vákuu, ktorá je spinovo závislá. Táto relativistická korekcia sa nazýva spin-orbitálna interakcia a budeme ju označovať  $\hat{V}_{SO}(\vec{r})$ . Teda platí, že  $U(\vec{r}) = V(\vec{r}) + \hat{V}_{SO}(\vec{r})$ . Člen  $V(\vec{r})$  predstavuje potenciálnu energiu, ktorá charakterizuje hrany vzorky.

Efekt spinovej polarizácie je spôsobený spin-orbitálnou interakciou  $\hat{V}_{SO}(\vec{r})$ , ktorej tvar vo vákuu je daný ako

$$\hat{V}_{SO}(\vec{r}) = -\lambda[\hat{\sigma} \times \nabla V(\vec{r})] \cdot \hat{\mathbf{k}}; \quad \lambda = -\frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} \approx -3.7 \times 10^{-6} \text{ \AA}^2 \quad (6)$$

kde  $\hat{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$  je vektor, ktorého zložky sú Pauliho matice a  $\hat{\mathbf{k}} = \hat{\mathbf{p}}/\hbar$ , kde  $\hat{\mathbf{p}}$  je operátor hybnosti. Je dôležité spomenúť, že pre GaAs platí  $\lambda = 5.3 \text{ \AA}^2$ . To znamená, že spin-orbitálna interakcia je v GaAs o šesť rádov väčšia ako vo vákuu a má opačné znamienko [9].

Ak uvážime, že elektróny sa nebudú pohybovať v smere osi  $z$ , teda  $\langle k_z \rangle = 0$ , môžeme výraz (6) rozpísať po zložkách nasledovne

$$\begin{aligned} \hat{V}_{SO}(\vec{r}) &= -\lambda \left[ k_x \left( \sigma_y \frac{dV}{dz} - \sigma_z \frac{dV}{dy} \right) - k_y \left( \sigma_x \frac{dV}{dz} - \sigma_z \frac{dV}{dx} \right) \right] \\ \hat{V}_{SO}(\vec{r}) &= -\lambda \left[ \frac{dV}{dx} \sigma_z k_y + \frac{dV}{dz} (\sigma_y k_x - \sigma_x k_y) \right], \end{aligned} \quad (7)$$

pričom sme pri druhej rovnici využili, že  $\frac{dV}{dy} = 0$ , pretože predpokladáme, že potenciálna energia  $V(\vec{r})$  nezávisí od súradnice  $y$ . To je dané tým, že hranicu

medzi vzorkou a okolím v smere osi  $y$  neuvažujeme, vzorka je v tomto smere nekonečná. Druhý člen vo vzťahu (7) sa nazýva Rashbova interakcia [6]. Jeho príspevok k spinovej polarizácii je podstatne menší v porovnaní s členom úmerným  $\frac{dV}{dx}$  a preto ho nebudeme v ďalšom uvažovať [7].

Na základe spomenutých predpokladov napíšeme spin-orbitálnu ako

$$\hat{V}_{SO}(x, y) = -\lambda\hat{\sigma}_z \frac{dV}{dx} \left( -i \frac{\partial}{\partial y} \right). \quad (8)$$

Potenciálnu energiu  $U(\vec{r})$  môžeme teraz vyjadriť v tvare  $U(\vec{r}) = U(x, y) + U(z)$ .  $U(x, y)$  je daná ako súčet potenciálnej energie od hrany vzorky v smere osi  $x$  a potenciálnej energie od spin-orbitálnej interakcie, zatiaľčo  $U(z)$  sa rovná iba potenciálnej energii od hrany vzorky v smere osi  $z$ . Budeme predpokladať, že potenciálna energia  $U(z)$  má tvar pravouhlej potenciálovej jamy, tak ako je zobrazené na obrázku (3a).

Rovnicu (4) na základe spomenutých predpokladov napíšeme v nasledujúcom tvare:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_{eff}} \Delta_{\vec{r}} + U(x, y) + U(z) \right) \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z). \quad (9)$$

Teraz zavedieme tzv. prirodzené jednotky, ktoré sú charakteristické pre daný problém, t.j. veličiny, s ktorými pracujeme, sú v nich rádovo rovné jednej. Napríklad pre Fermiho energiu dostaneme v týchto jednotkách hodnotu  $E_F = 3.01$ . Sú zavedené ako

$$r \rightarrow ra_B^*, \quad a_B^* = \frac{\epsilon_r}{m_{ef}} a_B = 185.2a_B = 9.79 \text{ nm} \quad (10)$$

$$E \rightarrow E\text{Ha}^*, \quad \text{Ha}^* = \frac{m_{ef}}{\epsilon_r^2} \text{Ha} = 4.36 \times 10^{-4} \text{Ha} = 11.9 \text{ meV}, \quad (11)$$

kde  $m_{ef}$  je efektívna hmotnosť a  $\epsilon_r$  je relatívna permitivita. Ich hodnoty sú  $m_{ef} = 0.067$  a  $\epsilon_r = 12.4$ , čo sú hodnoty typické pre GaAs.

Pomocou (10) a (11) prepíšeme rovnicu (9) do tvaru

$$\left( -\frac{1}{2} \Delta_{\vec{r}} + U(x, y) + U(z) \right) \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z), \quad (12)$$

kde  $U(x, y)$ ,  $U(z)$  a  $E$  je už v jednotkách  $\text{Ha}^*$ .

Rovnicu budeme riešiť metódou separácie premenných. Postup separácie je v prílohe A, tu napíšeme len konečný výsledok

$$\left( -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tilde{V}(x) + V_{SO}(x) \right) \chi(x) = \varepsilon\chi(x), \quad (13)$$

kde  $\varepsilon = E - \frac{k_y^2}{2}$  a  $k_y$  je kvantové vlnové číslo, ktoré určuje hybnosť elektrónu v smere osi  $y$ ,  $\tilde{V}(x) = V(x) + E_{z1}$ , kde  $E_{z1}$  je energia najnižšej hladiny v potenciálovej jame v smere osi  $z$  a  $V_{SO}(x) = -\lambda\hat{\sigma}_z \frac{dV}{dx}k_y$ .

Aby sme vyjadrili stav elektrónu, musíme zohľadniť tak priestorovú závislosť ako aj spinový stav. Na jeho reprezentáciu použijeme dvojkomponentnú (spinovú) vlnovú funkciu

$$\chi(x) = \begin{pmatrix} \chi_{\uparrow}(x) \\ \chi_{\downarrow}(x) \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Fyzikálny význam  $\chi_{\uparrow}$  a  $\chi_{\downarrow}$  je nasledovný:  $|\chi_{\uparrow}(x)|^2$  udáva hustotu pravdepodobnosti pre nájdenie elektrónu s priemetom spinu na os  $z$  rovným  $+1$  v okolí bodu  $x$ . Podobne  $|\chi_{\downarrow}(x)|^2$  má význam hustoty pravdepodobnosti nájdenia elektrónu s priemetom spinu na os  $z$  rovným  $-1$  v okolí miesta  $x$ . V prípade spinorových vlnových funkcií operátory sú  $2 \times 2$  matice, ktorých prvky sú operátory.

Rovnicu (13) potom prepíšeme do tvaru

$$\begin{pmatrix} \hat{H}_{\uparrow} & 0 \\ 0 & \hat{H}_{\downarrow} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \chi_{\uparrow}(x) \\ \chi_{\downarrow}(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\uparrow} & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\downarrow} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \chi_{\uparrow}(x) \\ \chi_{\downarrow}(x) \end{pmatrix}, \quad (15)$$

kde

$$\hat{H}_{\uparrow} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tilde{V}(x) - \lambda \frac{\partial V}{\partial x} k_y \quad (16)$$

a

$$\hat{H}_{\downarrow} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tilde{V}(x) + \lambda \frac{\partial V}{\partial x} k_y. \quad (17)$$

### 3 Elektrónová hustota

Na konci predchádzajúcej kapitoly sme prišli k SchR (15). Keď nájdeme riešenia tejto rovnice, tak budeme poznať vlnové funkcie stavov, ktoré budú obsadzovať elektróny. Pomocou vlnových funkcií potom vypočítame elektrónové hustoty pre rôzne spiny a z ich rozdielu určíme spinovú polarizáciu pri hrane vzorky v smere osi  $x$ .

Vo všeobecnosti môžeme elektrónovú hustotu v dvojrozmernom prípade vypočítať podľa

$$n(x, y) = \sum_{\nu=1}^N \varphi_{\nu}^*(x, y) \varphi_{\nu}(x, y), \quad (18)$$

kde index  $\nu$  prebieha cez všetky stavy, ktoré sú obsadené elektrónmi<sup>2</sup>. Pri teplote  $T = 0$  K elektróny obsadia všetky stavy, ktorých energia je menšia ako Fermiho energia. V rovnováhe, keď netečie elektrický prúd, je rozdelenie elektrónov nakreslené na obrázku 5 plnou čiarou. Aby elektrický prúd tiekol vo vzorke v smere osi  $y$ , posunieme Fermiho plochu o hodnotu  $u$  v smere  $k_y$ , tak ako je nakreslené na obrázku 5 prerušovanou čiarou. Takéto obsadenie je najpravdepodobnejšie pre daný prúd a najnižšiu energiu systému [8]. Pre prúdovú hustotu potom platí vzťah

$$j = n_{2D} u, \quad (19)$$

pričom volíme  $u \ll k_F$ .

Pripomíname, že vlnová funkcia  $\varphi(x, y)$  je tzv. obálková vlnová funkcia, pretože SchR (4) riešime v priblížení efektívnej hmotnosti. Elektrónová hustota vypočítaná z obálkovej vlnovej funkcie je rovná elektrónovej hustote vypočítanej z pôvodnej vlnovej funkcie, ktorá je ustrednená cez bunku kryštalickej mriežky.

Dvojrozmernú vlnovú funkciu môžeme napísať ako

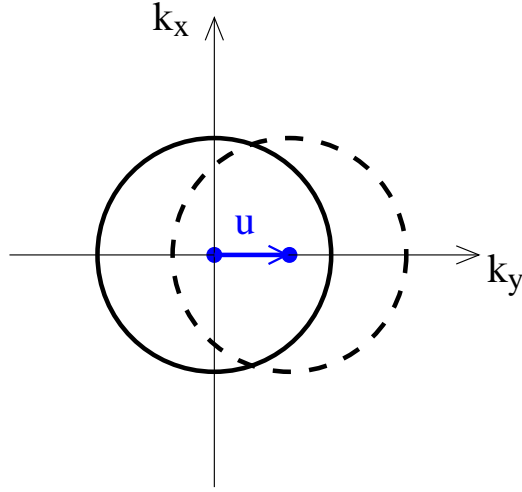
$$\varphi_{k_x, k_y}(x, y) = \chi_{k_x, k_y}(x) \phi_{k_y}(y), \quad (20)$$

kde  $\phi_{k_y}(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ik_y y)$ .

V ďalších kapitolách uvidíme, že vlnová funkcia  $\chi_{k_x, k_y}(x)$  bude popisovať dva rôzne typy stavov: viazané stavy, ktoré môžu existovať v potenciálovej jame, ktorá vznikne pripočítaním člena  $V_{SO}(x)$  k potenciálnej energii  $\tilde{V}(x)$  a rozptylové stavy, ktorých energia je väčšia ako energia viazaných stavov a je úmerná  $k_x^2$ . Pretože spin-orbitálna interakcia je závislá od  $k_y$ , aj vlnové funkcie budú závislé od  $k_y$ .

---

<sup>2</sup>Stavy budeme indexovať kvantovými číslami  $k_x, k_y$  namiesto indexu  $\nu$ .



Obrázok 5: V rovnováhe, keď netečie elektrický prúd, obsadia elektróny pri nulovej teplote všetky stavy, ktorých energia je menšia ako Fermiho energia, plná čiara. Pretože chceme, aby vo vzorke tiekol elektrický prúd v smere osi  $y$ , posunieme Fermiho plochu o hodnotu  $u$  v smere  $k_y$ , prerušovaná čiara. Hodnotu  $u$  volíme tak, aby platilo  $u \ll k_F$ .

V prílohe B je ukázané, že hustotu pri mnoho-elektrónových systémoch nachádzajúcich sa v makroskopickom objeme  $V$ , vypočítame v jednom rozmere podľa vzťahu

$$n(x) = \int dk \varphi_k^*(x) \varphi_k(x), \quad (21)$$

kde sa integruje cez všetky stavy  $k$ , ktoré sú obsadené elektrónmi a vlnová funkcia má tvar

$$\varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx), \quad (22)$$

ktorá je normovaná na  $\delta$ -funkciu [3].

Ak zovšeobecníme výraz (21) na dva rozmery a uvážime, že v smere osi  $x$  môžu existovať viazané aj rozptylové stavy, tak dostaneme

$$\begin{aligned} n(x, y) = & \int_0^\infty dk_x \int_{-\infty}^\infty dk_y |\varphi_{k_x, k_y}(x, y)|^2 n_F(E) + && \Rightarrow \text{rozptylové stavy} \\ & + \int_{-\infty}^\infty dk_y |\phi_{k_y}(y)|^2 \left( \sum_\nu |\chi_{\nu, k_y}(x)|^2 \right) n_F(E), && \Rightarrow \text{viazané stavy} \end{aligned} \quad (23)$$



pričom suma prebieha pre dané  $k_y$  cez všetky viazané stavy. Dôvod, prečo dolná hranica integrovania v prvom člene výrazu (23) je nulová, je ten, že pre hodnoty  $k_x > 0$  sú rozptylové stavy identické s tými, ktoré by sme dostali pre  $k_x < 0$ . Pretože v danom kvantovom stave sa môže nachádzať najviac jeden elektrón, musíme si vybrať jeden z intervalov pre  $k_x$ . My sme si vo výpočtoch zvolili interval  $k_x > 0$ .

Funkcia  $n_F(E)$  je daná ako

$$n_F(E) = \begin{cases} 1 & \text{ak } E < E_F \\ 0 & \text{ak } E > E_F. \end{cases}$$

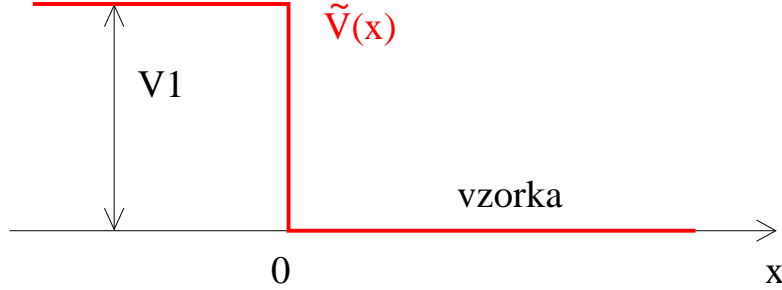
Energia elektrónu je v prípade rozptylových stavov v smere osi  $x$  rovná  $E = k_x^2/2 + k_y^2/2$  a v prípade viazaných stavov  $E = \varepsilon_\nu + k_y^2/2$ , kde  $\varepsilon_\nu$  je energia  $\nu$ -tého viazaného stavu. To znamená, že funkcia  $n_F(E)$  zabezpečuje, aby energia elektrónu v danom stave bola menšia ako Fermiho energia.

Ak uvážime vyjadrenie pre  $\phi_{k_y}(y)$  a dosadíme ho do rovnice (23) dostaneme

$$n(x) = \int_0^\infty dk_x \int_{-\infty}^\infty \frac{dk_y}{2\pi} |\chi_{k_x, k_y}(x)|^2 n_F(E) + \int_{-\infty}^\infty \frac{dk_y}{2\pi} \left( \sum_\nu |\chi_{\nu, k_y}(x)|^2 \right) n_F(E). \quad (24)$$

Tento výraz budeme používať pre výpočet elektrónovej hustoty v ďalších kapitolách.

## 4 Jednoduchý model hrany vzorky



Obrázok 6: Výpočet spinovej polarizácie robíme len pre jednu hranu vzorky v smere osi  $x$ , preto aj na tomto obrázku je naznačený priebeh potenciálnej energie  $\tilde{V}(x)$  len pri ľavej hrane vzorky. Hranu modelujeme potenciálnou energiou, ktorá má v bode  $x = 0$  konečnú nespojitosť.  $V_1$  má hodnotu  $229.0 \text{ Ha}^*$ .

Výpočet spinovej polarizácie budeme robiť len pre jednu hranu vzorky. Pretože typická šírka vzorky v experimentoch [11] je  $100\mu\text{m}$  ( $\sim 10^4 \text{ a.u.}^*$ ), môžeme vzorku v smere osi  $x$  považovať za polonekonečnú. Pre druhú hranu by mala spinová polarizácia opačné znamienko.

Na konci kapitoly 2 sme prišli k rovnici (15), ktorú teraz budeme riešiť pre nami zvolenú potenciálnu energiu  $\tilde{V}(x)$ . Táto je pri ľavej hrane vzorky daná ako

$$\tilde{V}(x) = \begin{cases} V_1 & \text{ak } x < 0 \\ 0 & \text{ak } x > 0 \end{cases}$$

a jej priebeh je na obrázku 6.

Pretože potenciálna energia  $\tilde{V}(x)$  je daná, jediné čo potrebujeme určiť v SchR (15), aby sme ju mohli riešiť, je tvar potenciálnej energie súvisiacej so spin-orbitálnou interakciou. Deriváciou potenciálnej energie  $V(x) = \tilde{V}(x) - E_{z1}$  dostaneme

$$\begin{aligned} V_{SO}(x) &= -\lambda\sigma_z \frac{\partial V}{\partial x} k_y \\ V_{SO}(x) &= \lambda\sigma_z V_1 \delta(x) k_y, \end{aligned} \quad (25)$$

kde  $\delta(x)$  je Diracova funkcia.

Dosadením  $V_{SO}(x)$  do rovnice (15) dostaneme

$$\left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \tilde{V}(x) \pm \alpha \delta(x) k_y \right) \chi(x) = \varepsilon \chi(x), \quad (26)$$

kde sme použili označenie  $\alpha = \lambda V_1$ . Aby sme skrátili zápis vzťahov, namiesto dvojkomponentného zápisu používame obyčajný zápis. Pre spin “hore” bude platiť horné znamienko, teda + a pre spin “dole” spodné znamienko, teda  $-$ . Tento zápis budeme využívať aj v ďalších častiach textu.

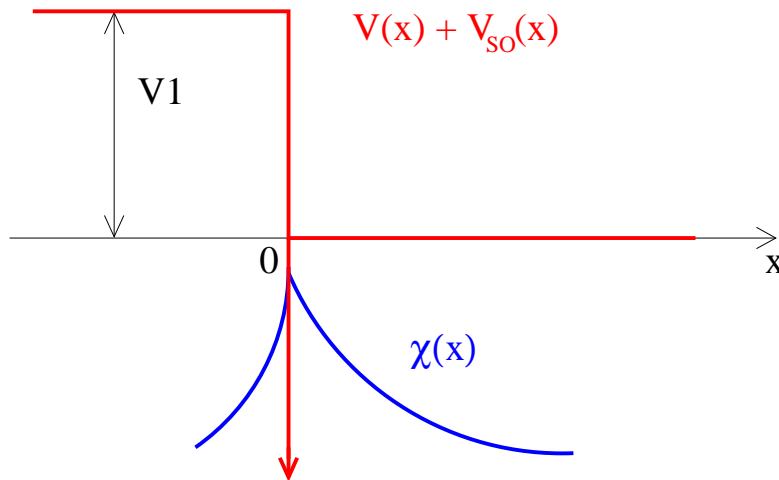
Z tvaru rovnice (26) je vidieť, že v závislosti od orientácie spinu elektrónu a smeru jeho pohybu v smere osi  $y$  (pohyb je určený vlnovým číslom  $k_y$ ), sa bude potenciálna energia od spin-orbitálnej interakcie alebo pripočítavať alebo odpočítavať od potenciálnej energie  $\tilde{V}(x)$ .

#### 4.1 Viazané stavy

Pri hľadaní viazaných stavov elektrónu v poli s potenciálnou energiou (obrázok 7), ktorá je daná ako

$$V_1\Theta(-x) + \kappa\delta(x), \quad (27)$$

budeme vychádzať z podmienky spojitosti vlnovej funkcie v bode  $x = 0$ . Spojitosť derivácie vlnovej funkcie nebudeme požadovať, kvôli  $\delta$ -funkcii v bode  $x = 0$ . V rovnici (27) sme použili označenie  $\kappa = \pm\alpha k_y$ , pričom musí platiť  $\kappa < 0$ , inak by sme nemali jamu, ale bariéru.



Obrázok 7: Priebeh výslednej potenciálnej energie pri ľavej hrane vzorky, ktorú sme dostali ako súčet potenciálnej energie, ktorá vytvára hranicu medzi vzorkou a okolím  $\tilde{V}(x)$  a potenciálnej energie od spin-orbitálnej interakcie  $V_{SO}(x)$ . Okrem toho je na obrázku kvalitatívne zobrazený viazaný stav v potenciálovej jame.

Vlnovú funkciu v oblasti  $x < 0$  môžeme napísať v tvare

$$\chi_1(x) = \exp(kx), \quad (28)$$

a v oblasti  $x > 0$  ju napíšeme ako

$$\chi_2(x) = D \exp(-lx), \quad (29)$$

kde  $k = \sqrt{2(V_1 - \varepsilon)}$  a  $l = \sqrt{-2\varepsilon}$ . V rovnici (28) (resp. (29)) sme nepísali člen úmerný  $\exp(-kx)$  (resp.  $\exp(lx)$ ), pretože vlnová funkcia viazaného stavu musí pre  $x$  mimo jamy klesať k nule.

Z podmienky spojitosti vlnovej funkcie v bode  $x = 0$  dostaneme

$$\begin{aligned} \chi_1(x=0) &= \chi_2(x=0) \\ 1 &= D \end{aligned} \quad (30)$$

a pre deriváciu vlnovej funkcie platí

$$\begin{aligned} \chi_2'(x=0) - \chi_1'(x=0) &= 2\kappa\chi(x=0) \\ -l - k &= 2\kappa, \end{aligned} \quad (31)$$

pričom sme využili rovnicu (30).

Ak dosadíme za  $l$  a  $k$  do rovnice (31) a upravíme ju, dostaneme

$$\sqrt{-2\varepsilon} = -\kappa + \frac{V_1}{2\kappa}. \quad (32)$$

Z tejto rovnice už vieme ľahko vypočítať energiu viazaného stavu  $\varepsilon$  pre zvolenú hodnotu  $k_y$ . Avšak, nie pre každé  $k_y$  existuje viazaný stav. To možno vidieť z toho, že pravá strana rovnice (32) môže byť pre niektoré hodnoty  $k_y$  záporná a teda by sme dostali

$$\sqrt{-2\varepsilon} < 0, \quad (33)$$

čo je nezmysel. Preto skúsme nájsť, pre aké hodnoty  $k_y$  je pravá strana rovnice (32) kladná. Tým vlastne nájdeme podmienku, pre aké hodnoty  $k_y$  existuje viazaný stav.

Hľadáme také hodnoty  $k_y$ , pre ktoré je splnená nasledovná podmienka

$$\kappa < \frac{V_1}{2\kappa}, \quad (34)$$

pričom  $\kappa$  musí byť záporná (ako bolo spomenuté na začiatku tejto kapitoly). Ak dosadením za  $\kappa$  a uvážime, že pre spin “hore” je  $\kappa < 0$  len ak je  $k_y < 0$  dostaneme

$$k_y \in \left( -\infty, -\frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{V_1}{2}} \right). \quad (35)$$

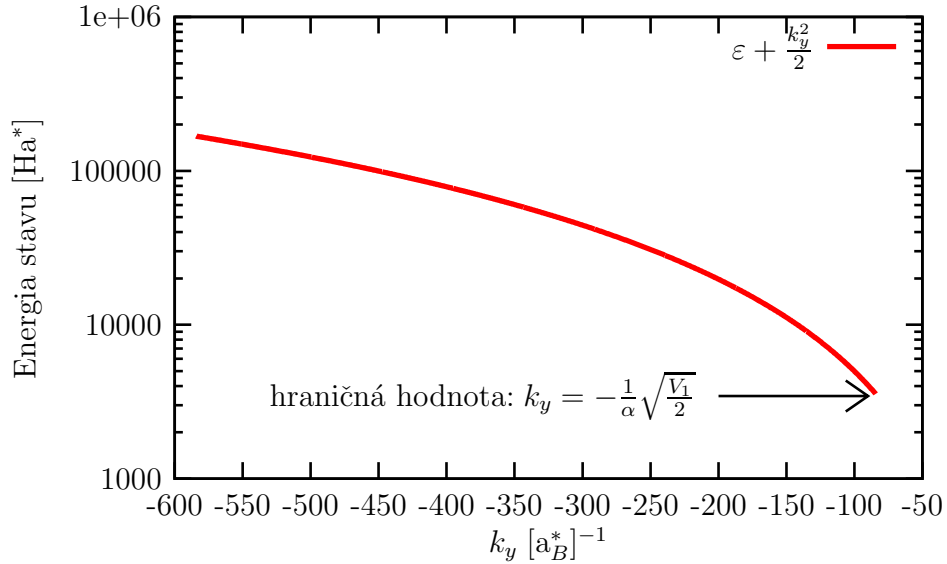
Teda viazaný stav pre spin “hore” existuje len pre hodnoty  $k_y$  dané podmienkou (35). Pre spin “dole” dostaneme podobným postupom nasledovnú podmienku

$$k_y \in \left( \frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{V_1}{2}}, \infty \right). \quad (36)$$

Podmienku, ktorú musí  $k_y$  spĺňať bez ohľadu na orientáciu spinu je

$$\varepsilon + \frac{k_y^2}{2} \leq E_F, \quad (37)$$

ktorá vyjadruje, že energia elektrónu musí byť menšia alebo rovná Fermiho energii.  $\varepsilon$  predstavuje energiu viazaného stavu.



Obrázok 8: Závislosť energie elektrónu so spinom “hore”, t.j. súčet energie viazaného stavu a energie rozptylového stavu v smere osi  $y$ , od hodnoty  $k_y$ , ktorá je daná podmienkou (35). Šípkou je vyznačená hraničná hodnota energie pre  $k_y = -\frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{V_1}{2}}$ . Pretože táto “hraničná” energia je o tri rády väčšia ako je Fermiho energia ( $E_F = 3.01$ ) a pre menšie  $k_y$  ešte narastá, viazaný stav pre hodnoty, ktoré používame vo výpočtoch nemôže existovať.

Ukážeme, že v reálnych situáciach neexistuje taká hodnota  $k_y$ , aby bola súčasne splnená podmienka (35) a aj podmienka (37). Teda ukážeme, že energia elektrónu so spinom “hore” je pre dovolené hodnoty  $k_y$  väčšia ako Fermiho energia. Výpočet urobíme s nasledujúcimi hodnotami parametrov:  $E_F = 3.01$ ,  $V_1 = 229.0$  a  $\alpha = 0.127$  [13].

Výsledok je na obrázku 8. Červená čiara predstavuje energiu elektrónu  $\varepsilon + k_y^2/2$  pre  $k_y$  dané podmienkou (35). Z obrázku je vidieť, že energia elektrónu je pre hraničnú hodnotu  $k_y = -\frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{V_1}{2}}$  približne o tri rády vyššia ako je Fermiho energia a pre menšie hodnoty  $k_y$  energia elektrónu rastie. Tým sme dokázali, že pre hodnoty, ktoré používame vo výpočtoch, viazaný stav nebude existovať.

Závislosť energie od  $k_y$  pre spin “dole” nebudeme počítat, výsledok, ktorý by sme dostali, by bol len zrkadlovo obrátený. Teda ani pre spin “dole” viazaný stav nebude existovať.

## 4.2 Rozptylové stavy

Energia rozptylových stavov bude z intervalu  $\varepsilon \in (0, V_1)$ . V oblasti  $x < 0$  môžeme riešenie SchR (26) napísať v tvare

$$\chi_1(x) = \exp(k_1x), \quad (38)$$

kde  $k_1 = \sqrt{2(V_1 - \varepsilon)}$ . Koeficient pri člene úmernom  $\exp(-k_1x)$  sme pložili rovný nule, pretože vlnová funkcia musí exponenciálne zanikať v oblasti, kde  $\varepsilon < V_1$ . Koeficient v (38) sme položili rovný jednej, riešenie nakoniec aj tak prenормujeme.

V oblasti  $x > 0$  je všeobecné riešenie SchR (26) dané ako

$$\chi_2(x) = c \exp(ik_2x) + d \exp(-ik_2x), \quad (39)$$

kde  $k_2 = \sqrt{2\varepsilon}$ .

Z podmienky spojitosti vlnovej funkcie dostaneme

$$\begin{aligned} \chi_1(x=0) &= \chi_2(x=0) \\ 1 &= c + d. \end{aligned} \quad (40)$$

Pre deriváciu vlnovej funkcie platí

$$\begin{aligned} \chi_2'(x=0) - \chi_1'(x=0) &= 2\Lambda \\ ick_2 - idk_1 - k_1 &= 2\Lambda, \end{aligned} \quad (41)$$

kde  $\Lambda = \pm\alpha k_y$ .

Dosadením (40) do rovnice (41) dostaneme pre koeficienty  $c$  a  $d$

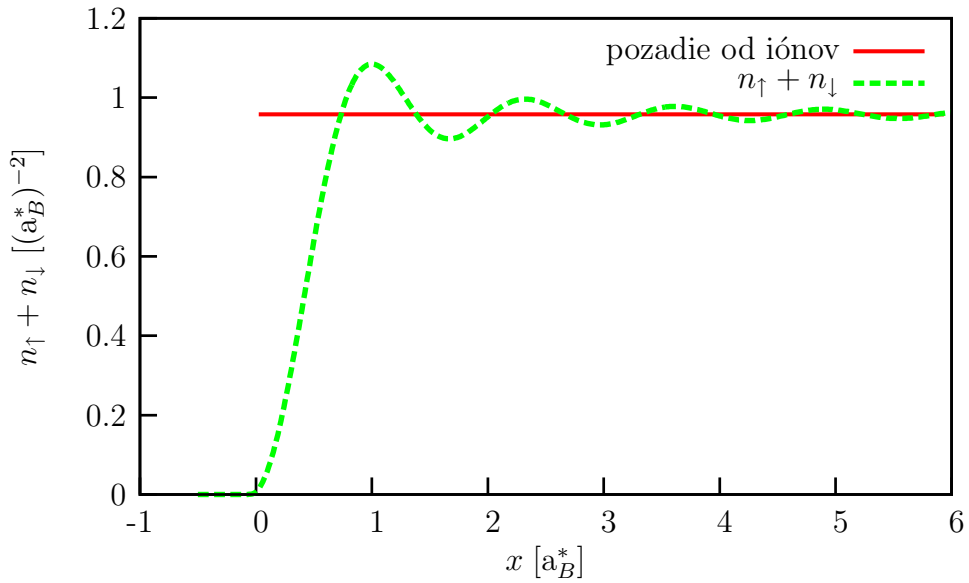
$$c = \frac{2\Lambda + k_1 - ik_2}{2ik_2} \quad (42)$$

$$d = -\frac{2\Lambda + k_1 + ik_2}{2ik_2}. \quad (43)$$

Pre normovanie vlnovej funkcie budeme opäť vychádzať z výsledkov v dodatku B, kde je ukázané, že pre výpočet elektrónovej hustoty musíme normovať rovinné vlny ako  $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx)$ . V našom prípade to znamená, že

$$\chi(x) = \begin{cases} \frac{1}{d} \frac{\exp(k_1 x)}{\sqrt{2\pi}}, & x < 0 \\ \frac{c}{d} \frac{\exp(ik_2 x)}{\sqrt{2\pi}} + \frac{\exp(-ik_2 x)}{\sqrt{2\pi}}, & x > 0 \end{cases}$$

Teda vlnovú funkciu normujeme tak, aby koeficient pri člene  $\exp(-ik_2 x)$  bol rovný  $1/\sqrt{2\pi}$ .



Obrázok 9: Na obrázku je zobrazená závislosť elektrónovej hustoty (zelená čiara) od súradnice  $x$  pri ľavej hrane vzorky. Červená čiara predstavuje pozadie od iónov. Oscilácie elektrónovej hustoty sa nazývajú Friedelove oscilácie a ich vlnová dĺžka je rovná  $\lambda_F/2$ . Výpočet sme urobili pre elektrónovú hustotu  $n = 0.958$ , čomu zodpovedá  $\lambda_F \approx 2.56$ .

Pre výpočet elektrónovej hustoty bol použitý výpočtový program, ktorý je súčasťou diplomovej práce. Úlohou tohto programu je pre zadané parametre (Fermiho energia, prúdová hustota, tvar potenciálnej energie) vypočítať koeficienty vlnových funkcií pre vybranú orientáciu spinu elektrónu a následne podľa vzťahu (24) vypočítať zodpovedajúcu elektrónovú hustotu. Z rozdielu elektrónových hustôt pre rôzne orientácie spinu program vypočíta spinovú polarizáciu. Jej hodnota bude ovplyvnená chybou, ktorej sa dopúšťame pri numerických výpočtoch. Táto chyba je spôsobená konečným krokom integrácie pri výpočte elektrónovej hustoty. Okrem spinovej polarizácie budeme

počítať aj magnetizáciu, ktorej hodnota bude ovplyvnená aj inými faktormi, ako je napríklad voľba hraníc integrálu, čomu sa budeme podrobne venovať v kapitole 6.

Na obrázku 9 je vypočítaná závislosť elektrónovej hustoty (zelená čiara) od súradnice  $x$  pri ľavej hrane vzorky. Červená čiara predstavuje pozadie od iónov. Výpočet sme urobili pre elektrónovú hustotu  $n = 0.958$ , čomu zodpovedá vlnová dĺžka  $\lambda_F \approx 2.56$ .

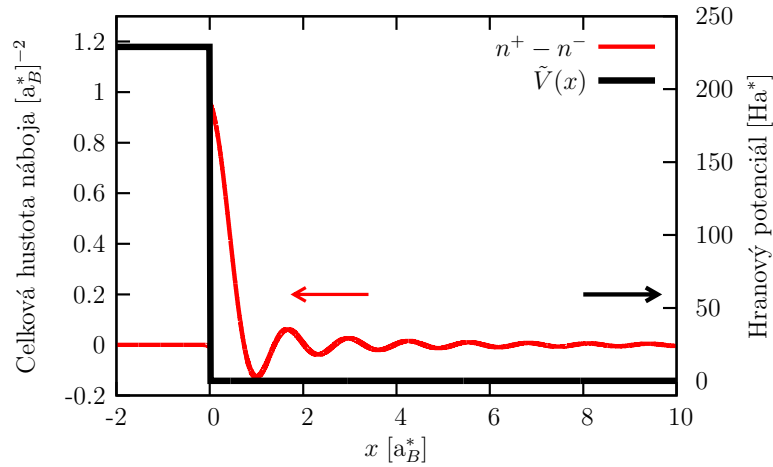
Oscilácie elektrónovej hustoty sa nazývajú Friedelove oscilácie. Takéto oscilácie elektrónovej hustoty vznikajú pri lokalizovanej poruche v ľubovoľnom systéme, pričom vlnová dĺžka Friedelových oscilácií je rovná  $\lambda_F/2$ , kde  $\lambda_F$  je Fermiho vlnová dĺžka. Pôvod týchto oscilácií je v nespojitom obsadzovaní stavov na Fermiho ploche.



## 5 Korekcia k jednoduchému modelu hrany vzorky

### 5.1 Potenciálna energia pri hrane vzorky

Na obrázku 10 je závislosť celkovej hustoty, hustota elektrónov + hustota kladných iónov, od súradnice  $x$  pri ľavej hrane vzorky. Z obrázku je vidieť, že v okolí rozhrania, v bode  $x = 0$ , vznikne oblasť, ktorá nie je neutrálna. Porušenie neutrality je dané tým, že hustota elektrónov v okolí rozhrania je menšia ako hustota kladných iónov. To spôsobí vznik dodatočného elektrického poľa na rozhraní, ktoré bude pôsobiť tak, aby porucha zanikla.



Obrázok 10: Červenou čiarou je zobrazená závislosť celkovej hustoty náboja (kladných iónov a záporných elektrónov) od súradnice  $x$  pri ľavej hrane vzorky. Čierna čiara predstavuje hranový potenciál vzorky  $\tilde{V}(x)$ . Z obrázku je vidieť, že v okolí rozhrania, v bode  $x = 0$ , vznikne oblasť, ktorá nie je neutrálna. To spôsobí vznik dodatočného elektrického poľa na rozhraní, ktoré bude pôsobiť tak, aby porucha zanikla.

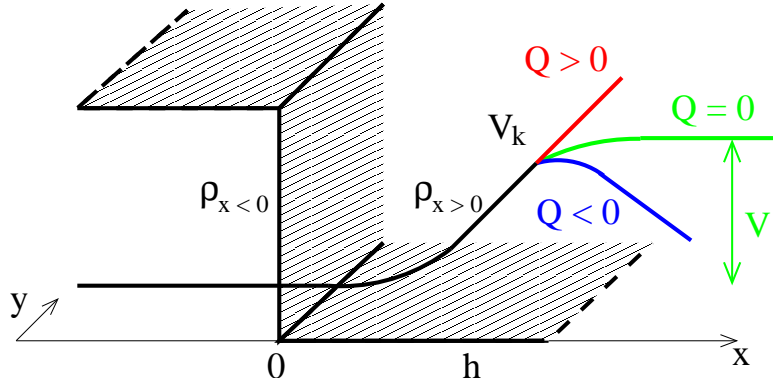
Pri hľadaní tvaru elektrického poľa, ktoré vznikne na rozhraní, budeme vychádzať z Poissonovej rovnice, ktorú môžeme vo všeobecnosti napísať v tvare

$$\Delta\phi = -\frac{\rho}{\varepsilon}, \quad (44)$$

kde  $\phi$  je elektrický potenciál,  $\rho$  je objemová hustota náboja a  $\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$  je permitivita. Rovnicu (44) prepíšeme do prirodzených jednotiek

$$\Delta V_k = -4\pi n, \quad (45)$$

kde sme využili vzťahy  $V_k = -e\phi$  a  $\rho = en$ .  $V_k$  je potenciálna energia a  $n$  je objemová hustota častíc, ktorá je daná ako  $n = n^- - n^+$ , pričom  $n^-$  je hustota elektrónov a  $n^+$  je hustota iónov.



Obrázok 11: Na obrázku je nakreslená ľavá hrana vzorky a priebeh potenciálnej energie  $V_k(x)$ , ktorý je daný na základe rozloženia náboja v smere osi  $x$ , pričom  $Q = \int dx[\rho_{x<0} + \rho_{x>0}]$ .  $\rho_{x<0}$  je hustota náboja v oblasti  $x < 0$ , ktorá je záporná, pretože v tejto oblasti je nenulová iba hustota elektrónov a  $\rho_{x>0}$  je hustota náboja v oblasti  $x > 0$ , ktorá je kladná, pretože v tejto oblasti prevláda hustota iónov nad hustotou elektrónov.

Rovnicu (45) nebudeme riešiť exaktne, namiesto toho odhadneme kvalitatívne riešenie. Predstavme si trojrozmernú vzorku, ktorá má v okolí rozhrania, v bode  $x = 0$ , náboj rozložený takto:  $\rho_{x<0}$  je záporný, pretože v tejto oblasti je nenulová iba hustota elektrónov a  $\rho_{x>0}$  je kladný, pretože v tejto oblasti prevláda kladná hustota iónov nad zápornou hustotou elektrónov. Budeme hľadať priebeh  $V_k$  v smere osi  $x$ . Pre  $x \ll 0$  zvolíme  $V_k(x)$  konštantné. Pretože  $\rho_{x<0}$  je záporné, z rovnice (45) dostaneme, že potenciálna energia  $V_k(x)$  sa bude pred rozhraním zakryvovať smerom nadol (zakryvenie je však veľmi malé, pretože hustota elektrónov je malá).  $\rho_{x>0}$  je kladné, a preto potenciálna energia  $V_k(x)$  sa bude v oblasti  $x > 0$  zakryvovať smerom nahor (hustota iónov je oveľa väčšia ako hustota elektrónov a preto aj zakryvenie potenciálnej energie je veľké), tak ako je to naznačené na obrázku 11. Ak by bol náboj na rozhraní nulový, potenciálna energia  $V_k(x)$  by sa pre  $x \gg 0$  blížila ku konštante  $V$ .

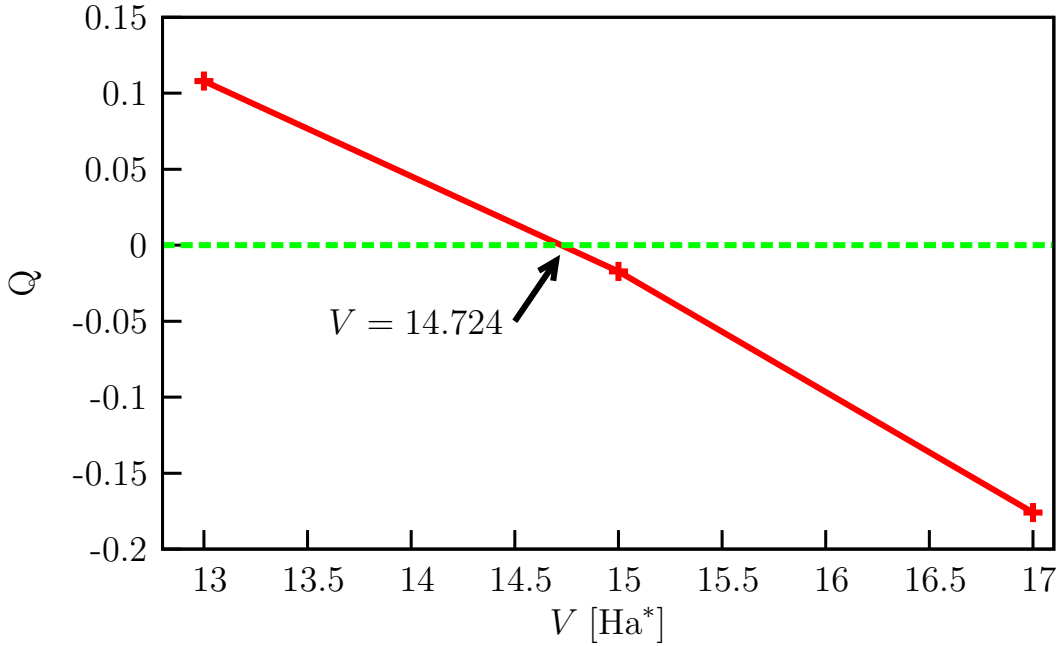
V dvojrozmernom prípade, čo je náš problém, budeme predpokladať, že priebeh potenciálnej energie by bol analogický tomu v trojrozmernom prípade. Bez riešenia budeme teda aproximovať priebeh  $V_k(x)$  lineárnou funkciou v oblasti  $0 < x < h$  a v oblasti  $x < 0$  bude nulová. Hodnotu  $V$ , po ktorú bude  $V_k$  rásť určíme z podmienky

$$\int dx[n^+(x) - n^-(x)] = 0, \quad (46)$$

kde  $n^-$  je hustota elektrónov a  $n^+$  je hustota iónov. Vzdialenosť  $h$ , obrázok

11, na ktorej bude  $V_k(x)$  lineárne rásť bude rovná  $\frac{\lambda_F}{2}$ , kde  $\lambda_F$  je Fermiho vlnová dĺžka. Takúto hodnotu  $h$  sme zvolili kvôli tomu, že  $\lambda_F$  je typická vzdialenosť, na ktorej dochádza pri hrane vzorky k zmenám elektrónovej hustoty.

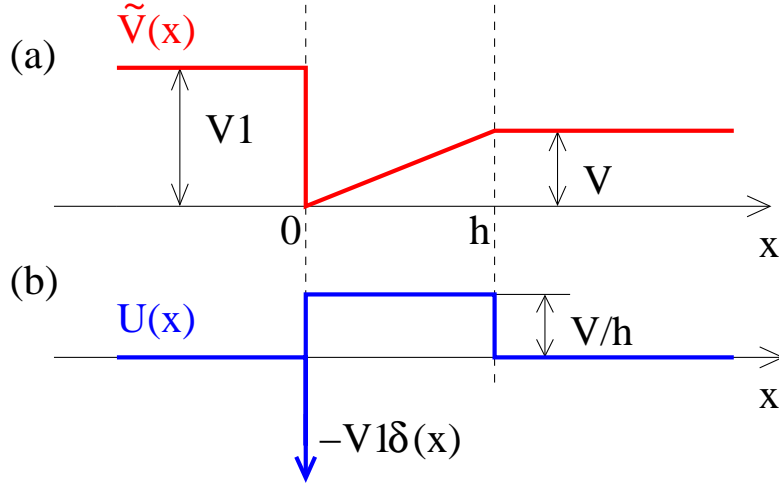
Rovnicu (46) budeme riešiť nasledovným spôsobom: pre zvolenú hodnotu  $V$  vypočítame hustotu elektrónov  $n^-(x)$ , hustota iónov je daná ako  $n^+ = \varepsilon_F/\pi$ , čo zodpovedá 2D hustote elektrónov s Fermiho energiou  $\varepsilon_F$  hlboko vo vzorke. Vypočítame integrál, a ak tento bude kladný, tak musíme  $V$  zväčšiť, aby sme “pritiahli” viac elektrónov bližšie k rozhraniu. Znova, teraz už pre väčšiu hodnotu  $V$ , vypočítame integrál a na základe jeho hodnoty alebo zväčšíme alebo zmenšíme  $V$ . Pre niekoľko hodnôt zostrojíme závislosť  $Q(V)$ , z ktorej odhadneme hodnotu  $V$ , pre ktorú je rozhranie neutrálne. Takáto závislosť je na obrázku 12.



Obrázok 12: Závislosť hodnoty  $Q$ , ktorá je definovaná ako  $Q = \int dx[n^+(x) - n^-(x)]$ , od hodnoty  $V$ .  $n^+$  a  $n^-$  sú hustoty iónov a elektrónov pre zvolenú hodnotu  $V$ . Rozhranie je neutrálne pre tú hodnotu  $V$ , pre ktorú je  $Q$  rovné nule.

Keď budeme poznať tvar  $V_k(x)$  s odhadom hodnoty  $V$ , tak túto potenciálnu energiu potom budeme považovať za korekciu k pôvodnej potenciálnej energii.

Potenciálna energia  $\tilde{V}(x)$ , už aj s korekciou, bude mať v blízkosti rozhrania priebeh daný podľa obrázku (13a). Spin-orbitálna potenciálna energia,



Obrázok 13: (a) Priebek potenciálnej energie  $\tilde{V}(x)$  už aj s korekciou  $V_k(x)$  pri ľavej hrane vzorky. (b) Potenciálna energia  $U(x)$  predstavuje deriváciu hranového potenciálu, teda  $U(x) = \frac{d\tilde{V}(x)}{dx}$ .

vystupujúca v Hamiltoniáne (15), bude mať tvar

$$V_{SO}(x) = -\lambda\sigma_z U(x)k_y, \quad (47)$$

kde sme označili  $U(x) = \frac{dV(x)}{dx}$  a priebek tejto potenciálnej energie je na obrázku (13b). Dosadením tohto vyjadrenia do (15) dostaneme

$$\left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \tilde{V}(x) \mp \lambda U(x)k_y \right) \chi(x) = \varepsilon \chi(x). \quad (48)$$

## 5.2 Viazané stavy

Vlnovú funkciu v oblasti  $x < 0$  môžeme napísať v tvare:

$$\chi_1(x) = e^{\alpha x}, \quad (49)$$

kde  $\alpha = \sqrt{2(V_1 - \varepsilon)}$ .

Riešenie v oblasti  $0 < x < h$  musí spĺňať rovnicu:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \chi_2(x) + (fx - V_2) \chi_2(x) = \varepsilon \chi_2(x), \quad (50)$$

kde  $V_2 = \pm \lambda \frac{V k_y}{h}$  a  $f = \frac{V}{h}$ . Pomocou substitúcie  $y = \gamma(fx - V_2 - \varepsilon)$  môžeme rovnicu (50) prepísať do tvaru:

$$-\frac{f^2 \gamma^2}{2} \frac{d^2}{dy^2} \chi_2(y) + \frac{y}{\gamma} \chi_2(y) = 0 \quad (51)$$

a parameter  $\gamma$  zvolíme tak, aby platilo  $\frac{f^2\gamma^2}{2} = \frac{1}{\gamma}$ . Tým dostaneme rovnicu (51) v tvare:

$$\chi''(y) - y\chi(y) = 0. \quad (52)$$

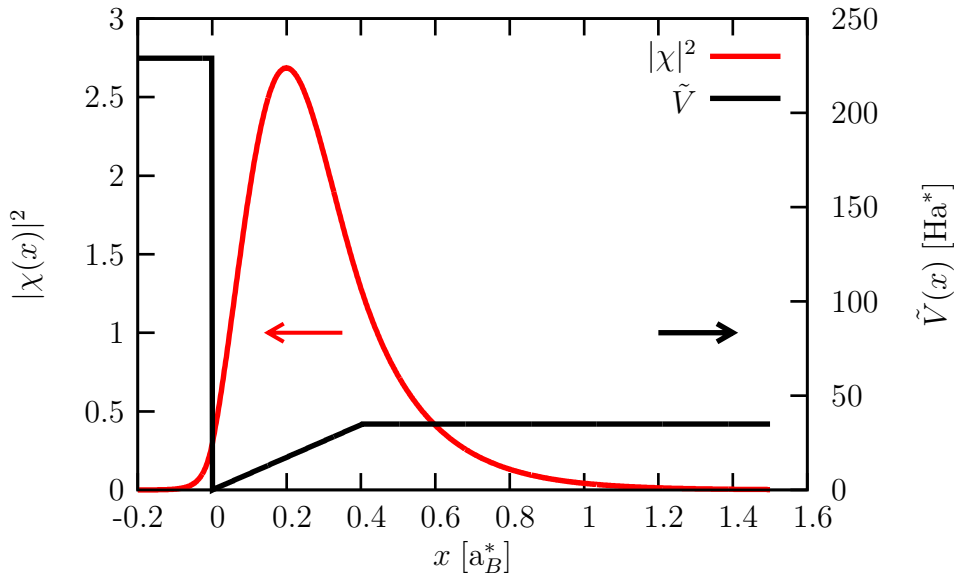
Táto rovnica je tzv. Airyho diferenciálna rovnica, ktorej všeobecné riešenie môžeme napísať pomocou Airyho funkcií:

$$\chi_2(y) = aAi(y) + bBi(y). \quad (53)$$

A nakoniec napíšeme vlnovú funkciu v oblasti  $x > h$  ako

$$\chi_3(x) = de^{-\beta x}, \quad (54)$$

kde  $\beta = \sqrt{2(V - \varepsilon)}$ .



Obrázok 14: Závislosť štvorca absolútnej hodnoty vlnovej funkcie, ktorá reprezentuje základný stav, od súradnice  $x$  v potenciálovej jame. Zo závislosti je vidieť, že energia viazaného stavu je blízko pri vrchole jamy, pretože vlnová funkcia je nenulová ďaleko od jamy.

Pre nájdenie viazaných stavov treba určiť koeficienty  $a, b, d$  a vlastnú energiu  $\varepsilon$  tak, že riešenie je spojité v bodoch  $x = 0$  a  $x = h$ . Kvôli  $\delta$ -funkcii v bode  $x = 0$  nebudeme požadovať, aby v tomto bode bola spojitá aj derivácia riešenia.

Postup ako sme odvodili rovnicu, ktorej riešením sú energie viazaných stavov je v prílohe C, tu napíšeme len výsledok

$$\gamma k[aAi'(y_h) + bBi'(y_h)] + d\beta e^{-\beta h} = 0, \quad (55)$$

kde za koeficienty  $a$ ,  $b$  a  $d$  postupne dosadíme z výrazov (76), (78) a (77).

Na obrázku 14 je kvadrát absolútnej hodnoty vlnovej funkcie pre elektrón so spinom “hore” v závislosti od súradnice  $x$ . Hodnota energie je  $\varepsilon = 30.948$ , pre  $n_{2D} = 9.58$ ,  $V_1 = 229.0$ ,  $V = 35.0$  a  $k_y = 0.0$ .

### 5.3 Rozptylové stavy

Znova budeme vychádzať z rovnice (48), pričom pre energiu bude platiť  $V_1 > \varepsilon > V$ . Postup je analogický tomu v predchádzajúcej časti. Najskôr určíme tvar vlnovej funkcie v jednotlivých oblastiach a potom využijeme podmienky spojitosti vlnovej funkcie v bodoch  $x = 0$  a  $x = h$ .

Riešenie v oblasti  $x < 0$  môžeme napísať v tvare

$$\chi_1(x) = e^{\alpha x}, \quad (56)$$

kde  $\alpha = \sqrt{2(V_1 - \varepsilon)}$ .

V oblasti  $0 < x < h$  má vlnová funkcia podľa (53) tvar:

$$\chi_2(y) = aAi(y) + bBi(y), \quad (57)$$

kde  $y = \gamma(\gamma x - V_2 - \varepsilon)$ .

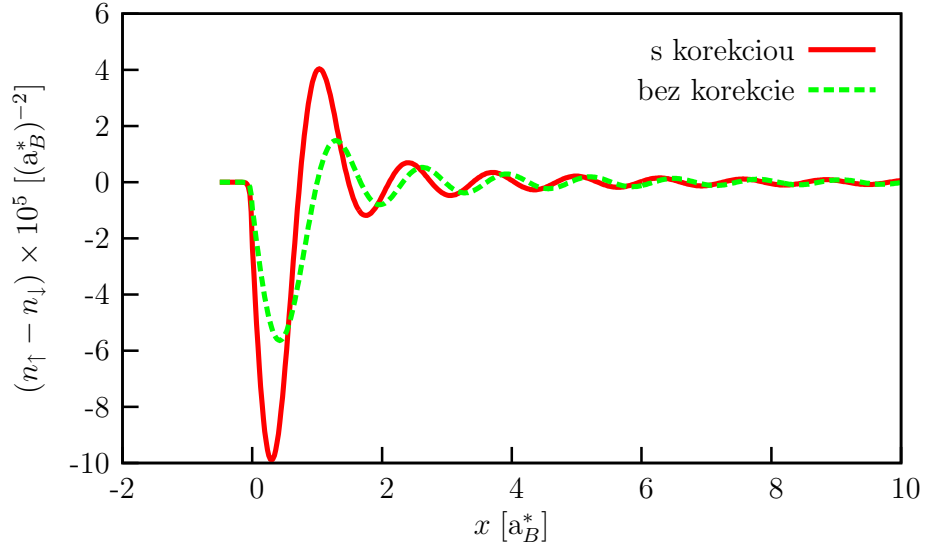
V oblasti  $x > h$  napíšeme riešenie vlnovej rovnice ako

$$\chi_3(x) = ce^{i\beta x} + de^{-i\beta x}, \quad (58)$$

kde  $\beta = \sqrt{2(\varepsilon - V)}$ .

Detailné odvodenie koeficientov  $a, b, c$  a  $d$  je v prílohe D. Pretože poznáme tvar vlnových funkcií môžeme pristúpiť k výpočtu elektrónovej hustoty pre spin “hore” a pre spin “dole” pri hrane vzorky.

## 6 Výpočet spinovej polarizácie a magnetizácie



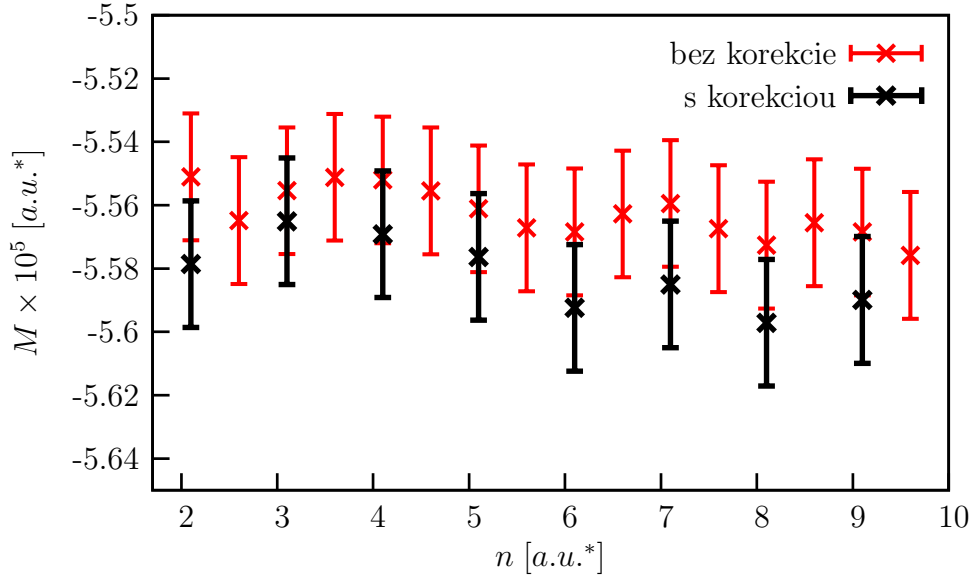
Obrázok 15: Závislosť spinovej polarizácie (rozdielu spinových hustôt  $n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$ ) od súradnice  $x$  pri ľavej hrane vzorky. Z obrázku vidíme, že pri ľavej hrane vzorky budú prevládať elektróny so spinom “dole” a ďalej od rozhrania spinová polarizácia zaniká. Výpočet sme urobili s nasledovnými parametrami:  $n = 0.958, j = 0.057, V_1 = 229.0$

Spinovú polarizáciu počítame ako rozdiel elektrónových hustôt s rôznou orientáciou spinu. Pre výpočet elektrónovej hustoty použijeme vzťah (24). Na obrázku 15 je závislosť spinovej polarizácie ( $n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$ ) od súradnice  $x$  pri ľavej hrane vzorky. Zelenou čiarou je zobrazená závislosť pre potenciálnu energiu bez korekcie a červenou čiarou pre potenciálnu energiu s korekciou. Zo závislostí vidíme, že pri ľavej hrane vzorky budú akumulované elektróny so spinom “dole” a ďalej od rozhrania spinová polarizácia zaniká. Pre model potenciálnej energie s korekciou je jav spinovej polarizácie zosilnený. Pri výpočte sme použili nasledujúce parametre:  $n = 0.958, j = 0.057$ .

Magnetizáciu počítame podľa vzťahu

$$M = \int_{x_0}^{x_1} dx (n_{\uparrow} - n_{\downarrow}), \quad (59)$$

kde  $x_0 = -0.5$  a  $x_1 = 10.0$ . Dôvod takejto voľby je vysvetlený v prílohe E. Pomocou tohto vzťahu sme vypočítali závislosť magnetizácie od elektrónovej hustoty (obrázok 16) a od prúdovej hustoty (obrázok 17). Na obrázku 16



Obrázok 16: Závislosť magnetizácie  $M$  od elektrónovej hustoty  $n$  pri konštantnej hodnote prúdovej hustoty  $j = 0.1$ . Krížikom je vyznačená vypočítaná hodnota magnetizácie a pás predstavuje odhad numerickej chyby, ktorej sme sa dopustili pri výpočtoch. Zo závislosti môžeme povedať, že magnetizácia je nezávislá od elektrónovej hustoty a jej hodnota je približne rovnaká pre obidva modely potenciálnej energie.

je krížikom vyznačená vypočítaná hodnota magnetizácie a pás predstavuje odhad numerickej chyby, ktorej sme sa dopustili pri výpočtoch (voľba  $x_1$ , hustota bodov pri integrovaní). Zo závislosti môžeme povedať, že magnetizácia je nezávislá od elektrónovej hustoty a jej hodnota je približne rovnaká pre obidva modely potenciálnej energie. Výpočet bol urobený pri hodnote prúdovej hustoty  $j = 0.1$ .

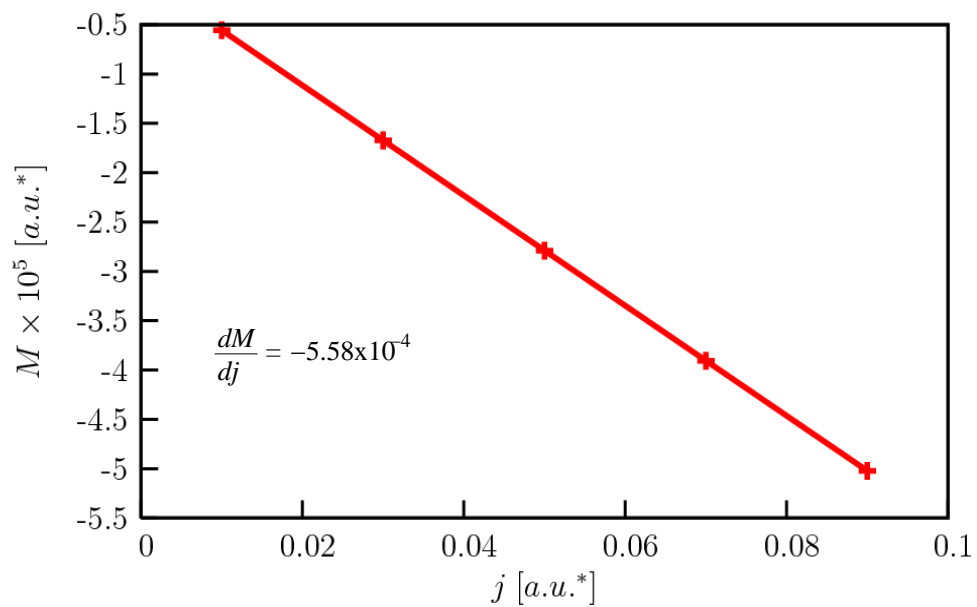
Závislosť magnetizácie od prúdovej hustoty sme vypočítali pre model s korekciou, pri konštantnej hodnote elektrónovej hustoty  $n = 0.958$ . Zo závislosti je vidieť, že magnetizácia narastá pri zvyšovaní prúdovej hustoty, pričom tento nárast je lineárny, čo aj očakávame, pretože uvažujeme  $u \ll k_F$ . Smernica priamky je rovná  $-5.58 \times 10^{-4}$ .

V [7] je odvodený vzťah, ktorý vyjadruje teoretický odhad závislosti magnetizácie od prúdovej hustoty. Jeho tvar je

$$m_z^E = -\frac{(\lambda^E)^2}{4}j,$$

kde  $(\lambda^E)^2/4 \approx 5.53 \times 10^{-4}$ . Porovnaním týchto výsledkov vidíme dobrú zhodu medzi numerickou a teoreticky odhadnutou hodnotou.





Obrázok 17: Závislosť magnetizácie  $M$  od prúdovej hustoty  $j$  pre model s korekciou, pri konštantnej hodnote elektrónovej hustoty  $n = 0.958$ . Zo závislosti je vidieť, že magnetizácia narastá pri zvyšovaní prúdovej hustoty, pričom tento nárast je lineárny. Smernica priamky je rovná  $-5.58 \times 10^{-4}$ .

## 7 Záver

Spinový Hallov jav je jav, pri ktorom dochádza pri prechode prúdu vzorkou ( $y$ ) k akumulácii elektrónov s rôznou orientáciou spinu ( $z$ ) na opačných hranách vzorky ( $x$ ). Tento jav bol pozorovaný v dvojrozmerných polovodičových štruktúrach. Efekt spinovej polarizácie je spôsobený spin-orbitálnou interakciou v týchto štruktúrach.

Cieľom tejto práce bolo študovať ako vplýva hrana vzorky na spinovú polarizáciu. Vo výpočtoch sme uvažovali dvojrozmernú vzorku, ktorá sa nachádzala v rovine  $x$ - $y$ . Pohyb elektrónov v smere osi  $z$  nebol možný. V smere osi  $y$  sme uvažovali vzorku nekonečnú a v smere osi  $x$  sme hranu vzorky modelovali potenciálnou energiou s konečným skokom. Takýto model spôsobil porušenie neutrality vzorky. Aby sme poruchu odstránili, museli sme potenciálnu energiu zmeniť pomocou korekcie.

Pre obidva modely sme pre porovnanie vypočítali spinovú polarizáciu pri ľavej hrane vzorky. Z ich priebehu sme prišli k záveru, že spinová polarizácia bola pre model potenciálnej energie s korekciou zosilnená. Okrem spinovej polarizácie sme počítali aj magnetizáciu. Magnetizáciu sme potom vykreslili v závislosti od elektrónovej hustoty a od prúdovej hustoty. Na základe týchto dvoch závislostí môžeme povedať, že magnetizácia je nezávislá od elektrónovej hustoty a jej hodnota pre prúdovú hustotu  $j = 0.1$  bola približne rovná  $-5.58 \times 10^{-5}$ . Závislosť magnetizácie od prúdovej hustoty je lineárna a s narastaním prúdovej hustoty narastá aj magnetizácia. Smernica priamky je rovná  $-5.58 \times 10^{-4}$ . Táto hodnota sa dobre zhodovala s teoretickým odhadom závislosti magnetizácie od prúdovej hustoty podľa [7].

Z porovnania výsledkov magnetizácie pre obidva modely potenciálnej energie môžeme povedať, že vplyv korekcie na magnetizáciu vzorky bol minimálny. Jej hodnota sa prakticky nezmenila.

Predbežné výpočty však ukazujú, že už malá zmena korekcie (faktor 2 až 4) by mohla viesť k významným zmenám magnetizácie. Preto by bolo zaujímavé skúsiť riešiť tento problém s realistickým tvarom korekcie a zistiť jej vplyv na spinovú polarizáciu.

## A Separácia premenných

Riešenie rovnice (12) hľadáme v “separovanom tvare”  $\psi(x, y, z) = \varphi(x, y)\phi(z)$ . Po dosadení tohto riešenia do rovnice, sa táto rozdelí na dve vzájomne nezávislé rovnice

$$\left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + U(x, y) \right] \varphi(x, y) = (E - E_z)\varphi(x, y) \quad (60)$$

a

$$\left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U(z) \right] \phi(z) = E_z \phi(z). \quad (61)$$

Ak by bola jama nekonečne hlboká, pre vlnovú funkciu a vlastné hodnoty energie platí:

$$\phi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(n\frac{\pi z}{a}\right), \quad E_{zn} = \frac{1}{2} \left(n\frac{\pi}{a}\right)^2, \quad (62)$$

kde  $n = 1, 2, \dots$ . Keď budeme predpokladať, že všetky elektróny obsadia len najnižšiu hladinu  $E_{z1}$ , tak rovnicu (60) môžeme napísať ako

$$\left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \tilde{U}(x, y) \right] \varphi(x, y) = E\varphi(x, y), \quad (63)$$

kde  $\tilde{U}(x, y) = U(x, y) + E_{z1} = [V(x) + E_{z1}] + V_{SO}(x, y) = \tilde{V}(x) + V_{SO}(x, y)$ .

Rovnicu (63) prepíšeme do tvaru

$$\left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \tilde{V}(x) + V_{SO}(x, y) \right] \varphi(x, y) = E\varphi(x, y). \quad (64)$$

Riešenie rovnice (64) hľadáme znova v “separovanom tvare”  $\varphi(x, y) = \chi(x)\phi(y)$ , kde vlnová funkcia v smere osi  $y$  je daná ako

$$\phi(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ik_y y). \quad (65)$$

Takéto normovanie rovinných vln bude vhodné pri výpočte elektrónovej hustoty.

Dosadením vlnovej funkcie (65) do rovnice (64) po úprave dostaneme

$$\left( -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tilde{V}(x) + V_{SO}(x) \right) \chi(x) = \varepsilon \chi(x). \quad (66)$$

kde  $\varepsilon = E - \frac{k_y^2}{2}$  a  $V_{SO}(x) = -\lambda \hat{\sigma}_z \frac{dV}{dx} k_y$ .

## B Výpočet elektrónovej hustoty

Elektrónu, ktorý sa voľne pohybuje a má určitú hybnosť  $p$ , môžeme podľa de Broglieho hypotézy priradiť vlnovú funkciu<sup>3</sup>

$$\phi_k(x) = C \exp[i(kx - \omega t)], \quad (67)$$

kde  $k = p/\hbar$  a  $\omega = E/\hbar$ . Takáto čistá rovinná vlna nám pri normovaní spôsobuje problémy, pretože platí

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |A|^2 \exp(-ikx) \exp(ikx) = |A|^2 \times \infty. \quad (68)$$

Voľný elektrón môžeme popísať tiež lokalizovaným vlnovým balíkom, ktorý vytvoríme ako lineárnu kombináciu rovinných vln s blízkym vlnovým číslom  $k$ .

$$\psi_{k,\Delta k}(x, t) = \int_{k-\Delta k/2}^{k+\Delta k/2} dk' A(k') \exp[i(k'x - \omega_{k'}t)], \quad (69)$$

kde  $\omega_k = \frac{\hbar k^2}{2m}$ . Takáto vlnová funkcia musí tiež spĺňať podmienku normalizácie

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 = 1. \quad (70)$$

V prípade vlnového balíka (69), narozdiel od rovinnnej vlny, dostaneme pre absolútnu hodnotu konštanty  $|A| = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta k}}$ .

Aby sme mohli pracovať s rovinnými vlnami, musíme obísť problém, ktorý súvisí s ich normovaním. To môžeme urobiť dvoma spôsobmi: normovať rovinné vlny na konečný objem alebo pomocou normovania na hybnosť, čo teraz ukážeme.

Predstavme si  $N$  elektrónov, každý v inom stave, danom výrazom (69) v čase  $t = 0$

$$\psi_{k_i,\Delta k}(x), \text{ pre } i = 1, \dots, N; \quad a \quad k_{i+1} = k_i + \Delta k, \text{ kde } k_0 = 0. \quad (71)$$

Elektrónovú hustotu v mieste  $x$  potom vypočítame ako

$$n(x) = \sum_{i=1}^N \psi_{k_i,\Delta k}^*(x) \psi_{k_i,\Delta k}(x). \quad (72)$$

---

<sup>3</sup>Pre zjednodušenie zápisu výrazov, budeme uvažovať iba o jednorozmernej vlnovej funkcii.

Pre elektróny nachádzajúce sa v makroskopickom objeme  $V$  s priemernou hustotou  $n = N/V$ , môžeme previesť limitu  $N \rightarrow \infty$ ,  $V \rightarrow \infty$  a  $N/V \rightarrow n$ . Ak budeme voliť  $\Delta k \rightarrow 0$  potom hustotu napíšeme ako

$$\begin{aligned} n(x) &= \sum_{i=1}^N \frac{1}{2\pi\Delta k} \int_{k_i-\Delta k/2}^{k_i+\Delta k/2} dk' \exp(-ik'x) \int_{k_i-\Delta k/2}^{k_i+\Delta k/2} dk'' \exp(ik''x) \approx \\ &\approx \sum_{i=1}^N \frac{1}{2\pi\Delta k} (\Delta k)^2 \exp(-ik_i x) \exp(ik_i x) \approx \int \frac{dk}{2\pi} \end{aligned} \quad (73)$$

pričom integrujeme cez interval zahrňujúci všetky uvažované  $k_i$ . Rovnaký výsledok by sme dostali, ak by sme uvažovali rovinné vlny, ktoré by boli normované ako

$$\varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx) \quad (74)$$

a hustotu počítali integrovaním cez všetky elektrónmi obsadené hodnoty  $k$

$$n(x) = \int dk \varphi_k^*(x) \varphi_k(x). \quad (75)$$

## C Podmienky spojitosti pre viazané stavy

Pri odvodení rovnice (55) budeme vychádzať z podmienok spojitosti vlnovej funkcie v bodoch  $x = 0$ ,  $x = h$  a rovníc, ktoré musí spĺňať derivácia vlnovej funkcie.

Podmienky spojitosti v bode  $x = 0$

$$\begin{aligned}\chi_1(x=0) &= \chi_2(x=0) \\ 1 &= aAi(y_0) + bBi(y_0)\end{aligned}\quad (76)$$

a v bode  $x = h$

$$\begin{aligned}\chi_2(x=h) &= \chi_3(x=h) \\ aAi(y_h) + bBi(y_h) &= de^{-\beta h}.\end{aligned}\quad (77)$$

Pre deriváciu vlnovej funkcie v bode  $x = 0$  platí

$$\begin{aligned}\chi_2'(x=0) - \chi_1'(x=0) &= 2\Lambda\psi(x=0) \\ \gamma f[aAi'(y_0) + bBi'(y_0)] - \alpha &= 2\Lambda,\end{aligned}\quad (78)$$

kde  $y_0 = \gamma(-V_2 - e)$  a  $\Lambda = \pm\lambda k_y V_1$ . V bode  $x = h$  platí

$$\begin{aligned}\chi_2'(x=h) &= \chi_3'(x=h) \\ \gamma f[aAi'(y_h) + bBi'(y_h)] &= -\beta de^{-\beta h},\end{aligned}\quad (79)$$

kde  $y_h = \gamma(fh - V_2 - e)$ . Z dvojice rovníc (76) a (78) pre koeficienty  $a$  a  $b$  dostaneme:

$$a = \frac{2\Lambda Bi(y_0) + \alpha Bi(y_0) - \gamma k Bi'(y_0)}{\gamma f[Ai'(y_0)Bi(y_0) - Ai(y_0)Bi'(y_0)]}\quad (80)$$

$$b = \frac{1 - aAi(y_0)}{Bi(y_0)}.\quad (81)$$

Z rovnice (77) dostaneme vyjadrenie koeficientu  $d$  v tvare

$$d = [aAi(y_h) + bBi(y_h)]e^{\beta h}.\quad (82)$$

Keďže sme mali štyri rovnice, tak posledná rovnica (79) je rovnica, ktorej riešením sú energie viazaných stavov:

$$\gamma k[aAi'(y_h) + bBi'(y_h)] + d\beta e^{-\beta h} = 0.\quad (83)$$

Koeficienty  $a$ ,  $b$  a  $d$  sme kvôli prehľadnosti nedosadili.

## D Podmienky spojitosti pre rozptylové stavy

Podmienky spojitosti vlnovej funkcie v bode  $x = 0$

$$\begin{aligned}\chi_1(x=0) &= \chi_2(x=0) \\ 1 &= aAi(y_0) + bBi(y_0)\end{aligned}\quad (84)$$

a v bode  $x = h$

$$\begin{aligned}\chi_2(x=h) &= \chi_3(x=h) \\ aAi(y_h) + bBi(y_h) &= ce^{i\beta h} + de^{-i\beta h}.\end{aligned}\quad (85)$$

Pre deriváciu vlnovej funkcie v bode  $x = 0$  platí

$$\begin{aligned}\chi_2'(x=0) - \chi_1'(x=0) &= 2\Lambda\chi(x=0) \\ \gamma f[aAi'(y_0) + bBi'(y_0)] - \alpha &= 2\Lambda,\end{aligned}\quad (86)$$

kde  $y_0 = \gamma(-V_2 - e)$  a  $\Lambda = \pm\lambda k_y V_1$ . V bode  $x = h$  platí

$$\begin{aligned}\chi_2'(x=h) &= \chi_3'(x=h) \\ \gamma f[aAi'(y_h) + bBi'(y_h)] &= i\beta[ce^{i\beta h} - de^{-i\beta h}],\end{aligned}\quad (87)$$

kde  $y_h = \gamma(fh - V_2 - e)$ . Z dvojice rovníc (84) a (86) máme:

$$a = \frac{2\Lambda Bi(y_0) + \alpha Bi(y_0) - \gamma f Bi'(y_0)}{\gamma f [Ai'(y_0) Bi(y_0) - Ai(y_0) Bi'(y_0)]}\quad (88)$$

$$b = \frac{1 - aAi(y_0)}{Bi(y_0)}.\quad (89)$$

Z dvojice rovníc (85) a (87) dostaneme vyjadrenia koeficientov  $c$  a  $d$

$$c = \frac{a}{2}e^{-i\beta h} \left[ \frac{\gamma f}{i\beta} Ai'(y_h) + Ai(y_h) \right] + \frac{b}{2}e^{-i\beta h} \left[ \frac{\gamma f}{i\beta} Bi'(y_h) + Bi(y_h) \right]\quad (90)$$

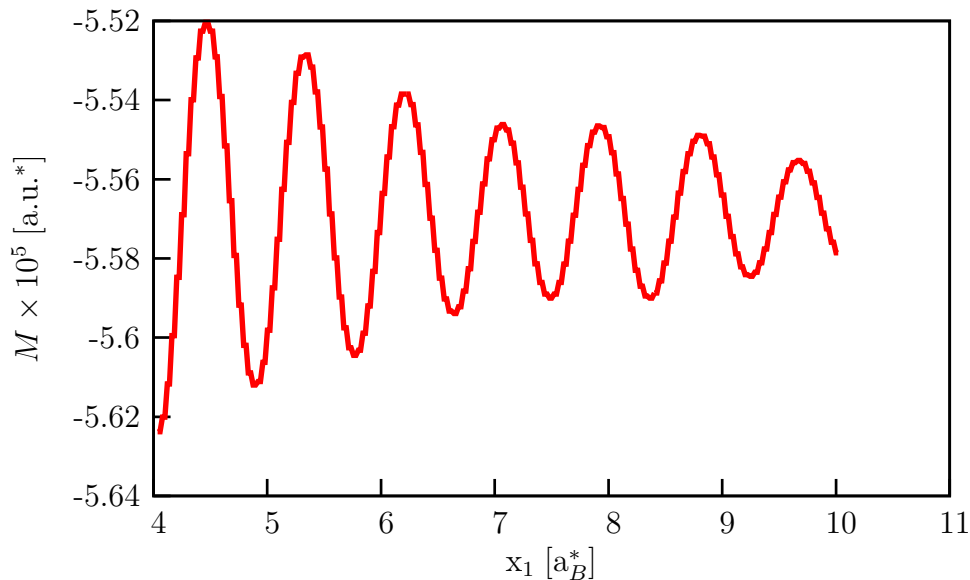
$$d = e^{i\beta h} [aAi(y_h) + bBi(y_h) - ce^{i\beta h}].\quad (91)$$

Teraz poznáme vyjadrenia pre všetky koeficienty a teda poznáme aj tvar vlnovej funkcie pre zadanú hodnotu energie.

## E Závislosť magnetizácie od hraníc integrovaní

Hodnotu  $x_0 = -0.5$  pri integrovaní vo vzťahu (59) sme zvolili kvôli tomu, že hustota elektrónov je už v tejto vzdialenosti prakticky nulová a jej príspevok k výslednej magnetizácii je zanedbateľný.

Dôvod, prečo sme hodnotu  $x_1$  zvolili rovnú 10.0, je vidieť na obrázku 18, kde je zobrazená závislosť magnetizácie od hodnoty  $x_1$ . Chyba, ktorej sa dopustíme pri obmedzení hornej integračnej hranice na hodnotu 10.0, je o dva rády menšia ako samotná hodnota magnetizácie. Táto závislosť bola vypočítaná pre model s korekciou a pre  $n = 2.1$  a  $j = 0.1$ .



Obrázok 18: Závislosť magnetizácie  $M$  od hornej integračnej hranice  $x_1$  pre model s korekciou. Zo závislosti je vidieť, že magnetizácia osciluje okolo určitej hodnoty a chyba, ktorej sa dopustíme, ak zvolíme hodnotu  $x_1 = 10.0$ , je o dva rády menšia ako samotná hodnota magnetizácie.



## Zoznam bibliografických odkazov

- [1] J. H. Davies, The Physics of Low-dimensional Semiconductors: An Introduction, Cambridge University Press, 1997
- [2] J. J. Sakurai, Advanced Quantum Mechanics, Addison Wesley, 1967
- [3] L. I. Schiff, Quantum Mechanics 3rd. Edition, McGraw-Hill Companies, 1968
- [4] J. Fabian *et al.*, Semiconductor spintronics, Acta Physica Slovaca **57**, 565 (2007)
- [5] J. M. Luttinger, W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955)
- [6] J. Luo, H. Munekata, F. F. Fang, P. J. Stiles, Phys. Rev. B **41**, 7685 (1990)
- [7] P. Bokes, F. Corsetti, R. W. Godby, Phys. Rev. Lett. **101**, 046402 (2008)
- [8] P. Bokes, H. Mera, R. W. Godby, Phys. Rev. B **72**, 165425 (2005)
- [9] H. A. Engel, B. I. Halperin, E. I. Rashba, Phys. Rev. Lett. **95**, 166605 (2005)
- [10] V. Sih, R. C. Myers, Y. K. Kato, W. H. Lau, A. C. Grossard, D. D. Awschalom, Nature Phys. **1**, 31 (2005)
- [11] Y. K. Kato *et al.*, Science **306**, 1910 (2004)
- [12] S. Datta, B. Das, Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990)
- [13] P. Bokes, The role of the edge induced spin-orbit interaction in the spin Hall effect, učebný text.