

Vinícius Moreira Martins

Introdução à Polarização de Spin Induzida por Corrente

Uberlândia, Minas Gerais, Brasil

Dezembro de 2019

Vinícius Moreira Martins

Introdução à Polarização de Spin Induzida por Corrente

Trabalho de Conclusão de Curso de graduação apresentado ao Instituto de Física da Universidade Federal de Uberlândia como requisito necessário para a aprovação no Bacharelado em Física de Materiais.

Universidade Federal de Uberlândia – UFU

Instituto de Física – INFIS

Bacharelado em Física de Materiais

Orientador: Prof. Dr. Gerson Ferreira Junior

Uberlândia, Minas Gerais, Brasil

Dezembro de 2019

Agradecimentos

Agradeço aos meus pais pelo suporte, aos colegas pela convivência, e ao orientador pela paciência; pois tornaram possível a realização deste trabalho.

Resumo

A spintrônica é um campo de pesquisa emergente que promete aprimorar a eletrônica. Uma de suas aplicações é a criação de dispositivos puramente elétricos, porém com propriedades magnéticas. Essas propriedades surgem da manipulação do Spin. Uma das maneiras de manipular a direção do Spin é com a simples passagem de uma corrente elétrica em um semicondutor. O presente estudo mostra através de uma metodologia teórica simples como esse efeito aparece.

Palavras-chave: Spin-Órbita. Spintrônica. Polarização de Spin. Corrente de Spin. Nanotecnologia.

Abstract

Spintronics is an emerging field of research that promises the enhancement of electronics. One of its applications is the creation of purely electrical devices, but with magnetic properties. These properties are from the Spin manipulation. A way to manipulate the direction of the Spin is with a simple passage of an electric current in a semiconductor. The present study shows through a simple theoretical methodology how this effect appears.

Keywords: Spin-Órbit. Spintronics. Spin polarization. Spin current. Nanotecnologie.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	11
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	13
2.1	O Modelo de Drude para a condutividade elétrica	13
2.2	A Equação de Transporte de Boltzmann	13
2.2.1	Equação de Boltzmann	14
2.2.2	Aproximação do Tempo de Relaxação	16
2.2.3	“Solução” da Equação de Boltzmann	16
2.3	Acoplamento Spin-Órbita	17
3	RESULTADOS E DISCUSSÃO	19
3.1	Equação de Boltzmann para elétrons livres	19
3.2	Ocupação dos estados k	20
3.3	O Hamiltoniano	21
3.4	A polarização de Spin	24
4	CONCLUSÃO	27
	REFERÊNCIAS	29

1 Introdução

A manipulação de spin em materiais condutores e semicondutores por meio de campos elétricos e/ou magnético constituem a spintrônica, campo de pesquisa emergente, cujos resultados e aplicações prometem aprimorar a eletrônica, que utiliza somente a carga dos elétrons, onde esta já apresenta limitações físicas. Um exemplo de aplicação bem sucedida de fenômenos da spintrônica é a aplicação do efeito da magnetorresistência gigante a discos rígidos, o que rendeu a Albert Fert e Peter Grünberg o prêmio Nobel de física de 2007 pela descoberta do efeito. Para ver sobre essa e outras aplicações da spintrônica veja a Ref.([FERT; DAU, 2019](#)).

Edelstein mostrou que a passagem de corrente elétrica em um gás de elétrons bidimensional pode levar a uma polarização de spins dos elétrons de condução, Ref.([EDELSTEIN, 1990](#)). Desde esta previsão teórica esse fenômeno tem sido investigado com crescente interesse tanto do ponto de vista teórico quanto do experimental, Refs.([NITTA et al., 1997](#); [LUENGO-KOVAC et al., 2017](#)).

A polarização de spin por corrente é uma alternativa à utilização de campos magnéticos externos para manipular a magnetização de ferromagnetos, através do efeito chamado current-induced spin-orbit torque, Ref. ([GAMBARDELLA; MIRON, 2011](#)). Ela também nos permite integrar propriedades magnéticas a circuitos eletrônicos sem a utilização de magnetos ou ferromagnetos, ou criar dispositivos puramente elétricos, porém com propriedades magnéticas. A manipulação de spin em sistemas totalmente elétricos é mostrada experimentalmente na Ref.([STEPANOV et al., 2014](#)).

A utilização de sistemas totalmente elétricos faz parte da “spintrônica sem magnetismo”, que é a spintrônica de semicondutores. A polarização de spin induzida por corrente é a base da spintrônica de semicondutores, que na ausência de campos magnéticos essa polarização de spin aparece devido somente a presença de acoplamento spin-órbita. Esse acoplamento aparece em semicondutores com assimetrias estruturais, ver Refs.([BANDYOPADHYAY; CAHAY, 2008](#); [FABIAN et al., 2007](#); [WINKLER, 2003](#)). Essa assimetria é devido a composição atômica ou a estrutura cristalina do material semicondutor, ou à construção de um dispositivo baseado em heterojunções de semicondutores. Nesse trabalho consideramos somente a assimetria de inversão da estrutura, que da origem ao acoplamento spin-órbita de Rashba. A spintrônica com semicondutores é atraente pois permite a geração e manipulação de spin somente pelo controle da corrente elétrica.

Nesse trabalho, que tem caráter introdutório, apresentamos resultados teóricos sobre a polarização de spin induzida por corrente em um gás de elétrons unidimensional levando em conta a interação spin-órbita de Rashba. Esse sistema é um modelo básico de

heterojunção de semicondutores. Para calcular a polarização de spin induzida por corrente utilizamos o método da equação de transporte de Boltzmann. O trabalho contém uma breve introdução a equação de Boltzmann e a interação spin-órbita.

2 Fundamentação Teórica

2.1 O Modelo de Drude para a condutividade elétrica

Após a descoberta dos elétrons, Drude usou a teoria cinética dos gases para construir um modelo de condução elétrica em metais. Os elétrons e núcleos atômicos são imaginados como partículas sólidas que colidem, sendo o núcleo uma partícula muito massiva e considerada imóvel. Assim, os elétrons de valência fazem o papel dos elétrons livres em um gás de elétrons e os núcleos atômicos em conjunto com os elétrons ligados fazem o papel das partículas pesadas e imóveis. Esse é um modelo simples que descarta a interação eletromagnética elétron-elétron e elétron-núcleo, a única interação no sistema são as colisões, que são instantâneas e causam abrupta mudança na direção da velocidade.

Em um metal sem a aplicação de um campo elétrico, os elétrons tem velocidades em todas as direções, sendo essa direção modificada somente durante colisões. Ter a velocidade aleatoriamente distribuída em todas as direções faz com que a velocidade média seja nula. Porém, se aplicarmos um campo elétrico, os elétrons ainda tem essa velocidade em direções aleatórias devido a colisões, mas são orientados por uma força na direção oposta ao campo elétrico (partículas de sinal negativo), ganhando então uma componente de velocidade resultante nessa direção. Ou seja,

$$\mathbf{F} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e\mathbf{E} \rightarrow \mathbf{v} = -\frac{e\mathbf{E}t}{m}.$$

No entanto essa expressão é estranha, pois sugere que a velocidade aumenta indefinidamente com o tempo. Isso só poderia acontecer caso o elétron não encontrasse uma próxima colisão, o que não é o caso. Assume-se então que o elétron leve em média um tempo τ entre colisões, isto é, um elétron que acaba de colidir leva um tempo τ até sua próxima colisão. A velocidade média passa a ser

$$\mathbf{v}_d = -\frac{e\mathbf{E}\tau}{m}, \quad (2.1)$$

conhecida como velocidade de arrasto. O tempo τ é conhecido como tempo de relaxação ou tempo de colisão. Utilizaremos a nomenclatura de tempo de relaxação por ser quase unicamente encontrada na literatura, apesar da outra ser mais intuitiva.

2.2 A Equação de Transporte de Boltzmann

Os elétrons ocupam níveis de energia a partir do estado de menor energia até o nível de Fermi, que é o último nível ocupado por um elétron do sistema, como visto nas

Refs.(KITTEL, 2006; ASHCROFT; MERMIN et al., 1976). De acordo com o princípio de exclusão de Pauli, só pode haver um único elétron em cada estado energético.

A expressão que rege a ocupação de elétrons nos níveis energéticos de um gás de elétrons é a distribuição de Fermi-Dirac (Fig. 1),

$$f_0 = \frac{1}{e^{(\epsilon_k - \epsilon_F)/k_b T} + 1}. \quad (2.2)$$

Porém, a distribuição de Fermi-Dirac é válida somente para um sistema em equilíbrio, isto é, não perturbado por campos externos ou aplicados ao sistema. Na presença de campos elétricos não muito intensos, a ocupação de estados deve diferir levemente de seu valor na ausência de perturbação. Procuramos então uma função distribuição f na forma $f = f_0 + g$, onde g são as correções. Na próxima seção veremos como obter estas correções.

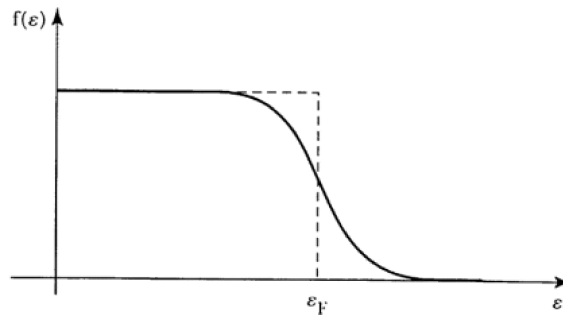


Figura 1 – Distribuição de Fermi-Dirac. Da figura, $f(\epsilon)$ é nosso $f_0(\epsilon_k)$. Figura extraída da Ref.(SALINAS, 1997).

2.2.1 Equação de Boltzmann

O espaço de fase que representa a evolução temporal da trajetória do elétron no sistema unidimensional é bidimensional, com os eixos de momento $p_x = \hbar k_x$ e de posição x . Se escolhermos um ponto nesse espaço, com uma dada posição e um dado momento em um tempo t , associado à esse ponto está uma probabilidade de ocupação f . No equilíbrio sabemos que essa probabilidade é simplesmente f_0 .

O modelo semi-clássico para os elétrons nos dá as equações de movimento na influência de um campo elétrico E ,

$$\begin{aligned} \hbar k(t) &= \hbar k_0 + \int_0^t q E dt', \\ v(t) &= \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon_k}{dk}, \\ x(t) &= x_0 + \int_0^t v(t') dt', \end{aligned} \quad (2.3)$$

sendo que a trajetória no espaço de fase é dada pela solução deste conjunto de equações.

Podemos então nos perguntar como f é construída em um tempo t a partir de seu valor em um instante anterior dt . Por simplicidade, vamos ignorar que poderiam haver colisões entre esses instantes, e chegar a uma equação de Boltzmann sem termo de colisão, mais tarde acrescentaremos esse termo.

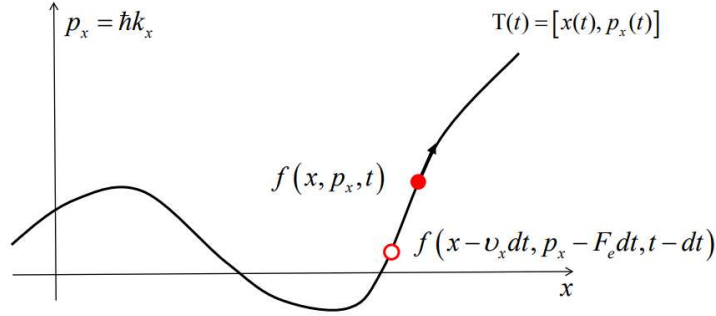


Figura 2 – Trajetória de um elétron no espaço de fase e as probabilidades de ocupação nos tempos t e $t - dt$. Figura extraída da Ref.([LUNDSTROM, 2011](#)).

Escolhendo um ponto na trajetória $T(t)$, como na Fig. 2, esse estado tem a probabilidade $f(x, p_x, t)$ de estar ocupado no tempo t . Logo antes, com uma diferença infinitesimal de tempo dt , o elétron ocupava um estado anterior, com probabilidade $f(x - v_x dt, p_x - F_e dt, t - dt)$.

O elétron que está em (x, p_x) em um tempo t , certamente estava em $(x - v_x dt, p_x - F_e dt)$ em um tempo $t - dt$. Como não há espalhamento devido a colisões, este é o único ponto do qual o elétron que está em (x, p_x) poderia ter vindo, e todo elétron nesse ponto alcançará (x, p_x) . Conseqüentemente, um elétron seguindo a trajetória ocupa esses dois pontos consecutivamente com uma mesma probabilidade, ou seja

$$f(x, p_x, t) = f(x - v_x dt, p_x - F_e dt, t - dt).$$

Destas considerações, chegamos na expressão abaixo, que nos diz que ao longo da trajetória não há variação na distribuição de probabilidades f ,

$$\frac{df}{dt} = 0.$$

Abrindo essa derivada e reconhecendo alguns termos, chegamos à Equação de Boltzman para um sistema sem colisões,

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial f}{\partial p_x} \frac{dp_x}{dt} = 0,$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} v_x + \frac{\partial f}{\partial p_x} F_x = 0. \quad (2.4)$$

Levando em conta as colisões, é acrescentado um termo de colisão no lado direito da equação,

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{out} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{in}. \quad (2.5)$$

O termo (out) representa os elétrons que falharam a chegar a (x, p_x, t) , pois foram espalhados por colisões entre $t - dt$ e t . E o termo (in) representa justamente os elétrons que chegaram nesse estado devido a colisões.

Assim, a equação de Transporte de Boltzmann completa em uma dimensão é

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} v_x + \frac{\partial f}{\partial p_x} F_x = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}. \quad (2.6)$$

Esta descreve o comportamento estatístico de um sistema fora do equilíbrio. Ela pode ser usada para determinar como quantidades físicas mudam quando o sistema inicialmente em equilíbrio é perturbado.

2.2.2 Aproximação do Tempo de Relaxação

A complexidade da solução da equação de Boltzmann depende do termo de colisão utilizado. Para o cálculo do termo de colisão há diversos métodos, tanto numéricos, como método de Monte Carlo, quanto analíticos, como as integrais de colisão. Adotaremos a aproximação mais simples para o termo de colisão, que é a aproximação do tempo de relaxação.

De acordo com Marder, Ref.(MARDER, 2010), a propriedade básica do termo de relaxação é fazer com que a distribuição f relaxe de volta ao equilíbrio, isto é, que o sistema perturbado retorne ao equilíbrio com o tempo. A aproximação do tempo de relaxação não é nada mais que a forma mais simples do termo de colisão com essa propriedade. A colisão faz com que a distribuição relaxe localmente para a distribuição de equilíbrio f_0 . Assim, consideraremos

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = -\frac{f - f_0}{\tau}, \quad (2.7)$$

onde τ é o tempo de relaxação, e será considerado como uma constante.

2.2.3 “Solução” da Equação de Boltzmann

A equação de Boltzmann, Eq. (2.6), é de difícil solução mesmo na forma apresentada aqui, onde o termo de colisão será a aproximação do tempo de relaxação. Foram feitas, então, algumas considerações.

Assumimos uma distribuição espacial uniforme, isto é, f não muda com x , e também uma solução estacionaria onde f não varia com o tempo. Temos então uma distribuição $f(x, p_x, t) \rightarrow f(p_x)$. A força F_x na eq.(2.6) é a força de Lorentz. No nosso problema não

há campo magnético externo, então ($F_x = -eE$). Isso resulta na equação diferencial

$$eE \frac{\partial f}{\partial p_x} = \frac{f - f_0}{\tau}.$$

Usando $f = f_0 + g$, recursivamente obtemos o valor de g em termos de f_0 ,

$$g = eE\tau \frac{\partial f_0}{\partial p_x} \quad \rightarrow \quad g = \frac{eE\tau}{\hbar} \frac{\partial f_0}{\partial k}.$$

A derivada no lado direito é uma regra da cadeia ($\frac{\partial f_0(\epsilon_k(k))}{\partial k} = \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k}$). A forma derivada ($\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_k}$) não muda de acordo com o sistema, a menos da substituição dos autovalores ϵ_k . Porém a derivada ($\frac{\partial \epsilon_k}{\partial k}$) toma uma forma diferente diretamente de acordo com ϵ_k , isto é, de acordo com o sistema. Devemos então guardar o valor da perturbação g e da forma final da distribuição f para serem utilizados mais tarde,

$$g = \frac{eE\tau}{\hbar} \frac{\partial f_0}{\partial k}, \quad (2.8)$$

$$f = f_0 + \frac{eE\tau}{\hbar} \frac{\partial f_0}{\partial k}. \quad (2.9)$$

2.3 Acoplamento Spin-Órbita

Orbitando em torno do núcleo atômico, o elétron sente o campo elétrico dos prótons do núcleo. Porém, no referencial de repouso do elétron, o núcleo é quem gira em torno do elétron, e partículas em movimento dão origem a campos magnéticos locais, sendo

$$\mathbf{B}_{SO} = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{v}}{2c^2 \sqrt{1 - v^2/c^2}}. \quad (2.10)$$

Esse campo magnético intrínseco da dinâmica atômica faz com que haja um torque sobre o elétron, tendendo a alinhar o momento magnético μ_e do elétron com a direção do campo, causando uma distorção nos orbitais eletrônicos. O hamiltoniano dessa interação é

$$H_{SO} = -\boldsymbol{\mu}_e \cdot \mathbf{B}_{SO}, \quad (2.11)$$

com $\boldsymbol{\mu}_e = -g_0\mu_B\mathbf{s}$. Onde g_0 é o fator giromagnético de Landé, μ_B é o magnéton de Bohr e \mathbf{s} é o momento de spin $\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$. Reescrevendo a Eq. (2.11) temos

$$H_{SO} = g_0\mu_B \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{v}}{2c^2 \sqrt{1 - v^2/c^2}} \cdot \mathbf{s} = \frac{g_0\mu_B\hbar}{2m} \frac{\hbar\mathbf{k} \times \nabla V}{2c^2 \sqrt{1 - v^2/c^2}} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.12)$$

onde usamos $\mathbf{E} = -\nabla V$ e $\mathbf{p} = m\mathbf{v} = \hbar\mathbf{k}$. Veja que para a interação elétron-próton no átomo, o potencial V é o potencial Coulombiano, então $\nabla V = \frac{-Ze}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{r}}{r^3}$. Substituindo na Eq. (2.12), temos a relação $(\hbar\mathbf{k} \times \mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$, onde $(\hbar\mathbf{k} \times \mathbf{r})$ é o momento angular orbital que é

quantizado em unidades de \hbar na forma $\hbar l$. Deste acoplamento entre o momento angular orbital e o momento de spin \mathbf{s} segue o nome interação spin-órbita para o elétron.

Um elétron em um cristal esta sob influencia de um potencial V_{est} com diversas contribuições: potencial eletrostático devido aos núcleos atômicos que descrevem sua estrutura cristalina, impurezas, campos externos ou diferença de potencial aplicada, entre outros. Nos modelos para gases de elétrons, costuma-se considerar os termos de spin-órbita investigados por Rashba e Dresselhaus. O termo de Dresselhaus se deve à ausência de simetria de inversão na estrutura cristalina, enquanto que o termo de Rashba é dado pela quebra de simetria estrutural, e pode ser manipulado por campos elétricos externos. Para uma consulta mais detalhada sobre os acoplamentos spin-órbita e as assimetrias mencionadas acima, consulte Refs. (BANDYOPADHYAY; CAHAY, 2008; FABIAN et al., 2007; WINKLER, 2003).

No presente trabalho utilizaremos somente o termo de Rashba, que através do método $k \cdot p$, é possível mostrar¹ que se torna,

$$H_{SO} = \frac{g_0 \mu_B \hbar^2}{2m} \frac{(\mathbf{k} \times \nabla V_{est})}{2c^2} \cdot \boldsymbol{\sigma} \longrightarrow H_{SO} = \alpha (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\sigma}) \cdot \hat{z}. \quad (2.13)$$

O coeficiente de Rashba α leva em conta o potencial V_{est} e efeitos de estrutura de banda. Há diferentes aproximações e métodos para calcular o valor o valor de α , porém no presente trabalho utilizarmos o valor de α como constante.

¹ A dedução de modelos efetivos pelo método $k \cdot p$ esta fora do escopo deste trabalho. Para mais detalhes veja as Refs. (WINKLER, 2003; FABIAN et al., 2007).

3 Resultados e Discussão

O método da equação de Boltzmann mostrado na seção 2.2 usa os autovalores ϵ_k de um sistema em equilíbrio com uma distribuição de probabilidades no equilíbrio f_0 , e nos dá uma distribuição de probabilidades fora do equilíbrio f para um sistema levemente perturbado, de maneira que f é próximo a f_0 . Utilizaremos esse método para encontrar a distribuição de probabilidades de alguns sistemas exemplo, e essa distribuição para estimar os valores de grandezas física de interesse.

3.1 Equação de Boltzmann para elétrons livres

É curioso observar um primeiro resultado da aplicação da equação de Boltzmann.

Os autovalores de energia para elétrons livres em um gás de elétrons são $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Da Eq. (2.8), a derivada de f_0 resolvida explicitamente tem uma forma não muito intuitiva, porém se olharmos para a distribuição de Fermi-Dirac em função da energia, Fig. 1, vemos que f_0 só varia em torno da energia de Fermi com um declive intenso, isso implica um valor grande na derivada em torno desse ponto. Esse formato sugere que a derivada seja algo próximo a uma delta de Dirac $\delta(\epsilon_k - \epsilon_F)$. Um resultado que reforça essa aproximação é que sem flutuação térmica ($T = 0$), todos os estados estão ocupados abaixo do nível de Fermi e nenhum está ocupado após o nível de Fermi, f_0 então se torna uma função degrau $\Theta(\epsilon_k - \epsilon_F)$, e a derivada desta é a delta de Dirac. Assim, segue a função distribuição f que utilizaremos para os cálculos analíticos,

$$f = f_0 + \frac{eE\tau}{\hbar} \frac{d\epsilon_k}{dk} \delta(\epsilon_k - \epsilon_F), \quad (3.1)$$

e sua forma para elétrons livres:

$$f = f_0 + \frac{eE\hbar\tau}{m} k \delta(\epsilon_k - \epsilon_F).$$

Lembrando da velocidade de arrasto, Eq. (2.1), temos

$$f = f_0 - v_d \hbar k \delta(\epsilon_k - \epsilon_F). \quad (3.2)$$

Tendo a função distribuição de probabilidades podemos usá-la para calcular valores médios, ou esperados, Ref.(SALINAS, 1997). O valor médio de uma função $q(k)$ associada a uma distribuição de probabilidades $p(k)$ é a própria função ponderada em toda a distribuição,

$$q_{avg}(k) = \sum_k q(k)p(k) = \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} q(k)p(k)dk. \quad (3.3)$$

Assim, as quantidades físicas podem ser estimadas de maneira estatística pelo valor médio da grandeza física na distribuição.

Da equação (2.3) temos a velocidade média de todos os elétrons do sistema

$$v_{avg} = \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} v f dk = v_d \frac{L}{\pi} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \epsilon_F},$$

e o número N de elétrons é a somatória de todos os estados dk ocupados (cada ponto no espaço k é um estado de número quântico k),

$$N = \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f dk = \frac{L}{\pi} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \epsilon_F}, \quad (3.4)$$

e a velocidade média por elétron $v_{avg}^{e^-}$ é a razão entre a velocidade média dos elétrons no sistema pelo número de elétrons,

$$v_{avg}^{e^-} = \frac{v_{avg}}{N} = v_d.$$

Esse é o resultado interessante de ser observado, a equação de Boltzmann juntamente com as aproximações foram suficientes para chegar a um resultado conhecido. A velocidade média de cada elétron em um sistema perturbado pela aplicação de campo elétrico é a velocidade de arrasto v_d .

A média do operador velocidade nos dá a densidade de corrente elétrica j no sistema,

$$j = e \frac{v_{avg}}{L} = \frac{e}{L} \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} v f dk = e v_d \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \epsilon_F},$$

em que a densidade de elétrons $n = N/L$ é

$$n = \frac{N}{L} = \frac{1}{L} \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f dk = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \epsilon_F},$$

portanto, a densidade de corrente fica

$$j = e n v_d. \quad (3.5)$$

3.2 Ocupação dos estados k

Ainda olhando para elétrons livres no gás, sabemos que os autovalores ($\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$) descrevem uma parábola. Sabemos também que no equilíbrio os estados k de energia ϵ_k (pontos sobre a curva da parábola ϵ_k correspondentes a k_+ e k_-) são igualmente ocupados. Porém, fora do equilíbrio, devido a aplicação de um campo elétrico, há um deslocamento

na ocupação desses estados. Os estados que representam os elétrons que tem a mesma direção da corrente são preenchidos a um nível de maior energia que os estados dos elétrons que vão contra a corrente. Essa diferença de ocupação é representada esquematicamente na Fig. 3. Da Eq. (2.3) temos o deslocamento em k que é a diferença $\delta k_{\pm} = k_{+} - k_{-}$, sendo

$$\delta k_{\pm} = -\frac{eE\tau}{\hbar},$$

e ele representa o momento $\hbar\delta k = -eE\tau$ que os elétrons ganharam. Podemos escrever esse deslocamento em termos da velocidade dos elétrons ou da densidade de corrente, que fica

$$\delta k_{\pm} = -\frac{eE\tau}{\hbar} = \frac{mv_d}{\hbar} = \frac{m}{en\hbar}j, \quad (3.6)$$

este último explicitando que a diferença de ocupação em k aumenta proporcionalmente com a corrente.

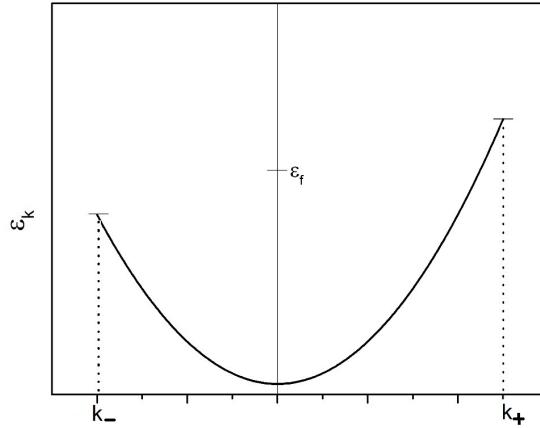


Figura 3 – Ocupação desigual em k devido a corrente elétrica.

A ocupação desigual dos estados k_{+} e k_{-} que surge devido a corrente não tem efeito prático se desconsiderarmos o spin. Porém, ela sugere que os efeitos de spin-órbita dependentes de k , Eq.(2.13), poderiam levar à uma acumulação de spin em alguma direção.

3.3 O Hamiltoniano

Para explorar o fenômeno de polarização de spin, por simplicidade, escolhamos o gás de elétrons em uma dimensão. Levamos em conta o efeito Zeeman e a interação spin-órbita de Rashba, cujo hamiltoniano é

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \alpha k \sigma_x + \mu B \sigma_z, \quad (3.7)$$

onde escolhamos a direção do campo magnético $\mathbf{B} = B_z \hat{z}$. O campo magnético é responsável pela separação energética das bandas de spin, Fig. 4. O termo de Rashba em uma dimensão,

($H_{SO} = \alpha k \sigma_x$), leva a uma separação das bandas proporcional a k na direção x , como pode ser visto na Fig. 5. As cores representam os autoestados de spin. Cada banda das Figs. 4 e 5 é ocupada por spins opostos. Isto é consequência direta das matrizes de Pauli σ no hamiltoniano. Na figura 4 o vermelho representa $|+1/2\rangle_z$ e o azul $|-1/2\rangle_z$. E na figura 5 o vermelho representa $|+1/2\rangle_x$ e o azul $|-1/2\rangle_x$.

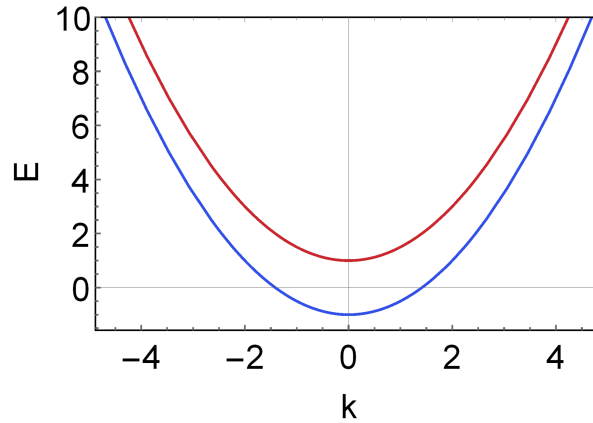


Figura 4 – Separação energética das banda de spin devido ao termo de Zeeman (i.e., $B \neq 0$ e $\alpha = 0$ na Eq. (3.7)).

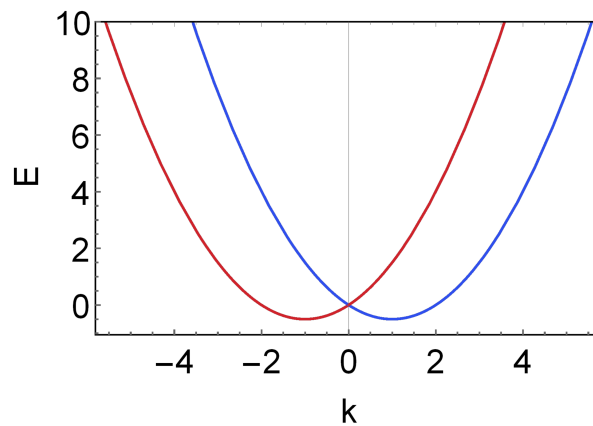


Figura 5 – Autovalores da Eq. (3.7) com $B = 0$ e $\alpha \neq 0$, separação das bandas em k_x devido ao acoplamento spin-órbita.

Veja que o hamiltoniano da Eq. (3.7) possui os operadores de spin σ_x e σ_z , e então tem as direções de spin correspondentes a esses operadores assim como uma combinação delas.

Os autovalores do hamiltoniano Eq. (3.7) com $B \neq 0$ e $\alpha \neq 0$ são mostrados nas Figs. 6 e 7. Nestas duas figuras os autovalores são os mesmos. As cores representam a direção de spin segundo o valor esperado, $\langle \pm | \sigma | \pm \rangle$, dos operadores σ_z na Fig.6 e σ_x na Fig.7.

Na figura 6, o vermelho representa $|+1/2\rangle_z$ e o azul $|-1/2\rangle_z$. Podemos ver que a intensidade dessas cores muda ao longo da curva. A intensidade da cor tem relação com a

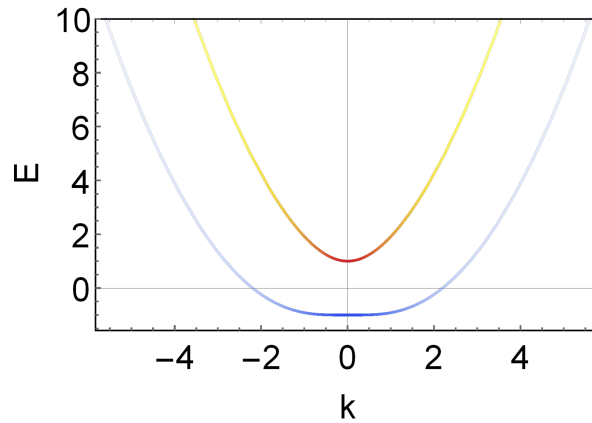


Figura 6 – Autovalores do Hamiltoniano Eq. (3.7), com os valores esperados para o operador de spin σ_z .

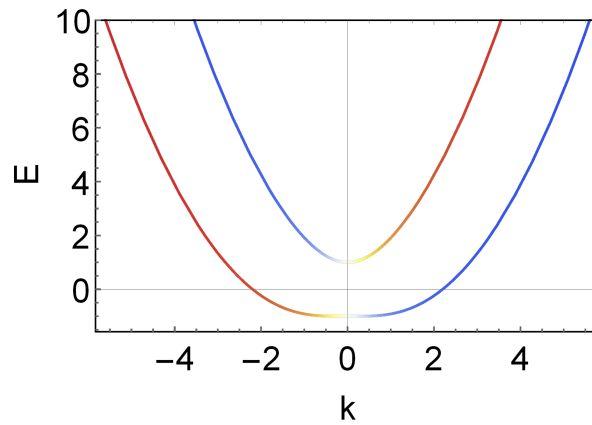


Figura 7 – Autovalores do Hamiltoniano Eq. (3.7), com os valores esperados para os operadores de spin σ_x .

direção de spin, como a figura 6 foi feita para o valor esperado de σ_z as partes escuras representam os estados em que a direção de spin corresponde à $|+1/2\rangle_z$ para o vermelho e $| -1/2\rangle_z$ para o azul. Então, as partes claras representam estados em que o spin não tem mais a direção z , e como nosso sistema só permite duas direções, a medida que a curva fica clara na figura 6 o spin toma a direção de x . O mesmo acontece na figura 7, onde o azul representa $|+1/2\rangle_x$ e o vermelho representa $| -1/2\rangle_x$. Vemos então que essas duas figuras se complementam, pois onde uma é clara na outra é escura. Vemos também que a direção do spin está mudando de acordo com os estados k ocupados, isso se deve ao fato de que os autovetores da Eq.(3.7) são dependentes de k . As expressões desses autovetores são omitidas aqui pelo seu tamanho e complexidade, mas, por fins de efeito, colocamos os valores esperados de σ_x e de σ_z para ilustrar sua dependência com k . Considerando $\hbar = m = 1$ na Eq.(3.7),

$$\langle \pm | \sigma_x | \pm \rangle = \pm \frac{k\alpha}{\sqrt{k^2\alpha^2 + B^2}}$$

que no caso do hamiltoniano Eq.(3.7) com $B = 0$ eram simplesmente ± 1 ,

$$\langle \pm | \sigma_z | \pm \rangle = \pm \frac{B}{\sqrt{k^2 \alpha^2 + B^2}},$$

que no caso do hamiltoniano Eq.(3.7) com $\alpha = 0$ também eram simplesmente ± 1 .

No hamiltoniano Eq.(3.7) não há mais separação de direção spin por banda, como acontece nas figuras 4 e 5, cada banda contém diferentes direções de spin. Se em um lugar da banda o spin aponta z e em outro aponta x , isso sugere que há uma rotação do spin ao longo dos estados k .

3.4 A polarização de Spin

Começamos o cálculo da polarização de spin pelo hamiltoniano da Eq. (3.7) com $B = 0$, que é o caso da figura 5. Em equilíbrio espera-se que as bandas de spin estejam populadas igualmente até o nível de Fermi e que as componentes de spin se cancelem. Porém, com a aplicação de corrente esperamos que as componentes de spin não se cancelem totalmente devido a ocupação desigual dos estados k de cada banda de spin. Utilizando o método da equação de Boltzmann podemos calcular a contribuição para a direção de spin gerada por cada banda, calculando a média dos valores de spin,

$$\sigma_{\pm}^{avg} = \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \sigma_x \rangle_{\pm} f_{\pm} dk, \quad (3.8)$$

sendo que \pm se refere aos dois ramos de spins opostos na Fig. 5, e $\langle \sigma_x \rangle_{\pm} = \pm 1$.

A contribuição total para a direção de spin é a soma da contribuição de cada banda, assim encontramos,

$$\sigma_+^{avg} + \sigma_-^{avg} = \frac{eE\tau}{\hbar} \frac{4m\alpha}{\hbar^2} \frac{L}{2\pi} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\epsilon_F}}.$$

Somente os elétrons deslocados pela quebra de equilíbrio contribuem para esse valor $\sigma_+^{avg} + \sigma_-^{avg}$ e com ele podemos definir a polarização de spin como

$$P = \frac{\sigma_+^{avg} + \sigma_-^{avg}}{N}, \quad (3.9)$$

que é uma razão dos elétrons que contribuem para o acúmulo de spin pelo número total de elétrons. A polarização de spin por corrente nesse sistema é então

$$P = \frac{eE\tau}{\hbar\epsilon_F} \alpha = -\frac{m\alpha}{en\hbar\epsilon_F} j, \quad (3.10)$$

em que já conhecíamos N da Eq.(3.4). É interessante notar a dependência de P com a corrente j e o parâmetro de spin-órbita α , e se algum deles é zero não há polarização de spin.

Voltando na Eq.(3.8) com mais atenção, vemos que nesse sistema $\sigma_{\pm}^{avg} = \pm N_{\pm}$. Isso implica que P , Eq.(3.9), nada mais é que,

$$P = \frac{N_+ - N_-}{N_+ + N_-},$$

a razão entre a diferença do número N_+ de elétrons com spin $+$ e o número N_- de elétrons com spin $-$, e o número total de elétrons. Sendo essa forma um pouco mais intuitiva para entender o que está acontecendo na Eq.(3.9) e na contribuição total na direção do spin $\sigma_+^{avg} + \sigma_-^{avg}$.

Para o hamiltoniano completo, Eq.(3.7), utilizamos um procedimento semelhante ao descrito acima, porém numérico. Esse hamiltoniano possui dois operadores de spin, σ_x e σ_z , que não comutam. Isso implica em autovetores complexos e dependentes de k para o hamiltoniano e para os operadores de spin, como já mencionado na seção 3.3, fazendo com que a tarefa de encontrar σ^{avg} analiticamente não seja nada fácil.

Primeiro resolvemos a Eq.(3.8) para cada banda. Note que anteriormente, para o caso do hamiltoniano com $B = 0$ os sinais \pm indicavam o spin, pois cada banda era ocupada por um spin. Aqui isso já não acontece, cada banda tem diferentes direções de spin entre x e z , então nesse caso os sinais \pm representam as bandas de energia, superior e inferior, nas Figs. 6 e 7. É preciso repetir o cálculo da Eq.(3.8) para cada operador de spin σ_x e σ_z separadamente.

Tendo em mãos a contribuição para a direção do spin de cada banda calculamos a contribuição total e dividimos pelo número de elétrons, exatamente como visto previamente. Temos então a polarização, Eq.(3.9), para o hamiltoniano da Eq.(3.7).

Dessa vez calculamos também a contribuição de cada banda para a velocidade dos elétrons,

$$v_{\pm}^{avg} = \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} v_{\pm} f_{\pm} dk = \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_{k\pm}}{\partial k} \right) f_{\pm} dk,$$

e a velocidade total dada por essas contribuições sobre o número de elétrons do sistema é,

$$\frac{\delta v_+^{avg} + \delta v_-^{avg}}{N}.$$

Como sabemos que a polarização de spin está relacionada com a corrente elétrica, fizemos dois gráficos da a polarização de spin pela velocidade média do sistema. Como resultado obtivemos a Fig.8 para σ_x , e a Fig.9 para σ_z .

Da Fig. 8 vemos que há uma polarização na direção x de acordo com a velocidade, e portanto, com a corrente elétrica. A orientação do spin muda com o sentido da corrente.

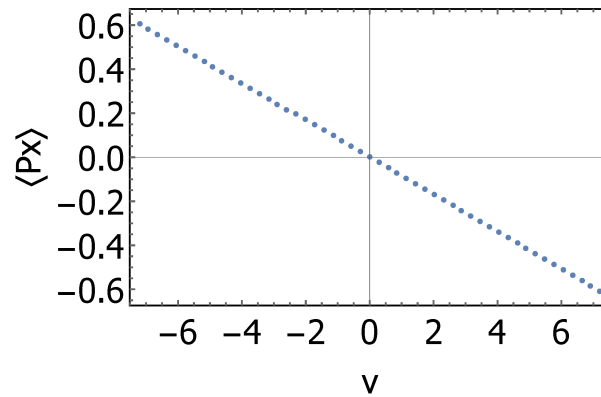


Figura 8 – Polarização de spin na direção x de acordo com a velocidade.

Quando aumentamos a velocidade, aumentamos a polarização do sistema devido a maior quantidade de elétrons de spin polarizados.

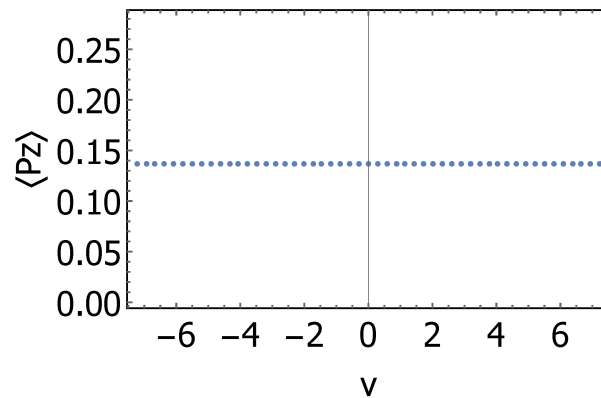


Figura 9 – Polarização de spin na direção z de acordo com a velocidade.

Da Fig. 9 vemos que não há polarização em z com a corrente elétrica mas há uma polarização constante devido a presença do campo magnético constante na direção z , Eq.(3.7). Esse campo foi escolhido tendo baixa intensidade, somente suficiente para aparecer o efeito Zeeman. Para o hamiltoniano Eq.(3.7) a polarização aponta predominantemente o eixo x quando há corrente elétrica.

4 Conclusão

Apesar de termos feito um cálculo simplificado utilizando a equação de Boltzmann em um sistema unidimensional com a constante do acoplamento spin-órbita α e o tempo de relaxação τ tratados como constantes, conseguimos dar uma visão geral do fenômeno de polarização de spin induzida por corrente. O resultado qualitativo importante é que é possível induzir e controlar a polarização de spin pela passagem de corrente elétrica em um semicondutor com assimetria de inversão estrutural.

Veja que essa polarização é um valor médio, com uma direção resultante devido ao acúmulo de elétrons com um determinado spin, ainda há spins em direções contrárias à de polarização. Isso é diferente de outro efeito em que todos ou a grande maioria dos spins dos elétrons apontam a mesma direção, chamado de corrente de spin polarizada.

Podemos deixar algumas perspectivas para a continuação deste trabalho. Uma delas é o cálculo do tempo de relaxação τ como uma função dependente de k e do spin s , Ref.([GORINI et al., 2017](#)). Pode-se também acrescentar o termo de troca, e tendo uma corrente polarizada de spin chegar ao efeito de spin-órbit torque, como na Ref.([GAMBARDELLA; MIRON, 2011](#)).

Referências

- ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. et al. *Solid state physics [by] Neil W. Ashcroft [and] N. David Mermin*. [S.l.]: New York: Holt, Rinehart and Winston, 1976.
- BANDYOPADHYAY, S.; CAHAY, M. *Introduction to Spintronics*. [S.l.]: CRC Press, 2008.
- EDELSTEIN, V. M. Spin polarization of conduction electrons induced by electric current in two-dimensional asymmetric electron systems. *Solid State Communications*, Elsevier, v. 73, n. 3, p. 233–235, 1990.
- FABIAN, J. et al. Semiconductor spintronics. *Acta Physica Slovaca. Reviews and Tutorials*, Versita, v. 57, n. 4-5, p. 565–907, 2007.
- FERT, A.; DAU, F. N. V. Spintronics, from giant magnetoresistance to magnetic skyrmions and topological insulators. *Comptes Rendus Physique*, v. 20, n. 7, p. 817 – 831, 2019. ISSN 1631-0705. La science en mouvement 2 : de 1940 aux premières années 1980 – Avancées en physique. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1631070519300738>>.
- GAMBARDELLA, P.; MIRON, I. M. Current-induced spin-orbit torques. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, The Royal Society Publishing, v. 369, n. 1948, p. 3175–3197, 2011.
- GORINI, C. et al. Theory of current-induced spin polarization in an electron gas. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 95, p. 205424, May 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.205424>>.
- KITTEL, C. *Introdução à Física do Estado Sólido. Oitava Edição*. [S.l.]: LTC Livros Técnicos e Científicos Editora, 2006.
- LUENGO-KOVAC, M. et al. Current-induced spin polarization in InGaAs and GaAs epilayers with varying doping densities. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 96, p. 195206, Nov 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.96.195206>>.
- LUNDSTROM, M. *Lecture 7: The Boltzmann Transport Equation*. 2011. Disponível em: <<https://nanohub.org/resources/11861>>.
- MARDER, M. P. *Condensed matter physics*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2010.
- NITTA, J. et al. 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.*, American Physical Society, v. 78, p. 1335–1338, Feb 1997. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.78.1335>>.
- SALINAS, S. R. *Introdução a física estatística vol. 09*. [S.l.]: Edusp, 1997.
- STEPANOV, I. et al. All-electrical time-resolved spin generation and spin manipulation in n-InGaAs. *Applied Physics Letters*, AIP, v. 104, n. 6, p. 062406, 2014.

WINKLER, R. Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems. *Springer Tracts in Modern Physics*, v. 191, 2003.