



รายงานวิจัยฉบับบสมบูรณ์

โครงการ การขนส่งอนุภาคและสปินผ่านโครงสร้างผสมที่ประกอบด้วยสารเฟอโร แมกเนติก/ระบบที่มีคู่ควบสปินกับวงโคจรแบบรัชบา/สารเฟอโรแมกเนติก

คณะผู้วิจัย สังกัด

ดร.เอก จันต๊ะยอด สังกัดภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์

สนับสนุนโดยกองทุนมหาวิทยาลัยนเรศวร

บทคัดย่อ

โครงการวิจัยนี้เป็นการศึกษาเชิงทฤษฎีของการขนส่งประจุไฟฟ้าและสปินที่ปราศจากสนามแม่เหล็ก ภายนอก ผ่านรอยต่อของสารเฟอโรแมกเนติกและระบบที่มีการคู่ควบกันของสปินกับวงโคจรแบบรัชบา ซึ่งใช้ การจำลองการเคลื่อนที่ของประจุไฟฟ้าแบบแลททิส เพื่ออธิบายคุณสมบัติต่างๆ ของประจุไฟฟ้าผ่ายรอยต่อ โดยงานวิจยันี้ได้คำนวณหาวิธีการที่เหมาะสมในการพิจารณาผลของการกระเจิงที่รอยต่อสองแบบ คือ การ กระเจิงแบบปกติ และการกระเจิงแบบที่มีการเปลี่ยนทิศของสปิน เพื่อศึกษาผลกระทบของปริมาณดังกล่าวต่**อ** พาหะนำไฟฟ้าและสปินโพลาไรเซชัน ซึ่งจากแบบจำลองการเคลื่อนที่แบบแลททิสทำให้เราทราบค่าพาหะน้ำ ไฟฟ้าทั้งของอิเล็กตรอนและโฮล จากการศึกษาค้าคว้าผู้วิจัยพบว่าการกำหนดให้อนุภาคเริ่มต้นที่สารเฟอโร แมกเนติกแล้วส่งผ่านมายังระบบที่มีคู่ควบสปินออร์บิทแบบรับบา พบว่าจุดเด่นชัดของการเปลี่ยนแปลง ปริมาณสภาพนำไฟฟ้าที่ได้มีค่าไม่แตกต่างจากการเริ่มยิงอนุภาคจากโลหะ ซึ่งผลของการใช้สารที่มีคุณสม**บัติ** เป็นเฟอโรแมกเนทจะขึ้นอยู่กับค่าพลังงานแลกเปลี่ยนภายในโดยไม่มีผลต่อคุณภาพของรอยต่อ ดังนั้นเพื่อ ความสะดวกผู้วิจัยจึงพิจารณาโลหะแทนเฟอโรแมกเนท ผลการวิจัยพบว่า ค่าสภาพนำไฟฟ้าเพิ่มขึ้นเมื่อมีการ ไบแอสแรงดันไฟฟ้าเพิ่มขึ้น และพบว่า สภาพนำไฟฟ้าจะเกิดการเปลี่ยนแปลงความชั้นอย่างชัดเจนเมื่อมีการ ให้แรงดันไฟฟ้าเท่ากับจุดตัดของแถบพลังงานบวกและแถบพลังงานลบของระบบที่มีการคู่ควบสปินออร์บิท แบบรัชบา จากความแตกต่างของช่วงพลังงานดังกล่าวเราสามารถนำไปคำนวณหาพลังงานของการคู่ควบก**ัน** ของสปินออร์บิทแบบรัชบาได้ ในส่วนของการเพิ่มความสูงของกำแพงศักย์ที่รอยต่อส่งผลให้สภาพนำไฟ**ฟ้า** ลดลงซึ่งเป็นเป็นเรื่องที่ทราบกันดีอยู่แล้ว แต่งานวิจัยนี้เราพบว่าเมื่อพิจารณาผลของการกระเจิงที่รอยต่อแบ**บ** มีการเปลี่ยนทิศของสปินซึ่งสามารถทำได้โดยการใส่ความไม่บริสุทธ์ทางแม่เหล็กลงไปที่รอยต่อ จะทำให้**ค่า** สภาพนำไฟฟ้ามีค่าเพิ่มขึ้นตามความต้านทานของรอยต่อได้ โดยค่าสภาพนำไฟฟ้ารวมจะสูงสุดเมื่อขนาดของ การกระเจิงทั้งสองแบบในรอยต่อมีค่าเท่ากัน ปรากฏการณ์นี้สามารถพบได้ทั้งสภาพนำไฟฟ้าของอิเล็กตรอน และสภาพนำไฟฟ้าของโฮล สำหรับการขนส่งของสปินซึ่งในเชิงปริมาณ เราวัดด้วยอัตราส่วนของผลต่างสภ**าพ** นำไฟฟ้าของประจุไฟฟ้าที่มีทิศของสปินตรงข้ามกันต่อค่าสภาพนำไฟฟ้ารวมของระบบ จากงานวิจัยเราพบ**ว่า** เมื่อตัดผลกระทบของการกระเจิงแบบมีการเปลี่ยนทิศของสปินได้ สปินโพลาไรเซชันจะเพิ่มขึ้นเมื่อมีการใส่ แรงดันไฟฟ้าเพิ่มขึ้นและจะมีขนาดสูงสุดเมื่อแรงดันไฟฟ้ามีค่าเท่ากับจุดตัดของค่าแถบพลังงานบวกและล**บ** ของระบบที่มีคูควบกันของสปินออร์บิทของระบบรัชบา

นอกจากนั้น โครงงานวิจัยนี้ยังได้คำนวณการขนส่งของอนุภาคและสปินผ่านรอยต่อระหว่างโลหะและ สารกึ่งตัวนำที่มีการคู่ควบกันของสปินออร์บิทแบบเดรสเซลฮอสโดยการจำลองการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอน แบบต่อเนื่อง งานวิจัยพบว่า ผลของค่าสภาพนำไฟฟ้าถูกพิจารณาเป็นฟังก์ชันของความหนาแน่นของ อิเล็กตรอน ค่าสภาพนำไฟฟ้าเพิ่มขึ้นเมื่อจำนวนความหนาแน่นของอิเล็กตรอนเพิ่มขึ้น และเกิดจุด เปลี่ยนแปลงของสภาพนำไฟฟ้าเมื่อความหนาแน่นของอิเล็กตรอนเท่ากับจุดตัดกันของแถบพลังงานของระบบ เดรสเซลฮอส ในขณะที่สภาพนำไฟฟ้าลดลงเมื่อความแรงของการคู่ควบสปินกับวงโคจรของระบบรัชบา เพิ่มขึ้นจนถึงค่าวิกฤต หลังจากค่าวิกฤต ค่าสภาพการนำไฟฟ้าจะมีขนาดเพิ่มขึ้นตามความแรงของการคู่ควบสปินกับวงโคจรของระบบเดรสเซลฮอส ส่วนค่าสปินโพลาไรเซชันจะมีค่าสูงสุดเมื่อความแน่นของอิเล็กตรอน

เท่ากับจุดตัดกันของแถบพลังงานของระบบเดรสเซลฮอส ความรู้ที่ได้จากโครงงานวิจัยนี้สามารถนำไปใช้เป็น แนวทางในการออกแบบอุปกรณ์ที่มีรอยต่อดังกล่าวเป็นส่วนประกอบ



Abstract

This research project is a theoretical study of the particle and spin transport in a metal and a semiconductor with Rashba spin-orbit coupling system within a lattice model. A lattice model is used to investigate conductance spectra and the spin polarization of the system. An appropriate matching conditions at the interface was developed in order to calculate the particle current across the junction. This model can provide the conductance value for both electron and hole Fermi surfaces. We found that the injection of the particle from ferromagnetic to the Rashba system gives the similar results from that using the injection from metal. An exchange energy in ferromagnetic does not affect to the scattering potential at the interface of the junction. For simplicity, we study the injection particle for normal metal instead the ferromagnetic. In this project we consider a heterostructure for two system.

First, we calculate the particle and spin transport in a metal and a semiconductor with Rashba spin-orbit coupling system. It found that the tunneling conductance was calculated as a function of applied voltage and showed the containment of two distinguished features, the energy spacing between which equal to the Rashba spin-orbit coupling energy. The conductance is increased with the applied voltage. When consider the impact of interface qualities we found that the conductance was suppressed with increase the barrier potential. However, it can be enhanced when equally increase the spin-conserved and spin-flip scattering at the interface of the junction. This result can be showed both electron and hole conductance. As for spin polarization of conductance in the absence of spin-flip scattering potential, the maximum magnitude occurs at the voltages equivalent to the two crossing points in the Rashba energy band.

Second, we also calculate the charge conductance across a metal/cubic semiconductor with Dresselhaus spin-orbit coupling junction. The conductance at a zero-applied voltage is calculated by using a free electron and scattering methods. The carrier density of semiconductor and the strength of Dresselhaus system are investigated on the overall conductance. We found that the conductance appears a kink feature which occurs when the Fermi level reaches the coincidence of Dresselhaus spin-orbit coupling band interaction. The Dresselhaus coupling strength increases, the conductance decreases until the strength reaches a critical value. Beyond this value, the conductance gradually increases with the coupling strength. The conductance can be enhanced when both types of interface spin scattering (spin-flip and non-spin-flip) are risen under certain condition. The spin polarization of current in the Dresselhaus system at a zero-applied voltage is also studied.

We found that its magnitude is large by increasing the carrier density and it weakly depend on the interfacial scattering. However, at the low carrier density, the sign of spin polarization switches when both types of interface spin scattering are taken into account.

This findings in this project can be used to help design spintronic devices that contain these types of interface



Executive Summary

ในโลกปัจจุบันนี้อุปกรณ์ทางอิเล็กทรอนิกส์เป็นส่วนหนึ่งที่สำคัญต่อการสื่อสารในชีวิตประจำวัน หลักการทำงานของอุปกรณ์เหล่านี้มีพื้นฐานมาจากความรู้ความเข้าใจฟิสิกส์ของสสารระหว่างรอยต่อหลาย ประเภท เช่น โลหะ/สารเฟอโรแมกเนติก สารกึ่งตัวนำ/สารตัวนำยิ่งยวด โลหะ/สารกึ่งตัวนำ เป็นต้น ความ เข้าใจเกี่ยวกับการขนส่งถ่ายเทประจุข้ามรอยต่อเหล่านี้มีความจำเป็น และนำไปสู่การพัฒนาออกแบบอุปกรณ์ ทางอิเล็กทรอนิกต่างๆ

โครงการวิจัยนี้เป็นการศึกษาเชิงทฤษฎีของการขนส่งประจุไฟฟ้าและสปินผ่านรอยต่อของสารเฟอโร แมกเนติกและระบบที่มีการคู่ควบกันของสปินกับวงโคจรแบบรัชบา จากการศึกษาค้าคว้าผู้วิจัยพบว่าการ กำหนดให้อนุภาคเริ่มต้นที่สารเฟอโรแมกเนติกแล้วส่งผ่านมายังระบบที่มีคู่ควบสปินออร์บิทแบบรับบา พบว่า จุดเด่นชัดของการเปลี่ยนแปลงปริมาณสภาพนำไฟฟ้าที่ได้มีค่าไม่แตกต่างจากการเริ่มยิงอนุภาคจากโลหะ ซึ่ง ผลของการใช้สารที่มีคุณสมบัติเป็นเฟอโรแมกเนทจะขึ้นอยู่กับค่าพลังงานแลกเปลี่ยนภายในโดยไม่มีผลต่อ คุณภาพของรอยต่อ เพื่อจะได้ผลลัพท์ที่เกิดจากคุณภาพของรอยต่ออย่างแท่จริง โครงการวิจัยนี้จึงได้ ทำการศึกษาเชิงทฤษฎีเกี่ยวกับการขนส่งประจุและสปินของโครงสร้างผสม 2 ระบบ คือ

- โลหะ/ระบบที่มีการคู่ควบกันของสปินกับวงโคจรแบบรัชบาโดยการจำลองการเคลื่อนที่ของ อิเล็กตรอนแบบแลททิส โดยงานวิจยันี้ได้คำนวณหาวิธีการที่เหมาะสมในการพิจารณาผลของการกระเจิงที่ รอยต่อสองแบบ คือ การกระเจิงแบบปกติ และการกระเจิงแบบที่มีการเปลี่ยนทิศของสปิน เพื่อศึกษา ผลกระทบของปริมาณดังกล่าวต่อพาหะนำไฟฟ้าและสปินโพลาไรเชชัน ซึ่งจากแบบจำลองการเคลื่อนที่แบบ แลททิสทำให้เราทราบค่าพาหะนำไฟฟ้าทั้งของอิเล็กตรอนและโฮล ผลการวิจัยพบว่า ค่าสภาพนำไฟฟ้าเพิ่มขึ้น เมื่อมีการไบแอสแรงดันไฟฟ้าเพิ่มขึ้น และพบว่า สภาพนำไฟฟ้าจะเกิดการเปลี่ยนแปลงความชั้นอย่างชัดเจน เมื่อมีการให้แรงดันไฟฟ้าเท่ากับจุดตัดของแถบพลังงานบวกและแถบพลังงานลบของระบบที่มีการคู่ควบสปิน ออร์บิทแบบรัชบา จากความแตกต่างของช่วงพลังงานดังกล่าวเราสามารถนำไปคำนวณหาพลังงานของกา**รคู่** ควบกันของสปินออร์บิทแบบรัชบาได้ ในส่วนของการเพิ่มความสูงของกำแพงศักย์ที่รอยต่อส่งผลให้สภาพ**นำ** ไฟฟ้าลดลงซึ่งเป็นเป็นเรื่องที่ทราบกันดีอยู่แล้ว แต่งานวิจัยนี้เราพบว่าเมื่อพิจารณาผลของการกระเจิงที่รอย**ต่อ** แบบมีการเปลี่ยนทิศของสปินซึ่งสามารถทำได้โดยการใส่ความไม่บริสุทธ์ทางแม่เหล็กลงไปที่รอยต่อ จะทำให้ ค่าสภาพนำไฟฟ้ามีค่าเพิ่มขึ้นตามความต้านทานของรอยต่อได้ โดยค่าสภาพนำไฟฟ้ารวมจะสูงสุดเมื่อขนาด ของการกระเจิงทั้งสองแบบในรอยต่อมีค่าเท่ากัน ปรากฏการณ์นี้สามารถพบได้ทั้งสภาพนำไฟฟ้าของ อิเล็กตรอนและสภาพนำไฟฟ้าของโฮล สำหรับการขนส่งของสปินซึ่งในเชิงปริมาณ เราวัดด้วยอัตราส่วนข**อง** ผลต่างสภาพนำไฟฟ้าของประจุไฟฟ้าที่มีทิศของสปินตรงข้ามกันต่อค่าสภาพนำไฟฟ้ารวมของระบบ จาก งานวิจัยเราพบว่าเมื่อตัดผลกระทบของการกระเจิงแบบมีการเปลี่ยนทิศของสปินได้ สปินโพลาไรเซชันจะ เพิ่มขึ้นเมื่อมีการใส่แรงดันไฟฟ้าเพิ่มขึ้นและจะมีขนาดสูงสุดเมื่อแรงดันไฟฟ้ามีค่าเท่ากับจุดตัดของค่า แถบพลังงานบวกและลบของระบบที่มีคูควบกันของสปินออร์บิทของระบบรัชบา
- 2. โครงสร้างผสมที่ประกอบด้วย โลหะ/ระบบที่มีการคู่ควบกันของสป็นกับวงโคจรแบบเดรสเซลฮอส โดยการจำลองการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนแบบต่อเนื่อง งานวิจัยพบว่า ผลของค่าสภาพนำไฟฟ้าถูกพิจารณา

เป็นฟังก์ชันของความหนาแน่นของอิเล็กตรอน ค่าสภาพนำไฟฟ้าเพิ่มขึ้นเมื่อจำนวนความหนาแน่นของ อิเล็กตรอนเพิ่มขึ้น และเกิดจุดเปลี่ยนแปลงของสภาพนำไฟฟ้าเมื่อความหนาแน่นของอิเล็กตรอนเท่ากับจุดตัด กันของแถบพลังงานของระบบเดรสเซลฮอส ในขณะที่สภาพนำไฟฟ้าลดลงเมื่อความแรงของการคู่ควบสปินกับ วงโคจรของระบบรัชบาเพิ่มขึ้นจนถึงค่าวิกฤต หลังจากค่าวิกฤต ค่าสภาพการนำไฟฟ้าจะมีขนาดเพิ่มขึ้นตาม ความแรงของการคู่ควบสปินกับวงโคจรของระบบเดรสเซลฮอส ส่วนค่าสปินโพลาไรเซชันจะมีค่าสูงสุดเมื่อ ความแน่นของอิเล็กตรอนเท่ากับจุดตัดกันของแถบพลังงานของระบบเดรสเซลฮอส

ความรู้ที่ได้จากโครงงานวิจัยนี้สามารถนำไปใช้เป็นแนวทางในการออกแบบอุปกรณ์ที่มีรอยต่**อ** ดังกล่าวเป็นส่วนประกอบ



สารบัญเรื่อง

	หน้า
บทน้ำ	1
แบบจำลองและวิธีการคำนวณ	3
โครงสร้างผสมของโลหะ/ระบบที่มีการคู่ควบกันของสปินออร์บิทแบบรัชบา	3
โครงสร้างผสมของโลหะ/ระบบที่มีการคู่ควบกันของสปินออร์บิทแบบเดรสเซลฮอส	9
สรุป วิจารณ์ และข้อเสนอแนะ	14
เอกสารอ้างอิง	15
ผลลัพท์จากโครงการวิจัย	17



กิตติกรรมประกาศ

ผู้วิจัยขอขอบพระคุณ กองทุนอุดหนุนการวิจัย จากงบประมาณรายได้ของมหาวิทยาลัยนเรศวร ปีงบประมาณ 2556 เป็นอย่างยิ่ง โครงการวิจัยนี้ไม่สามารถสำเร็จลุล่วงไปได้หากผู้วิจัยไม่ได้รับการสนับสนุน จากทุนดังกล่าว นอกจากนี้ผู้วิจัยขอขอบคุณ นายอำพล หลักบุญ นิสิตช่วยงานวิจัยที่ได้ให้ข้อสังเกตุ คำแนะน้ำ ที่เป็นประโยชน์ รองศาสตรจารย์ ดร.พวงรัตน์ ไฟเราะ อาจารย์ ดร.เบญจมาศ ศรีสองเมือง ที่ให้คำปรึกษา คำแนะนำที่ดี เป็นประโยชน์อย่างยิ่งที่ทำให้โครงการนี้สำเร็จได้ด้วยดี ขอบคุณ อาจารย์ ดร. อรรถพล อ่าทอง ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยนเรศวร ที่ให้คำแนะการเขียนบทความวิจัยเพื่อตีพิมพ์ใน วารสารระดับนานาชาติ และขอขอบคุณภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ ที่เอื้อหนุนสถานที่ทำวิจัยเป็นอย่าง ดี



1. บทน้ำ

ปัจจุบันนี้อุปกรณ์ทางอิเล็กทรอนิกส์เป็นส่วนหนึ่งที่สำคัญต่อการสื่อสารในชีวิตประจำวันของมนุษย์ เรา หากเราสามารถพัฒนาอุปกรณ์เหล่านี้ให้มีประสิทธิภาพดียิ่งขึ้นก็จะส่งผลต่อความสะดวก รวดเร็ว แม่นยำ ในการสื่อสารด้วยเช่นกัน หลักการทำงานของอุปกรณ์เหล่านี้มีพื้นฐานมาจากความรู้ความเข้าใจฟิสิกส์ของ สสารประเภทต่างๆ เช่น โลหะ สารเฟอโรแมกเนติก สารกึ่งตัวนำ และสารตัวนำยิ่งยวด นักฟิสิกส์พบว่าหาก สร้างระบบโครงสร้างผสมที่ประกอบด้วยสะสารเหล่านี้ เช่น โลหะ/สารเฟอโรแมกเนติก โลหะ/สารกึ่งตัวนำ สารกึ่งตัวนำ/สารเฟอโรแมกเนติก สารเฟอโรแมกเนติก/สาร ตัวนำยิ่งยวด เป็นต้น จะสามารถเพิ่มประสิทธิภาพการนำไฟฟ้าของอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ให้ดียิ่งขึ้น [1-3] ซึ่ง ความเข้าใจเกี่ยวการขนส่งถ่ายเทประจุไฟฟ้าข้ามรอยต่อระหว่างสะสารเหล่านี้มีความจำเป็นอย่างยิ่ง และนำ ไฟสู่การออกแบบ พัฒนาอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ต่างๆ

ในช่วง 2-3 ทศวรรษที่ผ่านมานักวิจัยมีความสนใจต่อการพัฒนาอุปกรณ์ที่ใช้คุณสมบัติของสปินของ พาหะไฟฟ้าหรือที่เรียกว่า อุปกรณ์สปินทรอนิกส์ อย่างแพร่หลาย และเป็นแรงบันดาลใจให้เกิดงานวิจัยจำนวน มากทั้งด้านการทดลองและทางทฤษฎีที่เกี่ยวกับการขนส่งพาหะทางไฟฟ้าที่มีค่าสปินไม่เป็นศูนย์ ซึ่งพาหะ ไฟฟ้าดังกล่าวมักอยู่ในสสารประเภทที่มีความเป็นแม่เหล็ก และสารกึ่งตัวนำที่มีคู่ควบสปินออร์บิทแบบรัชบา [4, 5] โดยเฉพาะอย่างยิ่งระบบที่มีคู่ควบสปินออร์บิทแบบรัชบา เป็นสารที่มีการคู่ควบของสปินกับวงโคจรสูง มากที่บริเวณพลังงานของระบบรัชบา: $E_{\lambda} = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m^*}$ เมื่อ k_0 คือ ความแรงของระบบรัชบา (Rashba spinorbit coupling strength) และ m^* คือ มวลยังผล (electron effective mass) ซึ่งจะส่งผลให้มี ประสิทธิภาพในการขนส่งสปินมากยิ่งขึ้น ในงานวิจัยที่ผ่านมาส่วนมากได้ศึกษาระบบโครงสร้างผสม [6-15] ที่ ประกอบด้วยระบบที่มีคู่ควบสปินกับวงโคจรแบบรัชบาโดยได้ใช้แบบจำลองแบบต่อเนื่อง (Continuous model) ในการอธิบายคุณสมบัติของประจุไฟฟ้า เช่น ฮามิลโตเนียน แถบพลังงาน ลักษณะการเคลื่อนที่ เป็น ต้น แต่แบบจำลองนี้ไม่จำกัดโอกาสในการเคลื่อนที่ของอนุภาค ซึ่งในทางทฤษฎีนั้นยังมีแบบจำลองที่มีความ เสมือนจริงมากกว่าแบบจำลองต่อเนื่อง นั่นคือ แบบจำลองแลททิส (Lattice model or Tight binding model) ถึงแม้จะมีนักวิจัยบางกลุ่มที่ศึกษากระแสไฟฟ้าไหลผ่านโครงสร้างผสมดังกล่าวด้วยแบบจำลอง แลททิส แต่ได้พิจารณาระบบที่มีลักษณะเป็นควันตัมไวร์ (วัสดุนาโนที่โครงสร้าง 1 มิติ อีก 2 มิติมีขนาดเล็ก มาก) [16-19] และได้คำนวณหาเงื่อนไขขอบเขตที่รอยต่อภายใต้ฟังก์ชันกรีน (Green's function) ซึ่งเป็น การสมมุติให้รอยต่อมีคุณภาพที่แย่มาก แต่จากผลวิจัยที่ผ่านมาพบว่าคุณภาพของรอยต่อมีอิทธิพลต่อพาหะนำ ไฟฟ้าและสปินโพลาไรเซชันเป็นอย่างมาก [20, 21] รวมถึงในการทดลองจริงๆ เราสามารถทำให้รอยต่อมี คุณภาพที่ดีขึ้นได้ หมายความว่าเราสามารถพิจารณาคุณภาพรอยตั้งแต่คุณภาพดีเยี่ยมไปจนถึงคุณภาพแย่มาก ที่มีต่อพาหะนำไฟฟ้าและสปินผ่านโครงสร้างผสมต่างๆ ได้ ซึ่งจะเห็นว่าการศึกษาเกี่ยวกับสปินและพาหะไฟฟ้า ยังไม่สามารถอธิบายได้อย่างกระจ่างแจ้ง

ดังนั้นในงานวิจัยนี้จะศึกษาคุณสมบัติของประจุและสป็นผ่านโครงสร้างผสมที่ประกอบด้วยโลหะ/ ระบบที่มีคู่ควบสปินกับวงโคจรแบบรัชบา โดยจะใช้แบบจำลองแลททิสในระบบสองมิติ รวมถึงข้อได้เปรียบ ของแบบจำลอง เช่น โอกาสในการเคลื่อนที่ไปยังตำแหน่งอื่น (hopping energy) ทิศทางของผิวรอยต่อ (interface orientation) แถบพลังงาน (energy band) เป็นต้น ทั้งนี้ในงานวิจัยจะคำนวณหาเงื่อนไข ขอบเขตที่เหมาะสมของรอยต่อพร้อมทั้งพิจจารณาตัวแปรที่อธิบายถึงคุณภาพของรอยต่อตั้งแต่คุณภาพดีเยี่ยม จนถึงคุณภาพที่แย่ลง ที่มีต่อพฤติกรรมของการขนส่งประจุไฟฟ้าและสปินของระบบที่ประกอบด้วยโครงสร้าง ดังกล่าว เพื่อวิธีการควบคุมและจัดการกับการขนส่งของพาหะไฟฟ้าให้มีประสิทธิภาพสูงสุด และเป็นประโยชน์ ต่อการนำไปสู่การออกแบบอุปกรณ์สปินทรอนิกส์ที่มีขนาดเล็ก ประมวลผลด้วยความรวดเร็ว เป็นมิตรกับ สิ่งแวดล้อม และมีการใช้พลังงานให้น้อยที่สุด ผลที่ได้จากการศึกษาโดยสรุปเป็นดังนี้

- 1. โครงสร้างผสมของโลหะ/สารที่มีคู่ควบสปินออร์บิทแบบรัชบาในแบบจำลองแลททิส พบว่า คุณภาพของรอยต่อมีผลต่อสภาพนำไฟฟ้าผ่านรอยต่อดังกล่าว ดังนี้ การเพิ่มความสูงของกำแพง ศักย์ที่รอยต่อส่งผลให้สภาพนำไฟฟ้าลดลงซึ่งเป็นเป็นเรื่องที่ทราบกันดีอยู่แล้ว แต่งานวิจัยนี้เรา พบว่าเมื่อพิจารณาผลของการกระเจิงที่รอยต่อแบบมีการเปลี่ยนทิศของสปินซึ่งสามารถทำได้โดย การใส่ความไม่บริสุทธ์ทางแม่เหล็กลงไปที่รอยต่อ จะทำให้ค่าสภาพนำไฟฟ้ามีค่าเพิ่มขึ้นตาม ความต้านทานของรอยต่อได้ โดยค่าสภาพนำไฟฟ้ารวมจะสูงสุดเมื่อขนาดของการกระเจิงทั้งสอง แบบในรอยต่อมีค่าเท่ากัน ปรากฏการณ์นี้สามารถพบได้ทั้งสภาพนำไฟฟ้าของอิเล็กตรอนและ สภาพนำไฟฟ้าของโฮล
- 2. โครงสร้างผสมของโลหะและสารกึ่งตัวน้ำที่มีการคู่ควบกันของสปินกับวงโคจรแบบเดรสเซล ฮอส พบว่า ผลของค่าสภาพนำไฟฟ้าถูกพิจารณาเป็นฟังก์ชันของความหนาแน่นของอิเล็กตรอน ค่าสภาพนำไฟฟ้าเพิ่มขึ้นเมื่อจำนวนความหนาแน่นของอิเล็กตรอนเพิ่มขึ้น และเกิดจุด เปลี่ยนแปลงของสภาพนำไฟฟ้าเมื่อความหนาแน่นของอิเล็กตรอนเท่ากับจุดตัดกันของ แถบพลังงานของระบบเดรสเซลฮอส ในขณะที่สภาพนำไฟฟ้าลดลงเมื่อความแรงของการคู่ควบ สปินกับวงโคจรของระบบรัชบาเพิ่มขึ้นจนถึงค่าวิกฤต หลังจากค่าวิกฤต ค่าสภาพการนำไฟฟ้าจะ มีขนาดเพิ่มขึ้นตามความแรงของการคู่ควบสปินกับวงโคจรของระบบเดรสเซลฮอส ส่วนค่าสปิน โพลาไรเซชันจะมีค่าสูงสุดเมื่อความแน่นของอิเล็กตรอนเท่ากับจุดตัดกันของแถบพลังงานของ ระบบเดรสเซลฮอส

ความรู้ที่ได้จากโครงงานวิจัยนี้สามารถนำไปใช้เป็นแนวทางในการออกแบบอุปกรณ์ที่มีรอยต่อ ดังกล่าวเป็นส่วนประกอบ สำหรับรายละเอียดของการการค้นพบความรู้ในโครงงานวิจัยนี้ เราได้นำไปเขียน เป็นบทความ 2 เรื่อง คือ

- 1. Tunneling conductance across a junction of metal/Rashba spin-orbit coupling system in a lattice model
- 2. Charge conductance and spin-polarized current across a metal/cubic semiconductor with Dresselhaus spin-orbit coupling junction ซึ่งรายละเอียดของต่างๆ อยู่ในส่วนของผลลัพท์ของงานวิจัย

2. แบบจำลองและวิธีการคำนวณ

ผู้วิจัยได้ใช้วิธีการศึกษาหลักคือ วิธีทางกลศาสตร์ควันตัมที่เรียกว่า วิธีการกระเจิง ซึ่งนิยมใช้ใน การศึกษารอยต่อระหว่างสาร 2 ชนิด สำหรับรายละเอียดของวิธีการดังกล่าวในรอยต่อของเฟอโรแมกเนติก/ สารที่มีคู่ควบสปินออร์บิทแบบรัชบา/สารเฟอโรแมกเนติก เนื่องจากผู้วิจัยจะต้องใช้วิธีการกระเจิง (Scattering method) ร่วมกับวิธีไทต์ใบดิ้ง (Tight-binding approximation) เพื่ออธิบายการเคลื่อนที่ ของอิลเกตรอนหรือที่เรียกว่า แบบจำลองแลททิส (Lattice model) ผู้วิจัยพบปัญหาคือ การคำนวณหาเงื่อน ไปขอบเขตที่รอยต่อระหว่าง ระบบที่มีสปินออร์บิทแบบรัชบา/สารเฟอโรแมกเนติก ดังนั้นผู้วิจัยจึงพิจารณา เฉพาะรอยต่อของ สารเฟอโรแมกเนติก/ระบบที่มีสปินออร์บิทแบบรัชบา โดยเน้นไปที่ผลกระทบของการ กระเจิงที่รอยต่อ ดังนั้นในส่วนของสารที่มีคุณสมบัติเป็นเฟอโรแมกนิกติก ถ้าหากตัดความเป็นแม่เหล็กออกก็ จะกลายเป็นสารที่มีคุณสมบัติเป็นโลหะปกติ เพื่อให้ได้ผลกระทบของการกระเจิงที่รอยต่ออย่างแท้จริงผู้วิจัยจึง นำเสนอรายละเอียดของงานวิจัยของรอยต่อ ระหว่าง โลหะ/ระบบที่มีสปินออร์บิทแบบรัชบา เพื่อความ สะดวกในการเขียนและบรรยายวิธีการคำนวณผู้วิจัยขอเขียนเป็นภาษาอังกฤษ

2.1 โครงสร้างผสมของโลหะ/ระบบที่มีการคู่ควบกันของสปินออร์บิทแบบรัชบา

We presented both the normal metal and the RSOC in an infinite 2D square lattice in a xy plane (see Fig 1) and the sketched of energy dispersion of the model as see in Fig. 2. We described the RSOC system by Eq.(1) and for simplicity we assume there are only nearest-neighbor hopping energy. The simplest tight binding Hamiltonian that can be described the influence of Rashba spin-orbit coupling in a square lattice [15, 27] has the form.

$$H_{RS} = \sum_{nm\sigma} (\epsilon_{nm\sigma} - \mu) C_{nm\sigma}^{\dagger} C_{nm\sigma} - t_R \sum_{nm\sigma} (C_{n+1,m\sigma}^{\dagger} C_{nm\sigma} + C_{n,m+1,\sigma}^{\dagger} C_{nm\sigma} + H.C.)$$
$$- t_{so} \sum_{nm\sigma\sigma'} \{ C_{n+1,m\sigma'}^{\dagger} (i\sigma_y)_{\sigma\sigma'} C_{nm\sigma} - C_{n,m+1,\sigma'}^{\dagger} (i\sigma_x)_{\sigma\sigma'} C_{nm\sigma} + H.C. \}$$
(1)

where the subscripts n and m indicate the column and row indices of the square lattice site. The tight-binding Hamiltonian is obtained by discretzing the free electron Hamiltonian: $p^2/2m^* + \alpha(\sigma_y p_x - \sigma_x p_y)$, where m^* is the electron effective mass and p is the electron momentum. $C^{\dagger}_{nm\sigma}(C_{nm\sigma})$ is the creation (annihilation) operator of an electron at indices (nm) at lattice site with spin $\sigma = \uparrow \downarrow$, $\epsilon_{nm\sigma}$ is the on-site energy; $t_R = \hbar^2/2m^*a$ is the hopping energy (nearest-neighbor) for a lattice constant a (see Fig. 1), μ is the chemical potential. α is the Rashba parameter, $\sigma_{x(y)}$ is the Pauli's

matrix, $t_{so} = \alpha/2a$ denotes the RSOC strength in the lattice representation ($t_{so} = 0$, the Hamiltonian is reduced to that of electrons in a normal metal).

The Hamiltonian can transform into the momentum space by using the Fourier transform and can be obtained the eigenstates and eigenvalues by the standard quantum mechanics, thus the energy dispersion relation of electron in the Rashba system are

$$E(\mathbf{k}) = E_0(\mathbf{k}) \pm 2t_{so} \sqrt{\sin^2(k_x a) + \sin^2(k_y a)}$$
 (2)

where $E_0(\mathbf{k}) = (\epsilon_R - \mu) - 2t_R(\cos(k_x a) + \cos(k_y a))$ is the eigenvalue for a 2DEG without spin-orbit coupling. The plus and minus signs are for plus and minus branch of Rashba energy spectrum, respectively. $k_{x(y)}$ is the wave vector in x(y) direction.

Assuming an incoming electron from the normal metal side, the electronic wave function of electron with the energy E in the metal is written as a linear combination of incident momentum state and reflected states of the same energy and k_y . Based on the spin part of the wave function, we again have two equally likely incident states. In the absence of the applied magnetic field, we write the two cases of the wave function in the metal side as

$$U_{M,1}^{k_y}(n,m) = \left[e^{iq_x an} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + e^{-iq_x an} \begin{pmatrix} r_{1\downarrow} \\ r_{1\uparrow} \end{pmatrix} \right] e^{ik_y ma}$$
(3)

$$U_{M,2}^{ky}(n,m) = \left[e^{iq_x an} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + e^{-iq_x an} \begin{pmatrix} r_{2\downarrow} \\ r_{2\uparrow} \end{pmatrix} \right] e^{ik_y ma}, \tag{4}$$

where n, m represent the indices of the columns and rows of the lattice points, $q_x = \frac{1}{a}\cos^{-1}\left[\left(E - \epsilon_N + \mu + 2t'_N\cos(k_y a)\right) / - 2t_N\right]$ is the wave vector along the x direction with $|q_x| < \pi/a$ and $|k_y| < \pi/a$. $r_{j\sigma}$ is the reflection amplitudes of spin- σ state in case j.

In order to focus our attention on the effect of the Rashba system on the particle transport across the junction, we set the hopping energy along the surface in the metal to be smaller than that along the direction perpendicular to the surface, i.e., $t'_N = 0.1t_N$. This choice of the parameter results in the energy contours as shown in Fig. 3. The parameter $F_N \equiv (\epsilon_N - \mu)/2(t_N + t'_N)$ is called the filling parameter. In this

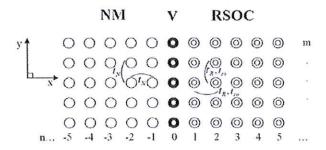


Figure 1: Schematic illustration of the square lattice junction of a normal metal/2DEG with RSOC in xy plane, a is a lattice constant of the system, and nm indicate the column and row indices of the square lattice, respectively.

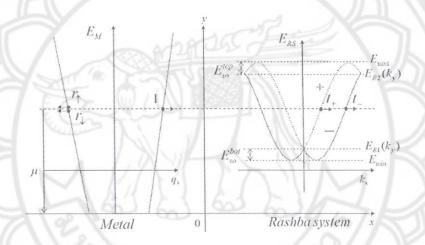


Figure 2: Sketches of the energy dispersion of the electron in the metal (left) and the Rashba system (right). The dashed line that crosses both sides shows the momentum states with the same k_y . E_{max} , E_{min} , E_{R1} , and E_{R2} are dependent with k_y . They correspond to the maximum energy level, minimum energy level, the condition of an appropriated eigenstates for the 1st and 2nd crossing point of RSOC band dispersion, respectively. Note that $E_{R1} = (\epsilon_R - \mu) - 2t_R(1 + \cos(k_y a)) - 2t_{so}\sin(k_y a)$ and $E_{R2} = (\epsilon_R - \mu) - 2t_R(-1 + \cos(k_y a)) + 2t_{so}\sin(k_y a)$.

work, we use the half-filling Fermi surface ($F_N = 0$) represented as the thickest energy contour in the figure. Also, in most cases the energy band width of a metal is about an order of magnitude larger than that of a Rashba system, we therefore set our energy

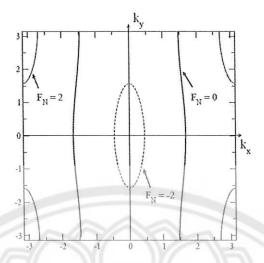


Figure 3: Contour energy of metal showed three Fermi levels with $t'_N = 0.1t_N$.

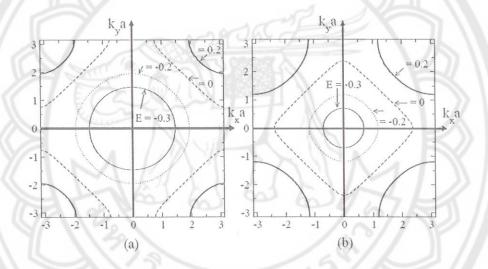


Figure 4: Plots of contour energy of RSOC system (left) Fermi levels in minus branch and (right) for plus branch, note that the energy is multiply t_N .

parameters accordingly. That is, we set the hopping energy in the Rashba system to be $t_R = 0.1t_N$. The spin-orbit coupling energy that causes the spin-splitting states is t_{so} , which is set to be $t_{so} = 0.4t_R = 0.04t_N$, unless we state otherwise. Similarly, we define the filling parameter for the Rashba system as $F_{RS} \equiv (\mu - \epsilon_R)/(4t_R \mp 2\sqrt{2}t_{so})$. Each filling level is shown in Fig. 4, where the left panel is for the minus branch and the right panel is for the plus branch. However, we also consider effects of t_{so} on the conductance spectrum as will discuss later.

For wave function of the Rashba region, There are three forms of the electronic wave function, depending on the energy. For $E < E_{R1}(k_y)$,

$$U_{R}^{ky}(n,m) = \begin{bmatrix} t_{j+}e^{i(-k_{x}^{+})an} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\frac{i\sin(-k_{x}^{+}a)+\sin k_{y}a}{\sqrt{\sin^{2}(-k_{x}^{+}a)+\sin^{2}k_{y}a}} \\ 1 \end{pmatrix} \\ + t_{j-}e^{ik_{x}^{-}an} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\frac{i\sin(k_{x}^{-}a)+\sin k_{y}a}{\sqrt{\sin^{2}(k_{x}^{-}a)+\sin^{2}k_{y}a}} \\ 1 \end{pmatrix} \end{bmatrix} e^{ik_{y}ma},$$
 (5)

for $E_{R1}(k_y) \leqslant E \leqslant E_{R2}(k_y)$,

$$U_{R}^{k_{y}}(n,m) = \begin{bmatrix} t_{j+}e^{ik_{x}^{+}an} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{i\sin k_{x}^{+}a + \sin k_{y}a}{\sqrt{\sin^{2}k_{x}^{+}a + \sin^{2}k_{y}a}} \\ 1 \end{pmatrix} + t_{j-}e^{ik_{x}^{-}an} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\frac{i\sin(k_{x}^{-}a) + \sin k_{y}a}{\sqrt{\sin^{2}(k_{x}^{-}a) + \sin^{2}k_{y}a}} \\ 1 \end{pmatrix} \right] e^{ik_{y}ma},$$
 (6)

for $E > E_{R2}(k_y)$,

$$U_{R}^{ky}(n,m) = \begin{bmatrix} t_{j+}e^{ik_{x}^{+}an} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{i\sin k_{x}^{+}a + \sin k_{y}a}{\sqrt{\sin^{2}k_{x}^{+}a + \sin^{2}k_{y}a}} \\ 1 \end{pmatrix} \\ + t_{j-}e^{i(-k_{x}^{-})an} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{i\sin(-k_{x}^{-}a) + \sin k_{y}a}{\sqrt{\sin^{2}(-k_{x}^{-}a) + \sin^{2}k_{y}a}} \\ 1 \end{pmatrix} e^{ik_{y}ma},$$
 (7)

where $E_{R1}(k_y)$ and $E_{R2}(k_y)$ are defined in the Fig. 2, j = 1, 2 refer to the two cases of different incoming states in the metal, $t_{j\pm}$ correspond the transmission amplitudes of plus and minus branch in case j, respectively, and k_x^{\pm} are defined as

$$\cos(k_x^{\pm}a) = \frac{1}{2} \left(\frac{t_R(E + 2t_R\cos(k_y a))}{t_R^2 + t_{so}^2} \right)$$

$$\pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{t_{so}^2 \left(4t_R^2 + 6t_{so}^2 - E^2 - 4t_R E\cos(k_y a) - 2\left(2t_R^2 + t_{so}^2\right)\cos(2k_y a)\right)}{\left(t_R^2 + t_{so}^2\right)^2}}.$$
(8)

The \pm signs are for the plus and minus branch.

All wave function have positive group velocities or the vector momentum k_x have a positive imaginary parts. As mention above we developed the suitable way by making the quality of interfacial scattering to calculate the transport properties of particle.

With the translational symmetry of the system, the component along the surface (k_y) of a momentum is conserved within a reciprocal-lattice vector corresponding to the translation of a distance between the lattice networks. Therefore, we can used the Bloch's theorem to write the eigenstates of Eq.(1) in the following form

$$U(n,m) = e^{imk_y a} U^{k_y}(n) \tag{9}$$

where n and m indicated the column and row indices as see in Fig. 1, $-\pi/a \leqslant k_y \leqslant$ π/a . Substituting Eq.(9) into Eq.(1), the 2D equations are reduced to the following 1D equations for each k_y

$$\sum_{n'} T^{k_y}(n, n') U^{k_y}(n') = E U^{k_y}(n). \tag{10}$$

 $T^{k_y}(n,n')$ is the suitable (2×2) energy matrix between two ions with column indices n and n'. In each system, we have to set of a different equation to described both bulk state of normal metal and Rashba system, these equation still provide the matching condition for two wave functions, $U_M^{k_y}(n)$ and $U_R^{k_y}(n)$ at the interface.

$$U_R^{k_y}(0) - U_M^{k_y}(0) = 0 (11)$$

$$U_R^{k_y}(0) - U_M^{k_y}(0) = 0$$

$$t_N U_M^{k_y}(-1) - T_{so} U_R^{k_y}(-1) + V U_R^{k_y}(0) = 0$$
(11)

where $V = \begin{pmatrix} V_0 & V_F \\ V_F & V_0 \end{pmatrix}$. The diagonal elements of V from now on mean $V_0 = V_{\uparrow\uparrow} = V_0$ $V_{\downarrow\downarrow}$, which is a spin-conserved that related to the potential barrier of the junction, the off-diagonal elements are denoted by $V_F = V_{\uparrow\downarrow} = V_{\downarrow\uparrow}$, which mean the spin-flip interfacial scattering and $T_{so} = \begin{pmatrix} t_R & -t_{so} \\ t_{so} & t_R \end{pmatrix}$.

After substituted the wave function of both normal metal and RSOC into the boundary condition, we can obtained the transmission (T) and reflection (R) probability which is conservation of electric current at the interface.

An electrical current flowing through a solid, and having unit of charge per unit area which mean a measurement in a perpendicular to the flow direction. For the number of free electron charge per unit volume n_e flowing to a solid with velocity v,

resulting in volume current J is given by

$$J = \sum_{\vec{k}} e n_e v_k \tag{13}$$

where e is the charge on an electron. Since the current is independent of x, we consider the current density as a function of applied voltage V in the ROSC system as

$$J = \sum_{k_{x} > 0, k_{x}} ev_{k}(T(E_{k})) \left[f(E_{k} - eV) - f(E_{k}) \right], \tag{14}$$

where f(E) is Fermi distribution function. By changing the integration variable and setting temperature to zero for simplicity, one can obtain the expression for the electric current as

$$J(V) = \frac{e\mathcal{A}}{(2\pi)^2} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} dk_y \int_0^{eV} dE \cdot T(E) \left(f(E - eV) - f(E) \right)$$
 (15)

where $A = a \times a$ is the area of lattice network, thus the differential conductance at zero temperature is,

$$G(eV) \equiv \frac{dJ}{dV}$$

$$= \frac{e^2 \mathcal{A}}{(2\pi)^2} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} dk_y T(E)$$
(16)

Note that, the applied voltage was considered in both positive and negative value and the effects of finite temperature on the conductance spectrum is a smear feature, i.e., it not change the position of conductance spectrum.

2.2 โครงสร้างผสมของโลหะ/สารกึ่งตัวน้ำที่มีการคู่ควบกับของสปินออร์บิทแบบเดรศเซลฮอส

เนื่องจากระหว่างค้นคว้าข้อมูลของระบบสสารหลายประเภท เราพบว่ายังมีระบบที่มีการคู่ ควบกันของสปินออร์บิทแบบเดรสเซลฮอสซึ่งสามารถพบได้ในสารกึ่งตัวนำเช่นเดียวกับระบบรัชบา ดังนั้นผู้วิจัยจึงได้ทดลองคำนวณหาการขนส่งของอนุภาคผ่านรอยต่อดังกล่าวซึ่งจะใช้การจำลองการ เคลื่อนที่แบบต่อเนื่องเพื่อคำนวณหาค่าพาหะนำไฟฟ้าอิเล็กตรอนผ่านรอยต่อโลหะ/สารกึ่งตัวนำที่มี การคู่ควบกับของสปินออร์บิทแบบเดรศเซลฮอส

The metal and cubic semiconductor with Dresselhaus spin-orbit interaction is modeled by an infinite two-dimensional (2D) system which lies on xz plane. The region at x < 0 is occupied by metal while the Dresselhaus system is in x > 0. These two regions are separated by a flat interface at x = 0 where interfacial scattering (we are only interested in the elastic scattering) is represented by a Dirac-delta function potential [45]. The Hamiltonian in the one-band effective mass approximation with exchange interaction in the metal and Dresselhaus spin-orbit coupling has the following form

$$\vec{H} = \{\hat{p}\frac{1}{2m(x)}\hat{p} + V(x,z)\}\hat{I} + \vec{H}_D(x). \tag{1}$$

The Schrödinger equation is expressed in a 2×2 matrix acting on the spinor states. \hat{I} is 2×2 identity matrix and the momentum operator $\hat{p} = -i\hbar(\hat{x}\frac{\partial}{\partial x} + \hat{z}\frac{\partial}{\partial z})$. The effective mass m(x) is position dependent; i.e., $[m(x)]^{-1} = m^{-1}\Theta(-x) + (m^*)^{-1}\Theta(x)$, where m and m^* are the effective electron mass in the metal and the Dresselhaus system, respectively. $\Theta(x)$ is the Heaviside step function. V(x,z) is also a position dependent function, modeled by the expression

$$V(x,z) = H\delta(x) - E_F(\Theta(-x)), \qquad (2)$$

where H represents the scattering potential at the interface. The diagonal elements of H, $H^{\uparrow\uparrow}$ and $H^{\downarrow\downarrow}$ correspond to the non-spin-flip scattering potential of the junction while $H^{\uparrow\downarrow} = H^{\downarrow\uparrow}$ describe the spin-flip scattering. $E_F = (\hbar^2 q_F^2)/(2m)$ is the Fermi energy of the metal. The Dresselhaus Hamiltonian term $\vec{H}_D(x)$ is written as

$$H_D = \beta(\sigma_z k_z - \sigma_x k_x),\tag{3}$$

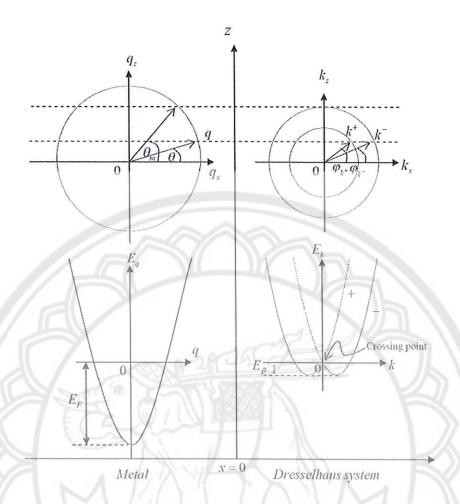


Figure 1: The sketches of the energy contour (top) and energy spectra (bottom) of electron in metal (on the left) and in the Dresselhaus system (on the right), $E_{\beta} = \hbar^2 k_D^2/(2m^*)$ is the Dresselhaus energy, E_F is the Fermi energy in the metal. The parameters are defined in the text.

We then write the magnitude of the wave vector as a function of the carrier density by using the relationships in Eqs.(6) and Eqs.(7). For E > 0, k^{\pm} are

$$k^{\pm} = k_D \left(\sqrt{\frac{2n}{n_D} - 1} \mp 1 \right). \tag{8}$$

The - and + signs in the right hand side of equation above are for the plus and minus branches, respectively. For E < 0, the wave vectors are obtained as

$$k^{\pm} = k_0 \left(1 \mp \frac{n}{n_D} \right). \tag{9}$$

The – and + signs in the right hand side of equation above are for $|k| \leq k_D$ and $k_D \leq |k| < 2k_D$, respectively.

Finally, we can obtain both conductance and the spin polarization of current as a function of the electron carrier density across the junction by using the scattering method. In this method, we first consider an incoming electron from one side of the junction, and calculate the reflection and transmission probabilities, which are later used to obtain the current density of the junction. We point out that these quantities are at zero temperature.

The wave function of electrons on the metal side with energy E is therefore written as a linear combination of incident momentum states and reflected states of the same energy and the momentum along the surface k_z . Because there are equal number of electrons with opposite spin directions, there are two possibilities of the wave function. For simplicity, we choose the spins of incident electrons along the z-axis. The wave function of electron in the metal side can be written in two cases, depending on the spin orientation of them, as

$$\psi_M^{(1)} = \left(\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} e^{iq_x x} + \begin{bmatrix} r_{1\uparrow} \\ r_{1\downarrow} \end{bmatrix} e^{-iq_x x} \right) e^{iq_z z} \tag{10}$$

$$\psi_M^{(2)} = \left(\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} e^{iq_x x} + \begin{bmatrix} r_{2\uparrow} \\ r_{2\downarrow} \end{bmatrix} e^{-iq_x x} \right) e^{iq_z z}, \tag{11}$$

where $q_x = q \cos \theta$ and $q_z = q \sin \theta$. θ is the angle between \vec{q} and x axis and $q = n_F \sqrt{1 + E/E_F}$, where $n_F = q_F^2/2\pi$ is the carrier density at Fermi level. $r_{j\sigma}$ is the reflection coefficient of electron reflection with spin σ in case j of incident electrons.

Similarly, the wave function of the Dresselhaus system is obtained as a linear combination of two outgoing eigenstates of the same energy and k_z

$$\psi_D^{(j)}(x,z) = \left(t_{j+} \left[\begin{array}{c} \mp \cos\left(\frac{\varphi_{k+}}{2} \pm \frac{\pi}{4}\right) \\ \pm \sin\left(\frac{\varphi_{k+}}{2} \pm \frac{\pi}{4}\right) \end{array} \right] e^{ik_x^+ x}$$

$$+ t_{j-} \left[\begin{array}{c} \sin\left(\frac{\varphi_{k-}}{2} + \frac{\pi}{4}\right) \\ \cos\left(\frac{\varphi_{k-}}{2} + \frac{\pi}{4}\right) \end{array} \right] e^{ik_x^- x} \right) e^{ik_z z},$$

$$(12)$$

where j=1, 2 refer to the wave functions of the Dresselhaus system corresponding to the two cases of spin orientation of incident electrons. $\varphi_{k\pm}$ are the angles between k^{\pm} and the x-axis. For E > 0, t_{j+} and t_{j-} are the transmission amplitudes for plus and minus branches, respectively. When E < 0,

 t_{j+} and t_{j-} refer to the transmission amplitudes of electrons for $|k| \leq k_D$ and $k_D \leq |k| < 2k_D$, respectively. The upper and lower signs in the Eq.(12) are for E < 0 and E > 0 respectively. $k_x^{\pm} = k^{\pm} \cos \varphi_{k^{\pm}}$ and $k_z^{\pm} = k^{\pm} \sin \varphi_{k^{\pm}}$. The relationship between the angles $\varphi_{k\pm}$ and θ is $k_z = k^{\pm} \sin \varphi_{k\pm} = q \sin \theta$ as shown in Fig.1.

We now apply the matching conditions to the wave functions on both sides to obtain the transmission and reflection amplitudes: the continuity of the wave function and the discontinuity of its slope $(\partial \psi/dx)$, due to the delta-function like barrier at the interface are,

$$\psi_M^{(j)}(x=0^+,z) = \psi_D^{(j)}(x=0^-,z) = \psi^{(j)}(0)$$
(13)

$$\psi_{M}^{(j)}(x=0^{+},z) = \psi_{D}^{(j)}(x=0^{-},z) = \psi^{(j)}(0)$$

$$\left(\frac{m}{m^{*}} \frac{\partial \psi_{D}^{(j)}}{\partial x} - \frac{\partial \psi_{M}^{(j)}}{\partial x}\right) \bigg|_{o} = \left(2k_{F}Z + ik_{D} \frac{m}{m^{*}} \sigma_{x}\right) \psi^{(j)}(0),$$
(14)

where $Z = \frac{mH}{\hbar^2 q_F}$ determines the strength interfacial scattering. The diagonal components are $Z_{\uparrow\uparrow} = \frac{mH_{\uparrow\uparrow}}{\hbar^2 q_F}$ and $Z_{\downarrow\downarrow} = \frac{mH_{\downarrow\downarrow}}{\hbar^2 q_F}$. We assume $Z_{\uparrow\uparrow} = Z_{\downarrow\downarrow} \equiv Z_0$. For the off-diagonal components, we assume $Z_{\uparrow\downarrow} = \frac{mH_{\uparrow\downarrow}}{\hbar^2 q_F} = Z_{\downarrow\uparrow} = \frac{mH_{\downarrow\uparrow}}{\hbar^2 q_F} \equiv Z_F$. From these matching conditions, we can calculate the reflection and transmission probabilities $(R_{j\sigma}, T_{j\sigma})$ which satisfy the conservation of electric current at the interface.

From the transmission probabilities, the differential conductance at zero temperature and at the zero-applied voltage is

$$G(V=0) = \frac{e^2}{h} \frac{\mathcal{L}^2 q_F}{2\pi} \int_{-\theta_m}^{\theta_m} d\theta \cos\theta \sum_{i=1}^2 \left(T_{j+}(V,\theta) + T_{j-}(V,\theta) \right)$$
 (15)

where \mathcal{L}^2 is the area of the metal and $\theta_m = \sin^{-1}[k^-(n)/q(n)]$ is the maximum angle incident electron from the metal. $T_{j+}(V,\theta)$ and $T_{j-}(V,\theta)$ are the transmission probabilities for plus and minus branches in the Dresselhaus system, respectively.

We define the spin polarization of current \mathcal{P} , which measures the difference in the current densities of the carriers between up spin and down spin in unit time, normalized to the total particle current. Thus, the spin polarization of current in the Dresselhaus system in terms of the transmission

probabilities is written as

$$\mathcal{P} = \frac{\int_{-\theta_m}^{\theta_m} d\theta \cos \theta \sum_{i=1}^{2} \left(T_{j-}(V, \theta) \cos \varphi_{k-} - T_{j+}(V, \theta) \cos \varphi_{k+} \right)}{\int_{-\theta_m}^{\theta_m} d\theta \cos \theta \sum_{i=1}^{2} \left(T_{j-}(V, \theta) + T_{j+}(V, \theta) \right)}$$
(16)

3. สรุป วิจารณ์ และข้อเสนอแนะ

3.1 โครงสร้างผสม โลหะ/ระบบที่มีการคู่ควบกันของสปินกับวงโคจรแบบรัชบา

โครงงานวิจัยนี้ศึกษาเชิงทฤษฎีของการขนส่งประจุและสปินผ่ายโครงสร้างผสม โลหะและระบบที่มี การคู่ควบกันของสปินกับวงโคจรแบบรัชบา โดยจำลองการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนแบบแลททิส ในระบบสอง มิติ ผู้วิจัยพบว่า จากแบบจำลองการเคลื่อนที่แบบแลททิสทำให้เราทราบค่าพาหะนำไฟฟ้าทั้งของอิเล็กตรอน และโฮล ผลการวิจัยพบว่า ค่าสภาพนำไฟฟ้าเพิ่มขึ้นเมื่อมีการไบแอสแรงดันไฟฟ้าเพิ่มขึ้น และพบว่า สภาพนำ ไฟฟ้าจะเกิดการเปลี่ยนแปลงความชั้นอย่างชัดเจนเมื่อมีการให้แรงดันไฟฟ้าเท่ากับจุดตัดของแถบพลังงานวก และแถบพลังงานลบของระบบที่มีการคู่ควบสปินออร์บิทแบบรัชบา จากความแตกต่างของช่วงพลังงาน ดังกล่าวเราสามารถนำไฟคำนวณหาพลังงานของการคู่ควบกันของสปินออร์บิทแบบรัชบาได้ เมื่อไม่มีการ กระเจิงแบบเปลี่ยนทอศของสปินได้ที่รอยต่อ ค่าสภาพนำไฟฟ้ารวมจะมีขนาดลดลงตามขนาดความแรงของ การกระเจิงแบบปกติซึ่งเป็นเป็นเรื่องที่ทราบกันดีอยู่แล้ว แต่งานวิจัยนี้เราพบว่าเมื่อพิจารณาผลของการ **กระ**เจิงที่รอยต่อแบบมีการเปลี่ยนทิศของสปินซึ่งสามารถทำได้โดยการใส่ความไม่บริสุทธ์ทางแม่เหล็กลงไปที่ รอยต่อ จะทำให้ค่าสภาพนำไฟฟ้ามีค่าเพิ่มขึ้นตามความต้านทานของรอยต่อได้ โดยค่าสภาพนำไฟฟ้ารวมจะ สูงสุดเมื่อขนาดของการกระเจิงทั้งสองแบบในรอยต่อมีค่าเท่ากัน ปรากฏการณ์นี้สามารถพบได้ทั้งสภาพนำ -ไฟฟ้าของอิเล็กตรอนและสภาพนำไฟฟ้าของโฮล สำหรับการขนส่งของสปินซึ่งในเชิงปริมาณ เราวัดด้วย **อัต**ราส่วนของผลต่างสภาพนำไฟฟ้าของประจุไฟฟ้าที่มีทิศของสปินตรงข้ามกันต่อค่าสภาพนำไฟฟ้ารวมขอ**ง** ระบบ จากงานวิจัยเราพบว่าเมื่อตัดผลกระทบของการกระเจิงแบบมีการเปลี่ยนทิศของสปินได้ สปินโพลาไรเช ชั้นจะเพิ่มขึ้นเมื่อมีการใส่แรงดันไฟฟ้าเพิ่มขึ้นและจะมีขนาดสูงสุดเมื่อแรงดันไฟฟ้ามีค่าเท่ากับจุดตัดของค่า แถบพลังงานบวกและลบของระบบที่มีคูควบกันของสปินออร์บิทของระบบรัชบา

3.2 โครงสร้างผสมของโลหะ/สารกึ่งตัวน้ำที่มีการคู่ควบกับของสปินออร์บิทแบบเดรศเซลฮอส การขนส่งของอนุภาคและสปินผ่านรอยต่อระหว่างโลหะและสารกึ่งตัวน้ำที่มีการคู่ควบกันของสปิน ออร์บิทแบบเดรสเซลฮอสโดยการจำลองการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอบแบบต่อเนื่อง งานวิจัยพบว่า ผลของค่า สภาพนำใฟฟ้าถูกพิจารณาเป็นฟังก์ชันของความหนาแน่นของอิเล็กตรอน ค่าสภาพนำใฟฟ้าเพิ่มขึ้นเมื่อจำนวน ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนเพิ่มขึ้น และเกิดจุดเปลี่ยนแปลงของสภาพนำไฟฟ้าเมื่อความหนาแน่นของอิเล็กตรอนเท่ากับจุดตัดกันของแถบพลังงานของระบบเดรสเซลฮอส ในขณะที่สภาพนำไฟฟ้าลดลงเมื่อความ แรงของการคู่ควบสปินกับวงโคจรของระบบรัชบาเพิ่มขึ้นจนถึงค่าวิกฤต หลังจากค่าวิกฤต ค่าสภาพการนำ

ไฟฟ้าจะมีขนาดเพิ่มขึ้นตามความแรงของการคู่ควบสปินกับวงโคจรของระบบเดรสเซลฮอส ส่วนค่าสปินโพลา ไรเซชันจะมีค่าสูงสุดเมื่อความแน่นของอิเล็กตรอนเท่ากับจุดตัดกันของแถบพลังงานของระบบเดรสเซลฮอส

ความรู้ที่ได้จากโครงงานวิจัยนี้สามารถนำไปใช้เป็นแนวทางในการออกแบบอุปกรณ์ที่มีรอยต่อ ดังกล่าวเป็นส่วนประกอบ ซึ่งคาดว่าจะเป็นอุปกรณ์ที่เข้ามาแทนที่อุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ในอนาคต

ในการคำนวณการขนส่งอนุภาคและสป็นผ่านระบบ เฟอโรแมกเนติก/ระบบที่มีคู่ควบสป็นกับวงโคจร แบบรัชบา/สารเฟอโรแมกเนติก โดยใช้การจำลองอนุภาคแบบแลททิสในสองรอยต่อหรือมากกว่านั้น ผู้วิจัยคิด ว่าควรจะศึกษาความหนาของชั้นระบบที่มีการคู่ควบกันของสป็นออร์บิทที่ได้ผลจริงจากการทดลอง แต่ เนื่องจากว่างานวิจัยเกี่ยวกับเรื่องนี้นั้นยังไม่มีผลการวัดจากการทดลองโดยตรง ดังนั้นการออกแบบหรือการ คำนวณหาเงื่อนไขที่เหมาะสมระหว่างรอยต่อจึงอาจจะต้องค้นหาวิธีที่สอดคล้องกับขนาดของระบบซึ่งมีความ เล็กมากถึงระดับนาโนสเกล ซึ่งอาจจะต้องทำเป็นโครงงานวิจัยต่อเนื่องในอนาคต.

3. เอกสารอ้างอิง

- 1. M. Oestreich, Nature (London) 402, 735 (1999).
- 2. I. Zutic, J. Fabian, and S. D. Sarma, Rev. Mod. Phys. 76, 323 (2004).
- 3. S. A. Wolf, et. al, Science 294, 1488 (2001).
- 4. E. I. Rashba, Fiz. Tverd. Tela 2, 1224 (1960), Solid state Ionics 2, 1109 (1960).
- 5. Y. A. Bychhov and E. I. Rashba, J. Phys. C 17, 6039 (1984).
- 6. M. H. Larsen, A. M. Lunde, and K. Flenberg, Phys. Rev. B 66, 033304 (2002).
- 7. F. Mireles and G. Kirczenow, Phys. Rev. B 66, 214415 (2002).
- 8. D. Grundler, Phys. Rev. B 63, 161307 (2001), Phys. Rev. Lett. 86, 1058 (2001).
- 9. Q.-F. Sun and X. C. Xie, Phys. Rev. B 71, 155321 (2005).
- 10. L. Cai, Y. C. Tao, J.-G. Hu, and G.-J. Jin, Phys. Lett. A 372, 5361 (2008).
- 11. T. Matsuyama, C. M. Hu, D. Grundler, G. Meier, and U. Merkt, Phys. Rev. B 65, 155322 (2002).
- 12. H. C. Wu, Y. Guo, X. Y. Chen, and B. L. Gu, J. Appl. Phys. 93, 5316 (2003).
- 13. Y. T. Zhang and Y. C. Li, J. Appl. Phys. 99, 013907 (2006).
- 14. A. Jantayod and P. Pairor, Physica E, 48 111 (2013).

- 15. B. Srisongmuang, P. Pairor and M. Berciu, Phys. Rev. B 78, 155317 (2008).
- 16. F. Mireles and G. Kirczenow, Phys. Rev. B 64, 024426 (2001).
- 17. Z. H. Yang, J. Wang, and K. S. Chan, Supercond. Sci. Technol. 22, 055012 (2009).
- 18. J. Wang, K. S. Chan, and D. Y. Xing, Phys. Rev B 73, 033316 (2006).
- 19. M. Yamamoto, T. Ohtsuki, and B. Kramer, Phys. Rev B 72, 115321 (2005).
- 20. A. F. Andreev, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 46, 1823 (1964), Sov. Phys. JETP 19, 1228 (1964).
- 21. T. P. Pareek and P. Bruno, Phys. Rev B 65, R241305 (2002).
- 22. Z. H. Yang, Y. H. Yang, J. Wang, and K. S. Chan, J. Appl. Phys. 103, 103905 1. M. Oestreich, Nature (London) 402, 735 (1999).
- 23. G. Dresselhaus, Phys. Rev. 100 (1955) 580.
- 24. Ashcroft, N. W. and Mermin (2003). Solid State Physics. Thomson Press.

ผลลัพท์ที่ได้จากโครงการ

ความรู้ที่ได้จากโครงงานวิจัยนี้สามารถนำไปเป็นความรู้ในการออกแบบและพัฒนาอุปกรณ์ ทางอิเล็กทรอนิกส์ หรือ สปินทรอนิกส์ ที่มีรอยต่อดังกล่าวเป็นส่วนประกอบ ซึ่ง โครงงานวิจัยนี้ สามารถเขียนบทความเพื่อเผยแพร่ออกมา 2 เรื่อง ได้แก่

- A. Jantayod (2013). Charge conductance and spin-polarized current across a metal/cubic semiconductor with Dresselhaus spin-orbit coupling junction, Superlattices and Microstructures. 64: 78-87. (Impact Factor 1.532)
- 2. A. Jantayod and P. Pairor, Tunneling conductance across a junction of metal/Rashba spin-orbit coupling system in a lattice model

หมายเหตุ: งานวิจัยเรื่องที่ 2 กำลังอยู่ระหว่างรอพิจารณาตีพิมพ์ในวารสารวิชาการระดับนานาชาติ Journal of Magnetism and Magnetic Materials ที่มีค่า Impact Factor 1.826

และได้นำเสนอในการประชุมวิชาการระดับชาติในรูปแบบโปสเตอร์ที่มีการตีพิมพ์เฉพาะ Abstract การประชุมวิชาการระดับชาติ วิทยาศาสตร์วิจัยครั้งที่ 6 วันที่ 20-21 มีนาคม 2557 ณ มหาวิทยาลัยบูรพา จังหวัดชลบุรี

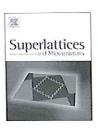




Contents lists available at ScienceDirect

Superlattices and Microstructures

journal homepage: www.elsevier.com/locate/superlattices



Charge conductance and spin-polarized current across a metal/cubic semiconductor with Dresselhaus spin-orbit coupling junction



A. Jantayod

Department of Physics, Faculty of Science, Naresuan University, Phitsanulok 65000, Thailand

ARTICLE INFO

Article history:
Received 29 July 2013
Accepted 5 September 2013
Available online 17 September 2013

Keywords:
A metal/cubic semiconductor with
Dresselhaus spin-orbit coupling junction
Tunneling conductance
Spin polarization of current

ABSTRACT

We theoretically study the charge conductance across a metal/ cubic semiconductor with Dresselhaus spin-orbit coupling junction. The conductance at a zero-applied voltage is calculated by using a free electron and scattering methods. The carrier density of semiconductor and the strength of Dresselhaus system are investigated on the overall conductance. We found that the conductance appears a kink feature which occurs when the Fermi level reaches the coincidence of Dresselhaus spin-orbit coupling band interaction. The Dresselhaus coupling strength increases, the conductance decreases until the strength reaches a critical value. Beyond this value, the conductance gradually increases with the coupling strength. The conductance can be enhanced when both types of interface spin scattering (spin-flip and non-spin-flip) are risen under certain condition. The spin polarization of current in the Dresselhaus system at a zero-applied voltage is also studied. We found that its magnitude is large by increasing the carrier density and it weakly depend on the interfacial scattering. However, at the low carrier density, the sign of spin polarization switches when both types of interface spin scattering are taken into account,

© 2013 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

The advantage of large spin degrees of freedom, including the magnitude and direction, provides a large possibility for the design of spintronic devices [1–8]. The starting point of spintronics is the appearance of spin aligned with a certain direction, the electron flow can give rise to spin-polarized

E-mail address: aekj@nu.ac.th

current. One of the important devices is a ballistic spin field effect transistor (SFET) that was proposed by Datta and Dass. It consists of two Ferromagnetics (FM) separated by a semiconductor (SC) [9], based on the spin precession controlled by an external gate voltage via a spin-orbit coupling. A source and drain are FM acting as the injector and detector of electron spin.

Recently, the large spin polarization can be found in a non-magnetic semiconductor due to the spin-orbit interaction. It is known that in a SC, lacking inversion symmetry gives rise to the Rashba effect [10-12], resulting in an imbalance spin-dependence of charge conductance and spin-polarized current. In addition to the Rashba effect in a SC, the Dresselhaus spin-orbit coupling caused by the bulk inversion asymmetry exists widely in III-V compound semiconductor with Zinc-blende crystal structure [13]. The significant progresses have been made in both theoretical and experimental investigations of spin-dependent tunneling through the heterostructures consisting of the Dresselhaus spin-orbit coupling [8,14-22]. An important parameter to determine the efficiency of spin-dependent across such heterostructure is the interface properties (i.e., spin-flip and non-spin-flip scattering potentials) [23-26]. They can cause significant modification of spin current and spin accumulation near the interface [27]. Furthermore, the combining effects of both types of spin-flip and non-spin-flip scattering can enhance the charge conductance [28,29] and the magnetoresistance [30,31]. These studies aim to utilize spin-dependent current to develop such devices in the future. When the optimal design of the next generation devices based on the Dresselhaus system, one needs to understand and characterize properties of semiconductor materials in tunneling junctions. In addition, the improvement methods to find the alternative spin polarization of Dresselhaus spin-orbit coupling using a junction conductance measurement are the challenge research.

In this work, the charge conductance and the spin polarization of current across a metal/cubic semiconductor with Dresselhaus spin-orbit coupling in a ballistic limit are investigated. The electron density of Dresselhaus system is varied to consider the overall conductance. We found that the conductance at a zero-applied voltage exhibits a characteristic kink and gets a maximal value of the spin polarization of current when the Fermi level hits the intersection of the Dresselhaus splitting band. The interface spin scattering is taken into account by using the normal and spin-flip potential barriers. We show how both types of scattering barriers affect on the conductance and spin polarization of current. We first describe this paper as following, the quantum tunneling model and assumptions are introduced in Section 2. The results and discussions are in Section 3, and the last one is conclusions.

2. Model and assumptions

A metal/cubic semiconductor with Dresselhaus spin-orbit interaction is modeled by an infinite two-dimensional (2D) system which lies on xz plane. The region at x < 0 is occupied by metal while the Dresselhaus system is in x > 0. These two regions are separated by a flat interface at x = 0 where interfacial scattering (we are only interested in the elastic scattering) is represented by a Dirac-delta function potential [32]. The Hamiltonian in the one-band effective mass approximation with exchange interaction in a metal and the Dresselhaus spin-orbit coupling system has the following form

$$\vec{H} = \left\{ \hat{p} \frac{1}{2m(x)} \hat{p} + V(x, z) \right\} \hat{I} + \vec{H}_D(x). \tag{1}$$

The Schrödinger equation is expressed in a 2×2 matrix acting on the spinor states. I is 2×2 identity matrix and the momentum operator $\hat{p} = -i\hbar(\hat{x}\frac{\partial}{\partial x} + \hat{z}\frac{\partial}{\partial z})$. The effective mass m(x) is position dependent; i.e., $[m(x)]^{-1} = m^{-1}\Theta(-x) + (m^*)^{-1}\Theta(x)$, where m and m^* are the effective electron mass in a metal and the Dresselhaus system, respectively. $\Theta(x)$ is the Heaviside step function. V(x,z) is also a position dependent function, modeled by the expression

$$V(x,z) = H\delta(x) - E_F(\Theta(-x)), \tag{2}$$

where H represents the scattering potential at the interface. The diagonal elements of H, H^{11} and H^{11} correspond to the non-spin-flip scattering potential of the junction while the off-diagonal elements, $H^{11} = H^{11}$ describe the spin-flip scattering. $E_F = (h^2 q_F^2)/(2m)$ is the Fermi energy of metal. The Dresselhaus Hamiltonian term H_D (x) is written as

$$H_D = \beta(\sigma_z k_z - \sigma_x k_x), \tag{3}$$

where β is the Dresselhaus coupling parameter of the junction. σ_x , σ_y are the Pauli spin matrices, and kis the wave vector.

From the Hamiltonian, we can obtain the eigenstates and eigenenergies for electrons in each region. The electron eigenenergy in a metallic side (x < 0) is therefore

$$E(q) = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - E_F, \tag{4}$$

where $q = \sqrt{q_x^2 + q_z^2}$ is the magnitude of the 2D electron wave vector. In the x > 0 region, the eigenenergies are obtained as

$$E^{\pm}(k) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[k^2 \pm 2k_D k \right],\tag{5}$$

where $k=\sqrt{k_x^2+k_z^2}$ is the magnitude of the 2D wave vector and $k_D=m^*\beta/\hbar$ is the strength of the **Dres**selhaus system (If $k_D = 0$, the system becomes a normal SC).

The free electron energy dispersion is split into two branches due to the Dresselhaus spin-orbit interaction: plus and minus branches. The two branches meet at the momentum k = 0, this point is called the crossing point. The energy from the minimum point to the crossing point is the Dresselhaus energy, defined as $E_{\beta} = h^2 k_D^2/(2m^*)$. The sketches of the energy spectra of the electrons in a metal and the Dresselhaus system are shown in Fig. 1.

In this work we goal to obtain the conductance and the spin polarization of current as a function of the carrier density of the Dresselhaus system at zero temperature. The carrier density is obtained by

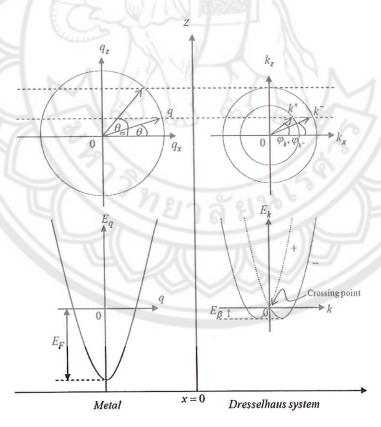


Fig. 1. The sketches of the energy contour (top) and energy spectra (bottom) of electron in a metal (on the left) and in the Dresselhaus system (on the right). $E_{\beta} = \hbar^2 k_D^2/(2m^*)$ is the Dresselhaus energy. E_F is the Fermi energy in a metal. The parameters are defined in the text.

integrating the density of states over the energy range from the bottom of the energy spectrum to the Fermi energy. For the Fermi energy below the crossing point, the electron density is

$$n^{<}(E) = n_D \sqrt{1 + \frac{E}{E_\beta}},\tag{6}$$

where $n_D = k_D^2/\pi$. For the energy above the crossing point, the electron density is related to the energy by

$$n^{>}(E) = n_{D} \left(1 + \frac{E}{E_{\beta}} \right). \tag{7}$$

We then write the magnitude of the wave vector as a function of the carrier density by using the relationships in Eqs. (6) and (7). For E > 0, k^{\pm} are

$$k^{\pm} = k_D \left(\sqrt{\frac{2n}{n_D} - 1} \mp 1 \right). \tag{8}$$

The plus and minus signs on the right hand side of the equation above are for the plus and minus branches, respectively. For E < 0, the wave vectors are obtained as

$$k^{\pm} = k_0 \left(1 \mp \frac{n}{n_D} \right). \tag{9}$$

The plus and minus signs on the right hand side of the equation above are for $|k| \le k_D$ and $k_D \le |k| < 2k_D$, respectively.

Finally, we can obtain both conductance and the spin polarization of current as a function of the electron carrier density across the junction by using the scattering method. In this method, we first consider an incoming electron from one side of the junction, and calculate the reflection and transmission probabilities, which are later used to obtain the current density of the junction. We point out that these quantities are at zero temperature.

The wave function of electrons on a metal side with energy E is therefore written as a linear combination of incident momentum states and reflected states of the same energy and the momentum along the surface k_z . Because there are equal number of electrons with opposite spin directions, there are two possibilities of the wave function. For simplicity, we choose the spins of incident electrons along the z-axis. The wave function of electrons in a metal side can be written in two cases, depending on the spin orientation of them, as

$$\psi_M^{(1)} = \left(\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} e^{iq_x x} + \begin{bmatrix} r_{11} \\ r_{11} \end{bmatrix} e^{-iq_x x} \right) e^{iq_z z},$$

$$\psi_{\scriptscriptstyle M}^{(2)} = \left(\left\lceil \begin{matrix} 0 \\ 1 \end{matrix} \right\rceil e^{iq_{\scriptscriptstyle X} \mathsf{X}} + \left\lceil \begin{matrix} r_{2\uparrow} \\ r_{2\downarrow} \end{matrix} \right\rceil e^{-iq_{\scriptscriptstyle X} \mathsf{X}} \right) e^{iq_{\scriptscriptstyle Z} \mathsf{Z}},$$

where $q_x = q \cos \theta$ and $q_z = q \sin \theta$. θ is the angle between \vec{q} and x-axis and $q = n_F \sqrt{1 + E/E_F}$, where $n_F = q_F^2/2\pi$ is the carrier density at Fermi level. $r_{j\sigma}$ is the reflection coefficient of electron reflection with spin σ in case j of incident electrons.

Similarly, the wave function of the Dresselhaus system is obtained as a linear combination of two outgoing eigenstates with the same energy and k_z

$$\psi_D^{(j)}(x,z) = \left(t_{j+} \begin{bmatrix} \mp\cos\left(\frac{\varphi_{k^+}}{2} \pm \frac{\pi}{4}\right) \\ \pm\sin\left(\frac{\varphi_{k^+}}{2} \pm \frac{\pi}{4}\right) \end{bmatrix} e^{\mp ik_x^+x} + t_{j-} \begin{bmatrix} \sin\left(\frac{\varphi_{k^-}}{2} + \frac{\pi}{4}\right) \\ \cos\left(\frac{\varphi_{k^-}}{2} + \frac{\pi}{4}\right) \end{bmatrix} e^{ik_x^-x} \right) e^{ik_z^-z},$$

where j=1,2 refer to the wave functions of the Dresselhaus system corresponding to the two cases of spin orientation of incident electrons. $\varphi_{k^{\pm}}$ are the angles between k^{\pm} and the x-axis. For E>0, t_{j+} and t_{j-} are the transmission amplitudes for plus and minus branches, respectively. When E<0, t_{j+} and t_{j-} refer to the transmission amplitudes of electrons for $|k| \leq k_D$ and $k_D \leq |k| < 2k_D$, respectively. The upper and

lower signs in Eq. (12) are for E < 0 and E > 0 respectively. $k_x^{\pm} = k^{\pm} \cos \varphi_{k^{\pm}}$ and $k_z^{\pm} = k^{\pm} \sin \varphi_{k^{\pm}}$. The relationship between the angles $\varphi_{k^{\pm}}$ and θ is $k_z = k^{\pm} \sin \varphi_{k^{\pm}} = q \sin \theta$ as shown in Fig. 1.

We now apply matching conditions to the wave functions on both sides to obtain the transmission and reflection amplitudes: the continuity of the wave function and the discontinuity of its slope ($\partial \psi | dx$), due to the delta-function like barrier at the interface are,

$$\psi_M^{(j)}(x=0^+,z) = \psi_D^{(j)}(x=0^-,z) = \psi^{(j)}(0), \tag{13}$$

$$\left. \left(\frac{m}{m^*} \frac{\partial \psi_D^{(j)}}{\partial \chi} - \frac{\partial \psi_M^{(j)}}{\partial \chi} \right) \right|_0 = \left(2k_F Z + ik_D \frac{m}{m^*} \sigma_x \right) \psi^{(j)}(0), \tag{14}$$

where $Z = \frac{mH}{h^2q_F}$ determines the strength interfacial scattering. The diagonal components are $Z_{\uparrow\uparrow} = \frac{mH_{11}}{h^2q_F}$ and $Z_{\downarrow\downarrow} = \frac{mH_{11}}{h^2q_F}$. We assume $Z_{\uparrow\downarrow} = Z_{\downarrow\downarrow} \equiv Z_0$. For the off-diagonal components, we assume $Z_{\uparrow\downarrow} = \frac{mH_{11}}{h^2q_F} = Z_{\downarrow\uparrow} = \frac{mH_{11}}{h^2q_F} \equiv Z_F$. From these matching conditions, we can calculate the reflection and transmission probabilities (R_{iq}, T_{iq}) which satisfy the conservation of electric current at the interface.

mission probabilities $(R_{j\sigma}, T_{j\sigma})$ which satisfy the conservation of electric current at the interface. From the transmission probabilities, the differential conductance at zero temperature and at a zero-applied voltage is

$$G(V=0) = \frac{e^2}{h} \frac{\mathcal{L}^2 q_F}{2\pi} \int_{-\theta_m}^{\theta_m} d\theta \cos\theta \sum_{i=1}^{2} (T_{j+}(V,\theta) + T_{j-}(V,\theta)), \tag{15}$$

where \mathcal{L}^2 is the area of a metal and $\theta_m = \sin^{-1}[k^-(n)/q(n)]$ is the maximum angle of incident electron from a metal. $T_{j+}(V,\theta)$ and $T_{j-}(V,\theta)$ are the transmission probabilities for plus and minus branches in the Dresselhaus system, respectively.

We define the spin polarization of current \mathcal{P} , which measures the difference in the current densities between up spin and down spin in unit time, normalized to the total particle current. Thus, the spin polarization of current in the Dresselhaus system in terms of the transmission probabilities is written as

$$\mathcal{P} = \frac{\int_{-\theta_m}^{\theta_m} d\theta \cos \theta \sum_{i=1}^{2} (T_{j-}(V, \theta) \cos \varphi_{k^-} - T_{j+}(V, \theta) \cos \varphi_{k^+})}{\int_{-\theta_m}^{\theta_m} d\theta \cos \theta \sum_{i=1}^{2} (T_{j-}(V, \theta) + T_{j+}(V, \theta))}.$$
(16)

3. Results and discussions

In this section, we show and discuss how the carrier density (n) of the Dresselhaus system, the Dresselhaus spin-orbit coupling strength (k_D) , and the interfacial scattering potential (i.e., non-spin-flip (Z_0)) and spin-flip barrier (Z_F)) affect the conductance and the spin polarization of current at zero temperature. In our numerical plots, we set $m/m^* = 10$ and explore the effect of variation of other parameters. All conductance plots are in units of $e^2 \mathcal{L}^2 q_F/h2\pi$.

The plots of differential conductance at a zero-applied voltage G(V=0) as a function of the carrier density of the Dresselhaus system for different Z_F ($Z_0=0$) are shown in Fig. 2(a). One can see that the impact of the carrier density influences the conductance, an increasing of n can enhance the G(V=0). There are two distinguish features at n=0 and $n=n_D=k_D^2/\pi$, corresponding to the electron filled up to the energy at the bottom and the branch crossing of the Dresselhaus splitting band, respectively. At $n=k_D^2/\pi$, the carrier density depends on the Dresselhaus coupling strength or the parameter k_D . Effects of interface spin scattering on the overall conductance can be clearly seen in the figure. As expected, the spin scattering suppresses the G(V=0) because the particle transmission probability is reduced by the potential barrier. Fig. 2(b) shows the plots of G(V=0) vs n for combining the effects of both kinds of spin scattering at the interface. When $Z_0=0.5$, the small increase of $Z_F\leqslant 0.5$ slightly affects the conductance. For $Z_F>0.5$, the conductance get suppressed. In Fig. 2(c) where $Z_0=2.0$, one can see that the G(V=0) can be enhanced when Z_F increases from 0 to 2.0. The conductance usually decreases when Z_F is greater than 2.0.

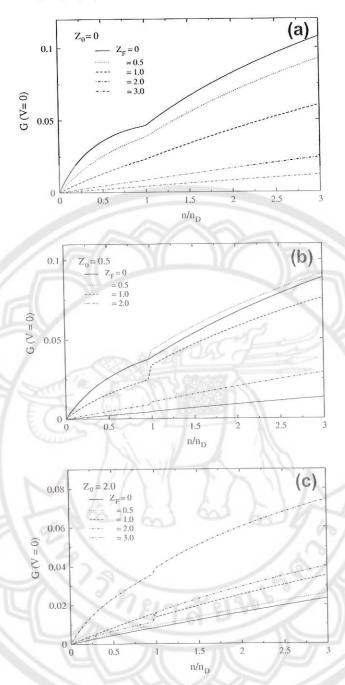
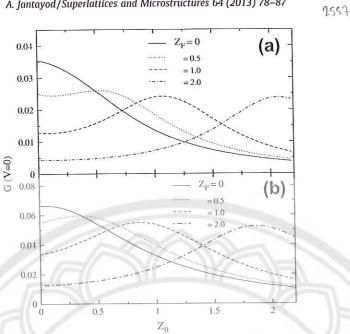


Fig. 2. Conductance at a zero-applied voltage G(V = 0) as a function of the carrier density n in case of (a) $Z_0 = 0$, (b) $Z_0 = 0.5$, and (c) $Z_0 = 2.0$ for different values of Z_F .

Both effects of interface spin scattering can clearly seen in Fig. 3(a) and (b). We plot the conductance G(V=0) as a function of normal interface spin scattering Z_0 for various values of spin-flip scattering Z_F . The carrier density n slightly below and above the crossing point of Dresselhaus energy band is considered. It is seen that the conductance can be enhanced with increasing Z_F until a maximum value at $Z_0 \sim Z_F$.

In Fig. 4, the plots of G(V=0) as a function of k_D for selected values of the carrier densities are shown. We see the conductance exhibits unusual behavior, it does not always increase with the strength of Dresselhaus spin-orbit coupling. For the high transparency regime $Z_0=0$, the G(V=0) is





995398

Fig. 3. Conductance at zero-applied voltage G(V = 0) as a function of normal spin scattering Z_0 for different values of spin-flip scattering Z_F. Top panel (a) is the carrier density slightly below the crossing point. Bottom panel (b) is the carrier density slightly above the crossing point.

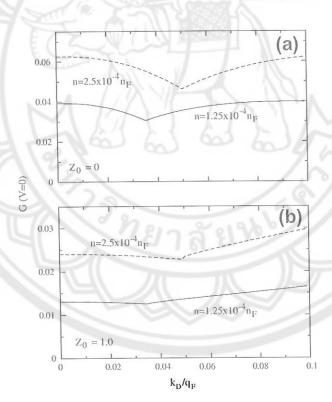


Fig. 4. Conductance at a zero applied voltage G(V = 0) as a function of Dresselhaus spin-orbit coupling strength parameter k_D for selected values of the carrier density n. n_F is defined as $n_F = q_F^2/\pi$. (a) $Z_0 = 0$ and (b) $Z_0 = 1.0$.

suppressed with increasing k_D . The suppression continues until k_D reaches the value of $\sqrt{n\pi}$. Beyond the critical value, the G(V=0) can gradually enhance. For the high barrier potential $(Z_0=1.0)$ in

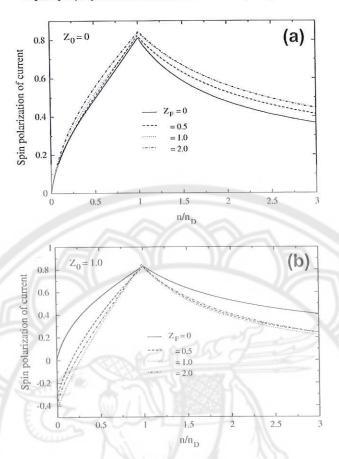


Fig. 5. Spin polarization of current at a zero-applied voltage G(V = 0) as a function of the carrier density n in case of (a) $Z_0 = 0$ and (b) $Z_0 = 1.0$ for different values of Z_F .

Fig. 3(b)) or a tunneling limit, the increase of k_D from 0 to $\sqrt{n\pi}$ barely changes the conductance. However, the conductance linearly increase when k_D is larger than $\sqrt{n\pi}$. Notice that in this plot we ignore the effect of spin-flip scattering.

Finally, we consider the spin polarization of current of the Dresselhaus system at a zero-applied voltage as shown in Fig. 5(a). This quantity tells us about the imbalance of the spin-up and spin-down particle current densities at the Fermi level. Increasing of the carrier density can enhance the magnitude of the spin polarization of current. Its maximum value occurs at $n = n_D$. When the carrier density

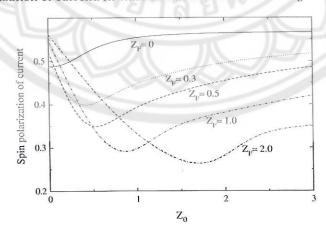


Fig. 6. Spin polarization of current at a zero-applied voltage as a function of Z_0 for various values of Z_F . This plot we use the carrier density $n = 1.25 \times 10^{-4} n_F$.

is larger than n_D , the magnitude is decreased. Either increasing of normal or spin-flip scattering potential has small effect on the spin polarization of current in the Dresselhaus system. Unlike in a metal [33], both Z_0 and Z_F strongly affect the spin polarization. However, the combination effect of Z_0 and Z_F can switch the sign of spin polarization for the low carrier densities (see Fig. 5(b)). To clarify the effect of Z₀ and Z_F on the spin polarization in the Dresselhaus system, in Fig. 6 we plot the spin polarization as a function of Z_0 for different values of Z_F at the carrier density $n = 1.25 \times 10^{-4} n_F$. It is shown that the increasing of Z_0 can enhance the spin polarization. When increasing effect of Z_F , the spin polarization is suppressed.

4. Conclusions

In this paper, the charge conductance and the spin polarization of current across a metal/cubic semiconductor with Dresselhaus spin-orbit coupling are calculated in a two-dimensional system via a free electron approximation and the scattering method. The impact of the carrier density and the coupling strength of Dresselhaus system on the conductance at a zero-applied voltage are considered. There is a distinguished change in the conductance when the Fermi level meets the crossing point of Dresselhaus energy dispersion. The increase of Dresselhaus coupling strength suppresses the conductance until the strength reaches a critical value $\sqrt{n\pi}$, (n is the carrier density of the Dresselhaus system). Beyond this value, the conductance gradually increases with the coupling strength. The conductance can be enhanced up to the maximum value when both types of interface spin scattering are increased under certain condition. We also consider the spin polarization of current at a zeroapplied voltage as function of the carrier density. The maximal value of the spin polarization of current is also found when the Fermi level hits the intersection of the Dresselhaus splitting band. The increase of barrier potential slightly enhances the spin polarization in the Dresselhaus system. However, including both types of interface spin scattering, the sign of spin polarization of current in the Dresselhaus system can be switched at the low carrier density.

Acknowledgment

Thanks A. Amthong for reading of the manuscript and we would like to acknowledge financial supported from Naresuan University (Project No. R2556C084).

References

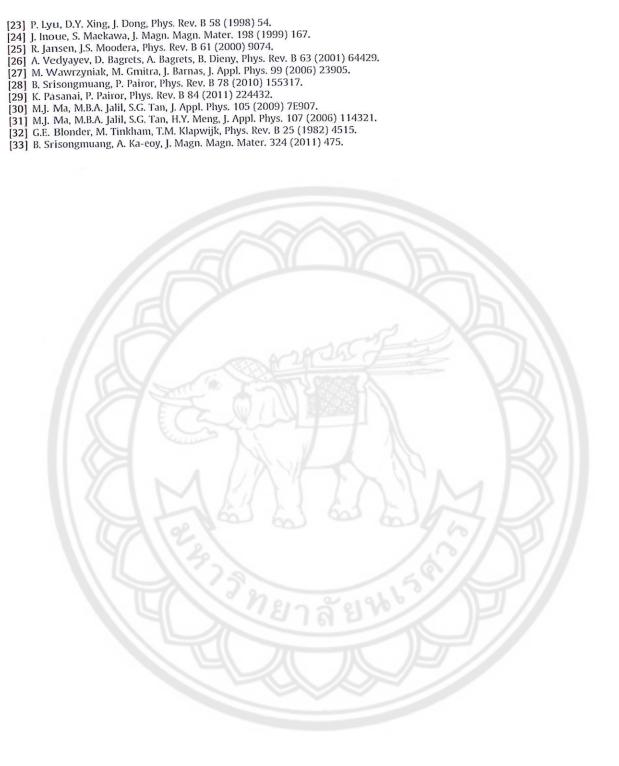
[1] S.A. Wolf, D.D. Awschalom, R.A. Buhrman, J.M. Daughton, S.V. Molnar, M.L. Roukes, A.Y. Chtchelkanova, D.M. Treger, Science 294 (2001) 1488.

G. Prinz, Phys. Today 48 (1995) 58.

- [3] P.R. Hammar, B.R. Bennett, M.J. Yang, M. Johnson, Phys. Rev. Lett. 83 (1999) 203; P.R. Hammar, B.R. Bennett, M.J. Yang, M. Johnson, Phys. Rev. Lett. 84 (2000) 5024. [4] C.-M. Hu, J. Nitta, A. Jensen, J.B. Hansen, H. Takayanagi, Phys. Rev. B 63 (2001) 125333.
- [5] S. Gardelis, C.G. Smith, C.H.W. Barnes, E.H. Linfield, D.A. Ritchie, Phys. Rev. B 60 (1999) 7764.

[6] F.G. Monzon, M.L. Roukes, J. Magn. Magn. Mater. 198 (1999) 632

- [7] T. Matsuyama, C.-M. Hu, D. Grundler, G. Meier, U. Merkt, Phys. Rev. B 65 (2002) 155322.
- [8] I. Zutic, J. Fabian, S.D. Sarma, Rev. Mod. Phys. 76 (2004) 323. [9] S. Datta, S. Das, Appl. Phys. Lett. 56 (1990) 665.
- [10] E.I. Rashba, Sov. Phys. Solid State 2 (1960) 1109; E.I. Rashba, Fiz. Tverd. Tela 2 (1960) 1224.
- [11] Y.A. Bychkov, E.I. Rashba, J. Phys. C 17 (1984) 6039.
- [12] Y.A. Bychkov, E.I. Rashba, JETP Lett. 39 (1984) 78.
- [13] G. Dresselhaus, Phys. Rev. 100 (1955) 580.
- [14] S.G. Tan, M.B.A. Jalil, Thomas Liew, K.L. Teo, T.C. Chong, J. Appl. Phys. 97 (2005) 10D506.
- [15] T. Uemura, Y. Imai, M. Harada, K. Matsuda, M. Yamamoto, J. Appl. Phys. 94 (2009) 182502.
- [16] V.I. Perel, S.A. Tarasenko, I.N. Yassievich, Phys. Rev. B 67 (2003) 201304. R.
- [17] M.P. Walser, U. Siegenthaler, V. Lechner, D. Schuh, S.D. Ganichev, W. Wegscheider, G. Salis, Phys. Rev. B 86 (2012) 195309.
- [18] A.V. Poshakinskiy, S.A. Tarasenko, Phys. Rev. B 87 (2013) 235301.
- [19] M.M. Glazov, P.S. Alekseev, M.A. Odnoblyudov, V.M. Chistyakov, S.A. Tarasenko, I.N. Yassievich, Phys. Rev. B 71 (2005) 155313.
- [20] W. Li, Y. Guo, Phys. Rev. B 73 (2006) 205311.
- [21] M. Yang, S.-S. Li, Phys. Rev. B 72 (2005) 193310.
- [22] J.-D. Lu, B. Xu, W. Zheng, Superlattices Microstruct. 54 (2013) 54.



Tunneling conductance across a junction of metal/two-dimensional electron gas with Rashba spin-orbit coupling in a lattice model

A. Jantayod^a, and P. Pairor^b

^aDepartment of Physics, Faculty of Science, Naresuan University, Phitsanulok 65000, Thailand

Abstract

We theoretically study the charge transport in an infinite two-dimensional system of normal metal and two-dimensional electron gas with Rashba spinorbit coupling. We used the lattice model to describe the electronic properties in each region and developed an appropriate way to take into account the quality of the interface to calculate the transport properties of particle in the junction. We focus on effects of two kinds interfacial scattering on the overall conductance spectrum; i.e., spin-conserved and spin-flip scattering potential. It found that an increase of interfacial scattering is suppressed the conductance spectrum but it can be enhanced by increasing equally both types of interfacial scattering probabilities under certain conditions. When the Fermi level reaches the coincidence of Rashba band interaction for both top and bottom of the band, the conductance spectrum appears the characteristic kink features. The kinks reflect the difference in nature of the electron-like and hole-like energy contours of the energy band. In addition, the energy spacing between the onset and kink of electron-conductance spectrum provides to predict the Rashba energy as determine from the hole-conductance spectrum.

Keywords: Heterostructures, Metal/two-dimensional electron gas with Rashba spin-orbit coupling, Tunneling conductance, Lattice model

Email address: aekj@nu.ac.th (A. Jantayod)

^bSchool of Physics, Institute of Science, Suranaree University of Technology, Nakhon Ratchasima 30000, Thailand

1. Introduction

A material with Rashba spin orbit coupling (RSOC)[1, 2, 3] is of interest for an application in spin transport as spintronic devices [4, 5, 6]. RSOC in a system arises from the presence of a structure inversion asymmetry which caused by a confining potential of a quantum well of a two-dimensional electron gas (2DEG) along the perpendicular direction of the interface of two-dimensional (2D) plane. A heterostructures of different combinations of 2DEG with RSOC have thus been studied rigorously in order to gain more understanding and in hope of obtaining new ways of controlling spin transport in such systems as spin injection [7, 8, 9, 10, 11, 12, 13], and spin precession [14, 15]. Many theoretical studies of electron and spin transport in these systems, free electron approximation and the continuity equation at the interface are used [11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19]. However, the assumption of the free electron model is that electron propagates almost freely. It can also take a different point of view by considering the electron that would be in atomic levels localized at lattice sites. It is a tight binding approximation which reconciliate between the apparently contradictory feature of localized atomic orbital on the one band and free electron-like plane wave levels on the other.

A tight binding or lattice model is also used to study particle and spin transport in heterostructures of 2DEG with RSOC in a quantum wire along with the Green's function method [15, 20, 21], the interface potential barrier is assumed an infinitely high, i.e., it is in a tunneling limit. However, in reality the quality of the interface can be made arbitrary and can strongly influence the particle transport in a heterostructures which introduced both type of spin-conserved and spin-flip interfacial scattering as discussed in the junction of metal/ferromagnetic [22, 23], metal/semiconductor with spinorbit coupling [17, 24], semiconductor/superconductor [25], and a magnetic tunnel junction [26, 27, 28, 29, 30, 31]. In order to obtain the most complete understanding of particle transport properties of Rashba-based junctions, it is important to study states at all Rahba band width. Practically, the state near (above and below) the band intersection exhibit the important characteristic qualitative effects of the RSOC. The measurement qualitative effects on the conductance of the heterostructures composed of a metal and the 2DEG with RSOC is considered.

In this paper, a theoretical approach is developed to calculate the charge transport in a metal/2DEG with RSOC junction by using a single-band lat-

tice model with explicit equation of motion for wave function amplitude. We find an appropriate way to consider an effects of interfacial scattering on the conductance spectrum. The numerical solution of electron- and hole-tunneling conductance were generalized for a 2-dimensional structure. We show that the different conductance shape between the electron- and hole-conductance spectrum were affected by the interfacial scattering (spinconserving and spin-flip scattering) on overall RSOC band width. The conductance exhibits a characteristic kink that occurs when the Fermi level reach the interaction of Rashba splitting band. The kink near the voltage close to the bottom of the band is pointing down, whereas the kink near the top of the band is pointing upward. The different natures of the kinks reflect the difference in nature of the electron-like (close to the bottom) and holelike (close to the top) energy contours of the energy band. Furthermore, the energy spacing between the onset and the kink of electron-conductance spectrum provides to predict the Rashba energy as determine from the holeconductance. We also consider effect of RSOC strength on the conductance, it is enhanced with increasing the strength, however, the energy around the middle band, the conductance is slightly decreased with the strong presented spin-coupling.

2. Model and Assumptions

We present both a normal metal and the RSOC system in an infinite 2D square lattice in a xy plane (see Fig 1). The simplest tight binding Hamiltonian that includes the influence of Rashba spin-orbit coupling in a square lattice [15, 32] is obtained by discretizing the free electron Hamiltonian: $p^2/2m^* + \lambda(\sigma_y p_x - \sigma_x p_y)$, m^* is the electron effective mass and p is the electron momentum, λ is the Rashba parameter. σ_x, σ_y are the Pauli's matrices. For simplicity we assume there are only nearest-neighbor hopping energy. It can be written as

$$H_{RS} = \sum_{nm\sigma} (\epsilon_{nm\sigma} - \mu) C_{nm\sigma}^{\dagger} C_{nm\sigma} - t_R \sum_{nm\sigma} (C_{n+1,m\sigma}^{\dagger} C_{nm\sigma} + C_{n,m+1,\sigma}^{\dagger} C_{nm\sigma} + H.C.)$$
$$- t_{so} \sum_{nm\sigma\sigma'} \{ C_{n+1,m\sigma'}^{\dagger} (i\sigma_y)_{\sigma\sigma'} C_{nm\sigma} - C_{n,m+1,\sigma'}^{\dagger} (i\sigma_x)_{\sigma\sigma'} C_{nm\sigma} + H.C. \}$$
(1)

where the subscripts n and m indicate the column and row indices of the square lattice site. $C_{nm\sigma}^{\dagger}(C_{nm\sigma})$ is the creation (annihilation) operator of an

electron at indices (nm) at lattice site with spin $\sigma = \uparrow \downarrow$, $\epsilon_{nm\sigma}$ is the on-site energy; $t_R = \hbar^2/2m^*a$ is the hopping energy (nearest-neighbor) for a lattice constant a (see Fig.1), μ is the chemical potential, $t_{so} = \lambda/2a$ denotes the RSOC strength in the lattice representation ($t_{so} = 0$, the Hamiltonian is reduced to that of electrons is in a normal metal or a 2DEG without spin-orbit coupling).

The Hamiltonian can transform into the momentum space by using the Fourier transform and can be obtained the eigenstates and eigenvalues by the standard quantum mechanics, thus the energy dispersion relation of electron in the Rashba system are

$$E(\mathbf{k}) = E_0(\mathbf{k}) \pm 2t_{so}\sqrt{\sin^2(k_x a) + \sin^2(k_y a)}$$
 (2)

where $E_0(\mathbf{k}) = (\epsilon_R - \mu) - 2t_R(\cos(k_x a) + \cos(k_y a))$ is the eigenvalue for a 2DEG without spin-orbit coupling. The plus and minus signs in Eq.(2) are for plus and minus branch of Rashba energy spectrum, respectively. $k_{x(y)}$ is the wave vector in x(y) direction. The sketched of energy dispersion of the model as see in Fig.2. Notice that this is a spacial case for the Fermi level of the metal coincides with the intersection of the bottom splitting bands. The plus and minus branches meet when $k_x = k_y = 0$ and $k_x = \pm \pi/a$, $k_y = 0$. The $E(k_x = 0, k_y = 0)$ is $\frac{t_{so}^2}{t_R}$ above the bottom of the band, whereas $E(k_x = \pm \pi/a, k_y = 0)$ is $\frac{t_{so}^2}{t_R}$ below the top of the band. These two levels are called the 1^{st} and the 2^{nd} crossing point of two branches, respectively. Note that $E_{R1}(k_y) = (\epsilon_R - \mu) - 2t_R(1 + \cos(k_y a)) - 2t_{so}\sin(k_y a)$ and $E_{R2}(k_y) = (\epsilon_R - \mu) - 2t_R(-1 + \cos(k_y a)) + 2t_{so}\sin(k_y a)$. The energy below and above two crossing points are the Rashba energy; $E_{so}^{bot,top} = \frac{t_{so}^2}{t_R}$.

Assuming an incoming electron from the normal metal side, the electronic wave function of electron with the energy E in the metal is written as a linear combination of incident momentum states and reflected states of the same energy and k_y . Based on the spin part of the wave function, we again have two equally likely incident states. In the absence of the applied magnetic field, we write the two cases of the wave function in the metal side as

$$U_{M,1}^{k_y}(n,m) = \left[e^{iq_x an} \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix} + e^{-iq_x an} \begin{pmatrix} r_{1\downarrow}\\r_{1\uparrow} \end{pmatrix} \right] e^{ik_y ma} \tag{3}$$

$$U_{M,2}^{k_y}(n,m) = \left[e^{iq_x an} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + e^{-iq_x an} \begin{pmatrix} r_{2\downarrow} \\ r_{2\uparrow} \end{pmatrix} \right] e^{ik_y ma}, \tag{4}$$

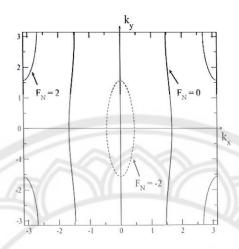


Figure 3: Contour energy of metal showed three Fermi levels with $t'_N = 0.1t_N$.

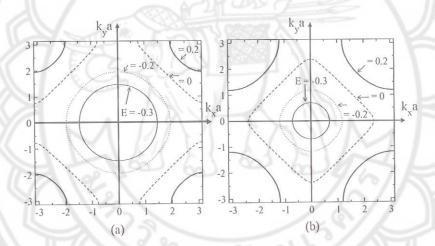


Figure 4: Plots of contour energy of RSOC system (left) Fermi levels in minus branch and (right) for plus branch, note that the energy is multiply t_N .

surface in the metal to be smaller than that along the direction perpendicular to the surface, i.e., $t'_N = 0.1t_N$. This choice of the parameter results in the energy contours as shown in Fig.3. The parameter $F_N \equiv (\mu - \epsilon_N)/2(t_N + t'_N)$ is called the filling parameter. In this work, we use the half-filling Fermi surface $(F_N = 0)$ represented as the thickest energy contour in the figure. Also, in most cases the energy band width of a metal is about an order of

magnitude larger than that of a Rashba system, we therefore set our energy parameters accordingly. That is, we set the hopping energy in the Rashba system to be $t_R = 0.1t_N$. The spin-orbit coupling energy that causes the spin-splitting states is t_{so} , which is set to be $t_{so} = 0.4t_R = 0.04t_N$, unless we state otherwise. Similarly, we define the filling parameter for the Rashba system as $F_{RS} \equiv (\mu - \epsilon_R)/(4t_R \mp 2\sqrt{2}t_{so})$, the \mp means the filling parameter for minus and plus branch, respectively. Each filling level is shown in Fig.4, where the left panel is for the minus branch and the right panel is for the plus branch. However, we also consider effect of t_{so} on the conductance spectrum as will discuss later.

For wave function of the Rashba region, There are three forms of the electronic wave function, depending on the energy. For $E < E_{R1}(k_y)$,

$$U_{R}^{k_{y}}(n,m) = \begin{bmatrix} t_{j+}e^{i(-k_{x}^{+})an} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{i\sin(-k_{x}^{+}a) + \sin k_{y}a}{\sqrt{\sin^{2}(-k_{x}^{+}a) + \sin^{2}k_{y}a}} \right) \\ + t_{j-}e^{ik_{x}^{-}an} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{i\sin(k_{x}^{-}a) + \sin k_{y}a}{\sqrt{\sin^{2}(k_{x}^{-}a) + \sin^{2}k_{y}a}} \right) \right] e^{ik_{y}ma}, \quad (5)$$

for $E_{R1}(k_y) \leqslant E \leqslant E_{R2}(k_y)$,

$$U_{R}^{k_{y}}(n,m) = \begin{bmatrix} t_{j+}e^{ik_{x}^{+}an} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{i\sin k_{x}^{+}a+\sin k_{y}a}{\sqrt{\sin^{2}k_{x}^{+}a+\sin^{2}k_{y}a}} \\ 1 \end{pmatrix} \\ + t_{j-}e^{ik_{x}^{-}an} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\frac{i\sin(k_{x}^{-}a)+\sin k_{y}a}{\sqrt{\sin^{2}(k_{x}^{-}a)+\sin^{2}k_{y}a}} \\ 1 \end{pmatrix} e^{ik_{y}ma}, \quad (6)$$

for $E > E_{R2}(k_y)$,

$$U_{R}^{k_{y}}(n,m) = \begin{bmatrix} t_{j+}e^{ik_{x}^{+}an} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{i\sin k_{x}^{+}a+\sin k_{y}a}{\sqrt{\sin^{2}k_{x}^{+}a+\sin^{2}k_{y}a}} \\ 1 \end{pmatrix} + t_{j-}e^{i(-k_{x}^{-})an} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{i\sin(-k_{x}^{-}a)+\sin k_{y}a}{\sqrt{\sin^{2}(-k_{x}^{-}a)+\sin^{2}k_{y}a}} \\ 1 \end{pmatrix} e^{ik_{y}ma}, \quad (7)$$

where $E_{R1}(k_y)$ and $E_{R2}(k_y)$ are defined in the Fig.2, j=1,2 refer to the two cases of different incoming states in a metal, $t_{j\pm}$ correspond the transmission

amplitudes of plus and minus branch in case j, respectively, and k_x^\pm are defined as

$$\cos(k_x^{\pm}a) = \frac{1}{2} \left(\frac{t_R(E + 2t_R \cos(k_y a))}{t_R^2 + t_{so}^2} \right)$$

$$\pm \frac{t_{so} \left(4t_R \left(t_R - E \cos(k_y a) \right) + 6t_{so}^2 - E^2 - 2 \left(2t_R^2 + t_{so}^2 \right) \cos(2k_y a) \right)^{1/2}}{2(t_R^2 + t_{so}^2)}.$$
(8)

The \pm signs are for the plus and minus branch.

All wave function have positive group velocities or the vector momentum k_x have a positive imaginary parts. As mention above we developed the suitable way by making the quality of interfacial scattering to calculate the transport properties of particle. With the translational symmetry of the system, the component along the surface (k_y) of a momentum is conserved within a reciprocal-lattice vector corresponding to the translation of a distance between the lattice networks. Therefore, we can used the Bloch's theorem to write the eigenstates of Eq.(1) in the following form

$$U(n,m) = e^{imk_y a} U^{k_y}(n) \tag{9}$$

where n and m indicated the column and row indices as see in Fig. 1, $-\pi/a \leqslant k_y \leqslant \pi/a$. Substituting Eq.(9) into Eq.(1), the 2D equations are reduced to the following 1D equations for each k_y

$$\sum_{n'} T^{k_y}(n, n') U^{k_y}(n') = E U^{k_y}(n). \tag{10}$$

 $T^{ky}(n, n')$ is the suitable (2×2) energy matrix between two ions with column indices n and n'. By following the procedure used to obtain the conditions for a metal/superconductor junction in a lattice model [33]. In each system, we have to set of a different equation to describe both bulk states of a normal metal and the Rashba system, these equation still provide the matching condition for two wave functions $U_M^{ky}(n)$ and $U_R^{ky}(n)$ at the interface.

$$U_R^{k_y}(0) - U_M^{k_y}(0) = 0 (11)$$

$$t_N U_M^{k_y}(-1) - T_{so} U_R^{k_y}(-1) + V U_R^{k_y}(0) = 0$$
(12)

where $V = \begin{pmatrix} V_0 & V_F \\ V_F & V_0 \end{pmatrix}$. The diagonal elements of V from now on mean $V_0 = V_{\uparrow\uparrow} = V_{\downarrow\downarrow}$, which is a spin-conserved that relates to the potential barrier of the junction, the off-diagonal elements are denoted by $V_F = V_{\uparrow\downarrow} = V_{\downarrow\uparrow}$, which means the spin-flip interfacial scattering and $T_{so} = \begin{pmatrix} t_R & -t_{so} \\ t_{so} & t_R \end{pmatrix}$.

After substituted the wave function of both a normal metal and the RSOC into the boundary conditions, we can obtain the transmission (T) and reflection (R) probability which is conservation of electric current at the interface.

For the number of free electron charge per unit volume n_e flowing to a solid with velocity v, resulting in volume current J is given by

$$J = \sum_{\vec{k}} e n_e v_k, \tag{13}$$

where e is the charge on an electron. Since the current is independent of x, we consider the current density as a function of applied voltage V in the ROSC system as

$$J = \sum_{k_x > \vec{0}, k_z} ev_k(T(E_k)) \left[f(E_k - eV) - f(E_k) \right], \tag{14}$$

where f(E) is Fermi distribution function. By changing the integration variable and setting temperature to zero for simplicity, one can obtain the expression for the electric current as

$$J(V) = \frac{e\mathcal{A}}{(2\pi)^2} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} dk_y \int_0^{eV} dE \cdot T(E) \left(f(E - eV) - f(E) \right), \tag{15}$$

where $\mathcal{A} = a \times a$ is the area of lattice network, thus the differential conductance $G(eV) \equiv dJ/dV$ at zero temperature is,

$$G(eV) = \frac{e^2 A}{(2\pi)^2} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} dk_y T(E).$$
 (16)

Note that, the applied voltage is considered in both positive and negative value and the effects of finite temperature on the conductance spectrum is a smear feature, i.e., it not change the position of conductance spectrum.

3. Results and Discussions

By assuming the energy band of the Rashba system is empty, we use Eq.(16) to calculate the conductance for different values of interfacial scattering potential at column n=0. We consider how two kinds of scattering potential effect the conductance spectrum at zero temperature (i.e., V_0 which is the spin-conserved scattering potential, and V_F the spin-flip scattering potential). All conductance spectra are plotted as a function of energy in the unit of $e^2a^2/(2\pi)^2$.

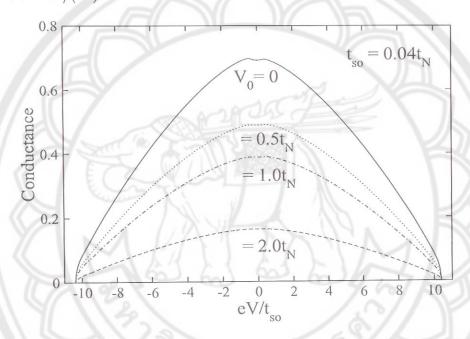


Figure 5: Plots of conductance spectra as a function of energy for $V_0 = 0$ and $V_0 = 0.5t_N$. V_F is zero in these plots.

First, we show Fig.5 the plots of conductance spectra for the voltage range equivalent to the whole band width of RSOC system, when $V_0 = 0$, $V_0 = 0.5t_N$, $V_0 = 1.0t_N$ and $V_0 = 2.0t_N$. As can seen, the conductances are zero until the applied voltage reaches the bottom of the Rashba band. It is increased and reached the maximum near the middle of the band, which appears as two double peaks symmetric in voltage positions around the middle of the band, and then it decreases to zero at the top of the band. According to the density of states of 2DEG with RSOC, there are shown four Van Hove

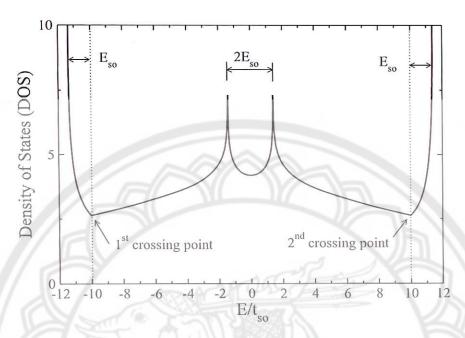


Figure 6: Numerical solution of total density of state of RSOC system as a function of energy by setting the $t_R = 0.4t_N$. E_{so} is the Rashba energy.

singularities as seen in Fig.6. We will also show the magnified plots of conductance spectra in three regions, i.e., the voltage near the 1^{st} crossing point, the middle of the band, and near the 2^{nd} crossing point. The conductance spectrum was suppressed with increased the spin-conserved scattering potential in case of absent the spin-flip value as can clearly seen in Fig.7. Unlike in the continuous model [17, 18], one can see that there is no kink in the spectrum at the crossing points when increasing of only V_0 . The double peaks at the voltage near the middle band vanishes when V_0 is a tunneling limit or $V_0 > 0.5t_N$. We also consider effect of increasing V_F by setting $V_0 = 0$, the conductance spectrum does not a king at the crossing points. The suppression of conductance does not surprise because the potential barrier is know to reduce the transmission probability.

The conductance was affected by both types of interfacial scattering we show in Fig.8 and Fig.9 as discus following. For a small value of V_0 ($V_0 = 0.5t_N$), the increase in V_F , suppresses the conductance spectrum. The kinks also appear at the energies corresponding to the crossing points. The higher

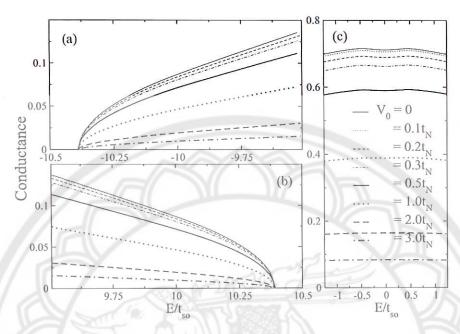


Figure 7: Magnified plots of conductance spectra as a function of energy for several values of V_0 near the bottom, middle, and top of the band. V_F is zero in these plots.

the value of V_0 , the more prominent the kinks. It should also be noted that the kink near the voltage close to the bottom of the band is dip-like or pointing down, similar to the kink in the conductance spectrum that was obtained by using the continuous model, whereas the kink near the top of the band is sharp and pointing upward. The different natures of the kinks reflect the difference in nature of the electron-like (close to the bottom) and hole-like (close to the top) energy contours of the energy band.

The effect of the presence of both V_F and V_0 can also be seen around the energy corresponding to the middle of the band, i.e., the double peaks of conductance spectrum near the maximum point are shifted towards the bottom of the band. They are no longer symmetric around the middle of the band (see Fig.8). When V_F is high value, the double peaks are invisible. For high barrier strength, i.e., $V_0 = 2.0t_N$ (see Fig.9), the conductance reaches maximum value when of $V_F \simeq V_0$.

For the around bottom of RSOC band system the energy different between the onset and the discontinuity of the slope of conductance spectrum can

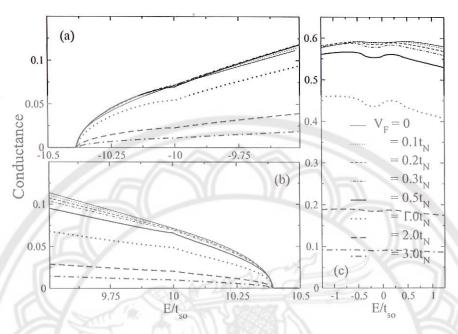


Figure 8: Magnified plots of conductance spectra as a function of energy for several values of V_F in case of $V_0 = 0.5t_N$.

also be used to determine the Rashba energy [17]. It has been predicted by using a free electron approximation. But it cannot investigated out of area because of a limit of the model. In this work, it has an advantage in a tight-binding approximation so we can predict the Rashba energy by using the energy different between the discontinuity of slope and the offset of the hole-conductance spectrum around top of the RSOC band.

For an high barrier strength, i.e., $V_0 = 2.0t_N$ (see Fig.9-all), the conductance spectrum is a maximum for all applied voltage at the value of $V_0 \simeq V_F$ and the shape of electron conductance spectra are exactly different with the hole conductance.

In order to more clear the effect of spin-flip scattering on the conductance, we plot of conductance as a function of V_0 at the Fermi levels as for example, $E = -10.125t_{so}$, $E = -9.5t_{so}$, $E = 9.5t_{so}$, and $E = 10.125t_{so}$ (see Fig.10), which lead to the Fermi energy at around bottom to top of the band. All plots are the conductance as a function of V_0 for different values of V_F . One can see that for the small value of V_F all plots of conductance decrease with

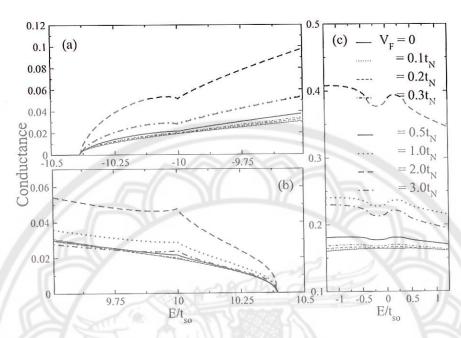


Figure 9: Magnified plots of conductance spectra as a function of energy for several values of V_F in case of $V_0 = 2.0t_N$.

 V_0 as expected. But for V_F is higher than $0.3t_N$ the tendency of conductance change to increase until it reaches a maximum at $V_0 \simeq V_F$. After that when the value of V_F beyond its V_0 the conductance is suppressed as mention early. This surprising has been reported as well as in a limit of free electron approximation in a metal/2DEG with RSOC junction [17].

The conductance spectrum as a function the hopping energy that corresponds to the strength of RSOC is showed in Fig.11. We consider the different constance energy E as showed in the picture. The conductance is enhanced with increasing the strength of RSOC. However, the conductance for the energy at the middle of RSOC band is slightly decreased with strongly presented spin-orbit coupling of Rashba system.

4. Conclusions

We theoretically study a junction of a metal and the 2DEG with RSOC by using a lattice model. We find an alternative way to take into account the interface quality to calculate the transport properties of electron in our

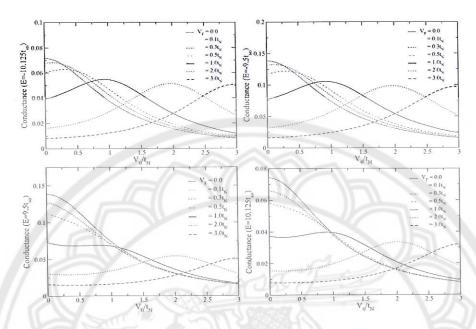


Figure 10: Differential conductance at a constant energy $E=-9.5t_{so}$, $E=-10.125t_{so}$, $E=9.5t_{so}$ and $E=10.125t_{so}$, plotted as a function of the barrier strength V_0 for different V_F , the maximum conductance is occurred at the value of $V_0 \simeq V_F$.

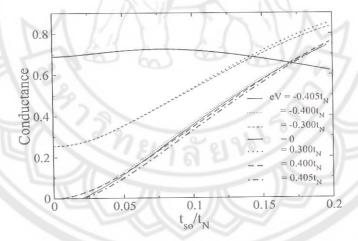


Figure 11: Differential conductance plotted as a function of the hopping energy of spin-orbit coupling in a Rashba system for different the constant energy eV.

system. The numerical solution of electron- and hole-tunneling conductance were generalized for a 2-dimensional structure. We find that the conductance spectrum depends on the barrier strength as, an increased either spin-conserving or spin-flip scattering the conductance was suppressed, however, both types of interfacial scattering are taken into account, the conductance exhibits a characteristic kink that occurs when the Fermi level reach the interaction of Rashba splitting band. The energy spacing between the two distinguish features of the conductance's slope either considering electron-or hole-conductance can be determined the Rashba energy. The conductance spectrum of electron and hole are exactly different shape. They can be enhanced by increasing the strength of spin-flip which slightly equal the spin-conserved value. For effect of Rashba spin-orbit coupling strength, the tunneling conductance is increased with the strong Rashba spin-orbit coupling strength but the energy is approached the middle band energy of Rashba system the conductance is quietly independence with the Rashba strength.

Acknowledgment

This work was financially supported by Naresuan University (Project No. R2556C084).

References

- E. I. Rashba, Soviet Physics-Solid State 2 (1960) 1109, Fizika Tverdogo Tela 2 (1960) 1224.
- [2] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, Journal of Physics C 17 (1984) 6039.
- [3] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, JETP Lettre 39 (1984) 78
- [4] I. Zutic, J. Fabian, and S. D. Sarma, Reviews of Modern Physics 76 (2004) 323.
- [5] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. V. Molnar, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, and D. M. Treger, Science 294 (2001) 1488.
- [6] G. Prinz, Physics Today 48 (1995) 58.

- [7] P. R. Hammar, B. R. Bennett, M. J. Yang, and M. Johnson, Physical Review Letters 83 (1999) 203; 84 (2000) 5024.
- [8] C.-M. Hu, J. Nitta, A. Jensen, J. B. Hansen, and H. Takayanagi, Physical Review B 63 (2001) 125333.
- [9] S. Gardelis, C. G. Smith, C. H. W. Barnes, E. H. Linfield, and D. A. Ritchie, Physical Review B 60, (1999) 7764.
- [10] F. G. Monzon and M. L. Roukes, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 198 (1999) 632.
- [11] T. Matsuyama, C.-M. Hu, C. Grundler, G. Meier, and U. Merkt, Physical Review B 65, (2002) 155322.
- [12] D. Grundler, Physical Review Letters 86 (2001) 1058.
- [13] C.-M. Hu and T. Matsuyama, Physical Review Letters 87 (2001) 066803.
- [14] S. Datta and S. Das, Applield Physics Letters 56 (1990) 665.
- [15] F. Mireles and G. Kirczenow, Physical Review B 64, (2001) 024426.
- [16] L. W. Molenkamp, G. Schmidt, and G. E. W. Bauer, Physical Review B 62 (2000) 4790.
- [17] B. Srisongmuang and P. Pairor and M. Berciu, Physical Review B 78 (2008) 155317.
- [18] A. Jantayod and P. Pairor, Physica E 48 (2013) 111.
- [19] H. Li and X. Yang, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 323 (2011) 2899.
- [20] J. Wang, H. B. Sun, and D. Y. Xing, Physical Review B 69 (2004) 085304.
- [21] T. P. Pareek and P. Bruno, Physical Review B 63 (2001) 165424.
- [22] K. Pasanai and P. Pairor, Physical Review B 84 (2011) 224432.
- [23] W. Chen, Z.Z. Zhang, L. Jiang, Z.W. Xing, R. Shen, and B.G. Wang, The Euoropian Physical Journal B 85 (2012) 275.

- [24] A. Jantayod, Superlattices and Microstructures 64 (2013) 78.
- [25] I. Zutic and S. Das Sarma, Physical Review B 60 (1999) 16322R.
- [26] P. Lyu, D. Y. Xing, and J. Dong, Physical Review B 58 (1998) 54.
- [27] J. Inoue and S. Maekawa, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 198 (1999) 167.
- [28] R. Jansen and J. S. Moodera, Physical Review B 61 (2000) 9047.
- [29] A. Vedyayev, D. Bagrets, A. Bagrets, and B. Dieny, Physical Review B 63 (2001) 064429.
- [30] M. Wawrzyniak, M. Gmitra, and J. Barnas, Journal of Applied Physics 99 (2006) 023905.
- [31] F. Guinea, Physical Review B 58 (1998) 9212.
- [32] Z. H. Yang, Y. H. Yang, J. Wang, and K. S. Chan, Journal of Applied Physics 103 (2008) 103905.
- [33] P. Pairor and M. B. Walker, Physical Review B 65 (2001) 064507.

การขนส่งอนุภาคและสปินผ่านโครงสร้างผสมโลหะ/เพ่อร์โรแมกเนติก Particle and spin transport across of metal/ferromagnetic heterostructure

อำพล หลักบุญ และ เอก จันดีะยอด* ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยนเรคาร จังหวัดพิษณุใลก

บทคัดย่อ

งานวิจัยนี้เป็นการศึกษาเชิงทฤษฎีคำนวณหาค่าสภาพนำให้ฟ้าและค่าสปินโพลาไรเชชันผ่านโครงสร้างผลมโลหะ/เฟอร์โรแมก
แห็ก ซึ่งจะเน้นไปที่ผลกระทบของการคู่ควบกันของสปินกับวงโคจรแบบรัชบาที่บริเวณผิวรอยต่อ พบว่าสภาพนำให้ฟ้าจะมีการ
แลี่ยนแปลงที่ชัดเจนเมื่อการไบแอสความต่างศักย์ให้ฟ้าถึงจุดต่ำสุดของแถบพลังงานส่วนน้อยของเพ่อร์โรแมกเนติก สภาหนำ
ให้ฟ้าจะลดลงเมื่อความแรงของการคู่ควบกันของสปินกับวงโคจรที่ผิวรอยต่อเพิ่มขึ้น เมื่อพิจารณาการกระเจิงที่รอยต่อแบบปกติ
อย่างอ่อน (โปร่งใส) ค่าสปินโพลาไรเขชันลดลงเมื่อเพิ่มความแรงของการคู่ควบสปินกับวงโคจร แต่ถ้าพิจารณาผลของการ
กระเจิงแบบปกติอย่างรุนแรง (ที่บ) ทบว่าค่าสปินโพราไรเขชันจะเพิ่มขึ้นถึงจุดสูงสุดค่าหนึ่งแล้วหลังจากนั้นก็จะลดลงเข้าสู่ค่าคง

Abstract

The conductance and the spin polarization of current across a two-dimensional heterostructure of metal/ferromagnetic (M/FM) junction were theoretically studied by using the free electron approximation. We focused on effect of the Rashba spin-orbit coupling at the interface of the junction. It found that the conductance shows the prominent kink when the applied voltage reaches the bottom of the minority band of ferromagnetic. A risen spin-orbit coupling strength suppresses the conductance. For the spin polarization of current in a small present of normal scattering, it is decreased with a strong interface spin-orbit coupling value. In a tunneling limit, an increase the spin-orbit coupling strength can enhance the spin polarization to a maximum value, and it then decreases to a constant.

Keywords: Rashba spin-orbit coupling, spin polarization of current, tunneling conductance

*Corresponding Author: E-mail address: aeki@nu.ac.th



ผลกระทบของผิวรอยต่อแบบมีการคู่ควบกันของสปินกับวงโคจรต่อการขนส่งอนุภาคและสปินผ่านระบบโถหะเ สารเพื่อร์โรแมกเนติก

> Effect of interface spin-orbit coupling on particle and spin transport across of metal/ferromagnetic heterostructures อำหล หลักบุญ ,เอก จันต๊ะยอด*



ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยนเรศวร จ.พิษณุโลก 65000 aekj@nu.ac.th

บทคัดย่อ

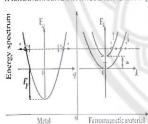
การศึกษานี้เป็นการศึกษาทางทฤษฎีของการทะลุผ่านที่บริเวณรอยค่อของโครงสร้างผสมในสองมิสิ สำหรับโดหะกับสารงส่อริโรแมกเนลิก โดยใช้การจำลองการทะลุผ่านที่บริเวณรอยค่อของโครงสร้างผสมในสองมิสิ สำหรับโดหะกับสารงส่อริโรแมกเนลิก โดยใช้การจำลองการเคลื่อนที่ของอิเลือดรอนแบบค่อเนื่องและวิธีการ กระเจิง ซึ่งจะคำนวณหากระแสไฟฟ้าและกระแสสปีนที่อุณหภูมิ 0เคลวิน ซึ่งเราจะเน้นไปที่ปฏิกิริยาของ Rashba spin-orbit coupling ที่บริเวณผิวรอยสอทบว่าสภาพนำให้ทำจะมีการเปลี่ยนแปลงที่ชัดเจนเมื่อการ ไบแอสภาวรสารศักย์ใฟฟ้าถึงรุดต่ำสุดของแกบหลังงานล่วนน้อยของเพ่อริโรเมทแล็กสภาหน้าให้ห้าจะลดลงเมื่อเพิ่มการคู่ควบกันของลปินกับวงโดจที่มีอวรอยล่อเมื่อหิจารณาการกระเจิงที่รอยส่อแบบปกติเพียง เล็กน้อย (ไปร่งใส) แส่ถ้าพิจารณาผลของการกระเจิงแบบปกติอย่างรุนแรง (ทีบ) จะพบว่าก่าสปินโพราไรเขชั้นจะลดลงเมื่อพิจารณาเพิ่มผลของการคู่ควบกันของสปินกับวงโคจมแล้วเพิ่มผลของการคู่ควบลปินกับวง ใครราะทำให้ค่าสปืนโพราไรเขชันเพิ่มขึ้นถึงรุกสูงสุดค่าหนึ่งแล้วหลังจากนั้นก็จะลดลงเข้าสู่ค่าคงตัว

ที่มาและความสำคัญ

โครงสร้างผสมของสสารสางๆ มีประโยชน์ส่อการพัฒนาอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เพื่อให้ใช้ชิ้นงานมี **จนาดเล็ก** ประมวณผลด้วยความรวดเร็ว ถ้าหากจะทัฒนาอุปกรณ์ดังกล่าวแล้วจำเป็นต้องมี พื้นฐานมาจากความรู้ความเข้าใจฟิสิกส์และสสารนี้เป็นอย่างดี แต่โครงสร้างดังกล่าวยังไม่ สามารถที่จะนำไปสู่การผลิตเป็นขึ้นส่วนอิเล็กทรอนิกส์ได้เนื่องจากยังพบปัญหา เช่น ประสิทธิภาพ รองการใหลของกระแสสปีนจากสารคัวที่หนึ่งไปยังตัวที่สอง เนื่องจากเกิดการไม่ส่อเนื่องกันของ คุณสมบัติทางไท่ฟ้าที่รอยต่อของสารทั้งสองตัวเป็นต้น แต่หลังจากนั้นได้มีนักวิจัยพบว่า สามารถ **เพิ่มประสิ**ทธิภาพการใหลของสปินนี้ใต้ เช่น การใส่ฉนวนเข้าไปบริเวณรอยต่อระหว่างสารทั้งสอง [2] หรือ การศึกษาตารเพ่อร์โรแมกเนลิกที่มีความแตกค่างของพลังงานเพ่อร์มิสูงๆ [3] เป็นล้น ทั้งนี้ **เราสามาร**ถพิจารณาตัวแปรต่างๆ ที่ส่งผลกระทบต่อพาหะนำไฟฟ้าดังกล่าว เช่น ประสิทธิภาพของ การกระเจิงของสปินที่รอยส่อแบบปกลิ (non-spin-fip scattering) และแบบที่สามารถกลับที่สของ สปินได้ (spin- fip scattering) ซึ่งทั้งสองตัวสามารถทำให้สภาหนำไฟฟ้าและสปินโพลาไรเขชัน เพิ่มขึ้นให้ภายให้เงื่อนไขที่เหมาะสม [4] นอกจากประสิทธิภาพของการกระเจิงสองแบบดังกล่าว แด้วยังมีผลของความแรงของการคู่ควบสปันกับวงจร (interface spin-orbit coupling) ซึกรูปแบบ หนึ่งชึ่งมีผลทำให้จุดสูงสุดของสภาพนำให้ทำเปลี่ยนแปลงได้ในระบบโดรงสร้างผสมของโลหะ/สาร ตัวนำยวดยิ่ง [5] จะเห็นว่าการหิจารณาผลกระทบที่รอยล่อและการเลือกพิจารณาโครงสร้างผสมที่ ประกอบด้วยสลารต่างๆ มีความสำคัญต่อประสิทธิภาพของสภาพนำให้ฟ้าและสปินโทราไรเขชัน **ธองระบ**บอย่างมาก อย่างไรก็ตามยังไม่มีงานวิจัยที่สามารถเพิ่มประสิทธิภาพการไหลของ อิเด็กตรอนและสปินได้อย่างสมบูรณ์ ซึ่งปัจจุบันนี้ก็ยังเป็นปัญหาที่นักวิจัยล้องคิดล้นและพัฒนา ต่อไป

หลักการและเหตุผล

งานวิจัยนี้จะศึกษาเริงทฤษฎีของผลกระทบของรธยส่อแบบมีการสู่ควบกันระหว่างสปันกับวงโคจร **ศอลภาห**น้าให่ฟ้าและสปืนโพลาไรเซชันธองโครงสร้างผสมที่ประกอบด้วยโลหะและสารเพ่อร์โร แมกเหลิก โดยจะใช้การจำลองการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนและสปินแบบส่อเนื่อง (free electron approximation) ในระบบสองมิติ ซึ่งรวมถึงการพิจารณาผลกระทบของการกระเจิงของสปิน รอยต่อแบบปกลิ และแบบที่มีการคู่ควบกันของสปินกับวงโคจรแบบรัชบาที่ลำแหน่ง x=0 ดังรูปที่1 กำแพงศักย์ที่รธยต่อสามารถอธิบายล้วยสมการ [6]



 $U(x) = \left[U_0 + U_1 \hat{n} \cdot \left(\vec{\sigma} \times \hat{k}\right)\right] \delta(x)$ เมื่อ $\hat{n} = \hat{X}$ เวกเลอร์หน่วยสามแนวแกน x $U_{
m o}$ และ $U_{
m i}$ คือกำแพงศักย์ที่มีความเป็น อิสระของสปันและความแรงของการคู่ ควบสปืนกับวงโคจรแบบรัชบาสามลำลับ

σ คือ สปืนเพาถีเมสริก \hat{k} คือ ตัวลำเนินการเวกเตอร์โมเมนภัม และ อ(x) คือ ฟังก์ขันภิแรก

รูปที่ในถบพลังงานของโลหะและสารเพ่อร์โรแมกเนลิก

อามิลโดเนียนของระบบสามารถเขียนให้ดังนี้ $\hat{H}(x) = \hat{p} \frac{1}{2m} \hat{p} + V(x)$ เมื่อ \hat{P} คือลัวดำเนินการ โมเนนตัน Mคือ มวลของอิเล็กตรอนและ $\Gamma(x) = -E_r \theta(x) + U(x) - [im \hat{\sigma} - i\theta(x)]$ จากสมการ ร้างลัน E_r คือ หลังงานเพ่อร์มิของโลหะ Θ ทั้งก็ขัน Heaviside step, h คือปฏิกิริยาที่เปลี่ยนแปลง ในสารเพ่อภิโรแมกเนติก, \hat{m} คือ เวกเตอร์หน่วยของแมกเนไตเขชันในเพ่อภิโรแมกเนติกในงานวิจัยนี้ เลือกให้ไปในทิศ+z ซึ่งหมายถึง การมีลปินส่วนใหญ่เป็นลปินชี้ขึ้น และทิศทาง –z หมายถึง การมี สปินส่วนน้อยเป็นสปินชี้ลง สำหรับโลหะx<0 สามารถเขียนภารแจกแจงหลังงานลังนี้ $E(q) = \frac{\hbar^2 q^4}{2m} - E_{EM}$ เมื่อ q คือขนาลของเวกเตอร์คลื่นสามารถเขียนพังก์ชันคลื่นให้ดังนี้

$$\psi_{M}^{(1)} = \left(\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} e^{iq_{1}x} + \begin{bmatrix} r_{1}^{(1)} \\ r_{1}^{(1)} \end{bmatrix} e^{-iq_{1}x} \right) e^{iq_{2}x} \quad \psi_{M}^{(1)} = \left(\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} e^{iq_{1}x} + \begin{bmatrix} r_{1}^{(2)} \\ r_{2}^{(1)} \end{bmatrix} e^{-iq_{2}x} \right) e^{iq_{2}x}$$

(1)และ(2) คือ กรณีอิเล็กตรอนตกกระทบมีลปินชี้ขึ้นและชี้ลงตามลำดับ 7,7 คือขนาดของ ล้มประสิทธิ์ของการสะท้อนกลับแบบมีสปันชี้ขึ้น สปันชื่องตามลำลับ ในส่วนของเพ่อร์โรแมกเนติก x>0สามารถเรียนฟังก์ขันคลื่นได้ดังนี้

 $\psi_{FM}^{(i)} = \left(\begin{bmatrix} \ell_i^{(i)} \\ 0 \end{bmatrix} e^{ik_{\epsilon,1}x} + \begin{bmatrix} 0 \\ \ell_i^{(i)} \end{bmatrix} e^{ik_{\epsilon,1}x} \right) e^{ik_{\epsilon,1}x}$ เมื่อi=1,2และ $I_{\uparrow},I_{\downarrow}$ คือขนาดของสัมประสิทธิ์ของการส่งผ่านแบบมีลปีนชี้ขึ้นชื่องตามลำดับ

 $E(k) = \frac{h^2 k_{\uparrow,\downarrow}^2}{2} \mp h - h$ และมีการแจกแจงพลังงานคือ สามารถคำนวดเหาสมประสิทธิ์สางๆให้จากเงื่อนใชขอบเขตที่รอยต่อตั้งนี้

จากสัมประสิทธิ์ส่างๆสามารถคำนวณหาค่าการล่งฝานและการละท้อนกลับของอีเล็กตรอนได้ดังนี้

 $R_{\uparrow}^{(i)} = \left|r_{\uparrow}^{(i)}\right|^{2}$, $R_{\downarrow}^{(i)} = \left|r_{\downarrow}^{(i)}\right|^{2}$, $T_{\uparrow}^{(i)} = \left|r_{\uparrow}^{(i)}\right|^{2} \cdot \frac{\overline{v}_{k,t}}{\overline{v}_{\downarrow}}$, $T_{\downarrow}^{(i)} = \left|r_{\downarrow}^{(i)}\right|^{2} \cdot \frac{\overline{v}_{k,t}}{\overline{v}_{\downarrow}}$ \overline{v} คือความเร็วกลุ่มอิเล็กตรอน เมื่อเราไบแอลความเร็างเล็กซ์ \vee ฝานรับบบสามารถกำนวณหา กระแสไฟฟ้าจากด้านเฟอโรแมกเนสิกดังนี้

กระแสเทหาจากสามเพชนระมาณเรกสุงม $f_*(eV) = \frac{e^{-A^2}q_F}{h^2 2\pi} \int_0^{eV} dE \int_{-\theta_{e(e)}}^{\theta_{e(e)}} d\theta \cos\theta \sqrt{1 + \frac{E}{E_F}} (T_+ + T_\perp)$ เมื่อ $\theta_*(E) = \sin^{-1}(k_\perp(E)/q(E))$.ส่ คือพื้นที่บริเวณเฟอร์โระมาณหลิก เพื่อความสะควกต่อการ

คำนวณเราพิจารณากระแสไฟฟ้าที่รุณหภูมิศูนย์เคลวินซึ่งจะได้สภาหนำไปปีปก็อ $G(eV) = dj_s^c/dV$

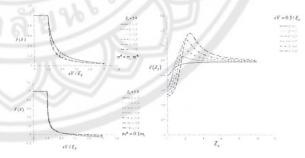
 $G(eV) = \frac{C}{h}\frac{d^3q_c}{2\pi}\int_{-Q_{e/Q}}^{Q_{e/Q}}d\theta\cos\theta\sqrt{1+\frac{eV}{E_p}}(I_1+I_1)$ และการโพลาไรเซรันซองสปิน (สามารถวัลค่ำความแตกต่างกันซองสภาพน้ำให้ฟ้าสปินซี้ซึ้นและ สปินซื้ลง) ดังนี้ $P(E) = \frac{G_1(E) - G_1(E)}{G_1(F) + G_2(E)}$ ผลการวิจัย

ผลการวิจัย

ค่าของกระแด้ไท่ฟ้าถูกหลือคในพังก์ขันของ applied voltage ในหน่วย $eA^2q_F/2\pi h$ โดยการ เปลื่อนแปลงพารามิเคอร์บางคัว



มูปที่ 2 กระแสไท่ฟ้าทางข้ายและสภาหน้าไฟฟ้าทางขวาเป็นพังก์ขันของ applied vottage โดย



รูปที่ 3 กระแสไฟฟ้าทางร้ายและสภาพนำไฟฟ้าทางรวาเป็นพังก์รันรอง applied voltage โดย เปลี่ยนค่า h ที่ Z=0

- S.Datta and S.Das, Appl. Phys. Lett. 56 (1990) 665.
- [2] E.I. Rashba, Phys. Rev. B 62 (2000) R16267.
- [3] D. Grundler, Phys. Rev. B 63, 161307 (2001), Phys. Rev. Lett. 86, 1058 (2001).
- [4]Pasanai K. and P. Pairor, Phys. Rev. B 84
- [5] B. Lv, Eur. Phys. J. B 83, 493-497 (2011)
- [6] S. wu and K.V. samokhin, Phys. Rev. B 81, 214506 (2010)