

Spin-pálya kölcsönhatás által
indukált spin dinamika fémekben és
félvezetőkben

Tézisfüzet

Szolnoki Lénárd

Témavezető: Simon Ferenc

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Budapest

2019. június 19.



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Előzmények

Az elektronikai ipar nagymérvű fejlődése és a XX. századi informatikai forradalom létrejöttében kulcsszerepet játszottak a század eleji kvantummechanikai vizsgálatok, melyek az alapvető transzport effektusok megértését célozták. 1965-ben Moore megfigyelte, hogy a számítógépek számítási kapacitása exponenciálisan növekszik az idő előrehaladtával. Ez a tapasztalati törvény most, mint Moore törvény vált ismertté [1]. Annak ellenére, hogy a Moore-törvény több mint fél évszázadon keresztül helyesen jósolta a számítástechnika fejlődését, ez a páratlan fejlődési tendencia feltehetően lelassul vagy akár meg is szűnik amint az elektronikai eszközeink elérnek egy alsó méretkorlátot.

A hagyományos elektronika lényegében az elektronok számának illetve áramlásának szabályozásával működik, mind információ tároló illetve számítást végző eszközökben egyaránt. Az ötlet, hogy az elektron impulzus-momentuma (spinje) is használható ezekre a célokra, először a 90-es években merült fel[2]. A tudományterületet, ami ezzel a kérdéskörrel foglalkozik, *spintronikának* nevezzük. A spintronika alapvető ötlete és feltevése, hogy az elektron spinje kevésbé érzékeny a környezetre az elektron momentumához képest. Az elektron spinje legtöbbször csak relativisztikus hatásokon keresztül lép kapcsolatba a környezetével (az ún. spin-pálya kölcsönhatáson keresztül), ellenben az elektron momentumának nagyságát és irányát a sokkal erősebb Coulomb-kölcsönhatás befolyásolja. Egy elektron-sokaság (vagy akár néhány elektron) kollektív spin iránya

elvbén használható információ tárolásra vagy számításra egyaránt[3].

A spintronikai alkalmazások szempontjából megkerülhetetlen az alapjelenségek elméleti leírása. Ezen belül is, a spintronikai eszközök alkalmazhatósága szempontjából a központi mennyiség az ún. spin relaxáció jelensége. A hagyományos elektronikát alapul véve, a spin relaxáció a momentum szórással állítható párhuzamba. A spin relaxációs idő megadja, hogy egy spin-sokaság, amelyben a spinek iránya azonos, milyen időskálán veszíti el az eredő spin értékét.

Egy elektron sokaság spin iránya különböző folyamatokon keresztül veszti el a koherenciáját. A spin relaxációs idő hossza határozza meg, hogy mennyi idő áll rendelkezésre a spin információ manipulálására illetve kiolvasására. A spin relaxáció folyamata általában nagyságrendekkel lassabb a momentum relaxációnál. Ennek eredményeként a spin transzport leggyakrabban egy diffúziós folyamat, a spin irány több momentum szórást követően is megmarad.

A spin relaxációnak két alapvető elmélete ismert ami használható az esetek többségében: Olyan fémekben, amelyek rendelkeznek inverziós szimmetriával (ilyen a legtöbb elemi fém) az ún. Elliott-Yafet elmélet [4, 5] érvényes, feltéve hogy a momentum relaxáció nem túl erős. Amennyiben az anyag szerkezete nem rendelkezik inverziós szimmetriával, és a momentum relaxáció erőssége jelentős (pl. GaAs), az ún. D'yakonov-Perel' elmélet érvényes [6, 7]. Rögtön több kérdés is felmerülhet abból a tényből, hogy két alapvető elméletet ismerünk ugyanannak a fizikai jelenségnek –

spin relaxációnak – a leírására. Ezek: Milyen mértékben támogatják kísérleti eredmények ezeket az elméleteket? Mi történik, akkor ha a fenti feltételek nem teljesülnek, például erős momentum szórás esetén inverziós szimmetria mellett, vagy gyenge momentum szórás esetén egy inverziós szimmetriát sértő anyagban? Vajon lehetséges-e a két relaxációs mechanizmust egy egyesített elméletben tárgyalni?

Célkitűzések

A disszertációm ezek a megválaszolatlan kérdések motíválták, ebben a tézisben mutatom be az ezen területen elért elméleti eredményeimet. Eredményeim között bemutatom az Elliott-Yafet elmélet egy empirikus validációját inverziós szimmetriával rendelkező fémekben [8], megadok egy Monte Carlo szimuláción alapuló módszert a spin relaxációs idő számítására inverzió szimmetriát sértő anyagokban [9], illetve egy intuitív megközelítést mutatok be a látzólag alapjaiban eltérő két, spin relaxációt leíró, elmélet egyesítésére [10].

A disszertációm a következő módon tagolom: Ismertetem a spin-pálya kölcsönhatás alapvető elméletét, illetve a spin relaxáció azon elméleteit, melyek ismertek voltak a munkámat megelőzően is. Bemutatom a hagyományos Elliott-Yafet és D'yakonov-Perel' elméletek alapjait, illetve azokat a közelmúltbeli eredményeket, amik előbbre vitték ezt a területet [11] és azt vizsgálták, hogy lehetséges-e közös matematikai alapokon tárgyalni a két elméletet.

Az Eredmények fejezetben három fejezetben ismertetem és a tézis pontjaimmal zárom le. A mellékletekben mutatom be a a szimulációs algoritmus és az egyéb számítások részleteit.

Módszerek

Implementáltam egy Monte Carlo alapon működő szimulációs szoftvert a spin szuszceptibilitás és spin relaxációs idő meghatározására inverzió szimmetriát sértő anyagokban. Az elektron állapotok időfejlődése a Boltzmann egyenlet követi. Az egyes elektron spinek a spin-pálya kölcsönhatás által keltett beépített, \mathbf{k} függő mágneses tér körül precesszálnak két szórási események között. A momentum szórások más \mathbf{k} állapotba szórja az elektront a spin állapotot változtatlanul hagyva, így az egy eltérő mágneses tér körül precesszál tovább. A szimuláció az elektron spinek véletlen bolyongását, illetve a sokaság mágnesezettségét követi nyomon. A sokaság mágnesezettségének időfüggéséből lehet következtetni a spin relaxációs időre illetve a spin szuszceptibilitásra.

Új tudományos eredmények

1. Az elemi fémek spin-relaxációjának fenomenologikus vizsgálatára kidolgozott ún. Beuneu-Monod relációt vizsgáltam. Ez a kísérleti elektron spin rezonancia

vonalszélességeket veti össze az ún. spin-pálya keveredési együtthatókkal és a momentum-relaxációval. A Beuneu-Monod összefüggésben két hiányosságot tártam fel, nevezetesen megmutattam, hogy i) a momentum-relaxáció tárgyalásából bizonyos pontokon a Debye-hőmérséklet és az elektron-fonon csatolás erőssége el volt hanyagolva, és ii) az Elliott-Yafet elmélet alkalmazásánál a spin-pálya csatolás mátrixelemei helyett az atomi spin-pálya felhasadások voltak figyelembe véve, ami elvileg hibás megközelítés, habár ezen mennyiségek hasonló nagyságrendűek. E jelenségek pontos figyelembevételével pontosított értékeket kaptam az ún. empirikus spin-pálya keveredési együtthatókra. [T1]

2. Kifejlesztettem egy sztochasztikus modellt a dinamikus spin szuszceptibilitás számítására inverziós szimmetriát sértő anyagokban, a spin-pálya kölcsönhatás és a momentum szórás nagyságának tetszőleges értékeire. A számításokból a spin relaxációs idő numerikusan kinyerhető volt. A modell helyességét megerősítettem analitikus számítások jóslatainak összevetésével, mind tiszta (momentum relaxáció nélküli) és szennyezett (erős momentum relaxáció) határesetekben. [T2]
3. A sztochasztikus modell használatával tanulmányoztam a spin-relaxáció teljes fázisterét; nevezetesen a spin-pálya kölcsönhatás erősségének, eloszlásának és

a momentum relaxáció erősségének függvényében. Ezáltal azonosítottam két új spin relaxációs tartományt: egyikben a spin relaxáció erősen nem exponenciális jellegű, a másikban a spin relaxáció mértéke lényegében a momentum relaxációval megegyező. Ezzel együtt találtam egy érdekes párhuzamot a spin relaxáció elmélete és az NMR spektroszkópiában ismert mozgási keskenyedés elmélete között. A sztochasztikus modell segítségével spin szuszceptibilitást számoltam különböző spin pálya kölcsönhatásokra. [T2]

4. Kifejlesztettem egy intuitív modellt az Elliott-Yafet és D'yakonov-Perel' spin relaxációs mechanizmusok egyesítésére. Megmutattam, hogy a két elméletet leíró Hamilton-operátorok egymásba transzformálhatók. Megmutattam, hogy az ún. általánosított Elliott-Yafet elmélet eredménye – ami az erős momentum-relaxáció esetére lett kidolgozva – közvetlenül megkapható a D'yakonov-Perel' megközelítésből. [T3]
5. Megmutattam, hogy az EY és DP elméletek intuitív egyesítése nem csak bepillantást nyújt a két elmélet közeli kapcsolatába, hanem lehetővé teszi azt is, hogy numerikusan spin relaxációs időket számoljunk a DP elmülethez kifejlesztett sztochasztikus módszerrel inverzió szimmetrikus anyagokban is. Ennek a megközelítésnek bemutattam egy alkalmazását a MgB_2 -ban kísérletileg meghatározott spin relaxációs

idők sikeres számításával. Ennek a fontosságát az adja, hogy a MgB_2 -ban a momentum relaxáció jelentős, így nem tárgyalható a hagyományos Elliott-Yafet modell keretein belül. [T3]

6. Kifejlesztettem egy intuitív numerikus eszközt, ami lehetővé teszi a valódi spin relaxáció és fázisvesztés szétválasztását. A módszer lényegében a Loschmidt-echo elvén működik, azaz egy adott időpontban közép-pontosan tükrözi a beépített mágneses tér hatását és nyomon követi a spin sokaság mágnesezettségének visszatérését egy ún. Loschmidt-*echo* formájában. Megmutattam, hogy a Loschmidt-echo burkolója visszaadja a valódi – azaz fázisvesztés nélküli – spin relaxációt. [T4]

Tudományos közlemények

A tézispontokhoz kapcsolódó publikációk:

- [T1] L. Szolnoki, A. Kiss, L. Forró, and F. Simon: *Empirical Monod-Beuneu relation of spin relaxation revisited for elemental metals*, Physical Review B **89**, 115113 (2014).
- [T2] L. Szolnoki, A. Kiss, B. Dóra, and F. Simon: *Spin-relaxation time in materials with broken inversion symmetry and large spin-orbit coupling*, Scientific Reports **7**, 9949 (2017).
- [T3] L. Szolnoki, B. Dóra, A. Kiss, J. Fabian, and F. Simon: *Intuitive approach to the unified theory of spin relaxation*, Physical Review B **96**, 245123 (2017).
- [T4] L. Szolnoki, *et al.* manuscript in preparation

További tudományos közlemények

- [T5] G. Fábrián, B. Dóra, Á. Antal, L. Szolnoki, L. Korcuz, A. Rockenbauer, N. M. Nemes, L. Forró, and F. Simon: *Testing the Elliott-Yafet spin-relaxation mechanism in KC_8 : A model system of biased graphene*, Physical Review B **85**, 235405 (2012).

- [T6] A. Kiss, L. Szolnoki, and F. Simon: *The Elliott-Yafet theory of spin relaxation generalized for large spin-orbit coupling*, Scientific Reports **6**, 22706 (2016).
- [T7] B. G. Márkus, L. Szolnoki, D. Iván, B. Dóra, P. Szirmai, B. Náfrádi, L. Forró, and F. Simon: *Anisotropic Elliott-Yafet theory and application to KC_8 potassium intercalated graphite*, Physica Status Solidi B **253**, 2293 (2016)

Hivatkozások

- [1] G. E. Moore, „Cramming more components onto integrated circuits,” *Electronics*, vol. 38, p. 4, 1965.
- [2] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, and D. M. Treger, „Spintronics: A spin-based electronics vision for the future,” *Science*, vol. 294, no. 5546, pp. 1488–1495, 2001.
- [3] I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, „Spintronics: Fundamentals and applications,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 76, pp. 323–410, Apr 2004.
- [4] R. J. Elliott, „Theory of the Effect of Spin-Orbit Coupling on Magnetic Resonance in Some Semiconductors,” *Phys. Rev.*, vol. 96, pp. 266–279, 1954.

- [5] Y. Yafet, „g-factors and spin-lattice relaxation of conduction electrons,” *Solid State Physics*, vol. 14, pp. 1–98, 1963.
- [6] M. Dyakonov and V. Perel, „Spin relaxation of conduction electrons in noncentrosymmetric semiconductors,” *Soviet Physics Solid State, USSR*, vol. 13, no. 12, pp. 3023–3026, 1972.
- [7] G. E. Pikus and A. N. Titkov, *Spin relaxation under optical orientation in semiconductors*, pp. 73–131. Elsevier, Amsterdam, 1984.
- [8] L. Szolnoki, A. Kiss, L. Forró, and F. Simon, „Empirical monod-beuneu relation of spin relaxation revisited for elemental metals,” *Phys. Rev. B*, vol. 89, p. 115113, Mar 2014.
- [9] L. Szolnoki, A. Kiss, B. Dóra, and F. Simon, „Spin-relaxation time in materials with broken inversion symmetry and large spin-orbit coupling,” *Sci. Rep.*, vol. 7, 2017.
- [10] L. Szolnoki, B. Dóra, A. Kiss, J. Fabian, and F. Simon, „Intuitive approach to the unified theory of spin relaxation,” *Phys. Rev. B*, vol. 96, p. 245123, 2017.
- [11] P. Boross, B. Dóra, A. Kiss, and F. Simon, „A unified theory of spin-relaxation due to spin-orbit coupling in metals and semiconductors,” *Scientific Reports*, vol. 3, p. 3233, 2013.