



Universidade Federal Rural de Pernambuco  
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação  
Departamento de Física

Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada

Flutuações do ângulo spin Hall em dispositivos desordenados

*Fernando Augusto Fernandes de Santana*

Dissertação de Mestrado

Recife - PE

03 de Agosto de 2021

Universidade Federal Rural de Pernambuco

Departamento de Física

*Fernando Augusto Fernandes de Santana*

**Flutuações do ângulo spin Hall em dispositivos desordenados**

Trabalho apresentado ao Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada do Departamento de Física da Universidade Federal Rural de Pernambuco como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Física Aplicada.

**Orientador: Dr. Anderson Luiz da Rocha e Barbosa**

**Recife - PE**

**03 de Agosto de 2021**

*"Milagres só acontecem para aqueles que nunca desistem!"*

*(Emporio Ivankov - **Eiichiro Oda**)*

Dedico todo o meu sucesso, e todas as minhas conquistas, a minha mãe Julieta Fernandes Lima.

---

# AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, pela minha vida, e por me ajudar a ultrapassar todos os obstáculos encontrados ao longo dessa jornada. A minha mãe e meus familiares que me incentivaram nos momentos difíceis, e compreenderam a minha ausência enquanto me dedicava à realização deste trabalho.

Ao professor Dr. Anderson Luiz da Rocha e Barbosa pelos ensinamentos que me permitiram obter o melhor desempenho no meu processo de formação profissional e todo o apoio pessoal que sem ele seria impossível a realização deste trabalho.

Aos meus amigos e companheiros de curso que sempre me trazem boas lembranças.

E por fim, dedico esse trabalho ao meu primo Renato Alves(in memoriam) e meu amigo Max Bruno da Fonseca(in memoriam), que infelizmente a vontade de Deus não permitiu que ambos conseguissem me ver alcançar o fim dessa jornada.

---

# RESUMO

Investigamos um dispositivo mesoscópico desordenado que suporta a interação spin órbita. O sistema é ligado a um dispositivo de quatro terminais. Nesse contexto simulamos o efeito Hall de spin afim de compreender as flutuações do ângulo spin Hall. Mostramos analiticamente e numericamente as flutuações da corrente de spin, da corrente de carga e do ângulo spin Hall. O nosso trabalho mostra um excelente acordo entre os resultados numéricos, analíticos e experimentais. Todos os resultados indicam a relevância dos parâmetros microscópicos para o transporte eletrônico durante o processo de conversão da corrente de carga em corrente de spin, descrito pelo ângulo hall.

**Palavras-chave:** Spintrônica, Transporte Eletrônico, Flutuação do ângulo Hall, Efeito Hall de spin.

---

# ABSTRACT

We investigate a disordered mesoscopic device that supports spin-orbit interaction. The system is connected to a four-terminal device. We simulate the spin Hall effect in order to understand the fluctuations of the spin Hall angle. We show analytically and numerically the fluctuations of the spin current, the charge current, and the spin Hall angle. Our work shows excellent agreement between the numerical, analytical and experimental results. All results indicate the relevance of the microscopic parameters for the electronic transport during the conversion process from charge current to spin current, described by the Hall angle.

**Keywords:** Spintrònics, Electronic transportation , Hall angle fluctuation, Spin Hall effect.

---

# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Conceitos preliminares . . . . .	5
1.1.1	Gás de elétrons bi-dimensional (2DEG) . . . . .	5
1.2	Uma breve descrição sobre os próximos capítulos . . . . .	8
1.2.1	Capítulo 2 . . . . .	8
1.2.2	Capítulo 3 . . . . .	8
1.2.3	Capítulo 4 . . . . .	8
1.2.4	Capítulo 5 . . . . .	9
<b>2</b>	<b>Função de Green e o formalismo de transporte</b>	<b>10</b>
2.1	Funções de Green e a equação de Schrodinger . . . . .	10
2.2	Densidade de estados e função de Green . . . . .	14
2.2.1	Cadeia finita e o problema de dois sítios idênticos . . . . .	15
2.2.2	Cadeia linear semi-infinita e infinita . . . . .	17
2.2.3	Cadeia Infinita através do método tight-binding . . . . .	21
2.3	Funções de Green, Matriz S e os coeficientes de transmissão. . . . .	24
<b>3</b>	<b>Efeito Hall de spin</b>	<b>29</b>



3.1	Efeito Hall Clássico . . . . .	30
3.1.1	Formalismo de Drude . . . . .	30
3.1.2	Formalismo de Landauer-Büttiker . . . . .	33
3.2	Efeito Hall de spin . . . . .	37
3.2.1	Interação spin órbita. . . . .	38
3.2.2	Efeito Hall de spin através do formalismo de Landauer-Büttiker. . . . .	44
<b>4</b>	<b>Resultados</b>	<b>50</b>
4.1	Dispositivo de quatro terminais . . . . .	51
4.2	Corrente Hall de spin $I^s$ em função da desordem de Anderson . . . . .	52
4.2.1	Corrente de carga $I^C$ em função da desordem de Anderson . . . . .	54
4.2.2	Ângulo spin-Hall $\Theta_{sH}$ em função da desordem de Anderson . . . . .	56
<b>5</b>	<b>Conclusões e perspectivas futuras</b>	<b>60</b>
	<b>Referências</b>	<b>68</b>

---

# LISTA DE FIGURAS

1.1	Lei de Moore, número de transistores presente em um chip em função da quantidade de anos. A figura foi retirada da referência [1]. . . . .	2
1.2	Na imagem A temos a estrutura do experimento, utilizando de um filme condutor de GaAs e na imagem B, a medida experimental da acumulação de spin up e down como função do campo magnético. Imagem retirada da referência [2].	4
2.1	Representação de uma cadeia finita com dois átomos idênticos, $t$ e $t^*$ representa a taxa de transição de um elétron entre os átomos 1 e 2. . . . .	14
2.2	A Densidade de estados $\rho$ em função da energia $w$ , perceba que a densidade de estados apresenta picos nos dois estados possíveis de energia do sistema, $\eta = 0.01$ , $t = 1$ e $\epsilon_0 = 0$ . . . . .	17
2.3	Representação da cadeia semi-infinita com $n$ átomos ( $1, n \rightarrow \infty$ ). . . . .	18
2.4	Representação da contribuição da rede através da renormalização do sistema.	18
2.5	A densidade de estados para um sistema semi-infinito obtida através das funções de Green, note que a densidade de estados é contínua devido ao número ilimitado de estados possíveis, $\eta = 0$ , $t = 2$ e $\epsilon_0 = 0$ , $\rho(w = 0) = \rho_{max} = \frac{1}{\pi}$ . . .	19
2.6	Duas cadeias semi-infinitas usadas para representar uma cadeia infinita. . .	20

2.7	Densidade de estados para uma cadeia infinita, obtida através das funções de Green, usamos parâmetros genéricos apenas para obter a forma da curva, $t = 1, \epsilon_0 = 0$ e $\eta = 0.001$ . . . . .	21
2.8	Densidade de estados para uma cadeia infinita, obtida através tanto das funções de Green curva azul, e do TB model curva preta, $t = 1, \epsilon_0 = 0$ e $\eta = 0.001$ . . . . .	23
2.9	As ondas em azul representam um conjunto de ondas se afastando do ponto de excitação, enquanto as ondas em verde representam um conjunto de ondas se aproximando do ponto de excitação localizado em $x = x'$ . . . . .	25
2.10	Representação de um sistema com um fio condutor entre dois reservatórios ideais. . . . .	26
3.1	Representação de um dispositivo com 4 terminais. Em azul temos a representação dos reservatórios. Em cinza temos os guias ideais que conectam os reservatórios ao centro espalhador que está em preto. . . . .	33
3.2	(a) Representação do dispositivo com 4 terminais como representada na figura 3.1. Probabilidade de transmissão em função do campo magnético perpendicular à amostra (b) do terminal 1 para o 3, (c) do terminal 1 para o 4 e (d) do terminal 1 para o 2. Figura retirada da referência [3] . . . . .	35
3.3	Comparação entre o resultado experimental (Linha pontilhada) e a equação 3.17 (Linha contínua), da resistência hall em função do campo magnético, figura extraído da referência [3] . . . . .	37
3.4	A esquerda temos a dispersão da energia para o caso sem ISO ( $\lambda_R = 0$ ). A direita temos a dispersão da energia para o Hamiltoniano com ISO ( $\lambda_R \neq 0$ ). . . . .	42
3.5	A imagem mostra o resultado obtido para a média e desvio da condutância spin Hall em função da desordem de Anderson, para diferentes valores de interação spin-órbita $\lambda_R$ . Os valores referentes ao parâmetro de Rashba aumentam de baixo para cima, figura retirada da referência [4]. . . . .	49

4.1	É natural no contexto das simulações eletrônicas que representemos um 2DEG através uma rede quadrada. As linhas sólidas representam as possíveis trajetórias dos elétrons na rede. A região central destacada em azul é a região de espalhamento, onde foi adicionado a desordem e a interação spin-órbita. a seta preta representa a corrente longitudinal enquanto as correntes de spin up e down são representadas pela seta vermelha e azul respectivamente. . . . .	51
4.2	As figuras (a) e (c) mostram a média da corrente de spin enquanto (b) e (d) mostram o desvio da corrente de spin em função da desordem $U$ . As figuras (a) e (b) são para diferentes valores de interação spin órbita mantendo a energia fixa $E = 1$ , enquanto (c) e (d) são para valores distintos de energia mantendo a interação spin órbita fixa $\lambda = 0.8$ . Em ambos os casos, o desvio da corrente Hall de spin recupera os valores universais obtidos por Ren [4]. . . . .	53
4.3	As figuras (a) e (c) mostram a média da corrente de carga, enquanto as figuras (b) e (d) mostram o desvio da corrente de carga em função da desordem $U$ . As medidas (a) e (b) são para diferentes valores de $\lambda$ com energia fixa $E = 1$ , em (c) e (d) temos diferentes valores de $E$ fixando o valor da interação em $\lambda = 0.8$ . Em ambos os casos, o resultado do desvio máximo da corrente de carga é $rms = [I^c] = 0.48$ (linha tracejada). . . . .	54
4.4	As figuras (a) e (c) mostram a média do ângulo spin Hall, enquanto as figuras (b) e (d) mostram o desvio do ângulo spin Hall em função da desordem $U$ . As medidas (a) e (b) são para diferentes valores de $\lambda$ com energia fixa $E = 1$ , em (c) e (d) temos diferentes valores de $E$ fixando o valor da interação em $\lambda = 0.8$ . . . . .	57
4.5	(a) os pontos azuis são os desvios máximos retirado da figura 4.4 em função do número de canais a linha pontilhada é um ajuste dos dados numéricos. (b) os coeficientes de transmissão em função da energia. . . . .	58
4.6	A figura mostra SHA $\Theta_{sH}(\%)$ em função da condutividade adimensional $\sigma$ . Os símbolos: círculo, estrela, diamante e triangulo pra cima foram retirados da referência [5]. Os símbolos; quadrado, $x$ e triangulo para baixo foram obtidos das referências [6–9]. A linha azul é a equação 4.5. . . . .	59

---

---

# CAPÍTULO 1

---

## INTRODUÇÃO

A eletrônica surge por volta de 1907 com o surgimento da válvula de tríodo, que foi desenvolvida através do trabalho de Lee de Forest [10]. A válvula permitia o controle da corrente de carga através do controle da tensão entre o cátodo e o ânodo presente na válvula, através desse dispositivo se tornou possível o controle e a manipulação da corrente de carga dando origem assim a eletrônica. A válvula de tríodo teve desde de sua criação várias aplicações importantes, como por exemplo, a construção do rádio receptor desenvolvido por Edwin Howard Armstrong por volta de 1915 e a transmissão de sinais a distância desenvolvida por Guglielmo Marconi-Landel de Moura também na primeira metade da década.

Por volta de 1920 a mecânica quântica começava a se estabelecer como uma das principais áreas da física, tudo isso graças ao trabalho de Erwin Schrödinger e Werner Heisenberg [11]. Desse modo, com o avanço da mecânica quântica, os físicos retomaram os trabalhos que visavam compreender a origem das principais características macroscópicas dos materiais através da compreensão da sua estrutura microscópica. Sendo assim, compreender a origem microscópica resulta numa melhor compreensão da origem das principais propriedades dos materiais.

Através do desenvolvimento da mecânica quântica e da tecnologia da época, se tornou possível a invenção do transistor, desenvolvido em 1947 por W. Shockley, J. Bardeen e W.

Brattain [12,13]. O transistor, que era formado por junções de semicondutores, acabou por substituir a válvula de Lee de Forest. Como foi descrito, a válvula controlava a corrente de carga através das tensões nos terminais, já o transistor possibilitou o controle da corrente de carga através de outra corrente introduzida no material.

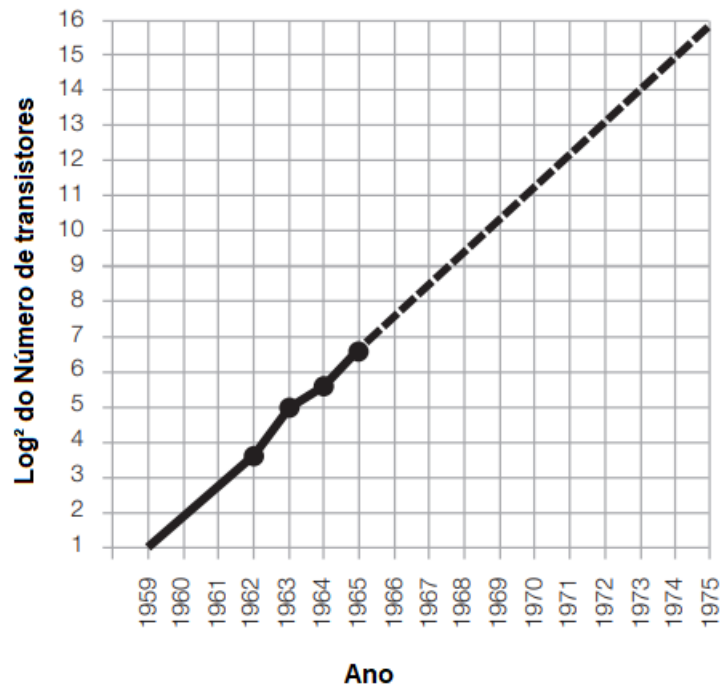


Figura 1.1: Lei de Moore, número de transistores presente em um chip em função da quantidade de anos. A figura foi retirada da referência [1].

Graças ao desenvolvimento de W. Shockley, J. Bardeen e W. Brattain, surgiu a concepção da eletrônica como conhecemos hoje, ou seja, a criação do transistor e sua miniaturização permitiu a partir da década de 1950 uma revolução e um rápido desenvolvimento da eletrônica. Em 1958 J. Kilby desenvolveu através de uma série de processos físico-químicos o que veio a ser chamado de circuito integrado [14], dando origem ao chip. É evidente que o processo de miniaturização do transistor permitiu que o número de transistores presentes em um determinado chip fosse cada vez maior.

Em abril de 1965, surge a lei de Moore [1,15]. A lei surge das observações e previsões feitas por Gordon E. Moore a partir da figura 1.1, aonde o mesmo percebeu que o número de transistores presentes nos chips dobraria a cada 18 meses. Inicialmente a lei de Moore não passava de uma

previsão, entretanto, acabou por incentivar as indústrias que produziam chips a desenvolver chips cada vez mais poderosos, ou seja, chips com mais transistores e dessa forma transistores cada vez menores. É evidente que existe um limite físico inerente associado as dimensões dos transistores e isso por sua vez cria um limite para o desenvolvimento tecnológico. Desse modo os cientistas precisaram encontrar novas perspectivas para o desenvolvimento tecnológico.

Como sabemos a eletrônica se baseia no transporte de carga elétrica. Entretanto além da carga elétrica os elétrons também tem spin [11]. Uma nova perspectiva surge quando se torna possível a manipulação da corrente de spin do elétron. Através do uso do spin surge a spintrônica [16].

A spintrônica tem sua primeira e grande aplicação nos dispositivos de gravação [16], permitindo que o leitor se torne cada vez menor aumentando assim a capacidade de armazenamento dos dispositivos de gravação. Essa aplicação se tornou possível graças ao trabalho de A. Fert em conjunto com o P. Grunberg por volta de 1988 [17], que descobriram o que veio a ser chamado de Magnetorresistência gigante.

A spintrônica deu origem a produção de tecnologia baseada na manipulação do spin do elétron. Perceba que mesmo com a origem da eletrônica sendo quase 100 anos antes, demorou muito para que os dispositivos chegassem as dimensões nas quais o spin torna-se relevante. Essa dificuldade surge do fato das amostras serem muito maiores do que o comprimento de coerência de fase, fazendo com que os efeitos de interferência não sejam relevantes para a descrição do transporte do elétron. Desse modo, as interações deixam de ser relevantes para o elétron durante o transporte através da amostra. Entretanto com a necessidade da miniaturização dos transistores surgiram amostras com as dimensões da ordem do comprimento de coerência de fase tornando possível o estudo da corrente de spin.

Em 1971 M. I. Dyakonov e V. I. Perel previram o efeito Hall de spin (SHE) [18] que será introduzido no capítulo 3 dessa dissertação. Em 1999 J. E. Hirsch [19] propôs um experimento para gerar e detectar uma corrente de spin em um metal paramagnético. Apenas em 2004, 30 anos após as previsões de Dyakonov e Perel, se tornou possível a observação experimental do efeito Hall de spin, graças ao trabalho de Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, e D. D. Awschalom. Eles conseguiram detectar o acúmulo de elétrons polarizados nas bordas de uma amostra semicondutora [2], os resultados obtidos podem ser vistos na figura 1.2. A

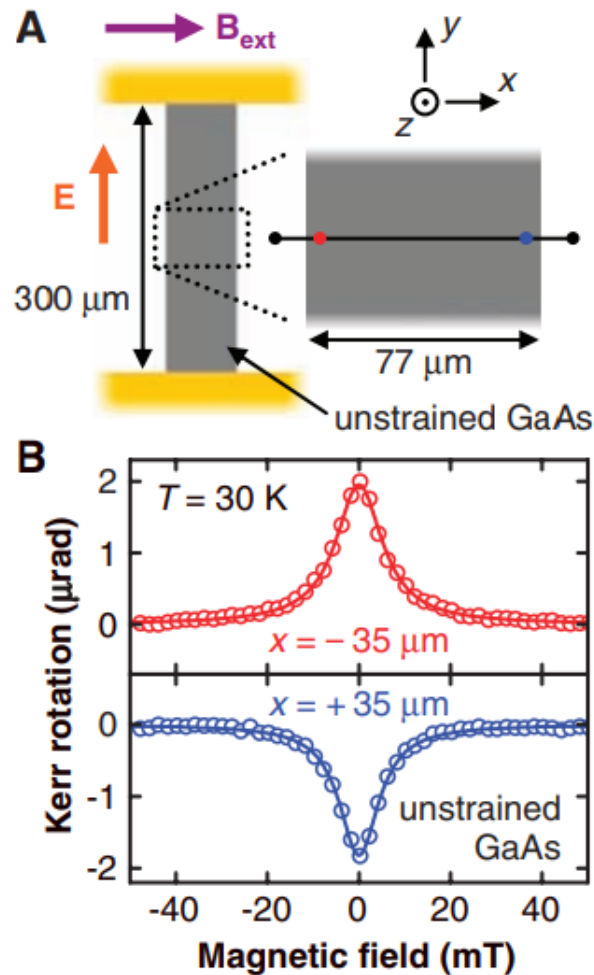


Figura 1.2: Na imagem A temos a estrutura do experimento, utilizando de um filme condutor de GaAs e na imagem B, a medida experimental da acumulação de spin up e down como função do campo magnético. Imagem retirada da referência [2].

figura (A) representa o arranjo experimental, o qual é constituído de um filme condutor de AsGa submetido a um campo elétrico. Observe que na ampliação temos a representação do acúmulo de spin nas bordas do material. O dispositivo foi construído de modo que as dimensões sejam da ordem de micrômetros, garantindo assim que a contribuição do spin seja relevante na amostra. A figura (B) consiste da medida experimental do acúmulo de spin up e down em função do campo magnético. Perceba que a polarização máxima acontece a campo magnético nulo de acordo com as previsões de I. Dyakonov.

Atualmente existem algumas formas de se produzir e manipular a corrente de spin, sendo



elas, o efeito Hall de spin [2, 20, 21], efeito spin pumping [22] e o efeito Seebeck [23–25]. Nesse trabalho iremos investigar as principais características do processo de conversão da corrente de carga em corrente de spin através do efeito Hall de spin. Além disso, iremos investigar as flutuações do ângulo spin Hall (ASH) e suas propriedades. O ASH é a grandeza que quantifica a eficiência do processo de conversão descrito anteriormente. Dado sua importância experimental [6–9] e o pouco conhecimento sobre os efeitos de desordem [26] sobre o ASH, motivaram o nosso grupo a desenvolver um estudo acerca das flutuações do ASH em função da desordem tanto do ponto de vista analítico quanto do ponto de vista numérico [27]. Todos os nossos resultados estão de acordo com os resultados experimentais presentes na literatura, como veremos no capítulo 4.

## 1.1 Conceitos preliminares

### 1.1.1 Gás de elétrons bi-dimensional (2DEG)

A física mesoscópica [28] baseia-se em um regime específico, onde acontecem fenômenos que podem ser descritos em uma interface entre a física clássica e quântica. Um material muito comum nesse contexto é o gás de elétrons bidimensional (GaAs-AlGaAs). Essa estrutura nos permite estudar um dispositivo em que a condução ocorre na interface da junção GaAs-AlGaAs. Isso ocorre devido a uma diferença entre a energia de Fermi na camada do GaAs em comparação com a do AlGaAs. Essa diferença permite que os elétrons transbordem do AlGaAs (maior energia de Fermi) em direção ao GaAs (menor energia de Fermi). A energia de Fermi está dentro da banda de condução, e essa fina camada que surge na interface é o que conhecemos por gás de elétrons bidimensional (2DEG).

O 2DEG, por mais versátil que seja, ainda encontra muitos empecilhos quando se discute possíveis aplicações na indústria. Isso surge devido ao fato de que esse material é muito sensível a temperatura [29]. Além disso, se faz necessário conhecer as escalas de comprimento em que os efeitos são válidos. Essas escalas por sua vez caracterizam os materiais com relação aos principais efeitos que contribuem para possíveis aplicações na spintrônica. Desse modo, conhecer esses comprimentos característicos é de extrema importância na caracterização

dos materiais que por sua vez possam ser construídos e utilizados em futuras aplicações na indústria. Veremos a seguir as escalas de comprimento mais relevantes, seguiremos a referência [29].

· **Comprimento de onda de Fermi  $\lambda_f$**

Os elétrons que contribuem para a condutância do dispositivo são os elétrons que estão em torno da superfície de Fermi, esses elétrons mais energéticos possuem um comprimento de onda característico o qual é inversamente proporcional a raiz quadrada da densidade eletrônica  $n_s$ . Esse comprimento de onda é denominado comprimento de onda de Fermi

$$\lambda_f = \frac{2}{k_f} = \sqrt{\frac{2}{n_s}}, \quad (1.1)$$

onde  $k_f$  é o vetor de onda de Fermi.

· **Livre caminho médio ( $l_e$ )**

Uma característica importante é o fato de que um elétron se movendo em um cristal se comporta efetivamente como um elétron no vácuo, note que os efeitos da interação são atribuídos a massa do elétron. Ao introduzirmos impurezas no cristal, ou seja, dizer que o elétron passa a interagir com a rede (interação elétron-fônon), essas novas interações com a rede fazem com que o elétron sofra "colisões" que produzem uma randomização do momento linear do elétron. Sendo assim o livre caminho médio  $l_e$  é a distância que os elétrons percorrem sem que seu momento inicial seja destruído

$$l_e = v_f \tau_m, \quad (1.2)$$

onde  $v_f$  é a velocidade de Fermi e  $\tau_m$  é o tempo de relaxação do momento.

· **Comprimento de relaxação de fase ( $l_\phi$ )**

Do mesmo modo que fizemos para o livre caminho médio, podemos fazer para o comprimento de coerência de fase. Entretanto a informação obtida através do comprimento de relaxação

de fase é um pouco mais sutil. Perceba que as funções de onda que descrevem o elétron em um determinado material carregam um termo de fase, esse termo por sua vez é o que torna o sistema sensível aos efeitos de interferência que surgem no processo de espalhamento.

O comprimento de coerência de fase é a distância que os elétrons percorrem antes de perderem a coerência de fase, sendo assim, antes da fase inicial ser completamente esquecida. Sua definição é dada por

$$l_\phi = \sqrt{D\tau_\phi}, \quad (1.3)$$

Onde  $D$  é chamado de coeficiente de difusão e  $\tau_\phi$  é o tempo de relaxação de fase, que descreve o tempo que o elétron mantém a sua coerência de fase, enquanto se desloca através do sistema.

Para se construir uma amostra mesoscópica precisamos garantir que as dimensões da mesma sejam maiores que as do comprimento de onda de Fermi  $\lambda_f$  e menores que o comprimento de coerência de fase  $l_\phi$ , garantindo assim que a amostra se encontre entre o regime quântico e clássico. Podemos caracterizar três regimes de transporte que podem ser estudados em um condutor através de sua dimensão, o regime de transporte balístico, difusivo e isolante.

O regime de transporte balístico é o regime em que o comprimento da amostra é menor que o livre caminho médio ( $L < l_e$ ). Se uma amostra é construída no regime de transporte balístico, podemos dizer que nessa amostra o elétron sofrerá poucas colisões de modo que o seu momento linear não seja alterado. Ao introduzirmos impurezas na amostra, estaremos interessados no regime difusivo. O qual é definido de modo que a amostra tenha um comprimento maior que o livre caminho médio ( $L > l_e$ ). Assim, um elétron se deslocando através da amostra sofrerá sucessivas colisões alterando o seu momento inicial. Por fim temos o regime isolante, no qual os elétrons ficam presos nos sítios devido a intensidade das impurezas presentes na amostra. Os principais resultados presentes nessa dissertação se encontram no regime difusivo. Entretanto, perceba que durante as simulações a amostra é submetida aos três regimes descritos anteriormente.

## 1.2 Uma breve descrição sobre os próximos capítulos

### 1.2.1 Capítulo 2

No capítulo 2 será apresentado uma breve revisão e algumas aplicações das funções de Green o qual será usado em nossos cálculos numéricos. Iniciaremos apresentando os conceitos básicos e propriedades desse conjunto de funções. Após a introdução das funções de Green iremos aplicar as equações obtidas a um conjunto de exemplos que permitem uma solução exata. Além disso, iremos conectar as funções de Green com os coeficientes de transmissão que irá possibilitar descrever a corrente de carga e a corrente de spin do sistema.

### 1.2.2 Capítulo 3

No capítulo 3 iremos apresentar uma revisão sobre o efeito Hall de spin (SHE). Para isso iniciaremos com uma apresentação do efeito Hall clássico através do modelo de Drude para metais, apresentando a origem do coeficiente Hall. Em seguida, iremos reavaliar o efeito Hall clássico através do formalismo de Landauer-Büttiker, revisitando o resultado experimental obtido em 1992 para um dispositivo de 4 terminais [3]. Na seção seguinte, iremos introduzir a interação spin órbita e obter a relação de dispersão. Além disso, mostraremos como o efeito do interação spin-órbita produz um desvio no elétron. Considerando a interação spin-órbita do tipo Rashba mostraremos como ocorre o efeito Hall de spin em uma amostra com 4 terminais, e por fim apresentaremos um breve resumo sobre as flutuações universais da corrente de spin.

### 1.2.3 Capítulo 4

O capítulo 4 apresenta os resultados obtidos na dissertação. Este capítulo une os principais conceitos mostrados em todos os capítulos anteriores. Através de simulações numéricas que foram realizadas através do pacote Kwant [30], descrevemos o efeito Hall de spin descrito no capítulo 3 em uma rede quadrada, com a presença da desordem de Anderson e da interação spin-órbita. resgatamos o resultado obtido por W. Ren [4], para a flutuação da corrente de spin. E concluímos os principais fatores que contribuem para a flutuação do angulo spin

Hall.

### **1.2.4 Capítulo 5**

É o capítulo de conclusão e por sua vez finaliza a nossa dissertação, onde reafirmamos a importância do estudo desenvolvido e dos resultados obtidos neste trabalho. Apresentaremos também perspectivas acerca de novos trabalhos, estendendo nosso resultado e propondo se possível a solução de novos problemas.

---

---

## CAPÍTULO 2

---

# FUNÇÃO DE GREEN E O FORMALISMO DE TRANSPORTE

Existem inúmeras referências sobre aplicações das funções de Green ao formalismo de transporte. Três referências básicas, foram fundamentais para a discussão presente neste capítulo Mariana M. Odashima [31], Supriyo Datta [29] e Dmitry A. Ryndyk [32]. Usaremos as funções de Green para obter os coeficientes de transporte que são essenciais para a descrição do efeito Hall de spin em dispositivos desordenados.

### 2.1 Funções de Green e a equação de Schrodinger

Naturalmente as funções de Green surgem como um poderoso método para solução de equações diferenciais não-homogêneas. Em física suas aplicações são numerosas [33–35], talvez a mais comum seja a sua aplicação em eletrodinâmica clássica [36, 37], entretanto o nosso interesse é aplicá-la em sistemas quânticos. Sendo assim temos que compreender como obter a solução da equação de Schrödinger em termos da função de Green. Como sabemos, a

equação de Schrödinger dependente do tempo é

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \psi(\vec{r}, t). \quad (2.1)$$

Podemos reescrever a equação de Schrödinger de maneira que ela tenha a forma de uma equação não-homogênea

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right) \psi(\vec{r}, t) = V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t). \quad (2.2)$$

Perceba que o termo de fonte da nossa equação não-homogênea é o potencial  $V(\vec{r}, t)$ , que descreve as principais interações do sistema. A solução da equação 2.2 é obtida através da função de Green

$$\psi(\vec{r}, t) = \int G(\vec{r}, t; \vec{r}', t') \psi(\vec{r}', t'). \quad (2.3)$$

A função de Green pode ser interpretada como um propagador [31], que por sua vez descreve como uma perturbação no tempo  $t'$  evolui até um tempo  $t$ , ou seja, ela tem como função descrever como um determinado estado  $\psi(\vec{r}', t')$  evolui até o estado  $\psi(\vec{r}, t)$ . Sendo assim, é natural que possamos escrever a função de Green em termos do operador evolução temporal

$$G(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = -i\theta(t - t') \langle \vec{r} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t')} | \vec{r}' \rangle, \quad (2.4)$$

onde a função  $\theta(t - t')$ , é a função de Heaviside ou função degrau. A mesma deve ser compreendida como um operador de ordenação temporal, que define a ordem com que os eventos acontecem no sistema. É apropriado defini-la da seguinte forma

$$\theta(t - t') = -\frac{1}{2i\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dw \frac{e^{-iw(t-t')}}{w + i\eta} = \begin{cases} 1, t - t' > 0 \\ 0, t - t' < 0 \end{cases}. \quad (2.5)$$

Suponha uma base conhecida de autoestados do Hamiltoniano  $\hat{H}$ , de modo que podemos escrever a função de Green em termos das funções de onda na representação dos autovetores dessa base

$$G(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \left\langle \theta(t - t') [\Psi(\vec{r}, t), \Psi^\dagger(\vec{r}', t')] \right\rangle. \quad (2.6)$$

É comum no contexto da eletrônica reescrever as funções de Green em termos dos operadores de criação e aniquilação. Como vamos descrever redes discretas a localização do elétron na rede é descrita pela sua presença em um dos sítios que compõem a rede, então nos resta discutir quando o elétron surge ou desaparece de um determinado sítio da rede, sendo assim, podemos reescrever a função de Green em termos apenas dos operadores criação e aniquilação

$$G_{ij}^c = -i \left\langle \theta(t - t') [\hat{C}_i(t), \hat{C}_j^\dagger(t')] \right\rangle. \quad (2.7)$$

$G_{ij}^c$  é denominada função de Green casual, ela descreve a propagação do elétron, de modo que, os operadores  $\hat{C}_i(t)$  e  $\hat{C}_j^\dagger(t')$  indicam a localização do elétron ao longo da rede.  $\hat{C}_i(t)$  é o operador aniquilação e acaba por destruir o elétron presente no sítio  $i$  no instante de tempo  $t$ , e por sua vez o operador  $\hat{C}_j^\dagger(t')$  é o operador criação e descreve o surgimento do elétron no sítio  $j$  no tempo  $t'$ .

Existem outras duas definições para as funções de Green que são importantes e de certo modo equivalentes, são chamadas de função de Green avançada ( $G_{ij}^A$ ) e retardada ( $G_{ij}^R$ ). Iremos nos referir a essas duas com mais frequência daqui para a frente, sendo assim é conveniente defini-las agora

$$G_{ij}^R = -i\theta(t - t') \left\langle \left\{ \hat{C}_i(t), \hat{C}_j^\dagger(t') \right\} \right\rangle, \quad (2.8)$$

e

$$G_{ij}^A = +i\theta(t' - t) \left\langle \left\{ \hat{C}_i(t), \hat{C}_j^\dagger(t') \right\} \right\rangle. \quad (2.9)$$



Podemos perceber que a função de Green retardada é o complexo conjugado da função de Green avançada

$$[G_{ij}^R]^* = G_{ij}^A. \quad (2.10)$$

Usando a equação 2.5 podemos escrever a transformada de Fourier para que tenhamos a representação da função de Green no domínio das energias. Para isso usaremos os operadores de criação e aniquilação levando em conta as suas respectivas evoluções temporais

$$\hat{C}_i(t) = e^{-i\varepsilon_i t} \hat{C}_i(t_0), \quad (2.11)$$

e

$$\hat{C}_i^\dagger(t') = e^{-i\varepsilon_i t'} \hat{C}_i^\dagger(t'_0). \quad (2.12)$$

Usando a regra de anti-comutação  $\{AB\} = AB + BA$ , podemos escrever as equações 2.8 e 2.9 e por fim obter a função de Green no domínio da energia [38]

$$G_{jj}^R(t, t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dw \frac{e^{-iw(t-t')}}{w - \epsilon_j + i\eta} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iw(t-t')} G_{jj}^R(w) dw, \quad (2.13)$$

ao comparar ambos os lados da equação 2.13 e usando a relação entre as funções de Green avançada e retardada, obtemos as duas funções de Green como função da energia

$$G_{jj}^R(w) = \frac{1}{w - \epsilon_j + i\eta}, \quad (2.14)$$

e

$$G_{jj}^A(w) = \frac{1}{w - \epsilon_j - i\eta}. \quad (2.15)$$

Perceba que escrevemos em função da frequência, entretanto a energia é proporcional a frequência  $E \sim w$ , de modo que não há diferença entre as duas perspectivas e vamos nos ater a discutir as funções de Green em termos da energia.

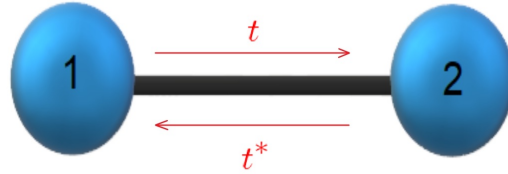


Figura 2.1: Representação de uma cadeia finita com dois átomos idênticos,  $t$  e  $t^*$  representa a taxa de transição de um elétron entre os átomos 1 e 2.

Calculando a derivada temporal [31, 38] das funções de Green, obtemos a equação de movimento descrita abaixo

$$wG_{ij}^R(w) = \delta_{ij} + \left\langle \left\langle [\hat{C}_i, \hat{H}]; \hat{C}_j \right\rangle \right\rangle, \quad (2.16)$$

desse modo podemos compreender como funciona a evolução temporal do sistema. Observe que a equação de movimento obtida não se restringe a sistemas não interagentes, porém para sistemas interagentes nem sempre é possível construir um sistema fechado de equações.

A partir de agora vamos discutir aplicações das equações até então obtidas. Observe que todos os resultados podem ser escritos em termos das funções de Green, ou seja, quando conhecemos a função de Green conseguimos obter os parâmetros físicos do sistema.

## 2.2 Densidade de estados e função de Green

Com o objetivo de aplicar as equações anteriormente apresentadas e obter as relações entre as funções de Green e os observáveis físicos vamos discutir alguns casos simples. Entre eles o problema de 2 sítios e de uma rede infinita, representado nas figuras 2.1 e 2.3.

### 2.2.1 Cadeia finita e o problema de dois sítios idênticos

O problema de dois sítios idênticos, representados na Figura 2.1, assume duas soluções, uma para cada orbital. Essas soluções devem apresentar a simetria de inversão espacial devido a simetria do sistema, sendo assim, temos dois estados possíveis, um estado ligante e outro antiligante.

O Hamiltoniano que descreve os dois sítios para o caso interagente é descrito pela equação abaixo

$$\hat{H} = \epsilon_0(\hat{C}_1^\dagger \hat{C}_1 + \hat{C}_2^\dagger \hat{C}_2) + t\hat{C}_2^\dagger \hat{C}_1 + t^* \hat{C}_1^\dagger \hat{C}_2, \quad (2.17)$$

onde  $t$  é a energia de ligação entre os sítios e  $\epsilon_0$  é a energia do sítio. Usando a equação 2.17 e as equações 2.8 e 2.9, chegamos no conjunto de equações que descreve o sistema acima

$$(w - \epsilon_0 + i\eta)G_{11}^R(w) = 1 + tG_{21}^R(w), \quad (2.18)$$

e

$$(w - \epsilon_0 + i\eta)G_{21}^R(w) = t^*G_{11}^R(w). \quad (2.19)$$

No limite em que os átomos estão distantes e não interagem entre si temos  $t \rightarrow 0$ , sendo assim, as equações para os sítios isolados se tornam

$$(w - \epsilon_0 + i\eta)g_{11}^R(w) = 1 \quad (2.20)$$

e

$$(w - \epsilon_0 + i\eta)g_{21}^R(w) = 0 \quad (2.21)$$

Vamos escrever tanto o caso não-interagente quanto o caso interagente na forma matricial, sendo assim temos

$$g^R(w) = \begin{pmatrix} g_1^R(w) & 0 \\ 0 & g_2^R(w) \end{pmatrix}, \quad (2.22)$$

para o caso interagente, considerando a simetria dos sítios  $G_{11}^R = G_{22}^R$  temos a seguinte forma matricial

$$G^R(w) = \begin{pmatrix} G_{11}^R(w) & G_{12}^R(w) \\ G_{21}^R(w) & G_{11}^R(w) \end{pmatrix}. \quad (2.23)$$

Note que através das equações 2.18, 2.19, 2.20 e 2.21 podemos escrever o caso interagente em termos do caso não interagente. Assumindo que  $tt^* = |t|^2$ , obtemos as funções de Green locais para o sistema interagente

$$G_{11}^R(w) = \frac{1}{g_1^R(w)^{-1} - |t|^2 g_1^R(w)}. \quad (2.24)$$

Em termos da energia a equação 2.24 se torna

$$G_{11}^R(w) = \frac{1}{2(w - (|t| + \epsilon_0) + i\eta)} + \frac{1}{2(w - (|t| - \epsilon_0) + i\eta)}. \quad (2.25)$$

Uma possível definição da densidade de estados é obtida através da parte imaginária da função de Green [39, 40] na região de interesse

$$\rho(w) = -\frac{1}{\pi} \Im[G_{11}^R(w)]. \quad (2.26)$$

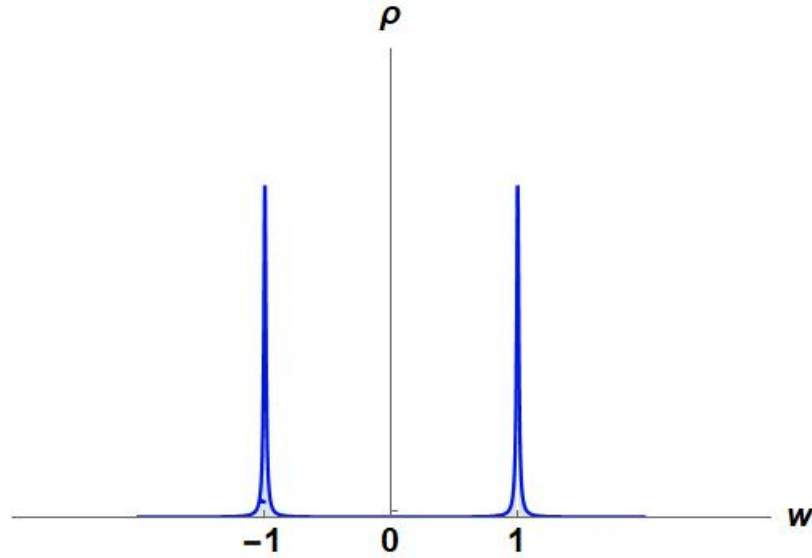


Figura 2.2: A Densidade de estados  $\rho$  em função da energia  $w$ , perceba que a densidade de estados apresenta picos nos dois estados possíveis de energia do sistema,  $\eta = 0.01$ ,  $t = 1$  e  $\epsilon_0 = 0$ .

Note que a densidade de estados  $\rho(w)$  nos permite saber como está distribuído os níveis de energia do sistema em questão. É de se esperar que no caso de uma cadeia com 2 níveis idênticos a densidade seja igualmente distribuída entre os dois possíveis estados. Usando a função de Green que obtivemos para o sistema representada na equação 2.25, substituindo na equação 2.26 e variando a energia encontramos a curva que representa a densidade de estados, representada na figura 2.2.

Vamos partir para o problema da cadeia linear semi-infinita e por sua vez obter a densidade de estados usando o mesmo algoritmo para o sistema de dois níveis que foi usado nessa seção.

### 2.2.2 Cadeia linear semi-infinita e infinita

A cadeia linear semi-infinita representada na figura 2.3 é um exemplo bastante interessante pelo fato de conseguirmos uma solução exata. Naturalmente o número infinito de sítios não nos permite a diagonalização do Hamiltoniano, de modo que vamos resolver o problema sempre comparando com o sistema de dois sítios.

Como a figura 2.4 indica, toda a contribuição dos átomos pode ser atribuída ao primeiro

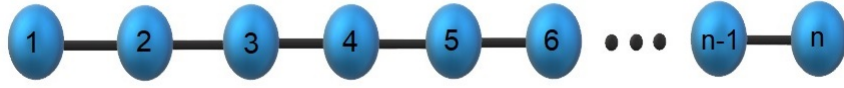


Figura 2.3: Representação da cadeia semi-infinita com  $n$  átomos ( $1, n \rightarrow \infty$ ).

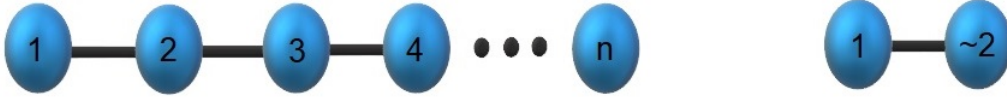


Figura 2.4: Representação da contribuição da rede através da renormalização do sistema.

vizinho, ou seja, um grande número de átomos será descrito no sítio 2, de modo que temos o 1 sítio acoplado ao 2 sítio. Sendo assim, podemos usar o conjunto de equações semelhantes as equações 2.18 e 2.19 obtidas no caso de dois sítios

$$G_{11}^R(w) = g_1^R + g_1^R t G_{21}^R(w) \quad (2.27)$$

e

$$G_{21}^R(w) = \tilde{G}_2^{R*} t^* G_{11}^R(w), \quad (2.28)$$

onde  $g_1^R$  é a função de Green não perturbada, como definida anteriormente, entretanto  $\tilde{G}_2^R$  é a função de Green perturbada que representa toda a contribuição do conjunto de átomos vizinhos na cadeia semi-infinita. É possível representar redes semi-infinitas dizendo que o  $n$ ésimo sítio é igual ao primeiro sítio da rede, de tal modo que  $\tilde{G}_2 = G_{11}^R(w)$ . Sendo assim, as equações 2.27 e 2.28 podem ser escritas como

$$G_{11}^R(w) = g_1^R + g_1^R t G_{21}^R(w) \quad (2.29)$$

e

$$G_{21}^R(w) = G_{11}^R(w) t^* G_{11}^R(w). \quad (2.30)$$

Resolvendo as equações 2.29 e 2.30 para  $G_{11}^R$ , obtemos

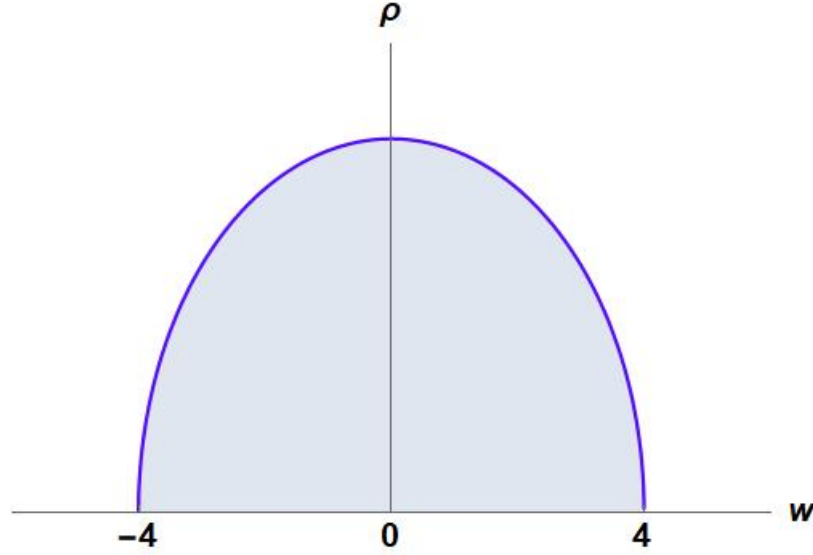


Figura 2.5: A densidade de estados para um sistema semi-infinito obtida através das funções de Green, note que a densidade de estados é contínua devido ao número ilimitado de estados possíveis,  $\eta = 0$ ,  $t = 2$  e  $\epsilon_0 = 0$ ,  $\rho(w = 0) = \rho_{max} = \frac{1}{\pi}$ .

$$G_{11}^R(w) = \frac{(w - \epsilon_0)}{t^2} \left( 1 - \frac{2ti}{(w - \epsilon_0)} \sqrt{1 - \frac{(w - \epsilon_0)^2}{4t^2}} \right). \quad (2.31)$$

Como definido na equação 2.26, temos a densidade de estados

$$\rho(w) = \frac{1}{\pi} \left\{ \frac{2}{t} \sqrt{1 - \frac{(w - \epsilon_0)^2}{4t^2}} \right\}. \quad (2.32)$$

Através da equação 2.32 obtemos a densidade de estados que por sua vez é contínua dentro do intervalo de energias disponíveis no sistema.

Agora vamos usar todas as ferramentas até aqui descritas para obter a densidade de estados para uma rede infinita. Iremos comparar o resultado obtido através das funções de Green com o resultado obtido através do método tight-binding, para a mesma rede.

Do mesmo modo que fizemos para analisar a cadeia semi-infinita, podemos construir uma cadeia infinita ao acoplar duas cadeias semi-infinitas, como representado na figura 2.6. O

acoplamento de duas cadeias semi-infinitas, pode ser representada novamente por sistema de dois sítios, onde cada sítio representa uma cadeia semi-infinita, sendo assim podemos usar a função de Green para o sistema de dois sítios

$$G_{11}^R(w) = \frac{\tilde{G}_1}{1 - \tilde{G}_1^2 t^2}. \quad (2.33)$$

Para resolver a equação 2.33 basta admitir que  $\tilde{G}_1 = G_{11}^R$  obtido através das equações 2.29 e 2.30, desse modo temos



Figura 2.6: Duas cadeias semi-infinitas usadas para representar uma cadeia infinita.

$$\tilde{G}_1(w) = \frac{1 - \sqrt{1 - 4t^2(g_1^R)^2}}{2g_1^R t^2}, \quad (2.34)$$

sendo assim, teremos a função de Green que representa o sítio da rede e por fim podemos calcular a densidade de estados para uma rede infinita

$$G_{11}^R(w) = \frac{-i}{2t \left( \sqrt{1 - \left( \frac{w - \epsilon_0 + i\eta}{2t} \right)^2} \right)}. \quad (2.35)$$

A densidade de estados é obtida através da equação 2.26, dessa forma obtemos a densidade de estado para a rede infinita usando o formalismo das funções de Green

$$\rho(w) = -\Im[G_{11}^R(w)] = \frac{1}{2t \sqrt{1 - \left( \frac{w - \epsilon_0 + i\eta}{2t} \right)^2}}. \quad (2.36)$$

A figura 2.7 corresponde ao gráfico da equação 2.36, que é a densidade de estados de uma cadeia infinita obtida através do método das funções de Green.



### 2.2.3 Cadeia Infinita através do método tight-binding

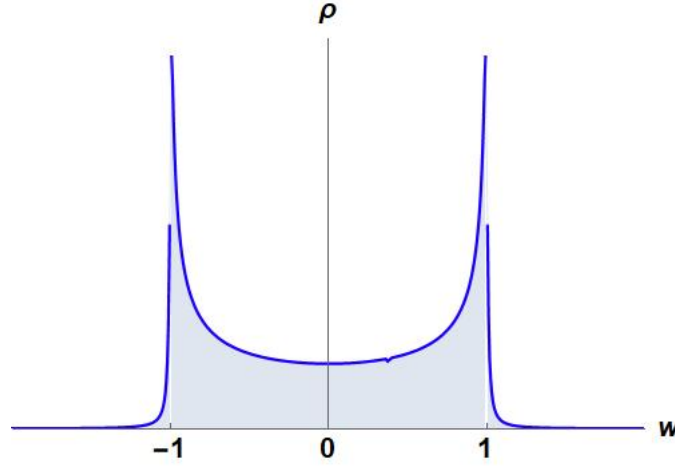


Figura 2.7: Densidade de estados para uma cadeia infinita, obtida através das funções de Green, usamos parâmetros genéricos apenas para obter a forma da curva,  $t = 1, \epsilon_0 = 0$  e  $\eta = 0.001$ .

O modelo tight-binding também conhecido como o modelo das diferenciais finitas possibilita uma abordagem computacional prática para os problemas físicos, ou seja, o modelo TB proporciona uma abordagem sistemática para resolver problemas de transporte eletrônico na presença de potenciais periódicos. Esse método consiste da discretização do Hamiltoniano da rede

$$\hat{H} = \sum_i \epsilon_i \hat{C}_i^\dagger \hat{C}_i + \sum_{i \neq j} (t_{ij} \hat{C}_i^\dagger \hat{C}_j + t_{ji} \hat{C}_j^\dagger \hat{C}_i), \quad (2.37)$$

admitindo que cada sítio contido na rede descreve um único átomo, e como a rede é constituída por átomos idênticos temos

$$t_{ij} = t_{ji} = t, \quad (2.38)$$

ignorando o termos de energia cinética  $\sum_i \epsilon_i \hat{C}_i^\dagger \hat{C}_i$ , e considerando apenas a interação de

primeiros vizinhos, reescrevemos o hamiltoniano descrito pela equação 2.37 na forma

$$\hat{H} = -t \sum_j (\hat{C}_j^\dagger \hat{C}_{j+1} + \hat{C}_j^\dagger \hat{C}_{j-1}). \quad (2.39)$$

É conveniente definir os operadores  $\hat{C}_j$  e  $\hat{C}_j^\dagger$ , no espaço dos momentos através da transformada de Fourier

$$\hat{C}_j = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_k e^{ikx} \hat{C}_k \quad (2.40)$$

e

$$\hat{C}_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_k e^{-ikx} \hat{C}_k^\dagger. \quad (2.41)$$

Considerando que a rede é discreta  $x = aj$ , e usando os operadores definidos nas equações 2.40 e 2.41 através da transformada de Fourier, conseguimos escrever a equação 2.39 como

$$\hat{H} = -t \sum_k 2 \cos(ka) \hat{C}_k^\dagger \hat{C}_k. \quad (2.42)$$

Considerando um autoestado do Hamiltoniano, podemos escrever a relação de dispersão para a rede descrita pelo Hamiltoniano da equação 2.37

$$\epsilon(k) = \epsilon_0 - 2t \cos(ka). \quad (2.43)$$

Onde  $\epsilon_0$  é o termo correspondente a energia cinética, que por sua vez é constante. Note que o termo correspondente a interação entre primeiros vizinhos é um termo periódico em  $2\pi$ .

Podemos definir a densidade de estados como a razão entre o número de estados e o comprimento da amostra  $\frac{N}{L} = \rho(\epsilon)$ . No limite do contínuo podemos escrever essa razão como a integral abaixo

$$\frac{N}{L} = \frac{1}{\pi} \int_0^{k_f} \frac{dk}{d\epsilon} d\epsilon = \int_0^{k_f} \rho(\epsilon) d\epsilon. \quad (2.44)$$

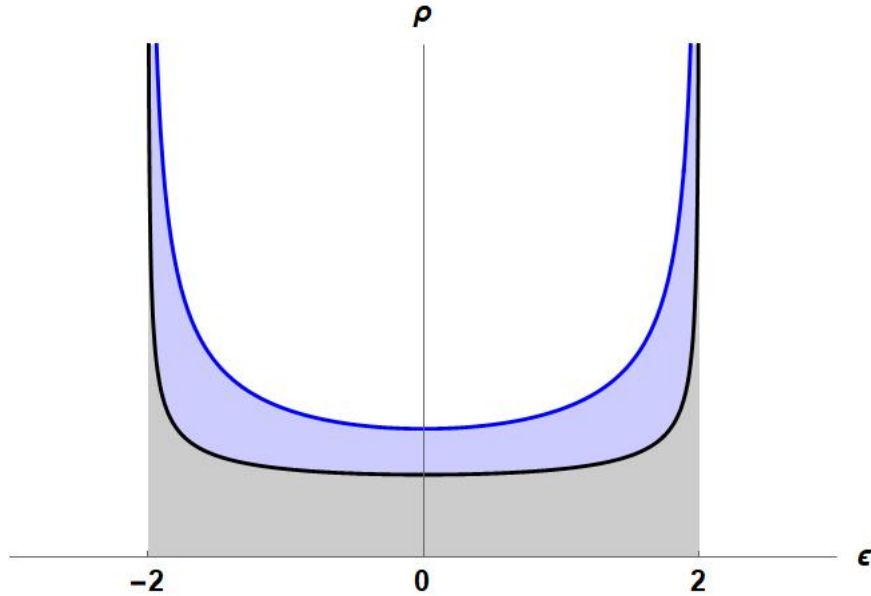


Figura 2.8: Densidade de estados para uma cadeia infinita, obtida através tanto das funções de Green curva azul, e do TB model curva preta,  $t = 1$ ,  $\epsilon_0 = 0$  e  $\eta = 0.001$ .

Usando a equação 2.43 combinada com a equação 2.44, obtemos a densidade de estados através do método tight-binding abaixo

$$\rho(\epsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{4t^2 - (\epsilon - \epsilon_0)^2}}. \quad (2.45)$$

Podemos comparar a densidade de estados obtida através do formalismo das funções de Green com a equação 2.45 que foi obtida através do método tight-binding como foi descrito nessa seção.

Observe que na figura 2.8 existe uma diferença entre as curvas. Essa diferença surge das aproximações usadas durante a descrição da rede através do modelo TB.

Agora podemos prosseguir para discutir como as funções de Green podem ser usadas para obter os coeficientes de transmissão e sua relação com a matriz de espalhamento que é o ponto chave para suas aplicações na spintrônica.

## 2.3 Funções de Green, Matriz S e os coeficientes de transmissão.

Como foi dito no fim da seção anterior, precisamos discutir como podemos obter os coeficientes de transmissão. Considerando que as funções de Green que representam a rede sejam conhecidas, logo precisamos discutir a relação dos elementos da matriz de espalhamento (matriz  $S$ ) com as funções de Green, para que possamos obter uma forma de descrever os coeficientes de transmissão.

Iremos concluir essa seção obtendo a relação de Fisher-Lee [41], que relaciona por sua vez a função de Green com os coeficientes de transmissão. Usaremos a relação entre as funções de Green com a matriz  $S$  para poder demonstrar a origem da relação de Fisher-Lee.

A função de Green descreve como uma perturbação em um determinado sítio de uma rede afeta a todos os outros sítios que constituem determinada amostra. Devido a relação entre as funções de Green e a matriz  $S$ , percebemos que é equivalente usar qualquer um dos formalismos [29]. Usaremos como exemplo uma amostra unidimensional com um potencial constante descrita pelo Hamiltoniano

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0. \quad (2.46)$$

Uma forma de resolver a equação 2.46 é reescrevê-la em termos das funções de Green, sendo assim, temos

$$\left(E - \hat{H}\right) G(x, x') = \delta(x - x'). \quad (2.47)$$

Perceba que se  $x = x'$  a equação 2.47 se torna a equação de Schrödinger, ou seja, se pudéssemos ignorar o termo de fonte  $\delta(x - x')$  ficaria evidente que as funções de Green representam funções de onda na posição  $x$  que surgiu de uma excitação na posição  $x'$ .

Ao considerarmos a equação 2.47 na posição  $x \neq x'$ , obteremos as função de Green do sistema

$$G(x, x') = -\frac{i}{\hbar v} e^{+ik|x-x'|}. \quad (2.48)$$

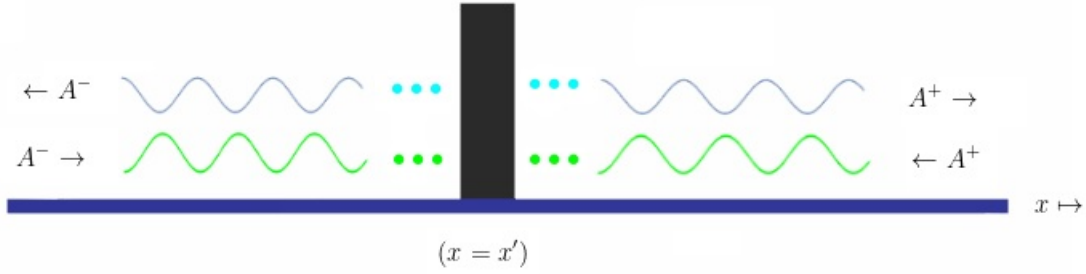


Figura 2.9: As ondas em azul representam um conjunto de ondas se afastando do ponto de excitação, enquanto as ondas em verde representam um conjunto de ondas se aproximando do ponto de excitação localizado em  $x = x'$ .

Para construir essa solução consideramos apenas o caso em que a perturbação em  $x'$  produz ondas se afastando da origem. A outra condição de contorno, representada na figura 2.9, é obtida de forma análoga

$$G(x, x') = \frac{i}{\hbar v} e^{-ik|x-x'|}. \quad (2.49)$$

A essas soluções damos o nome de funções de Green retardada (2.48) e avançada (2.49) respectivamente.

Note que se  $E$  fosse autovalor do operador  $\hat{H}$  o operador de Green também chamado de operador inverso, obtido da equação 2.47 iria divergir, de modo que iremos introduzir um termo imaginário proporcional a  $\eta$

$$\hat{G}(x, x) = (E - \hat{H} \pm i\eta)^{-1}. \quad (2.50)$$

Ao introduzirmos  $\eta$  além de evitar a divergência também incorporamos naturalmente as condições de contorno que geram as diferentes funções de Green.

Vamos agora considerar uma rede com  $N$ -modos transversais, de tal modo que a rede é confinada na direção  $y$  e quase infinita na direção  $x$ , observe que estamos falando de uma rede bidimensional, sendo assim nosso Hamiltoniano é

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\nabla}^2 + V(x, y). \quad (2.51)$$

Usando o método de separação de variáveis, percebemos que o Hamiltoniano é dividido em duas partes, uma para cada direção. Quando surge uma excitação no sistema é de se esperar que apareçam vários modos transversais no sistema, e por sua vez a função de Green é uma combinação linear de todos os modos possíveis

$$G^R(x, x') = \sum_n A_n^\pm \chi_n(y) e^{ik_n|x-x'|}. \quad (2.52)$$

Observe que  $A_n^\pm$  representam as amplitudes para os diferentes modos permitidos no sistema e  $\chi_n(y)$  são as funções de ondas na direção de confinamento, de modo que consideramos  $V(x, y) \equiv V(y)$ . Sendo assim, podemos obter as funções de ondas transversais através da equação abaixo

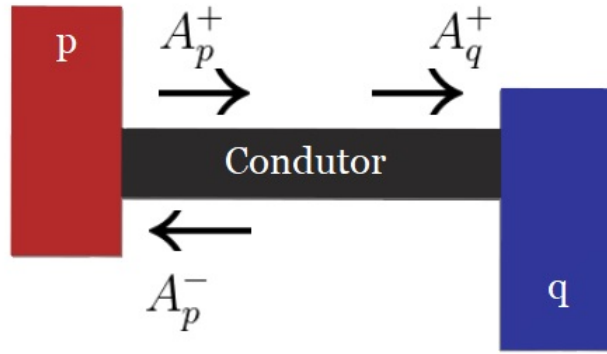


Figura 2.10: Representação de um sistema com um fio condutor entre dois reservatórios ideais.

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + V(y) \right] \chi_n(y) = \epsilon_n \chi_n(y). \quad (2.53)$$

Usando as condições de continuidade para as funções de onda, podemos reescrever a função de Green de modo semelhante a equação 2.48

$$G^R(x, y; x', y') = \sum_n -\frac{i}{\hbar v_n} \chi_n(y') \chi_n(y) e^{ik_n|x-x'|}, \quad (2.54)$$

tal que a soma leva em conta a contribuição de todos os  $N$ -modos possíveis no sistema.

Considere agora um condutor ligado a dois reservatórios indicados respectivamente pelas letras  $p$  e  $q$ , conforme a figura 2.10. Vamos definir a função de Green entre os pontos  $x_p$  e  $x_q$

$$G_{pq}^R(x_q = 0, y_q; x_p = 0, y_p) = G_{pq}^R(y_q, y_p). \quad (2.55)$$

Uma excitação no ponto  $x_p$  da origem a uma amplitude de onda em direção ao condutor e outra se afastando do condutor. Podemos escrever os elementos da matriz  $S$  em termos da função de Green, para um sistema unidimensional temos

$$G_{qp}^R = \delta_{qp} A_p^- + S'_{qp} A_p^+. \quad (2.56)$$

Podemos escrever a matriz  $S$  em termos da amplitude [29] de corrente em vez da amplitude de onda, através da equação 2.56 e usando a relação  $S'_{pq} = \sqrt{v_p/v_q} S_{qp}$ , conseguimos escrever os termos da matriz  $S$  através da função de Green

$$S_{qp} = i\hbar\sqrt{v_q v_p} G_{qp}^R - \delta_{qp}. \quad (2.57)$$

Usando o mesmo algoritimo, considerando agora  $N$ -modos disponíveis na rede, ou seja,  $N$  canais abertos, obtemos

$$S_{nm} = -\delta_{nm} + i\hbar\sqrt{v_n v_m} \iint \chi_n(y_q) \left[ G_{qp}^R(y_q; y_p) \right] \chi_m(y_p) dy_q dy_p. \quad (2.58)$$

Considerando novamente uma rede discreta em uma dimensão, como representada na figura 2.6, usaremos a equação 2.58 para obter o coeficiente de transmissão

$$T_{qp} = \sum_n \sum_m |S_{nm}|^2, \quad (2.59)$$

podemos reescrever a equação 2.59 combinada com a equação 2.58, considerando a função

de Green para uma rede discreta temos

$$T_{pq} = \sum_n \sum_m \frac{\hbar^2 v_n v_m}{a^2} \left\{ \sum_i \sum_j \chi_n(q_i) [G^R(j, i)] \chi_m(p_j) \right. \\ \left. \sum_{i'} \sum_{j'} \chi_n(q_{i'}) [G^R(j, i)]^* \chi_m(p_{j'}) \right\} \quad (2.60)$$

Usando as propriedades das funções de Green, e definindo  $\Gamma_q(i, i')$  e  $\Gamma_p(j, j')$  de modo adequado podemos escrever a relação de Fisher-Lee [41] [41]

$$T_{pq} = Tr \left[ \Gamma_q(i, i') G^R(j, i) \Gamma_p(j, j') G^A(i', j') \right]. \quad (2.61)$$

Note que as funções  $\Gamma_q$  e  $\Gamma_p$  representam o acoplamento entre o reservatório e o condutor, ou seja, se conhecermos as funções de Green da rede usando a equação 2.61 obtemos os coeficientes de transmissão.

Sendo assim, concluímos as principais aplicações das funções de Green para a eletrônica, onde obtemos a densidade de estados e os coeficientes de transmissão. Para desenvolver os cálculos numéricos via função de Green, iremos usar o pacote Kwant [30]. É interessante notar que o método computacional usado nessa dissertação é baseado nas funções de Green, e essa revisão serve para compreender como ocorre a descrição das amostras através desse método.



---

---

# CAPÍTULO 3

---

## EFEITO HALL DE SPIN

O efeito Hall em todas as suas "formas" é sem dúvida uma das principais ferramentas experimentais no contexto de física da matéria condensada, graças a Edwin Hebert Hall [42] que em 1879 descreveu o surgimento de uma diferença de potencial transversal em um condutor elétrico na presença de um campo magnético externo. O efeito Hall é de extrema importância para os físicos experimentais, servindo para a caracterização das principais propriedades dos metais e semicondutores.

O sucesso da spintrônica só se tornou possível devido a manipulação da corrente de spin, o efeito que possibilitou a criação e manipulação da corrente de spin é conhecido como efeito Hall de spin. Diferente do efeito Hall clássico, o efeito Hall de spin surge da interação do momento de spin com o campo magnético intrínseco da amostra.

Neste trabalho iremos estudar a eficiência de conversão da corrente de carga em corrente de spin, usaremos o ângulo spin Hall como medida da eficiência, para isso iremos simular o efeito Hall de spin em um dispositivo com quatro terminais.

## 3.1 Efeito Hall Clássico

A seguir vamos usar dois formalismos distintos para discutir o efeito Hall clássico. O primeiro é o formalismo de Drude que surgiu logo após a descoberta de Hebert Hall. Mesmo sendo um modelo clássico, a descrição obtida por Drude foi bastante útil para compreender melhor os metais, logo se torna ideal para iniciarmos essa discussão. Por fim vamos usar o formalismo de Landauer-Büttiker, que é um modelo quântico que surgiu cerca de 80 anos após a descoberta do efeito Hall, quando já se discutia os impactos da mecânica quântica na compreensão e caracterização dos metais.

### 3.1.1 Formalismo de Drude

Iremos seguir a referência [43] para descrever as descobertas obtidas P. Drude em 1900. Considere um metal constituído por um gás de elétrons livres, o que de imediato nos permite a comparação com a teoria cinética dos gases. Desse modo podemos esperar que exista um tempo de relaxação  $\tau$ . O inverso desse tempo é usado para caracterizar o número de colisões por unidade tempo que o elétron deve sofrer ao se movimentar pela amostra.

O nosso interesse é descrever a resposta da amostra quando submetida a campos elétrico e magnético externos  $(\vec{E}, \vec{B})$ . Vamos então escrever as equações de Newton considerando que o sistema está na presença de uma força externa  $\vec{F}_{ext}$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\vec{p}}{\tau} + \vec{F}_{ext}, \quad (3.1)$$

perceba que o termo  $\vec{p}/\tau$  é um termo que considera as sucessivas colisões sofridas pelo elétron dentro do metal. Esse termo é comumente chamado de termo de relaxação e foi introduzido por Drude para garantir que surgisse uma corrente estacionária.

Perceba que desejamos compreender como é a resposta de um elétron na presença tanto de um campo elétrico quanto de um campo magnético. Devemos então, considerar a força externa como sendo a força de Lorentz, e além disso, podemos com certo cuidado reescrever a equação 3.1 em termos da densidade de corrente  $\vec{J} = -ne\vec{p}/m$ , onde  $n$  é a densidade

eletrônica do metal. Então, a equação para a densidade de corrente é

$$\frac{d\vec{J}}{dt} + \frac{\vec{J} - \sigma_0 \vec{E}}{\tau} + \gamma(\vec{B} \times \vec{J}) = 0. \quad (3.2)$$

Dessa forma definimos a condutividade elétrica como sendo  $\sigma_0 = ne^2\tau/m$  e  $\gamma = -e/m$ . Note que a expressão para  $\sigma_0$  permite uma relação entre grandezas macroscópicas e microscópicas, sendo essa relação uma das principais conclusões obtida através do modelo de Drude.

Agora resta resolver a equação 3.2. Como estamos interessados no regime estacionário, uma ótima estratégia é admitir que a densidade de corrente não tem dependência temporal, dessa forma a equação 3.2 se torna

$$\vec{J} = \frac{\sigma_0}{\tau} \left[ \frac{1}{\tau} + \tilde{\beta} \right]^{-1} \vec{E}, \quad (3.3)$$

de modo que podemos reescrever a equação acima na forma matricial. Perceba que  $\tilde{\beta} = \gamma \vec{B} \times$  pode ser escrito na forma

$$\tilde{\beta} = \gamma \vec{B} \times = \gamma \begin{pmatrix} 0 & -B_z & B_y \\ B_z & 0 & -B_x \\ -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

sendo assim, para obter a densidade de corrente precisamos apenas, inverter a matriz presente na equação 3.3.

Vamos considerar um caso particular como o campo magnético  $\vec{B} = B_0 \hat{z}$  e o campo elétrico  $\vec{E} = E_0 \hat{x}$ . Note que essa componente do campo elétrico é responsável pela corrente de carga ao longo do eixo  $\hat{x}$ . Perceba que o campo magnético desvia os portadores de carga de modo a criar uma corrente transversal à direção original do fluxo de elétrons. Como a amostra é finita as cargas desviadas se acumulam nas bordas da amostra gerando um campo elétrico

transversal, o qual é denominado campo elétrico Hall. Este fenômeno é chamado de efeito Hall.

Considerando a situação anterior vamos reescrever o campo elétrico  $\vec{E} = (E_x, E_y, 0)$  considerando o campo gerado pelo acúmulo de cargas na direção transversal ao fluxo de elétrons na amostra

$$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix} = \Omega \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

onde  $\Omega$  é

$$\Omega = \frac{\sigma_0 \tau^2}{1 + \gamma^2 \tau^2 B_0^2} \begin{pmatrix} 1/\tau^2 & \gamma B_0/\tau & 0 \\ -\gamma B_0/\tau & 1/\tau^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/\tau^2 \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

O acúmulo de cargas nas bordas do metal aumenta o campo elétrico Hall. Após um tempo suficientemente longo o fluxo de cargas na direção  $\hat{y}$  será eventualmente nulo. Nesse momento as equações 3.5 e 3.6 combinadas com o fato de  $J_y = 0$ , nos permite escrever a relação entre o campo Hall e a densidade de corrente paralela a direção  $\hat{x}$

$$E_y = \gamma B_0 \tau E_x = -\frac{B_0}{ne} J_x. \quad (3.7)$$

Podemos definir o coeficiente Hall através da equação 3.7, como

$$R_H \equiv E_y/B_0 J_x = -1/ne. \quad (3.8)$$

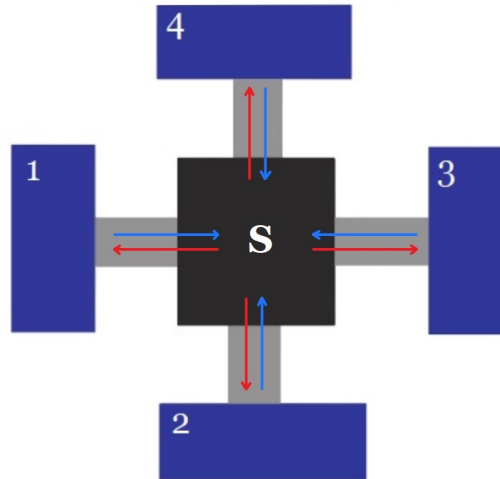


Figura 3.1: Representação de um dispositivo com 4 terminais. Em azul temos a representação dos reservatórios. Em cinza temos os guias ideais que conectam os reservatórios ao centro espalhador que está em preto.

O coeficiente Hall representado na equação 3.8 depende apenas da densidade eletrônica do material que é uma característica intrínseca do metal. Existem outras formas de se medir experimentalmente a densidade eletrônica de uma determinada amostra, e por sua vez são usadas para que possamos fazer a comparação dos resultados obtidos pelo modelo de Drude. Tais resultados concordam muito bem para o Cobre e o Lítio, entretanto para Alumínio, Berílio e Índio os valores obtidos pelo modelo de Drude não estão de acordo com os valores experimentais. Embora o modelo de Drude concorde muito bem com alguns casos os resultados para Alumínio, Berílio e Índio indicavam a necessidade da criação de modelos mais elaborados para a descrição do efeito Hall.

### 3.1.2 Formalismo de Landauer-Büttiker

Desde de 1879 muitos experimentos foram desenvolvidos com base no efeito Hall, entretanto vimos que o formalismo de Drude falha em alguns casos, devido a sua construção ser puramente clássica. Agora iremos descrever o efeito Hall através do formalismo de Landauer-Büttiker seguindo a referência [29]. Note que estamos interessados em descrever o efeito Hall em um dispositivo de quatro-terminais representado na figura 3.1.

Uma vez que não há nem uma diferença entre os contatos, podemos considerar que todos os contatos devem ser iguais. Deste modo podemos descrever a amostra em termos da expressão de Landauer-Büttiker para a corrente elétrica no caso de multi-terminais

$$I_p = \frac{2e}{h} \sum_q (T_{qp}\mu_p - T_{pq}\mu_q), \quad (3.9)$$

onde  $T_{pq}$  representa os coeficientes de transmissão do guia  $q$  para o guia  $p$  e  $\mu_p$  é o potencial eletroquímico no terminal  $p$ . É comum escrevermos a equação 3.9 em termos das tensões nos reservatórios  $V_p = \mu_p/e$  e em função da condutância

$$G_{pq} = 2e^2 T_{pq}/h. \quad (3.10)$$

Onde  $e$  é a carga elétrica e  $h$  é a constante de Plank. Dessa forma, a equação 3.9 se torna

$$I_p = \sum_q (G_{pq}V_p - G_{qp}V_q), \quad (3.11)$$

perceba que  $G_{pq}$  é a condutância no terminal  $q$  devido a um terminal  $p$  e observe que no caso em que todas as tensões são iguais a equação 3.11 deve ser nula. Concluimos que  $G_{pq} = G_{qp}$ , de modo que podemos reescrever a equação 3.11, como

$$I_p = \sum_q G_{pq}(V_p - V_q). \quad (3.12)$$

Vamos admitir que a tensão no terminal 4 é nula e usar a equação 3.12 para descrever o sistema. O conjunto de equações obtidas podem ser escritas na forma matricial. De modo que para o caso indicado  $I_1 = -I_3$  e  $I_2 = I_4 = 0$ , temos

$$\begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \end{bmatrix} = [G] \begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{bmatrix}. \quad (3.13)$$

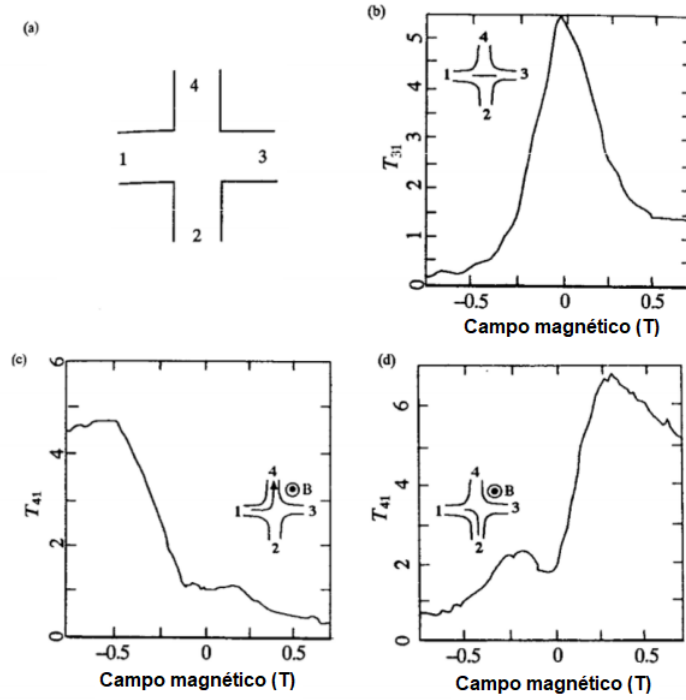


Figura 3.2: (a) Representação do dispositivo com 4 terminais como representada na figura 3.1. Probabilidade de transmissão em função do campo magnético perpendicular à amostra (b) do terminal 1 para o 3, (c) do terminal 1 para o 4 e (d) do terminal 1 para o 2. Figura retirada da referência [3].

A condutância é escrita em termo dos coeficientes de transmissão. Na figura 3.2 é mostrado o resultado experimental [3] que relaciona os coeficientes de transmissão em função do campo magnético aplicado na amostra. Vamos redefinir os coeficientes de transmissão

$$T_{13} = T_{31} = T_{42} = T_{24} = T_f$$

$$T_{21} = T_{32} = T_{43} = T_{14} = T_r$$

$$T_{41} = T_{12} = T_{23} = T_{34} = T_l$$

$$T_0 = T_f + T_r + T_l$$

(3.14)

e agora que definimos os coeficientes de transmissão de forma adequada ser torna mais simples escrever a matriz  $G$

$$[G] = \begin{bmatrix} T_0 & -T_l & -T_f \\ -T_R & T_0 & -T_l \\ -T_f & -T_R & T_0 \end{bmatrix}. \quad (3.15)$$

A equação 3.13 pode ser invertida para que possamos obter a resistência que é o que estamos interessados, ou seja

$$\begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{bmatrix} = \frac{h}{2e^2} \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \end{bmatrix}, \quad (3.16)$$

observe que a matriz resistência é obtida como o inverso da matriz condutância  $[G]^{-1} = [R]$  de acordo com a referência [29]. Invertendo a equação 3.15, obtemos a matriz resistência. A resistência Hall por sua vez é definida como a razão entre  $R_H = V_2/I_1$

$$R_H = \frac{h}{2e^2} \frac{T_l - T_r}{T_l^2 + T_r^2 + 2T_f^2 + 2T_f T_l + 2T_f T_r}. \quad (3.17)$$

Comparando os resultados obtidos através do formalismo de Landauer-Büttiker com os resultados experimentais presentes na figura 3.3, vemos que esse formalismo está de acordo com o experimento.

A seguir iremos discutir o efeito Hall de spin, visto que suas aplicações experimentais em semicondutores nos possibilita um fenômeno semelhante ao efeito Hall entretanto na ausência



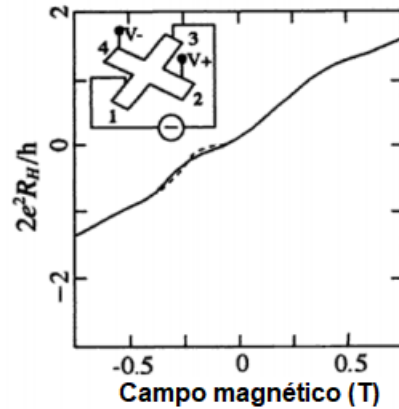


Figura 3.3: Comparação entre o resultado experimental (Linha pontilhada) e a equação 3.17 (Linha contínua), da resistência hall em função do campo magnético, figura extraído da referência [3]

de campo magnético externo. Perceba que nossa discussão anterior sempre levava em conta a presença do campo magnético de modo que o coeficiente Hall se torna zero a campo nulo, veja a figura 3.2 e compare com a equação 3.17.

## 3.2 Efeito Hall de spin

O efeito spin-Hall ou efeito Hall de spin (SHE) foi inicialmente previsto em 1971, por I. Dyakonov e V.I. Perel [18], e observado experimentalmente 30 anos mais tarde em semicondutores [2]. Atualmente a manipulação de semicondutores é essencial para spintrônica. Desse modo vamos discutir os efeitos causados pela SHE nesse grupo de materiais.

Diferente do efeito Hall clássico, que surge da interação do portador de carga com um campo magnético externo, o SHE surge da interação do momento de spin do elétron com o momento orbital do par elétron-próton. Esse efeito é chamado de interação spin órbita (ISO) [44, 45], sendo assim, antes de discutirmos o SHE temos que conhecer e manipular as principais propriedades que contribuem para o transporte eletrônico do spin, ou seja vamos discutir o papel da ISO nesse fenômeno.

### 3.2.1 Interação spin órbita.

Suponha que um elétron que se movimenta em um metal, com um momento linear  $\vec{p}$  na presença de um campo elétrico

$$\vec{E} = -\nabla V. \quad (3.18)$$

Do ponto de vista relativístico no referencial do elétron, o mesmo irá sentir um campo magnético [46]. Perceba que esse campo magnético é sentido apenas no referencial do elétron e sua origem é puramente intrínseca ao material. O campo magnético é

$$\vec{B} = -\frac{1}{c^2}\vec{v} \times \vec{E}. \quad (3.19)$$

Considerando o campo elétrico produzido por uma carga pontual [37], e reescrevendo a velocidade em termos do momento linear da partícula, podemos reescrever o campo magnético

$$\vec{B} = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0 r^2 m c^2} \vec{p} \times \hat{r}. \quad (3.20)$$

Usando a definição do momento angular orbital  $\vec{L} = \hat{r} \times \vec{p}$ , e usando na equação 3.20, reescrevemos o campo magnético em termos do momento angular orbital

$$\vec{B} = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r^2 m c^2} \vec{L}. \quad (3.21)$$

Agora que sabemos a relação entre o campo magnético efetivo no referencial do elétron e o momento angular orbital, podemos escrever Hamiltoniano que descreve o acoplamento entre o spin do elétron com o campo magnético do dispositivo

$$\hat{H} = -\frac{e}{m c} \vec{S} \cdot \vec{B}. \quad (3.22)$$

Substituindo o resultado obtido para o campo magnético efetivo, temos

$$\hat{H} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2 m^2 c^3} \vec{S} \cdot \vec{L}. \quad (3.23)$$

Devido a forma da equação 3.23, fica claro a origem do nome interação spin órbita. É importante destacar que estamos interessados na ISO que quebra a simetria de rotação de spin. Entre as ISO, existem dois acoplamentos que se destacam, são eles, Dresselhaus [47] e o Rashba [48, 49]. O Dresselhaus surge do fato da quebra de simetria ser causada por fatores externos, já no acoplamento do tipo Rashba a quebra de simetria surge da interação do elétron com a própria rede.

A ISO do tipo Rashba é o que foi usada ao longo da construção desse trabalho, sendo assim, vamos discutir a seguir qual o impacto da ISO na relação da dispersão do elétron.

Através da equação 3.23, considerando a definição do momento angular e escrevendo o momento de spin em termos das matrizes de Pauli, temos

$$H \simeq (\vec{\sigma} \times \vec{p}) \cdot \vec{E}. \quad (3.24)$$

Definindo um campo elétrico  $\vec{E} = E_0 \hat{z}$ . Podemos através da equação 3.24, mostrar que o Hamiltoniano Rashba pode ser escrito como

$$\hat{H}_R = \frac{\lambda_R}{\hbar} (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x), \quad (3.25)$$

onde  $\lambda_R$  é o parâmetro Rashba e  $\sigma$  representa as matrizes de Pauli.

Vamos mostrar como o efeito Rashba, modifica a relação de dispersão de uma partícula livre. Começaremos com uma partícula livre, já que a descrição é bem conhecida para um sistema em duas dimensões. O Hamiltoniano não perturbado neste caso é dado por

$$\hat{H}_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m}. \quad (3.26)$$

A solução para partícula livre é escrita em termos de ondas planas

$$\psi_{\uparrow}^0(\vec{x}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) \quad (3.27)$$

e

$$\psi_{\downarrow}^0(\vec{x}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}). \quad (3.28)$$

Iremos obter a relação de dispersão através da equação de autovalor

$$\hat{H}_0 \psi_{\uparrow(\downarrow)}^0(\vec{x}) = \psi_{\uparrow(\downarrow)}^0(\vec{x}) E. \quad (3.29)$$

A energia para o caso da partícula livre é

$$E_{\uparrow\downarrow} = \frac{\hbar^2}{2m} |\vec{k}_{\uparrow\downarrow}|^2. \quad (3.30)$$

Para considerar o efeito Rashba devemos usar o método perturbativo para sistemas degenerados [50]. Iremos obter a correção da relação de dispersão, para isso basta escrever o Hamiltoniano na forma matricial e por fim usar a equação de autovalor  $\det(\hat{H}_R - \mathbf{I}E) = 0$  para encontrar as energias. Podemos obter os termos do Hamiltoniano

$$\begin{aligned} H_{11} &= \langle \psi_{\uparrow}^0 | \hat{H}_R | \psi_{\uparrow}^0 \rangle, \\ H_{12} &= \langle \psi_{\uparrow}^0 | \hat{H}_R | \psi_{\downarrow}^0 \rangle, \\ H_{22} &= \langle \psi_{\downarrow}^0 | \hat{H}_R | \psi_{\downarrow}^0 \rangle, \\ H_{21} &= \langle \psi_{\downarrow}^0 | \hat{H}_R | \psi_{\uparrow}^0 \rangle. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Para obter os elementos da matriz  $\hat{H}_R$ , vamos considerar os operadores na representação das posições

$$\langle \vec{x}' | \hat{H}_R | \vec{x} \rangle = \frac{\lambda_R}{\hbar} (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) \delta(\vec{x} - \vec{x}'). \quad (3.32)$$

Na representação das posições, a equação para  $H_{11}$  se torna

$$H_{11} = \int \psi_{\uparrow}^{0*}(\vec{x}) \frac{\lambda_R}{\hbar} (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) \psi_{\uparrow}^0(\vec{x}) d\vec{x}. \quad (3.33)$$

Para isso considere os operadores momento linear na representação das posições

$$H_{11} = \frac{\alpha}{i} \int d\vec{x} \psi_{\uparrow}^{0*}(\vec{x}) (\sigma_x \frac{\partial}{\partial y} - \sigma_y \frac{\partial}{\partial x}) \psi_{\uparrow}^0(\vec{x}), \quad (3.34)$$

usando a equação 3.28 combinada com a equação 3.34

$$H_{11} = \alpha \int d\vec{x} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} k_y e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} - \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix} k_x e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \right\}. \quad (3.35)$$

Resolvendo a equação 3.35, obtemos  $H_{11} = 0$ , de maneira análoga obtemos os demais termos da matriz  $\hat{H}_R$

$$\hat{H}_R = \begin{bmatrix} 0 & \lambda_R(k_y + ik_x) \\ \lambda_R(k_y - ik_x) & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.36)$$

Como  $\det|\hat{H}_R - \mathbb{I}E| = 0$ , teremos

$$E^2 - \lambda_R^2(k_y + ik_x)(k_y - ik_x) = 0. \quad (3.37)$$

Resolvendo a equação 3.37, obtemos a contribuição da interação spin órbita para a relação de dispersão de uma partícula livre, concluímos assim a nova relação de dispersão

$$E_{\uparrow\downarrow} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ (k \pm k_{so})^2 - k_{so}^2 \right]. \quad (3.38)$$

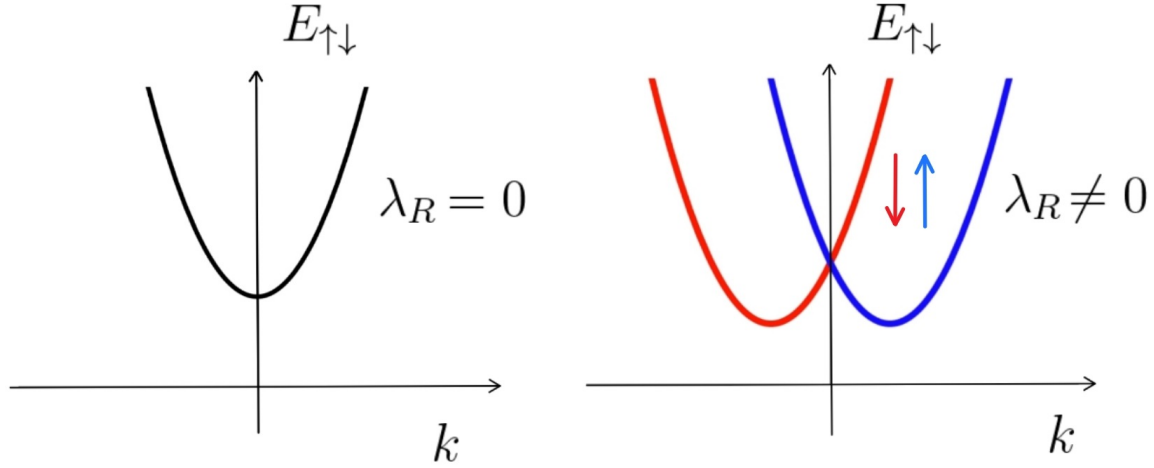


Figura 3.4: A esquerda temos a dispersão da energia para o caso sem ISO ( $\lambda_R = 0$ ). A direita temos a dispersão da energia para o Hamiltoniano com ISO ( $\lambda_R \neq 0$ ).

Onde  $k_{so} \equiv m\lambda_R/\hbar^2$ .

A correção obtida na energia devido a interação spin órbita dá origem a um deslocamento das bandas de energia, ver figura 3.4. Na ausência do Hamiltoniano Rashba as bandas de energia são equivalentes devido a degenerescência do sistema, desse modo concluímos que ao introduzirmos a interação spin órbita do tipo Rashba na amostra quebramos a degenerescência de spin e devido a isso ocorre o deslocamento na relação de dispersão.

Agora já que conhecemos os autovalores, podemos escrever a solução como uma combinação linear de estados não perturbados

$$\psi_{\uparrow}(\vec{x}) = \gamma\psi_{\uparrow}^0(\vec{x}) + \beta\psi_{\downarrow}^0(\vec{x}) \quad (3.39)$$

$$\psi_{\downarrow}(\vec{x}) = \gamma\psi_{\downarrow}^0(\vec{x}) + \beta\psi_{\uparrow}^0(\vec{x})$$

Através da equação de autovalor temos

$$\begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma \\ \beta \end{bmatrix} = E_{\uparrow\downarrow} \begin{bmatrix} \gamma \\ \beta \end{bmatrix}, \quad (3.40)$$

usando o autovalor  $E_{\uparrow} = +\lambda_R|\vec{k}|$ , temos

$$\beta(k_y + ik_x) = |\vec{k}|\gamma \quad (3.41)$$

$$\gamma(k_y - ik_x) = |\vec{k}|\beta,$$

definindo  $e^{i\theta} = (k_y + ik_x)/|\vec{k}|$ , obtemos  $\gamma = e^{i\theta}\beta$  e por fim podemos escrever as funções de onda para o autovalor  $E_{\uparrow}$

$$\psi_{\uparrow}(\vec{x}) = \beta e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.42)$$

de modo análogo, usando o segundo autovalor obtido  $E_{\downarrow} = -\lambda_R|\vec{k}|$ , encontramos

$$\psi_{\downarrow}(\vec{x}) = \gamma e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (3.43)$$

Os autovetores devem ser normalizados de modo que  $\beta = \gamma = 1/\sqrt{2}$ , e podemos por fim

escrever os autovetores

$$\begin{aligned} \psi_{\uparrow}(\vec{x}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ 1 \end{pmatrix} \\ \psi_{\downarrow}(\vec{x}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.44)$$

Perceba que a presença da ISO introduz uma fase na função de onda, essa fase é responsável pelo desvio na trajetória do elétron, o que produz o efeito Hall de spin, a seguir iremos descrever o efeito Hall de spin através do formalismo de Landauer-Büttiker.

### 3.2.2 Efeito Hall de spin através do formalismo de Landauer-Büttiker.

O efeito Hall de spin (SHE) consiste do bombeamento de uma corrente polarizada de spin dentro de uma amostra que tenha forte interação spin órbita. Como vimos, a presença da interação spin órbita irá por sua vez causar um desvio na trajetória do elétron. Perceba que o desvio depende da polaridade do spin em questão, além disso, o desvio causa um acúmulo de partículas na borda da amostra. Para descrever o SHE faremos a mesma descrição feita na seção anterior, entretanto precisaremos introduzir o grau de liberdade de spin na equação 3.9 de acordo com as referências [51, 52]

$$I_i^{\alpha} = \frac{e^2}{h} \sum_j \sum_{\alpha'} T_{i,j}^{\alpha,\alpha'} (V_i - V_j). \quad (3.45)$$

$T_{i,j}^{\alpha,\alpha'}$  representa a probabilidade de um elétron que inicialmente se encontrava no terminal  $j$  com um estado de spin  $\alpha'$ , chegar no terminal  $i$  com o estado de spin  $\alpha$ . Note que o índice



$\alpha$ , indica a polarização do spin ( $\alpha = 0, x, y, z$ ), onde o termo zero representa que o elétron não tem um estado de spin definido e na equação 3.45 representara a corrente de carga.

Iremos assumir que os elétrons que se encontram no reservatório 1 não estão polarizados, ou seja,

$$T^{\alpha\alpha'} = T^{\alpha 0} = T^{\alpha}. \quad (3.46)$$

Note que a equação 3.46 significa dizer que iremos nos referir apenas ao estado do spin que chegar nos demais reservatórios da amostra.

Usaremos a mesma configuração da figura 3.1 e a referência [51], consideramos que no centro espalhador temos ISO. Usando a equação 3.45, que leva em conta os graus de liberdade de spin para o elétron, chegaremos a expressões para a corrente representadas nas equações abaixo

$$I_1^{\alpha} = \frac{e^2}{h} \left[ T_{1,2}^{\alpha}(V_1 - V_2) + T_{1,3}^{\alpha}(V_1 - V_3) + T_{1,4}^{\alpha}(V_1 - V_4) \right], \quad (3.47)$$

$$I_2^{\alpha} = \frac{e^2}{h} \left[ T_{2,1}^{\alpha}(V_2 - V_1) + T_{2,3}^{\alpha}(V_2 - V_3) + T_{2,4}^{\alpha}(V_2 - V_4) \right], \quad (3.48)$$

$$I_3^{\alpha} = \frac{e^2}{h} \left[ T_{3,1}^{\alpha}(V_3 - V_1) + T_{3,2}^{\alpha}(V_3 - V_2) + T_{3,4}^{\alpha}(V_3 - V_4) \right], \quad (3.49)$$

$$I_4^{\alpha} = \frac{e^2}{h} \left[ T_{4,1}^{\alpha}(V_4 - V_1) + T_{4,2}^{\alpha}(V_4 - V_2) + T_{4,3}^{\alpha}(V_4 - V_3) \right]. \quad (3.50)$$

Como estamos interessados em uma corrente pura de spin nos terminais 2 e 4, assumimos que não há corrente de carga nesses terminais, ou seja,  $I_2^0 = I_4^0 = 0$ . Dessa forma, nos resta  $I_2^{\alpha}$  e  $I_4^{\alpha}$  que correspondem as expressões para a corrente de spin presente nos terminais.

A corrente de carga é a corrente nos terminais 1 e 3. Devido a conservação de carga temos  $I_1 = -I_3 \equiv I$ . Além disso, vamos redefinir as tensões aplicadas no sistema  $V_1 = V/2$  e

$V_3 = -V/2$ . Usando as equações 3.47 e 3.49, temos a expressão para a corrente de carga

$$2I = \frac{e^2}{h} \left[ \frac{V}{2} (T_{1,2}^0 + T_{1,3}^0 + T_{1,4}^0 + T_{3,1}^0 + T_{3,2}^0 + T_{3,4}^0 + T_{1,3}^0 + T_{3,1}^0) \right. \\ \left. + (T_{3,2}^0 - T_{1,2}^0)V_2 + (T_{3,4}^0 - T_{1,4}^0)V_4 \right]. \quad (3.51)$$

Como conhecemos as expressões para a corrente podemos escrever a matriz densidade de corrente, para isso usaremos a definição a seguir

$$J_i^\alpha = \frac{h I_i^\alpha}{e^2 V}. \quad (3.52)$$

Como queremos que nos terminais 2 e 4, tenhamos apenas uma corrente pura de spin temos que assumir  $J_2^0 = J_4^0 = 0$ . Note que essas igualdades são as condições que nos permite definir as tensões nos terminais 2 e 4, para garantir que existam apenas as correntes de spin nesses terminais.

Desse modo  $J_2^\alpha$  e  $J_4^\alpha$  descrevem apenas correntes de spin, a matriz densidade toma a forma

$$\begin{bmatrix} 2J \\ J_2^\alpha \\ J_4^\alpha \end{bmatrix} = [T] \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ \tilde{V}_2 \\ \tilde{V}_4 \end{bmatrix} \quad (3.53)$$

onde

$$[T] = \begin{bmatrix} (2N_1 - T_{1,1}^0 + 2N_2 - T_{2,2}^0 + T_{2,1}^0 + T_{1,2}^0) & (T_{3,2}^0 - T_{1,2}^0) & (T_{3,4}^0 - T_{1,4}^0) \\ (T_{2,3}^\alpha - T_{2,1}^\alpha) & -T_{2,2}^\alpha & -T_{2,4}^\alpha \\ (T_{4,3}^\alpha - T_{4,1}^\alpha) & -T_{4,2}^\alpha & -T_{4,4}^\alpha \end{bmatrix}$$

Perceba que usamos a definição da conservação da probabilidade de transmissão  $2N_i = \sum_{j=1}^4 T_{i,j}^\alpha$ , onde  $N_i$  é o número de modos de ondas propagantes no guia  $i$ . Note que  $\tilde{V}_i = V_i/V$ . Usando as condições para a corrente de carga ser nula nos terminais 2 e 4, encontramos as tensões  $\tilde{V}_2$  e  $\tilde{V}_4$ , respectivamente

$$\tilde{V}_2 = \frac{1}{2} \left[ \frac{(T_{2,3}^0 - T_{2,1}^0)(2N_4 - T_{4,4}^0) + T_{2,4}^0(T_{4,3}^0 - T_{4,1}^0)}{T_{4,2}^0 T_{2,4}^0 - (2N_4 - T_{4,4}^0)(2N_2 - T_{2,2}^0)} \right] \quad (3.54)$$

e

$$\tilde{V}_4 = \frac{1}{2} \left[ \frac{(T_{4,3}^0 - T_{4,1}^0)(2N_2 - T_{2,2}^0) + T_{4,2}^0(T_{2,3}^0 - T_{2,1}^0)}{T_{4,2}^0 T_{2,4}^0 - (2N_2 - T_{2,2}^0)(2N_4 - T_{4,4}^0)} \right]. \quad (3.55)$$

Conhecendo as tensões podemos escrever as densidades de corrente nos terminais 2 e 4, que descrevem a corrente de spin

$$J_2^\alpha = \frac{1}{2}(T_{2,3}^\alpha - T_{2,1}^\alpha) - T_{2,2}^\alpha \tilde{V}_2 - T_{2,4}^\alpha \tilde{V}_4, \quad (3.56)$$

e

$$J_4^\alpha = \frac{1}{2}(T_{4,3}^\alpha - T_{4,1}^\alpha) - T_{4,4}^\alpha \tilde{V}_2 - T_{4,2}^\alpha \tilde{V}_4. \quad (3.57)$$

Através do método diagramático descrito por P. W. Brouwer na referência [53], e através dos resultados estatísticos obtidos por Badarson [51], concluímos que a média da densidade de corrente é

$$\langle J_i^\alpha \rangle = 0. \quad (3.58)$$

Perceba que o fato da média da corrente de spin ser nula, não significa que o seu valor medido experimental seja nulo. Isso ocorre por que a corrente de spin é simétrica e ocorre com igual probabilidade para ambos os lados da amostra, sendo assim a média é nula. Desta forma, se faz necessário obter a amplitude das flutuações da corrente de spin. Observe que a variância pode ser obtida em função do número de canais abertos no sistema [51]

$$\text{var}[J_i^\alpha] = \frac{4N_i N_1 N_3 (N_T - 1)}{N_T (2N_T - 1) (2N_T - 3) (N_1 + N_3)}. \quad (3.59)$$

Perceba que para o caso de uma amostra simétrica, temos  $N_1 = N_2 = N_3 = N_4 = N$

$$\text{var}[J_i^\alpha] = \frac{4N^3 (4N - 1)}{4N (8N - 1) (8N - 3) 2N}. \quad (3.60)$$

O regime experimental consiste do regime de altas energias, ou seja, um grande número de modos de ondas propagante ( $N \gg 1$ ). Obtemos o valor de flutuação universal conforme a equação 3.59

$$\text{var}[J_i^\alpha] \simeq \frac{1}{32}, \quad (3.61)$$

onde o desvio da corrente de spin é

$$\text{rms}[J_i^\alpha] \simeq 0.18. \quad (3.62)$$

Esse resultado é muito importante e foi obtido de forma puramente analítica [51]. Entretanto em 2006 esse mesmo resultado foi verificado através de métodos numéricos baseados no modelo tight-binding por Wei Ren [4]. Na figura 3.5 mostramos a média e o desvio da condutância spin Hall obtida na referência [4]. Observe que a média localiza a medida que aumentamos a desordem  $W$ , entretanto o desvio apresenta um valor máximo  $\sim 0,18$ . Os resultados da referência [4] foram obtidos através da simulação de 20.000 amostras distintas. Note que, o resultado analítico da equação 3.60 [51] está de acordo com os resultados numéricos obtidos por Wei Ren [4] representado na figura 3.5 o qual obteve as flutuações da condutância Hall em função da desordem.

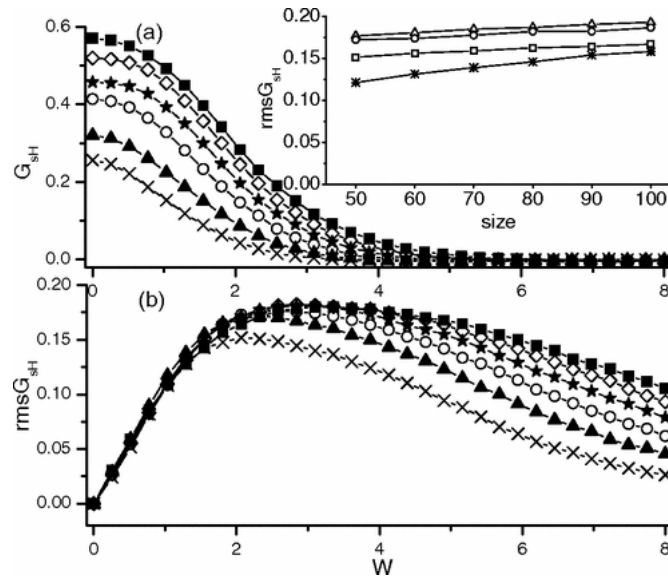


Figura 3.5: A imagem mostra o resultado obtido para a média e desvio da condutância spin Hall em função da desordem de Anderson, para diferentes valores de interação spin-órbita  $\lambda_R$ . Os valores referentes ao parâmetro de Rashba aumentam de baixo para cima, figura retirada da referência [4].

Agora que finalizamos a nossa discussão sobre o SHE, onde além de descrever todo o fenômeno concluímos que o desvio da corrente de spin converge para valores universais para altas energias. Iremos agora discutir se a grandeza denominada de ângulo spin Hall, que é responsável por quantificar a eficiência da conversão da corrente de carga em corrente de spin apresenta alguma classe de universalidade.

---

---

# CAPÍTULO 4

---

## RESULTADOS

Neste capítulo, iremos discutir e apresentar os principais resultados numéricos obtidos durante o desenvolvimento da pesquisa. Todos os resultados aqui apresentados foram obtidos através de simulações computacionais que se tornaram possível graças ao pacote Kwant [30]. O Kwant é um pacote para a linguagem Python, criado por um grupo de físicos do MIT, baseado no modelo tight binding e no formalismo das funções de Green para calcular os coeficientes de transmissão como descrito no capítulo 2. O Kwant é um pacote muito prático para desenvolver simulações de transporte eletrônico.

Nessa dissertação utilizamos o pacote Kwant para descrever uma rede quadrada com quatro terminais. Perceba que a figura 3.1 é uma representação do dispositivo experimental usado na referência [3]. Iremos simular o efeito Hall de spin nesse dispositivo, reproduzindo assim os resultados obtidos nas referências [4,51], além disso iremos compreender o comportamento das flutuações presentes tanto na corrente de carga quanto no ângulo spin Hall. Note que o ângulo é uma medida experimental da eficiência de conversão entre as correntes de carga e spin. Atualmente, têm surgido muitos trabalhos experimentais [54–56] medindo ângulo spin Hall, entretanto ainda estava em aberto a discussão sobre as flutuações universais do ângulo spin Hall. O nosso grupo acabou por responder as questões que envolviam as flutuações do ângulo spin Hall em dispositivos desordenados.

## 4.1 Dispositivo de quatro terminais

O dispositivo que iremos estudar está representado na figura 4.1. O Hamiltoniano que descreve a região azul é

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} (4t + \epsilon_i) c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - \lambda_R \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger \sigma_y c_j - c_i^\dagger \sigma_x c_j). \quad (4.1)$$

O primeiro termo representa a interação entre primeiros vizinhos,  $c_i(c_i^\dagger)$  são os operadores

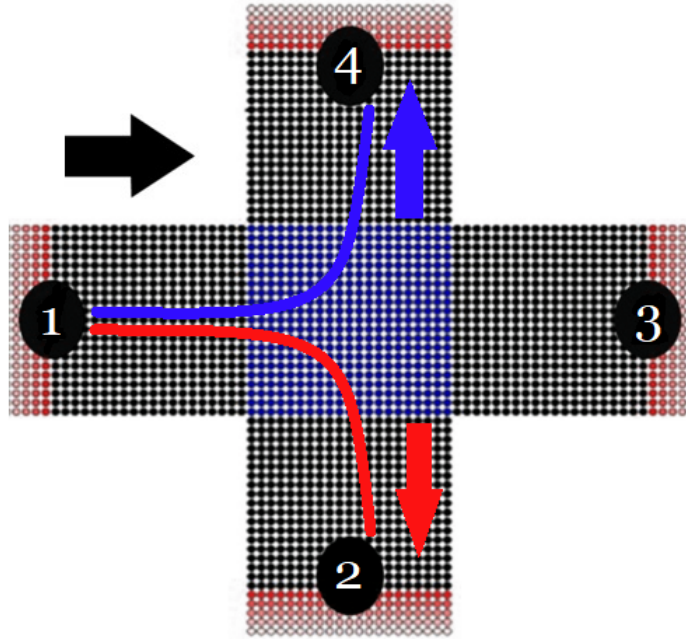


Figura 4.1: É natural no contexto das simulações eletrônicas que representemos um 2DEG através uma rede quadrada. As linhas sólidas representam as possíveis trajetórias dos elétrons na rede. A região central destacada em azul é a região de espalhamento, onde foi adicionado a desordem e a interação spin-órbita. a seta preta representa a corrente longitudinal enquanto as correntes de spin up e down são representadas pela seta vermelha e azul respectivamente.

aniquilação e criação respectivamente,  $t = \hbar^2/2m^*a^2$  representa a energia de salto entre os primeiros vizinhos,  $a$  é a constante de rede e  $m^*$  é a massa efetiva. O segundo termo

representa a desordem de Anderson [26], o qual introduz a desordem sítio a sítio seguindo uma distribuição uniforme em um intervalo  $(-U/2, U/2)$ , onde  $U$  é a intensidade da desordem. O último termo introduz a interação spin órbita do tipo Rashba no sistema,  $\lambda_R$  representa os valores de intensidade da ISO.

O dispositivo que estamos interessados é uma rede quadrada de comprimento  $L = 40a$ , onde  $a$  é o espaçamento entre os sítios que constituem a rede, o dispositivo está representado na figura 4.1. A região em azul representa o centro espalhador no qual está submetida a desordem de Anderson e a interação spin órbita. A região azul é descrita pelo Hamiltoniano presente na equação 4.1.

Seguindo a construção obtida no capítulo 3, precisamos definir as tensões adequadas nos terminais 1 e 3, de modo que apareça uma corrente longitudinal de carga. Quando o portador de carga atravessa o centro espalhador, devido à interação spin-órbita os elétrons sofreram um desvio de sua trajetória de acordo com as equações 3.44. Tal desvio é responsável pela aparição de uma corrente de spin transversal na amostra.

Note que a corrente longitudinal, ao entrar no centro espalhador devido à interação spin-órbita produz uma corrente transversal reproduzindo assim o efeito Hall de spin. A eficiência da conversão da corrente de carga em corrente de spin é quantificada pelo ângulo Hall de spin, o qual é definido como a razão entre a corrente de spin pela corrente de carga. Seguiremos estudando o comportamento das correntes de carga e spin em função da desordem no sistema. Todos os resultados obtidos nesse trabalho foram produzidos através de 15 mil simulações de amostras com desordens distintas.

## 4.2 Corrente Hall de spin $I^s$ em função da desordem de Anderson

Usaremos o método tight binding e a relação de Fisher Lee 2.61 ambos discutidos no capítulo 2 para obter a corrente de spin. Através do pacote Kwant [30] iremos obter a corrente de spin nos terminais 2 e 4. Observe que a corrente de spin é obtida através das equações 3.56 e 3.57. A figura 4.2 mostra a flutuação da corrente Hall de spin  $I^s$  em função da desordem



de Anderson  $U$  aplicada no centro espalhador. O resultado está de acordo com os resultados analíticos, descritos na seção 3.2.2 e o resultado numérico representado na figura 3.5. Nas figuras (a) e (b) temos a média e o desvio da corrente de spin em função da desordem de Anderson. Realizamos as simulações para valores distintos de interação spin órbita mantendo a energia fixa  $E = 1$ . Entretanto, nas figuras (c) e (d) mantivemos a interação spin órbita fixa  $\lambda = 0.8$  e fizemos novamente a média e o desvio agora considerando valores distintos de energia  $E$ . Observe que em ambos os casos o desvio da corrente de spin figura (b) e (d) converge para o valor máximo  $\text{rms}[I^s] = 0.18$ . Observe que tanto na figura 4.2 (a) e (c) apresentam oscilações nas caudas. As oscilações nas caudas surgem das flutuações dos potenciais  $V_{2,4}$  e as curvas decaem devido aos efeitos de localização.

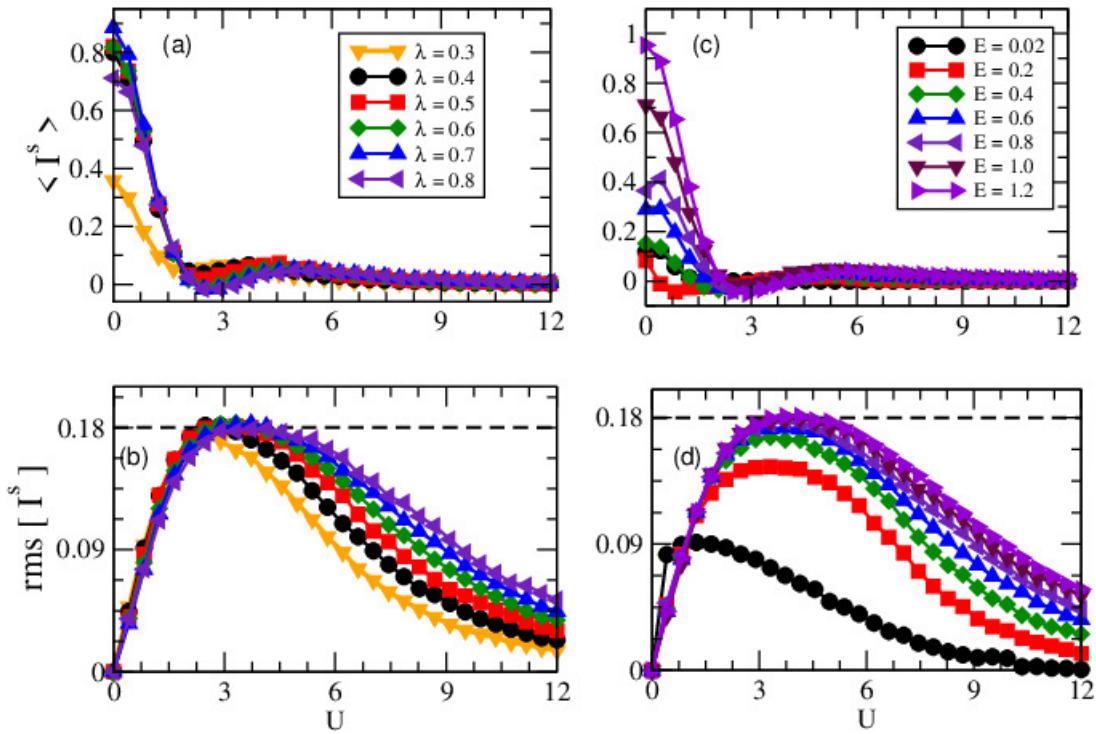


Figura 4.2: As figuras (a) e (c) mostram a média da corrente de spin enquanto (b) e (d) mostram o desvio da corrente de spin em função da desordem  $U$ . As figuras (a) e (b) são para diferentes valores de interação spin órbita mantendo a energia fixa  $E = 1$ , enquanto (c) e (d) são para valores distintos de energia mantendo a interação spin órbita fixa  $\lambda = 0.8$ . Em ambos os casos, o desvio da corrente Hall de spin recupera os valores universais obtidos por Ren [4].

As flutuações da corrente de spin presentes na figura 4.2 (b) e (d), mostram que inicialmente as flutuações crescem com o aumento da desordem, até atingir um valor máximo  $\text{rms}[I^s] = 0.18$  por volta de  $U \simeq 3$ . Na figura 4.2 (b) os valores convergem rapidamente independente da intensidade da interação spin órbita, entretanto na figura 4.2 (d) vemos que a flutuação para baixas energias não convergem para os valores universais de acordo com a equação 3.60 descrita na seção 3.2. Entretanto, para valores altos de energia temos que  $N \gg 1$ , obtemos os resultados descritos no capítulo anterior e já conhecido da literatura [4, 51].

Na seção seguinte iremos discutir as flutuações da corrente longitudinal de carga a qual dá origem a corrente de spin descrita nessa seção e sua descrição será fundamental para a descrição do ângulo spin Hall.

#### 4.2.1 Corrente de carga $I^C$ em função da desordem de Anderson

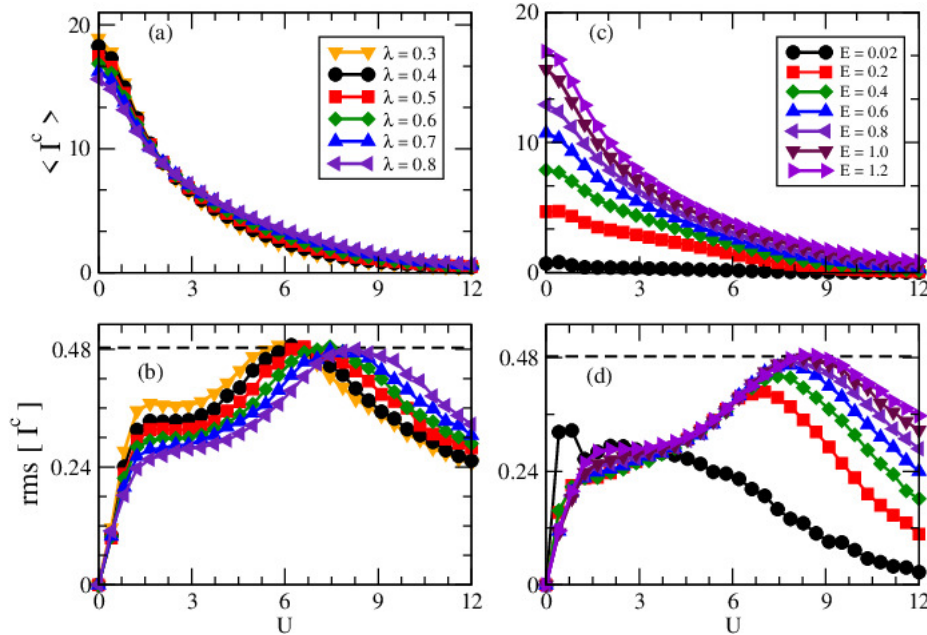


Figura 4.3: As figuras (a) e (c) mostram a média da corrente de carga, enquanto as figuras (b) e (d) mostram o desvio da corrente de carga em função da desordem  $U$ . As medidas (a) e (b) são para diferentes valores de  $\lambda$  com energia fixa  $E = 1$ , em (c) e (d) temos diferentes valores de  $E$  fixando o valor da interação em  $\lambda = 0.8$ . Em ambos os casos, o resultado do desvio máximo da corrente de carga é  $\text{rms}[I^c] = 0.48$  (linha tracejada).

A corrente de carga é descrita pelas correntes presentes nos terminais 1 e 3 de acordo com a equação 3.51 descrita no capítulo anterior. A corrente de carga é a corrente que passa pelo centro espalhador em direção ao terminal 3. Essa corrente é denominada corrente longitudinal e não apresenta uma polarização de spin específica, sendo assim a corrente longitudinal é uma corrente puramente de carga. Na figura 4.3 está presente os resultados para as flutuações da corrente de carga em função da desordem de Anderson  $U$ . Na figura (a) está presente a média para valores distintos de ISO ( $\lambda_R$ ) mantendo a energia fixa  $E = 1$  na figura (c) está presente a média para os valores distintos de energia  $E$  mantendo a ISO fixa  $\lambda_R = 0.8$ . Dessa forma, conseguimos discutir qual o papel da energia e da interação spin órbita para a descrição estatística das flutuações da corrente de carga. Todos os resultados presentes na figura 4.3 foram obtidos através de 15 mil simulações computacionais.

Ao observar a figura (a) e (c) concluímos que para altas desordens a corrente de carga desaparece devido aos efeitos de localização, ou seja, o dispositivo impede que os portadores de carga atravessem a amostra. Sendo assim, a amostra se encontra no regime isolante. Na figura (c) percebemos que a amplitude máxima da corrente de carga depende dos valores de energia do sistema, com mais energia o elétron consegue escapar da desordem do sistema sem sofrer muitos desvios em sua trajetória. Observando a figura (b) percebemos que o desvio da corrente de carga aumenta rapidamente quanto menor a interação spin órbita. Observe que o desvio máximo obtido para a corrente de carga figura(b) e figura (d) é  $\text{rms}[I^c] \simeq 0.48$  (linha pontilhada) e ocorre para altas desordens ( $U \geq 8$ ).

O comportamento da corrente de carga longitudinal é descrito pela equação 3.51. Diferentemente da corrente de spin presente na figura 4.2, a média da corrente de carga não apresenta oscilações em suas caudas, devido ao fato de que as tensões nos terminais 1 e 3 são fixas, e não apresentam flutuações durante o experimento. Além disso, o desvio máximo da corrente de carga presente na figura (b) e (d) ocorre para intensidades de desordem muito maiores  $U \geq 6$  do os obtidos para a corrente de spin  $U \simeq 3$ .

A seguir iremos descrever o ângulo spin Hall. O qual é a grandeza que usaremos para medir a eficiência no processo de geração da corrente de spin através de uma corrente de carga.

### 4.2.2 Ângulo spin-Hall $\Theta_{sH}$ em função da desordem de Anderson

O ângulo spin Hall  $\Theta_{sH}$  pode ser definido como a razão entre a corrente de carga e a corrente de spin

$$\Theta_{sH} = \frac{I^s}{I^c}. \quad (4.2)$$

Como dito anteriormente o ângulo spin Hall mede a eficiência da conversão da corrente de carga em corrente de spin, logo é necessário observar como a desordem afeta a eficiência. O resultado obtido está representado na figura 4.4. Nas figuras (a) e (b) temos a média e o desvio do ângulo spin Hall para diferentes valores de interação spin órbita  $\lambda_R$ , mantendo a energia fixa  $E = 1$ . Nas figuras (c) e (d) temos novamente a média e o desvio do ângulo spin Hall, entretanto fixamos a intensidade da interação spin órbita em  $\lambda_R = 0.8$  e variamos os valores de energia  $E$  do sistema. Na figura 4.4 (a) a média do ângulo spin Hall diminui rapidamente com o aumento da desordem, percebe-se que para valores pequenos de interação spin órbita a média do ângulo spin Hall diminui mais rapidamente. Entretanto, na figura 4.4 (c) percebemos que a média desaparece mais rapidamente para valores maiores de energia, note que a média do ângulo spin Hall manteve o comportamento da cauda obtida na corrente de spin ver figura 4.2. Entretanto, o desvio máximo acontece para valores  $U \geq 6$  diferente das flutuações obtidas para a corrente de spin.

As oscilações presentes na figura 4.2 são preservadas da corrente de spin e se tornam relevantes para o ângulo spin Hall. Entretanto o comportamento das flutuações da corrente de spin parecem não ser relevantes para o ângulo spin Hall, observe a figura 4.4 (b) o valor máximo apresenta um crescimento de acordo com os valores de interação spin órbita, ou seja, quanto maior a interação spin orbita mais eficiente é o processo de conversão entre as correntes. Entretanto na figura 4.4 (d) percebemos que quanto maior a energia ou seja de forma equivalente, o número de canais abertos no sistema menor será a eficiência. O valor máximo obtido para a nossa amostra é de 9% entretanto para outras amostras esse valor pode variar 0.01% a 58% de acordo com as referências [54–56].

Na figura (b) vemos que o crescimento da eficiência é independente da intensidade da interação spin orbita, ou seja para desordens  $U \leq 4$  as flutuações do ângulo Hall não dependem

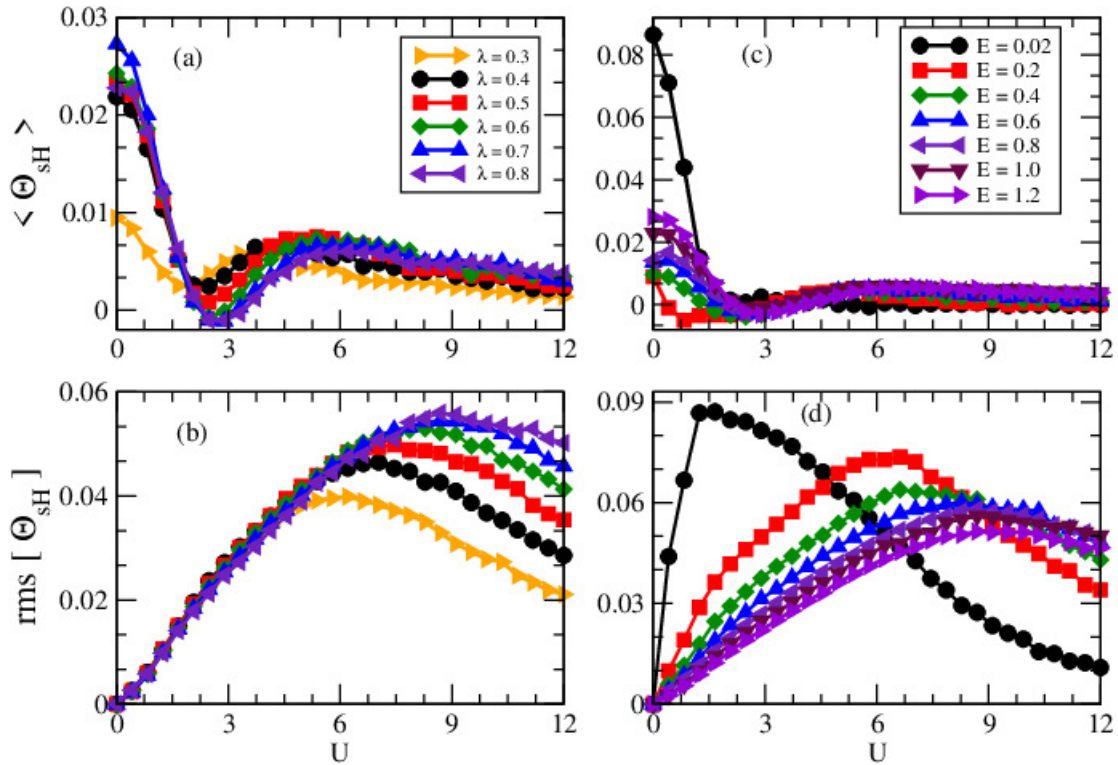


Figura 4.4: As figuras (a) e (c) mostram a média do ângulo spin Hall, enquanto as figuras (b) e (d) mostram o desvio do ângulo spin Hall em função da desordem  $U$ . As medidas (a) e (b) são para diferentes valores de  $\lambda$  com energia fixa  $E = 1$ , em (c) e (d) temos diferentes valores de  $E$  fixando o valor da interação em  $\lambda = 0.8$ .

da intensidade da interação spin órbita. Entretanto, para desordens maiores fica evidente que quanto maior a intensidade da ISO maior é a flutuação do ângulo spin Hall. Atingindo o valor máximo de  $\text{rms}[\Theta_{sH}] \simeq 0.058$ .

Na figura (d) vemos que para baixas energias a eficiência é muito alta chegando a valores de  $\text{rms}[\Theta_{sH}] \simeq 9\%$  e cai rapidamente quando a energia aumenta. Esse comportamento surge do fato de que quanto maior a energia maior será a probabilidade de o portador de carga escapar do centro espalhado sofrendo o menor desvio possível, contribuindo assim para um acréscimo na corrente de carga presente no sistema.

Através da descrição analítica proposta pelo nosso grupo na referência [27], concluímos que o desvio máximo do ângulo spin Hall é inversamente proporcional ao número de modos de

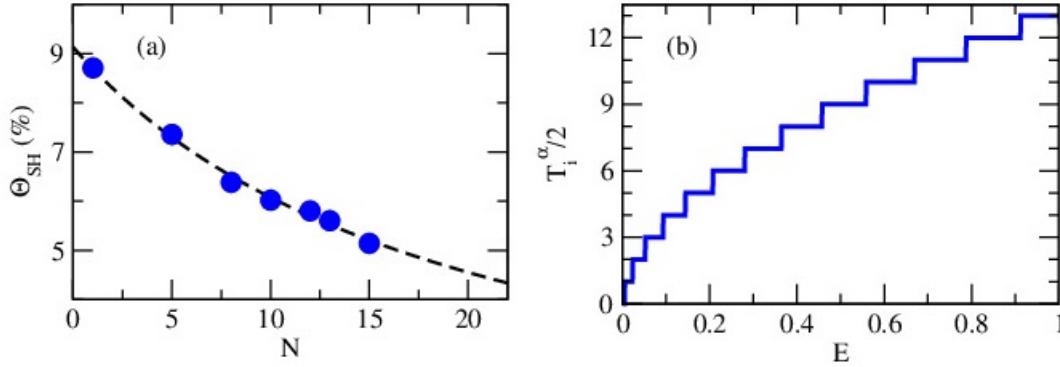


Figura 4.5: (a) os pontos azuis são os desvios máximos retirado da figura 4.4 em função do número de canais a linha pontilhada é um ajuste dos dados numéricos. (b) os coeficientes de transmissão em função da energia.

ondas propagantes do sistema

$$\text{rms}[\Theta_{sH}] = \frac{0.18}{N} \left(1 + \frac{L}{l_e}\right). \quad (4.3)$$

No limite para altas energias  $N \gg 1$  e de um fio infinito  $L/l_e \gg 1$ , concluímos que

$$\Theta_{sH} = \frac{1.8}{\sigma}. \quad (4.4)$$

Onde  $\sigma$  é a condutividade definida como  $\sigma = Nl_e/L$ , onde  $l_e$  é o livre caminho médio da amostra,  $L$  é o comprimento da amostra e  $N$  é o número de modos de ondas propagantes nos guias.

Na figura 4.5 (a) temos o desvio máximo do ângulo spin Hall retirado da figura 4.4 em função do número de modos de ondas propagantes nos guias. Perceba que o resultado numérico (pontos azuis) está de acordo com o comportamento previsto em nossa descrição analítica 4.3. Observe que na figura (b) temos a relação entre os coeficientes de transmissão e a energia do sistema. De modo que,  $T_i^\alpha = 2N$ , nos possibilita a relação imediata da energia com os números de modos de ondas propagantes nos guias. Nossos resultados numéricos e analíticos presentes na figura 4.5 e equação 4.3, mostram que o produto entre o ângulo spin Hall e a

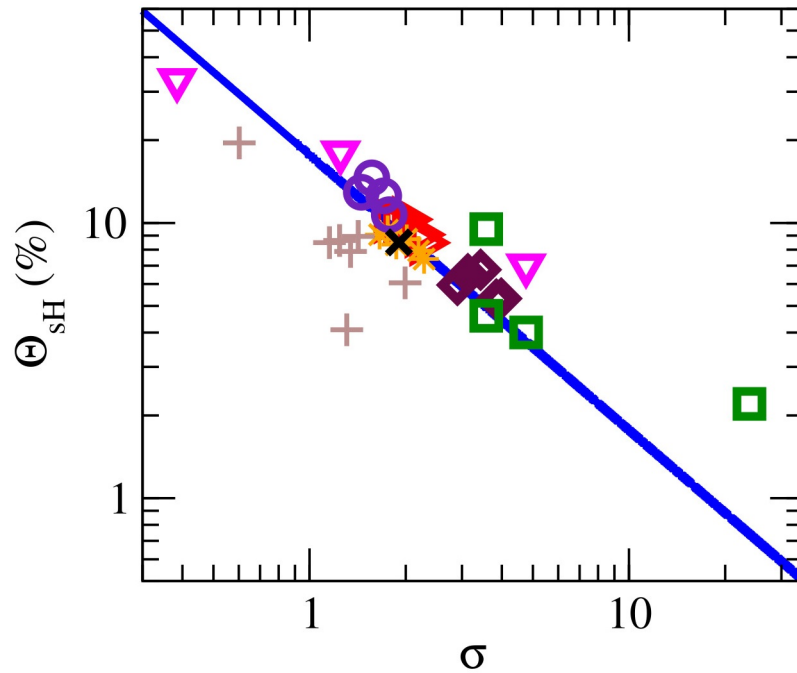


Figura 4.6: A figura mostra SHA  $\Theta_{sH}(\%)$  em função da condutividade adimensional  $\sigma$ . Os símbolos: círculo, estrela, diamante e triângulo pra cima foram retirados da referência [5]. Os símbolos; quadrado,  $x$  e triângulo para baixo foram obtidos das referências [6–9]. A linha azul é a equação 4.5.

condutividade seguem a seguinte relação universal

$$\Theta_{sH} \times \sigma = 0.18. \quad (4.5)$$

Na figura 4.6 nos plotamos a equação 4.5 linha azul, e introduzimos valores experimentais retirados das referências [5–9], obtendo assim a confirmação da relação universal que surge do produto das flutuações do ângulo Hall de spin pela condutividade elétrica do material.

Observe que agora ao conhecermos o comportamento das flutuações do ângulo spin Hall de uma determinada amostra, conseguimos através da equação 4.5 obter o livre caminho médio do sistema, possibilitando assim que o efeito Hall de spin possa ser usado para identificar o livre caminho médio da amostra.

---

---

# CAPÍTULO 5

---

## CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Neste trabalho apresentamos um estudo numérico das flutuações do ângulo spin Hall em um dispositivo desordenado com uma interação spin órbita do tipo Rashba. Obtivemos que o desvio do ângulo spin Hall no limite de altas energias é função de apenas três variáveis relevantes na descrição do transporte eletrônico essas variáveis surgem da contribuição da corrente de carga [27].

Com base no trabalho, podemos discutir qual o papel de outros tipos de interação spin órbita e como elas contribuem para a eficiência de conversão no efeito Hall de spin e se existe alguma relação de concorrência entre as interações spin órbita, visto que essas duas perspectivas não foram avaliadas nesse trabalho. Para isso precisamos estudar qual o papel dessas outras formas de interação spin órbita no processo de conversão, dessa forma obter o desvio para o ângulo spin Hall nessa nova amostra e através dele buscar compreender quais os parâmetros relevantes para o aumento do ângulo spin Hall desse novo dispositivo. Além disso podemos discutir como ocorre as flutuações do ângulo spin Hall em outros materiais como o grafeno, possibilitando o estudo das contribuições para cada tipo de interação spin órbita.



---

Esse trabalho foi publicado como destaque na revista *Physical Review B* (Rapid Communication) [27] e além disso o nosso grupo ganhou a menção honrosa no Encontro de Outono da Sociedade Brasileira de Física na seção de pôster destinados ao estudo da spintrônica no ano de 2020.

..

---

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] MOORE, G. E. et al. *Cramming more components onto integrated circuits*. [S.l.]: McGraw-Hill New York, 1965. IX, 2
- [2] KATO, Y. K. et al. Observation of the spin hall effect in semiconductors. *science*, American Association for the Advancement of Science, v. 306, n. 5703, p. 1910–1913, 2004. IX, 3, 4, 5, 37
- [3] SHEPARD, K.; ROUKES, M.; GAAG, B. Van der. Experimental measurement of scattering coefficients in mesoscopic conductors. *Physical Review B*, APS, v. 46, n. 15, p. 9648, 1992. X, 8, 35, 37, 50
- [4] REN, W. et al. Universal spin-hall conductance fluctuations in two dimensions. *Physical review letters*, APS, v. 97, n. 6, p. 066603, 2006. X, XI, 8, 48, 49, 50, 53, 54
- [5] SAGASTA, E. et al. Tuning the spin hall effect of pt from the moderately dirty to the superclean regime. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 94, n. 6, Aug 2016. ISSN 2469-9969. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.94.060412>>. XI, 59
- [6] PHAM, V. T. et al. Ferromagnetic/nonmagnetic nanostructures for the electrical measurement of the spin hall effect. *Nano letters*, ACS Publications, v. 16, n. 11, p. 6755–6760, 2016. XI, 5, 59

- [7] FRITZ, K. et al. Large spin hall effect in an amorphous binary alloy. *Physical Review B*, APS, v. 98, n. 9, p. 094433, 2018. XI, 5, 59
- [8] PAI, C.-F. et al. Spin transfer torque devices utilizing the giant spin hall effect of tungsten. *Applied Physics Letters*, American Institute of Physics, v. 101, n. 12, p. 122404, 2012. XI, 5, 59
- [9] LOU, P. C. et al. Large spin hall effect in si at room temperature. *Physical Review B*, APS, v. 101, n. 9, p. 094435, 2020. XI, 5, 59
- [10] FOREST, L. D. The audion: a new receiver for wireless telegraphy. *Proceedings of the American Institute of Electrical Engineers*, IEEE, v. 25, n. 10, p. 719–747, 1906. 1
- [11] SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. *Mecânica quântica moderna*. [S.l.]: bookman, 2013. 1, 3
- [12] NELSON, R. R. *The link between science and invention: The case of the transistor*. [S.l.]: Princeton University Press, 2015. 2
- [13] SHOCKLEY, W. The theory of p-n junctions in semiconductors and p-n junction transistors. *Bell System Technical Journal*, Wiley Online Library, v. 28, n. 3, p. 435–489, 1949. 2
- [14] KILBY, J. The integrated circuit's early history. *Proceedings of the IEEE*, IEEE, v. 88, n. 1, p. 109–111, 2000. 2
- [15] MOORE, G. E. Cramming more components onto integrated circuits, reprinted from electronics, volume 38, number 8, april 19, 1965, pp. 114 ff. *IEEE solid-state circuits society newsletter*, IEEE, v. 11, n. 3, p. 33–35, 2006. 2
- [16] CHAPPERT, C.; FERT, A.; DAU, F. N. V. The emergence of spin electronics in data storage. *Nanoscience And Technology: A Collection of Reviews from Nature Journals*, World Scientific, p. 147–157, 2010. 3

- [17] BAIBICH, M. N. et al. Giant magnetoresistance of (001)fe/(001)cr magnetic superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 61, p. 2472–2475, Nov 1988. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.61.2472>>. 3
- [18] DYAKONOV, M. I.; PEREL, V. Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 35, n. 6, p. 459–460, 1971. 3, 37
- [19] HIRSCH, J. Spin hall effect. *Physical review letters*, APS, v. 83, n. 9, p. 1834, 1999. 3
- [20] WUNDERLICH, J. et al. Experimental observation of the spin-hall effect in a two-dimensional spin-orbit coupled semiconductor system. *Physical review letters*, APS, v. 94, n. 4, p. 047204, 2005. 5
- [21] SINOVA, J. et al. Universal intrinsic spin hall effect. *Physical review letters*, APS, v. 92, n. 12, p. 126603, 2004. 5
- [22] DING, J. et al. Direct observation of spin accumulation in cu induced by spin pumping. *Physical Review Research*, APS, v. 2, n. 1, p. 013262, 2020. 5
- [23] UCHIDA, K. et al. Observation of the spin seebeck effect. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 455, n. 7214, p. 778–781, 2008. 5
- [24] JAWORSKI, C. et al. Observation of the spin-seebeck effect in a ferromagnetic semiconductor. *Nature materials*, Nature Publishing Group, v. 9, n. 11, p. 898–903, 2010. 5
- [25] UCHIDA, K.-i. et al. Observation of longitudinal spin-seebeck effect in magnetic insulators. *Applied Physics Letters*, American Institute of Physics, v. 97, n. 17, p. 172505, 2010. 5
- [26] ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. *Physical review*, APS, v. 109, n. 5, p. 1492, 1958. 5, 52
- [27] SANTANA, F. et al. Spin hall angle fluctuations in a device with disorder. *Physical Review B*, APS, v. 102, n. 4, p. 041107, 2020. 5, 57, 60, 61

- [28] IMRY, Y. *Introduction to mesoscopic physics*. [S.l.]: Oxford University Press on Demand, 2002. 5
- [29] DATTA, S. *Electronic transport in mesoscopic systems*. [S.l.]: Cambridge university press, 1997. 5, 6, 10, 24, 27, 33, 36
- [30] GROTH, C. W. et al. Kwant: a software package for quantum transport. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 16, n. 6, p. 063065, 2014. 8, 28, 50, 52
- [31] ODASHIMA, M. M.; PRADO, B. G.; VERNEK, E. Pedagogical introduction to equilibrium green's functions: condensed-matter examples with numerical implementations. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, SciELO Brasil, v. 39, n. 1, 2017. 10, 11, 14
- [32] RYNDYK, D. A. et al. Theory of quantum transport at nanoscale. *Springer Series in Solid-State Sciences*, Springer, v. 184, 2016. 10
- [33] MELNIKOV, Y. A. Some applications of the greens' function method in mechanics. *International Journal of Solids and Structures*, Elsevier, v. 13, n. 11, p. 1045–1058, 1977. 10
- [34] BEESACK, P. R. On the greens function of an tv-point boundary value problem. *EF BECKENBACH D. DERRY HL ROYDEN EG STRAUS TM CHERRY M. OHTSUKA E. SPANIER F. WOLF*, p. 801, 1962. 10
- [35] BUSH, A.; HUGHES, G. The average flow model: a greens function approach. In: *Developments in Numerical and Experimental Methods Applied to Tribology*. [S.l.]: Elsevier, 1984. p. 108–113. 10
- [36] SCHWINGER, J. Coulomb green's function. *Journal of Mathematical Physics*, American Institute of Physics, v. 5, n. 11, p. 1606–1608, 1964. 10
- [37] JACKSON, J. D. *Classical electrodynamics*. [S.l.]: American Association of Physics Teachers, 1999. 10, 38
- [38] MELLO, P. et al. *Quantum Transport in Mesoscopic Systems: Complexity and Statistical Fluctuations : a Maximum-entropy Viewpoint*. Oxford University Press,

2004. (Mesoscopic physics and nanotechnology). ISBN 9780198525820. Disponível em: <[https://books.google.com.br/books?id=\\_6fXYmexklsC](https://books.google.com.br/books?id=_6fXYmexklsC)>. 13, 14
- [39] LEWENKOPF, C. H.; MUCCIOLO, E. R. The recursive green's function method for graphene. *Journal of Computational Electronics*, Springer, v. 12, n. 2, p. 203–231, 2013. 16
- [40] FALLEEV, S. V. et al. Ab initio tight-binding lnto method for nonequilibrium electron transport in nanosystems. *Physical Review B*, APS, v. 71, n. 19, p. 195422, 2005. 16
- [41] FISHER, D. S.; LEE, P. A. Relation between conductivity and transmission matrix. *Physical Review B*, APS, v. 23, n. 12, p. 6851, 1981. 24, 28
- [42] HALL, E. H. et al. On a new action of the magnet on electric currents. *American Journal of Mathematics*, v. 2, n. 3, p. 287–292, 1879. 29
- [43] OLIVEIRA, I. S. *Introdução à física do estado sólido*. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2005. 30
- [44] PREMASIRI, K.; GAO, X. P. Tuning spin–orbit coupling in 2d materials for spintronics: a topical review. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 31, n. 19, p. 193001, 2019. 37
- [45] NALITOV, A. et al. Spin-orbit coupling and the optical spin hall effect in photonic graphene. *Physical review letters*, APS, v. 114, n. 2, p. 026803, 2015. 37
- [46] GRIFFITHS, D. J. *Introduction to electrodynamics*. [S.l.]: Prentice Hall New Jersey, 1962. 38
- [47] DRESSELHAUS, G. Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures. *Physical Review*, APS, v. 100, n. 2, p. 580, 1955. 39
- [48] LI, X.; WU, Z.; LIU, J. Rashba spin-orbit coupling in graphene monolayer coated by periodic magnetic stripes. *Scientific reports*, Nature Publishing Group, v. 7, n. 1, p. 1–9, 2017. 39

- [49] MIN, H. et al. Intrinsic and rashba spin-orbit interactions in graphene sheets. *Physical Review B*, APS, v. 74, n. 16, p. 165310, 2006. 39
- [50] GRIFFITHS, D. J. *Introduction to quantum mechanics*. [S.l.]: Pearson International Edition (Pearson Prentice Hall, Upper Saddle River, 2005), 1960. 40
- [51] BARDARSON, J.; ADAGIDELI, I.; JACQUOD, P. Mesoscopic spin hall effect. *Physical review letters*, APS, v. 98, n. 19, p. 196601, 2007. 44, 45, 47, 48, 50, 54
- [52] BÜTTIKER, M. Four-terminal phase-coherent conductance. *Physical review letters*, APS, v. 57, n. 14, p. 1761, 1986. 44
- [53] BROUWER, P. W.; BEENAKKER, C. W. Diagrammatic method of integration over the unitary group, with applications to quantum transport in mesoscopic systems. *Journal of Mathematical Physics*, v. 37, n. 10, 10 1996. 47
- [54] ALVES-SANTOS, O. et al. Giant spin-charge conversion driven by nanoscopic particles of ag in pt. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 96, p. 060408, Aug 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.96.060408>>. 50, 56
- [55] SEKI, T. et al. Giant spin hall effect in perpendicularly spin-polarized fept/au devices. *Nature Materials*, Nature, v. 7, p. 125, Feb 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/nmat2098>>. 50, 56
- [56] SEKI, T. et al. Spin hall effect and nernst effect in fept/au multi-terminal devices with different au thicknesses. *Solid State Communications*, v. 150, n. 11, p. 496 – 499, 2010. ISSN 0038-1098. Spin Caloritronics. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0038109809007078>>. 50, 56