

# TÍNH TOÁN DÒNG SPIN TRONG CẤU TRÚC TIẾP XÚC DỊ CHẤT BÁN DẪN

Nguyễn Thị Loan<sup>1,2</sup>, Nguyễn Thị Lâm Hoài<sup>3</sup>

## TÓM TẮT

*Trong bài báo này chúng tôi tính toán dòng spin qua cấu trúc dị chất bán dẫn nền GaAs. Chúng tôi sử dụng mô hình k.p 14 vùng để mô tả các vật liệu bán dẫn. Chúng tôi thiết lập chương trình tính toán và đưa ra đồ thị của dòng spin trong cấu trúc dị chất bán dẫn GaMnAs/GaAs/GaMnAs trong ba cấu hình từ hóa: song song, đối song và cấu hình truyền spin. Mô hình này cho phép bao gồm sự có mặt của cả tương tác spin quỹ đạo và tương tác trao đổi trong biểu thức của Hamiltonian.*

**Từ khóa:** Spintronic, dòng spin, spin bán dẫn, điện tử học spin.

## 1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Spintronics là ngành khoa học mới rất được quan tâm phát triển trong khoảng 3 thập kỉ trở lại đây. Spintronics khai thác các tính chất của spin của các electron thay vì điện tích của chúng nhằm tạo ra các linh kiện spin tử với kích thước nhỏ gọn nhưng đa năng hơn, mạnh mẽ hơn và có thời gian sống lâu hơn so với các linh kiện điện tử truyền thống. Các linh kiện spintronics thế hệ đầu tiên đã được thương mại hóa trên thị trường.

Dòng spin là khái niệm then chốt của công nghệ spintronics. Dòng spin thường được hiểu là hiệu số các dòng hạt tải mang spin up và spin down, và là hệ quả của sự không cân bằng về mật độ hay thế hóa của các hạt mang spin. Đến nay đã có rất nhiều công trình nghiên cứu, tính toán và tìm cách định nghĩa dòng spin trong các vật liệu khác nhau [1-9]. Tuy vậy, hiện vẫn chưa có công trình nghiên cứu nào cho thấy đáng điều cụ thể của dòng spin.

Các lớp tiếp xúc xuyên hầm từ tính (Magnetic tunnelling junctions - TMJs) gồm có hai lớp kim loại từ tính được cách ly bởi 1 lớp cực mỏng chất cách điện, đang hứa hẹn những ứng dụng quan trọng trong công nghiệp tích trữ thông tin, sensor và trong công nghệ spintronics. Trong các cấu trúc này thì cấu trúc tạo bởi vật liệu bán dẫn pha tạp từ GaMnAs rất đáng chú ý cả về mặt nghiên cứu lý thuyết và công nghệ vì hai lý do: i) GaMnAs là vật liệu spintronics bán dẫn điển hình ở đó mô men từ của tạp Mn có tương tác với điện tử và lỗ trống của bán dẫn; ii) Linh kiện làm từ GaMnAs dễ dàng tích hợp với các linh kiện điện tử bằng bán dẫn III-V đã và đang tồn tại. Trong bài báo này, chúng tôi sẽ tính toán cụ thể dòng spin qua cấu trúc dị chất bán dẫn GaMnAs/ GaAs/GaMnAs kết quả đạt được sẽ có ý nghĩa quan trọng trong sự phát triển của ngành khoa học spintronics.

<sup>1</sup> Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức

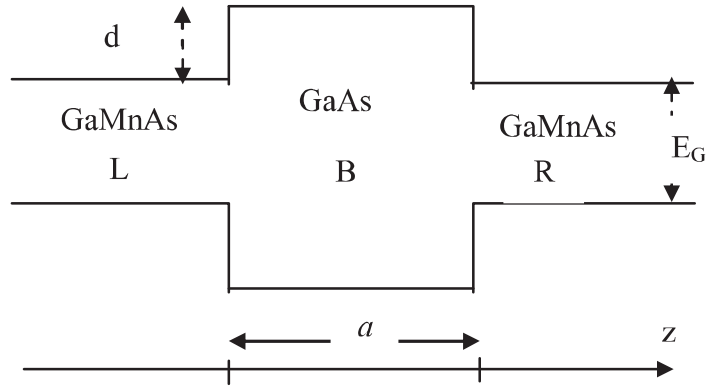
<sup>2</sup> Học viện Khoa học và Công nghệ, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam

<sup>3</sup> Viện Vật lý, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam

## 2. NỘI DUNG

### 2.1. Hamiltonian

Ta xem xét bài toán vận chuyển đa vùng, i.e., bao gồm cả điện tử và lỗ trống, qua cấu trúc đơn tường thế tạo bởi tiếp xúc dị chất bán dẫn được cấy dọc theo trục **[001]** của tinh thể. Cấu trúc này bao gồm một lớp bán dẫn thuần GaAs có độ dày  $a$  (nm) đóng vai trò tường thế (B) kẹp giữa hai vùng bán dẫn pha từ loãng GaMnAs ở phía trái (L) và phía phải (R). Độ cao tường thế  $d$  (eV) được tính bởi sự chênh lệch năng lượng giữa hai vùng cấm của hai vật liệu (Hình 1).



**Hình 1. Cấu trúc MTJ GaMnAs/GaAs/GaMnAs**

Theo Drouhin và các cộng sự [9], toán tử dòng spin được định nghĩa bằng phản giao hoán tử của toán tử spin và toán tử vận tốc hạt.

$$\hat{J}_j^\alpha = \frac{1}{2} (\hat{v}_j \hat{\sigma}_\alpha + \hat{\sigma}_\alpha \hat{v}_j) \quad (1)$$

Ở đây, toán tử vận tốc được định nghĩa bằng đạo hàm của Hamiltonian theo xung lượng.

$$\hat{v}_j = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_j} \quad (2)$$

Giá trị của dòng spin tại điểm  $z$  được tính:

$$J_s = \text{Re} \langle \psi | \hat{J}_s | \psi \rangle \quad (3)$$

Trong đó  $|\psi\rangle$  là nghiệm của phương trình Schrodinger:

$$(\hat{H} + V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (4)$$

Với  $\hat{H} = \{\hat{H}^{(j)}, j = L, B, R\}$  là Hamiltonian mô tả vật liệu trong từng vùng,  $V^L = V^R = 0$  là thế năng và  $E$  là năng lượng của hạt tải. Chúng tôi sử dụng hình thức luận k.p 14 vùng để mô tả cấu trúc điện tử của các vật liệu. Trong hình thức luận này, Hamiltonian có dạng một ma trận 14x14, cho phép bao gồm trong tính toán vùng dẫn bậc cao  $\Gamma_{7C}, \Gamma_{8C}$ , vùng dẫn thứ nhất  $\Gamma_6$ , vùng lỗ trống nặng, lỗ trống nhẹ  $\Gamma_8$  và vùng lỗ trống bị tách do tương tác spin quỹ đạo  $\Gamma_7$ . Biểu thức cụ thể của Hamiltonian có thể tham khảo trong tài liệu [10]. Cho

vật liệu GaAs (vùng B), chúng tôi chỉ sử dụng ma trận k.p với các mức năng lượng ở tâm vùng Brillouin là  $E_{8C} = 4.74$ ;  $E_{7C} = 4.54$ ;  $E_6 = 1.519$ ;  $E_8 = 0$ ;  $E_7 = 0.341$  (eV). Các thông số kết cặp k.p và các tham số Luttinger của mô hình được liệt kê ở bảng 1 dưới đây.

**Bảng 1. Các tham số của ma trận k.p 14x14 cho vật liệu GaAs**

| Tham số kết cặp k.p và tương tác spin quỹ đạo | Tham số Luttinger                                               |
|-----------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------|
| $\Delta = 0,341(eV)$                          | $\gamma'_1 = -1; \gamma'_2 = 0,375; \gamma'_3 = -0,318$         |
| $\Delta' = 0,17(eV)$                          | $\gamma'_C = 1;$                                                |
| $P = 9,88 \left( eV \overset{0}{A} \right)$   | $\gamma'_{C1} = -1; \gamma'_{C2} = 0,1; \gamma'_{C3} = 0,1$     |
| $P_X = 8,68 \left( eV \overset{0}{A} \right)$ | $\gamma'_{D1} = -1; \gamma'_{D2} = 0,375; \gamma'_{D3} = 0,318$ |
| $P' = 0,41 \left( eV \overset{0}{A} \right)$  | $\gamma'_{DC1} = -1; \gamma'_D = 0,1; \gamma'_{DC3} = 0,1$      |

Đối với vật liệu GaMnAs (vùng L và R), ngoài ma trận k.p, ta phải thêm vào phần tương tác trao đổi giữa tạp từ và vật liệu nền GaAs. Tương tác này thêm vào ma trận k.p một số hạng:

$$\hat{H}_{\text{exc}} = 6B_G s.m \quad (5)$$

Ở đây  $m$  là độ từ hóa,  $s$  là spin của điện tử hay lỗ trống. Trong hệ cơ sở của ma trận k.p 14x14, phần tương tác trao đổi này được viết dưới dạng ma trận

$$H_{\text{exc}} = \begin{pmatrix} H_{\text{exc}}^{\Gamma_{7,8C}} & 0 & 0 \\ 0 & H_{\text{exc}}^{\Gamma_1} & 0 \\ 0 & 0 & H_{\text{exc}}^{\Gamma_{7,8}} \end{pmatrix} \quad (6)$$

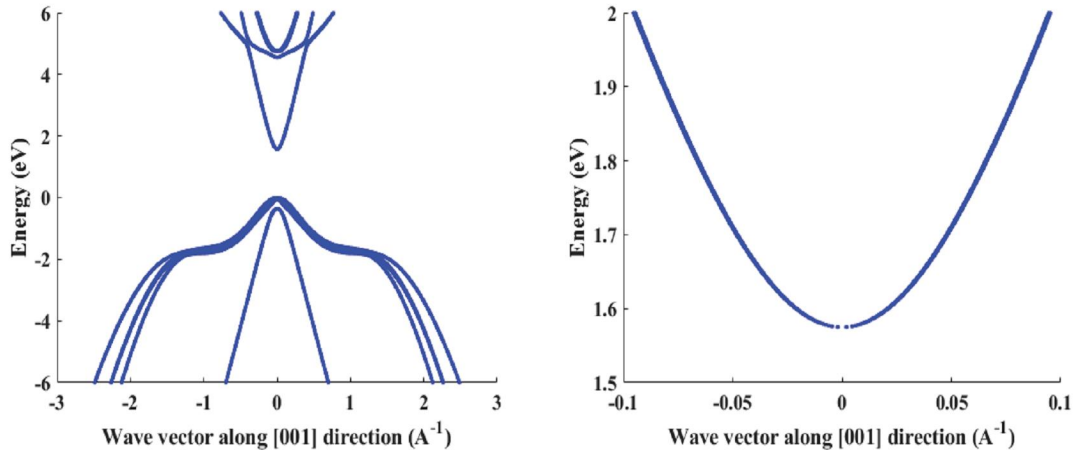
ở đó:

$$H_{\text{exc}}^{\Gamma_{7,8}} = B_G^{\Gamma_{7,8}} \begin{pmatrix} 3m_z & \sqrt{3}m_- & 0 & 0 & -\sqrt{6}m_- & 0 \\ \sqrt{3}m_+ & m_z & 2m_- & 0 & 2\sqrt{2}m_z & -\sqrt{2}m_z \\ 0 & 2m_+ & -m_z & \sqrt{3}m_- & \sqrt{2}m_+ & 2\sqrt{2}m_z \\ 0 & 0 & \sqrt{3}m_+ & -3m_z & 0 & \sqrt{6}m_+ \\ -\sqrt{6}m_+ & 2\sqrt{2}m_z & \sqrt{2}m_- & 0 & -m_z & -m_- \\ 0 & -\sqrt{2}m_+ & 2\sqrt{2}m_z & \sqrt{6}m_- & -m_+ & m_z \end{pmatrix} \quad (7)$$

với  $m_+ = m_x + im_y$ ;  $m_- = m_x - im_y$ . Do tính đối xứng,  $H_{\text{exc}}^{\Gamma_{7,8C}}$  có dạng giống hệt như  $H_{\text{exc}}^{\Gamma_{7,8}}$ , nhưng với hệ số tỉ lệ tương ứng là  $B_G^{\Gamma_{7,8C}}$ . Ma trận  $H_{\text{exc}}^{\Gamma_1}$  có dạng:

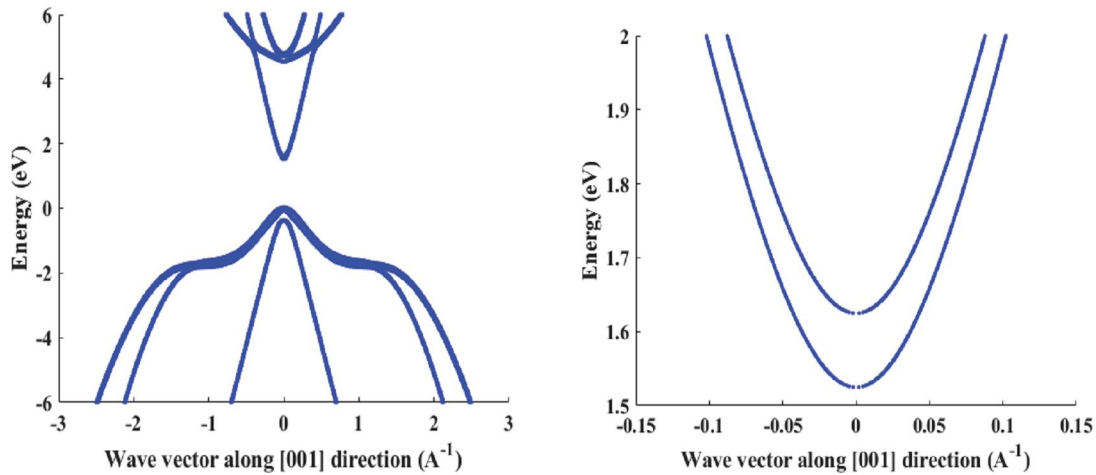
$$H_{\text{exc}}^{\Gamma_1} = 3B_G^{\Gamma_1} \begin{pmatrix} m_z & m_- \\ m_+ & -m_z \end{pmatrix} \quad (8)$$

Từ Hamiltonian xây dựng được khi thêm vào phần tương tác trao đổi, chéo hóa ma trận k.p 14x14 ta thu được cấu trúc toàn vùng năng lượng và cấu trúc vùng dẫn của GaAs và GaMnAs như hình 2 và hình 3.



**Hình 2. Cấu trúc toàn vùng năng lượng (a) và cấu trúc vùng dẫn (b) của GaAs**

Cấu trúc toàn bộ vùng năng lượng và cấu trúc vùng dẫn của vật liệu trong trường thế GaAs biểu diễn tương ứng trên các hình 2a, 2b, với thành phần véc tơ sóng song song được chọn là  $[k_x, k_y] = [0, 0, 0]$ . Cấu trúc vùng năng lượng và vùng dẫn của GaMnAs được biểu diễn trên Hình 3a, 3b với năng lượng trao đổi 0.05 (eV). Ta thấy sự có mặt của tương tác trao đổi sẽ làm khur suy biến theo spin của các vùng năng lượng ngay từ tâm vùng. Hình 3b cho thấy vùng dẫn của GaMnAs bị tách ra làm hai vùng con với khoảng cách năng lượng là 0.1eV, bằng hai lần năng lượng của tương tác trao đổi. Spin của điện tử trên hai vùng con là ngược nhau và có định hướng song song với véc tơ từ hóa.



**Hình 3. Cấu trúc toàn vùng năng lượng (a) và cấu trúc vùng dẫn (b) của GaMnAs**

## 2.2. Điều kiện biên

Trở lại phương trình Schrodinger, xét trạng thái dừng với năng lượng chui ngầm  $E$ , và giả thiết rằng thành phần véc tơ sóng  $[k_x, k_y]$  song song với tường thể là bảo toàn, bằng cách tìm nghiệm của Hamiltonian ta có thể tìm được các giá trị số sóng  $k_z$  tương ứng với mỗi vùng tại mỗi lớp của vật liệu. Gọi nghiệm  $k_z$  tương ứng với vùng năng lượng  $n$  là  $k_n$ . Do tính nghịch đảo thời gian, nếu  $k_n$  là một nghiệm thì  $-k_n$  cũng là một nghiệm. Bởi vậy ta tìm hàm sóng của phương trình trong lớp vật liệu  $j$  ( $j = L, B, R$ ) dưới dạng:

$$\Psi^{(j)} = \sum_{n=1}^N a_n^{(j)} \Phi^{(j)}(k_n, z) + b_n^{(j)} \Phi^{(j)}(-k_n, z) \quad (9)$$

ở đó  $N = 14$  là số vùng trong mô hình k.p. Để thuận tiện ta kí hiệu  $-k_n = k_{n+N}$ . Để tìm các hệ số  $a_n^{(j)}, b_n^{(j)}$  xác định hàm sóng, chúng tôi sử dụng điều kiện biên chuẩn cho vận chuyển đa vùng, ở đó hàm sóng  $|\psi\rangle$  và dòng xác suất  $(\psi | \mathbf{J}_z | \psi)$  là liên tục khi đi qua các mặt phân cách. Hàm  $\Phi$  thông thường được chọn là các hàm sóng phẳng  $\Phi(kz, z) = \exp(ik_z z)$  ta thu được các phương trình cho  $a_n^{(j)}, b_n^{(j)}$  dưới dạng:

Tại biên  $z=0$ :

$$M^L \begin{pmatrix} a^L \\ b^L \end{pmatrix} = M^B \begin{pmatrix} a^B \\ b^B \end{pmatrix} \quad (10)$$

Tại biên  $z=a$

$$M^B Q^B \begin{pmatrix} a^B \\ b^B \end{pmatrix} = M^R \begin{pmatrix} a^R \\ b^R \end{pmatrix} \quad (11)$$

Trong đó:

$$M_L = \begin{pmatrix} \Phi_1^L(k_1) & \dots & \Phi_1^L(k_{2N}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi_N^L(k_1) & \dots & \Phi_N^L(k_{2N}) \\ J_z \Phi_1^L(k_1) & \dots & J_z \Phi_1^L(k_{2N}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ J_z \Phi_N^L(k_1) & \dots & J_z \Phi_N^L(k_{2N}) \end{pmatrix}; M_B = \begin{pmatrix} \Phi_1^B(k_1) & \dots & \Phi_1^B(k_{2N}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi_N^B(k_1) & \dots & \Phi_N^B(k_{2N}) \\ J_z \Phi_1^B(k_1) & \dots & J_z \Phi_1^B(k_{2N}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ J_z \Phi_N^B(k_1) & \dots & J_z \Phi_N^B(k_{2N}) \end{pmatrix} \quad (12)$$

và

$$Q_B = \begin{pmatrix} e^{-ik_1 d} & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & e^{-ik_{2N} d} \end{pmatrix} \quad (13)$$

Ta cũng sử dụng các kí hiệu rút gọn

$a^{(j)} = [a_1^{(j)}, a_2^{(j)}, \dots, a_N^{(j)}]^T$ ;  $b^{(j)} = [b_1^{(j)}, b_2^{(j)}, \dots, b_N^{(j)}]^T$ . Các điều kiện đầu về sóng tới cho ta giá trị của  $a^L$ , điều kiện không tồn tại sóng phản xạ ở vô cùng cho ta  $b^R = 0$ . Các phương trình (10-13) cho phép ta xác định các hệ số còn lại của hàm sóng ở phương trình 9.

### 2.3. Tính toán dòng spin

Một khi hàm sóng đã được xác định, ta có thể tính toán giá trị của dòng spin theo công thức ở phương trình 3. Để dễ dàng cho việc nhìn nhận ý nghĩa vật lý của kết quả, chúng tôi chọn tính toán ở mức năng lượng của sóng tới là  $E = 1.6\text{eV}$  tương ứng với vùng con thấp hơn trong cấu trúc vùng dẫn của GaMnAs. Lúc này chỉ có duy nhất một hàm sóng điện tử được chiếu vào cấu trúc. Chú ý rằng do các tham số  $P', \Delta' \neq 0$  nên trên vùng dẫn có sự xuất hiện của từ trường nội hiệu dụng D'yakonov Perel [10].

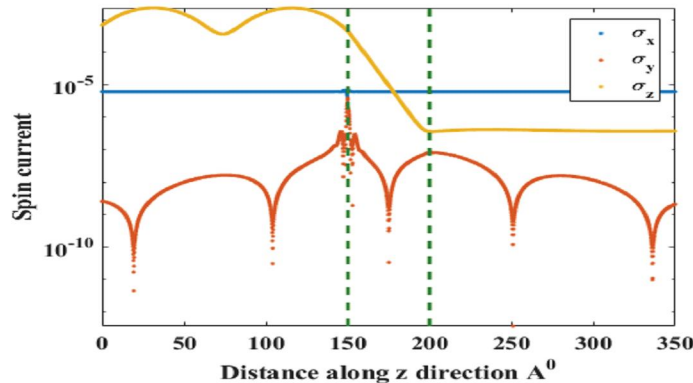
$$H_{DP} = -\gamma \begin{pmatrix} k_z(k_x^2 - k_y^2) & k_x(k_y^2 - k_z^2) - ik_y(k_z^2 - k_x^2) \\ k_x(k_y^2 - k_z^2) + ik_y(k_z^2 - k_x^2) & -k_z(k_x^2 - k_y^2) \end{pmatrix} \quad (14)$$

Định hướng của spin được xác định bởi cạnh tranh giữa từ trường nội Dresselhauss và tương tác trao đổi (phương trình 5). Chọn  $[k_x, k_y] = [0, 0.3, 0]$ , độ cao tường thế được chọn là  $d = 0.5(\text{eV})$ . Không mất tính tổng quát, giả sử véc tơ độ từ hóa trong vùng  $L$  là  $m = [m_x, 0, 0]$ .

Ta sẽ tính toán dòng spin  $\sigma_\alpha = J_z^\alpha$  với  $\alpha = x, y, z$  là các chỉ số trong không gian spin.

Xét cấu hình PA khi độ từ hóa của vùng  $R$  cùng hướng với độ từ hóa vùng  $L$ . Dáng điệu của ba thành phần của dòng spin trong cấu trúc PA được biểu diễn trên hình 4. Chú ý rằng ở đây chúng tôi biểu thị độ lớn trên thang log. Ta thấy thành phần dòng  $\sigma_y$  có giá trị rất nhỏ và có thể bỏ qua bên cạnh các thành phần dòng  $\sigma_x, \sigma_z$ . Điều này là hợp lý. Thật vậy, do  $k_y = 0$ , nên từ trường nội D'yakonov-Perel là  $H_{DP} = -\gamma k_z k_x^2 \hat{\sigma}_z + \gamma k_x k_z^2 \hat{\sigma}_x$ . Mặt khác tương tác trao đổi chỉ hỗ trợ định hướng spin theo phương  $x$ , bởi vậy về mặt vật lý sẽ không có dòng spin  $\sigma_y$  được gửi vào hay truyền qua cấu trúc.

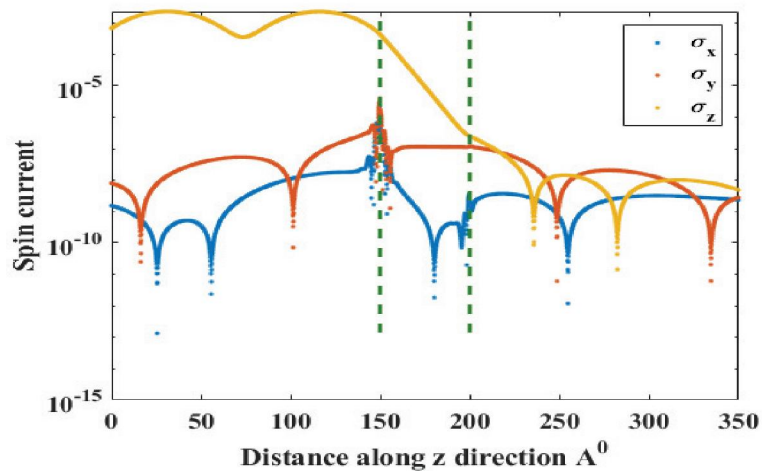
Do tương tác trao đổi của cả hai vùng  $L, R$  đều hỗ trợ định hướng spin  $\uparrow_x$  nên ta thấy dòng spin  $\sigma_x$  gần như được bảo toàn.  $\sigma_z$  có giá trị tương đối lớn trong điện cực trái  $L$ , bị suy giảm trong rào thế do sự dập tắt hàm sóng trong hiện tượng chui ngầm và có giá trị không đổi trong vùng điện cực phải.



Hình 4. Dòng spin của điện tử trong cấu hình PA

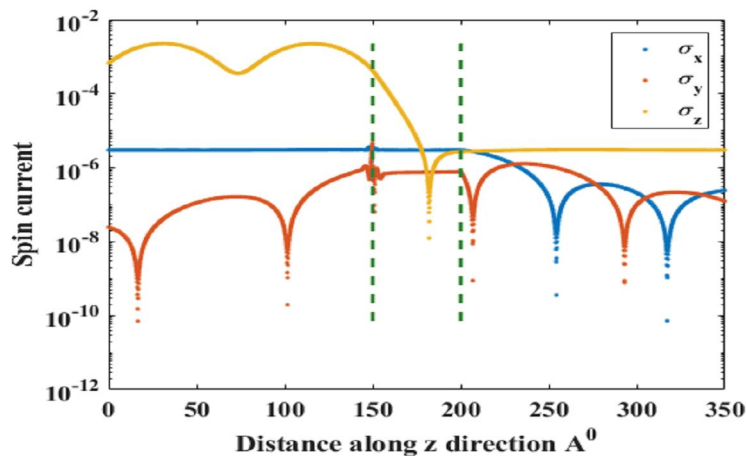
Hình 5 biểu diễn ba thành phần của dòng spin trên cấu trúc cấu hình từ hóa đối song (AP) tại hai điện cực  $L$  và  $R$ . Điều đáng chú ý xảy ra với thành phần  $\sigma_x$ : do tác dụng ngược nhau của véc tơ từ hóa, nó bị dập tắt và có giá trị nhỏ trên cả ba vùng.





Hình 5. Dòng spin của điện tử trong cấu hình AP

Cuối cùng, ta tính giá trị của dòng spin khi cấu trúc có cấu hình từ “vận chuyển spin” (ST), ở đó véc tơ độ từ hóa trong lớp L là trực giao với véc tơ độ từ hóa trong lớp R. Ở đây chúng tôi chọn véc tơ độ từ hóa của lớp R là song song với trục z (hình 6). Ta thấy, giống như hai trường hợp trước, thành phần  $\sigma_y = 0$  rất nhỏ và có thể bỏ qua. Thành phần  $\sigma_x$  có giá trị đáng kể trong vùng L và trong tường thế, nhưng bị suy giảm khi đi vào vùng phải R. Trong khi đó, thành phần  $\sigma_z$  bị suy giảm mạnh trong tường thế nhưng phục hồi trong vùng điện cực phải do sự hỗ trợ của tương tác trao đổi trong vùng R.



Hình 6. Dòng spin của điện tử trong cấu hình ST

### 3. KẾT LUẬN

Trong bài báo này, chúng tôi đã tính toán dòng spin trong cấu trúc tiếp xúc dị chất bán dẫn điển hình. Kết quả tính toán cho thấy độ lớn của dòng spin được quy định bởi tương tác spin quỹ đạo (thông qua từ trường nội D'yakonov-Perel) và tương tác trao đổi. Sự mở rộng kết quả tính toán cho dòng spin của các lỗ trống trong vùng hóa trị của bán dẫn, và dòng spin trong các cấu trúc đa tường thế là mục tiêu nghiên cứu của chúng tôi trong thời gian tới.

## LỜI CẢM ƠN

Bài báo này là kết quả nghiên cứu từ đề tài cấp cơ sở mã số ĐT-2018-03 của Trường Đại học Hồng Đức.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Wolf, S. A., D. D. Awschalom (2001), *R. A. Bulman, J. M. Daughton*, S. von Molnar, M. L. Roukers, A. Y. Chtchelkanova, and D. M. Treger, *Science* 2911, 1488.
- [2] E. I. Rashba (2003), *Phys. Rev. B* 68, 241315(R).
- [3] Sun, Q. F. & Xie, X. C, *Phys. Rev. B* 72, 245305 (2005)
- [4] Sun, Q. F., Xie, X. C. & Wang, J. *Phys. Rev. B* 77, 035327 (2008).
- [5] J. Shi, P. Zhang, D. Xiao, and Q. Niu (2006), *Phys. Rev. Lett.* 96, 076604.
- [6] Zutic, J. Fabian, S. D. Sarma, *Spintronics: Rev. Mod. Phys.* 76, 323 – 410 (2004).
- [7] T. L. Hoai Nguyen, H.-J. Drouhin, J.-E. Wegrowe, and G. Fishman (2009), *Phys. Rev. B* 79, 165204.
- [8] Federico Bottegoni, H.-J. Drouhin, Guy Fishman, and J. -E Wegrowe, *Phys. Rev B* 85, 235313 (2012).
- [9] H.-J Drouhin, Guy Fishman, and J.-E Wegrowe, *Phys. Rev. B* 83, 113307 (2011)
- [10] Huong T. Dang, PhD thesis, Ecole Polytechnique (2015).

## CALCULATING THE SPIN CURRENTS IN SEMICONDUCTOR HETEROSTRUCTURE

Nguyen Thi Loan, Nguyen Thi Lam Hoai

### ABSTRACT

*In this paper we calculate the spin currents through semiconductor heterostructure made of GaAs. We use 14x14 k.p approach to describe the semiconductor materials. We establish the boundary conditions based on the continuity of the probability current and then perform numerical calculations for spin current components. Profiles of spin currents in GaMnAs/GaAs/GaMnAs semiconductor heterostructure were obtained in three different magnetization configurations: Parallel, Anti-Parallel, and Spin Transfer. This model allows one to include the presence of both spin-orbit interaction and exchange interaction in the expression of the Hamiltonian.*

**Keywords:** *Spintronic, spin currents, semiconductor spins, spin electronics.*

*Ngày nộp bài: 9/7/2019; Ngày gửi phản biện: 19/7/2019; Ngày duyệt đăng: 6/8/2019.*