Politechnika Rzeszowska
im. Ignacego Łukasiewicza

Dyscyplina naukowa: nauki fizyczne

Rozprawa doktorska

mgr inż. Sylwia Kudła

Transport ładunku i spinu w układach niskowymiarowych

Promotor:
prof. dr hab. inż. Vitalii Dugaev

Rzeszów 2026

Dziękuję mojemu Promotorowi, prof. dr. hab. inż. Vitaliiemu Dugaevowi, za opiekę naukową, wskazówki merytoryczne oraz dyskusje dotyczące zagadnień badawczych podejmowanych w niniejszej rozprawie doktorskiej.

Szczególne podziękowania kieruję do dr hab. Anny Dyrdał za współpracę naukową, poświęcony czas oraz pomoc w poznawaniu i zrozumieniu mechanizmów fizycznych i metod obliczeniowych wykorzystywanych w badaniach transportu elektronowego.

Dziękuję również wszystkim współautorom publikacji naukowych za współpracę, wymianę wiedzy i doświadczeń oraz dyskusje merytoryczne, które przyczyniły się do uzyskania wyników przedstawionych w rozprawie.

Streszczenie

W rozprawie doktorskiej zbadano transport ładunku i spinu w niskowymiarowych układach elektronowych, w których oddziaływanie spin–orbita oraz oddziaływanie wymienne wykazują niejednorodność przestrzenną. Szczególną uwagę poświęcono wpływowi rozkładu przestrzennego tych oddziaływań na propagację elektronów, procesy rozpraszania oraz relaksację transportową. Analiza obejmuje wyniki przedstawione w czterech publikacjach wieloautorskich dotyczących dwuwymiarowego gazu elektronowego oraz stanów powierzchniowych trójwymiarowych izolatorów topologicznych.

Rozważono cztery modele fizyczne: transmisję elektronów przez barierę magnetyczną na powierzchni izolatora topologicznego, dwuwymiarowy gaz elektronowy z losowym przestrzennie oddziaływaniem spin–orbita Rashby, transport powierzchniowy w izolatorze topologicznym z losową magnetyzacją oraz rozpraszanie elektronów na lokalnej strukturze magnetycznej. W obliczeniach wykorzystano formalizm odpowiedzi liniowej Kubo i funkcje Greena, z uwzględnieniem przybliżenia Borna i poprawek wierzchołkowych. Zastosowano również metodę dopasowania spinorowych funkcji falowych oraz metodę fal cząstkowych.

W przypadku bariery magnetycznej określono warunki występowania stanów propagujących i zanikających oraz zbadano wpływ parametrów bariery na transmisję elektronów. W reżimie tunelowym transmisja maleje wraz ze wzrostem długości bariery, natomiast w reżimie propagacyjnym interferencja fal elektronowych prowadzi do powstawania rezonansów transmisyjnych. Dla dwuwymiarowego gazu elektronowego z losowym sprzężeniem Rashby wykazano, że czas życia stanów elektronowych oraz czasy relaksacji transportowej prądu ładunkowego i spinowego wykazują odmienne zależności od energii i korelacji przestrzennych nieuporządkowania. Różnice te znajdują odzwierciedlenie w zależności przewodnictwa ładunkowego i spinowego od parametrów układu.

W modelu izolatora topologicznego z losową magnetyzacją przeanalizowano wpływ amplitudy i korelacji przestrzennych pola wymiennego na poszerzenie stanów elektronowych oraz przewodnictwo podłużne. Uwzględniono zarówno wkład energii własnej elektronów, jak i poprawki wierzchołkowe do operatora prądu. Rozpraszanie na lokalnej strukturze magnetycznej opisano za pomocą amplitud kątowych i przekrojów

czynnych. Wykazano przy tym różnicę między symetrycznym rozpraszaniem uzyskiwanym w pierwszym przybliżeniu Borna a asymetrią kątową, która może występować po uwzględnieniu procesów rozpraszania wyższych rzędów.

Porównanie wyników pokazuje, że wpływ przestrzennie niejednorodnych oddziaływań zależnych od spinu na transport elektronowy jest związany z różnymi mechanizmami fizycznymi. Długość korelacji nieuporządkowania wpływa na rozkład przekazów pędu podczas rozpraszania, długość bariery magnetycznej określa warunki tunelowania i interferencji, natomiast rozmiar i siła lokalnej struktury magnetycznej wpływają na udział poszczególnych kanałów rozpraszania. Istotne znaczenie ma przy tym zarówno profil przestrzenny zaburzenia, jak i spinorowa struktura stanów elektronowych. Przeprowadzona analiza pozwala powiązać mechanizmy transportu ładunku i spinu rozpatrywane w poszczególnych modelach, z uwzględnieniem różnic między koherentną transmisją, przewodnictwem uśrednionym po nieuporządkowaniu oraz rozpraszaniem na pojedynczych strukturach magnetycznych.

Słowa kluczowe: transport ładunku, transport spinu, izolatory topologiczne, dwuwymiarowy gaz elektronowy, oddziaływanie spin-orbita Rashby, losowa magnetyzacja, korelacje przestrzenne, rozpraszanie elektronów.

Abstract

This dissertation examines charge and spin transport in low-dimensional electronic systems with spatially varying spin–orbit coupling and exchange interactions. Particular attention is given to the influence of the spatial distribution of these interactions on electron propagation, scattering, and transport relaxation. The analysis combines results from four coauthored publications concerning two-dimensional electron gases and surface states of three-dimensional topological insulators.

The research covers four physical models: electron transmission through a magnetic barrier on the surface of a topological insulator, a two-dimensional electron gas with random Rashba spin–orbit coupling, surface transport in a topological insulator with spatially fluctuating magnetization, and electron scattering by a localized magnetic structure. The calculations employ the Kubo linear-response formalism and Green functions, including the Born approximation and vertex corrections, as well as spinor wave-function matching and the partial-wave method.

For a magnetic barrier, the analysis identifies propagating and evanescent electronic states and establishes how the barrier parameters affect transmission. Evanescent modes give rise to tunneling, with transmission decreasing as the barrier length increases, whereas propagating modes produce interference and resonant transmission. In the two-dimensional electron gas with random Rashba coupling, the electron lifetime and the charge and spin transport relaxation times exhibit different dependences on energy and the spatial correlations of the disorder. Consequently, charge and spin conductivities respond differently to variations in these parameters.

For a topological insulator with random magnetization, the calculations reveal how the strength and spatial correlations of the exchange field influence electron state broadening and longitudinal conductivity. The transport response depends on both the electron self-energy and current vertex corrections. Scattering by a localized magnetic structure is examined through angular scattering amplitudes and cross sections. The results distinguish the symmetric scattering obtained in the first Born approximation from the angular asymmetry that can arise when higher-order scattering processes are included.

The comparison shows that the effects of spatially varying spin-dependent interactions cannot be described by a single transport mechanism. The correlation

length of disorder determines the distribution of momentum transfers, the length of a magnetic barrier controls tunneling and interference, and the size and strength of a localized magnetic structure influence the contributions of individual scattering channels. These mechanisms are governed by the interplay between the spatial profile of the perturbation and the spinor structure of the electronic states. The results provide a unified physical interpretation of the charge and spin transport phenomena investigated in the dissertation, while accounting for the differences between coherent transmission, disorder-averaged conductivity, and scattering by individual magnetic structures.

Keywords: charge transport, spin transport, topological insulators, two-dimensional electron gas, Rashba spin-orbit coupling, random magnetization, spatial correlations, electron scattering.

Spis treści

Streszczenie **5**

Abstract **7**

1 Wprowadzenie **13**

1.1 Motywacja podjęcia tematyki badawczej 13

1.2 Transport elektronowy i rola struktury spinowej w układach niskowymiarowych 13

1.3 Oddziaływanie spinowo-orbitalne jako mechanizm sprzęgający transport ładunku i spinu 14

1.4 Izolatory topologiczne i dwuwymiarowy gaz elektronowy jako układy badań transportowych 14

1.5 Nieuporządkowanie przestrzenne i magnetyzacja jako czynniki modyfikujące transport 15

1.6 Cel i zakres rozprawy 16

1.7 Układ rozprawy 16

2 Podstawy teoretyczne transportu spinowo-zależnego **18**

2.1 Reżimy transportu elektronowego w układach niskowymiarowych . . . 18

2.2 Przewodnictwo ładunkowe i przewodnictwo spinowe 19

2.3 Spin, prąd spinowy i akumulacja spinowa 20

2.4 Sprzężenie spinowo-orbitalne i powiązanie spinu z pędem 22

2.5 Magnetyzacja i nieuporządkowanie jako źródła rozpraszania 23

2.6 Czas relaksacji i transportowy czas relaksacji 24

3 Metody obliczeniowe transportu spinowo-zależnego **27**

3.1 Formalizm odpowiedzi liniowej 28

3.1.1 Wzór Kubo 29

3.1.2 Funkcje Greena w opisie transportu 30

3.1.3 Technika Matsubary i kontynuacja analityczna 32

3.2 Opis rozpraszania w przybliżeniu Borna 35

3.2.1 Energia własna i poszerzenie poziomów 36

3.2.2 Czas życia stanu kwaziczą stkowego 38
3.2.3 Transportowy czas relaksacji 39
3.3 Poprawki wierzchołkowe i interpretacja diagramatyczna 41
3.3.1 Renormalizacja wierzchołka prądowego 42
3.3.2 Diagramy drabinkowe 43
3.3.3 Znaczenie poprawek wierzchołkowych dla przewodnictwa . . . 45
3.4 Metody transmisyjne i rozpraszanie na lokalnych strukturach 47
3.4.1 Dopasowanie funkcji falowych na granicach obszarów 47
3.4.2 Amplituda transmisji i prawdopodobieństwo transmisji 49
3.4.3 Przybliżenie Borna dla lokalnej magnetyzacji 52
3.4.4 Metoda fal cząstkowych 55
3.5 Zestawienie metod zastosowanych w rozprawie 58

4 Modele analizowanych układów niskowymiarowych 60
4.1 Powierzchnia izolatora topologicznego 60
4.1.1 Hamiltonian powierzchniowych stanów Diraca 61
4.1.2 Helikalna struktura stanów powierzchniowych 62
4.1.3 Wpływ magnetyzacji na widmo powierzchniowe 64
4.2 Dwuwymiarowy gaz elektronowy z oddziaływaniem Rashby 65
4.2.1 Model 2DEG z jednorodnym oddziaływaniem Rashby 66
4.2.2 Model 2DEG z przestrzennie fluktuującym oddziaływaniem Rashby 67
4.2.3 Korelacje przestrzenne losowego sprzężenia spinowo-orbitalnego 67
4.3 Powierzchnia izolatora topologicznego z obszarem magnetycznym . . 68
4.3.1 Magnetyczna bariera na powierzchni izolatora topologicznego . 69
4.3.2 Transmisja przez obszar z magnetyzacją 69
4.3.3 Reżim tunelowy i reżim oscylacyjny 70
4.4 Powierzchnia izolatora topologicznego z losową magnetyzacją 71
4.4.1 Model przestrzennie fluktuującej magnetyzacji 71
4.4.2 Korelacje magnetycznego nieuporządkowania 73
4.4.3 Rozpraszanie powierzchniowych elektronów Diraca 74
4.5 Lokalna struktura magnetyczna na powierzchni izolatora topologicznego 75
4.5.1 Model kropki lub domeny magnetycznej 75
4.5.2 Rozpraszanie na lokalnej magnetyzacji 76
4.5.3 Spinowa struktura trajektorii elektronowej 77

5 Mechanizmy wpływające na transport ładunku i spinu 79
5.1 Rola oddziaływania spinowo-orbitalnego 79
5.2 Rola zjawiska spin-momentum locking w transporcie powierzchniowym izolatorów topologicznych 81

5.3 Magnetyzacja jako mechanizm kontroli transportu 83
5.3.1 Magnetyzacja jako źródło przerwy energetycznej 83
5.3.2 Magnetyzacja jako bariera transportowa 84
5.3.3 Magnetyzacja jako źródło asymetrycznego rozpraszania 85
5.4 Nieuporządkowanie spinowo-orbitalne w dwuwymiarowym gazie elektronowym 87
5.5 Nieuporządkowanie magnetyczne na powierzchni izolatora topologicznego 88
5.6 Znaczenie długości korelacji fluktuacji przestrzennych 90
5.7 Czas relaksacji jako wielkość opisująca efektywność transportu 91
5.8 Porównanie mechanizmów rozpraszania w analizowanych układach . . 93

6 Zbiorcza analiza wyników transportowych 95
6.1 Wpływ parametrów energetycznych na transport 95
6.2 Wyniki transportowe dla różnych profili magnetyzacji 100
6.3 Wpływ nieuporządkowania i długości korelacji na transport 103
6.4 Porównanie reżimów transportu 105
6.5 Czasy relaksacji a przewodnictwo ładunkowe i spinowe 106

7 Wspólna interpretacja mechanizmów transportu ładunku i spinu 110
7.1 Wspólny problem mikroskopowy 110
7.2 Znaczenie geometrii i statystycznego charakteru zaburzenia 111
7.3 Skala przestrzenna zaburzenia a długość fali elektronu 112
7.4 Struktura spinowa a relaksacja prądu ładunkowego i spinowego 114
7.5 Modyfikacja widma i rozpraszanie jako dwa skutki oddziaływań spinowo-zależnych 115
7.6 Zakres wspólnej interpretacji 116

8 Podsumowanie i wnioski końcowe 118

9 Publikacje stanowiące podstawę rozprawy – streszczenia i udział autorki 120
9.1 Publikacja 1 120
9.2 Publikacja 2 121
9.3 Publikacja 3 122
9.4 Publikacja 4 122

Dorobek naukowy autorki 124

Rozdział 1

Wprowadzenie

1.1 Motywacja podjęcia tematyki badawczej

Transport elektronowy w układach niskowymiarowych zależy od struktury stanów elektronowych oraz mechanizmów rozpraszania nośników [1, 2]. W obecności sprzężenia spinowo-orbitalnego i oddziaływań wymiennych opis transportu wymaga dodatkowo uwzględnienia struktury spinowej stanów, ponieważ oddziaływania te mogą wpływać na ruch elektronów, jak i na ich dynamikę spinową [3, 4].

Motywacją badań przedstawionych w rozprawie było określenie, w jaki sposób przestrzenna struktura oddziaływań zależnych od spinu wpływa na propagację i rozpraszanie elektronów. Znaczenie ma przy tym nie tylko amplituda oddziaływania, lecz również jego profil przestrzenny oraz relacja między charakterystyczną skalą tego profilu a długością fali elektronu. Przestrzennie jednorodny lub określony geometrycznie człon spinowo-zależny może przede wszystkim modyfikować lokalne widmo i warunki propagacji, natomiast jego przestrzenne fluktuacje prowadzą do rozpraszania i relaksacji prądu.

W rozprawie rozpatrzono zarówno deterministyczne struktury magnetyczne, jak i przestrzennie losowe oddziaływania spinowo-zależne. Pozwala to przeanalizować różne konsekwencje tego samego ogólnego problemu: oddziaływania przestrzennie niejednorodnego pola spinowo-zależnego ze stanami elektronowymi o określonej strukturze spinorowej [5, 6, 7, 8].

1.2 Transport elektronowy i rola struktury spinowej w układach niskowymiarowych

Ograniczenie ruchu elektronów do jednego lub dwóch wymiarów zmienia strukturę stanów elektronowych oraz warunki ich propagacji i rozpraszania. Właściwości transportowe takich układów zależą od widma energetycznego, geometrii struktury

i obecności nieuporządkowania. W układach o skończonych rozmiarach znaczenie mają również transmisja przez granice oraz interferencja fal elektronowych [1, 2, 9].

Jeżeli hamiltonian lub mechanizm rozpraszania zależy od spinu, opis transportu wymaga uwzględnienia struktury spinowej stanów. Proces rozpraszania może wówczas prowadzić jednocześnie do zmiany pędu oraz stanu spinowego elektronu. Z tego względu czas życia stanu, relaksacja prądu ładunkowego i relaksacja prądu spinowego nie muszą być określane przez te same procesy [3, 10].

W kontekście niniejszej rozprawy istotna jest przede wszystkim zależność między strukturą spinorową stanów a przestrzennym profilem oddziaływania spinowo-zależnego. To współdziałanie określa zarówno transmisję przez struktury magnetyczne, jak i efektywność rozpraszania oraz relaksacji w układach nieuporządkowanych.

1.3 Oddziaływanie spinowo-orbitalne jako mechanizm sprzęgający transport ładunku i spinu

Oddziaływanie spinowo-orbitalne wiąże orbitalne i spinowe stopnie swobody elektronu. Struktura spinowa stanów może wówczas zależeć od pędu, a procesy rozpraszania wpływają zarówno na ruch nośników, jak i na ich dynamikę spinową [4, 11]. Sprzężenie to umożliwia również konwersję między odpowiedzią ładunkową i spinową, której przykładami są spinowy efekt Halla oraz efekt Edelsteina [10, 12].

W rozprawie rozpatrywane są dwie realizacje tej zależności: dwuwymiarowy gaz elektronowy (2DEG) z losowym oddziaływaniem Rashby oraz powierzchniowe stany izolatora topologicznego (TI). W pierwszym przypadku przestrzenne fluktuacje sprzężenia stanowią źródło rozpraszania zależnego od spinu [6]. W drugim powiązanie orientacji spinu z pędem jest cechą stanów powierzchniowych i określa ich odpowiedź na zaburzenia magnetyczne [13, 14].

1.4 Izolatory topologiczne i dwuwymiarowy gaz elektronowy jako układy badań transportowych

Dwuwymiarowy gaz elektronowy i powierzchnia trójwymiarowego izolatora topologicznego umożliwiają porównanie transportu w układach o odmiennej strukturze elektronowej. W półprzewodnikowym 2DEG ruch elektronów w kierunku prostopadłym do warstwy jest skwantowany, natomiast ruch w jej płaszczyźnie pozostaje dwuwymiarowy [1, 4]. Trójwymiarowy izolator topologiczny charakteryzuje się przerwą energetyczną w widmie objętościowym oraz stanami powierzchniowymi

występującymi w tej przerwie [13, 14]. W rozpatrywanych modelach TI analizowany jest transport elektronów powierzchniowych, z pominięciem wkładu przewodzenia objętościowego.

W modelu 2DEG przyjętym w rozprawie punktem wyjścia jest paraboliczne pasmo elektronowe, a losowe oddziaływanie Rashby uwzględnia się jako zaburzenie [6]. Stany powierzchniowe TI opisuje natomiast niskoenergetyczny hamiltonian Diraca, wiążący strukturę spinową z pędem elektronu [13, 14]. Porównanie tych układów pozwala zbadać, jak rodzaj dyspersji i struktura spinowa stanów wpływają na działanie zaburzeń przestrzennych. Różnica między tymi układami jest istotna dla interpretacji wyników. W 2DEG losowe oddziaływanie Rashby samo stanowi mechanizm spinowo-zależnego rozpraszania, natomiast w stanach powierzchniowych TI zależność między ruchem i strukturą spinową jest właściwością niezaburzonego hamiltonianu. Pozwala to porównać dwa odmienne sposoby, w jakie przestrzennie niejednorodne oddziaływania spinowo-zależne wpływają na transport.

1.5 Nieuporządkowanie przestrzenne i magnetyzacja jako czynniki modyfikujące transport

Przestrzenna niejednorodność oddziaływań spinowo-orbitalnych i wymiennych może prowadzić do rozpraszania elektronów. Jej wpływ na transport zależy od amplitudy zaburzeń, ich korelacji przestrzennych oraz struktury spinowej stanów [15, 6, 7]. Magnetyzacja może ponadto zmieniać widmo energetyczne, a granice obszaru magnetycznego mogą powodować odbicie i transmisję fal elektronowych [5].

W rozprawie rozpatrywane są trzy przestrzenne realizacje oddziaływań spinowo-zależnych. Skończony obszar magnetyczny stanowi deterministyczną strukturę, dla której analizowane są warunki propagacji i transmisji [5]. Przestrzennie losowe oddziaływanie Rashby oraz losowa magnetyzacja wymagają opisu statystycznego i prowadzą do relaksacji prądu w układzie nieuporządkowanym [6, 7]. Lokalna struktura magnetyczna jest natomiast pojedynczym centrum rozpraszającym, którego wpływ charakteryzują amplituda i przekrój rozpraszania [8].

Rozróżnienie tych geometrii jest istotne, ponieważ transmisja, przewodnictwo układu nieuporządkowanego i przekrój rozpraszania nie są wielkościami bezpośrednio równoważnymi. Wspólnej interpretacji podlegają natomiast mechanizmy mikroskopowe związane z przestrzennym profilem zaburzenia, przekazem pędu i strukturą spinorową stanów.

1.6 Cel i zakres rozprawy

Celem rozprawy jest określenie, w jaki sposób przestrzenny profil oddziaływań spinowo-orbitalnych i wymiennych, w połączeniu ze strukturą spinorową stanów elektronowych, wpływa na transport elektronowy w wybranych układach niskowymiarowych. Analiza obejmuje modyfikację warunków propagacji i koherentne rozpraszanie na zadanych profilach magnetyzacji oraz relaksację prądów wywołaną statystycznie opisanymi fluktuacjami oddziaływań spinowo-zależnych.

Rozprawa stanowi zbiorcze opracowanie wyników przedstawionych w cyklu publikacji wieloautorskich [5, 6, 7, 8]. Analiza obejmuje cztery modele: powierzchnię izolatora topologicznego z barierą magnetyczną, dwuwymiarowy gaz elektronowy z przestrzennie losowym oddziaływaniem Rashby, powierzchnię izolatora topologicznego z losową magnetyzacją oraz powierzchnię izolatora topologicznego z lokalną strukturą magnetyczną.

Zakres analizowanych wielkości wynika z charakteru fizycznego poszczególnych modeli. Dla bariery magnetycznej badane są warunki propagacji i transmisja elektronów przez skończony obszar. W układach z losowym nieuporządkowaniem analizowane są czasy relaksacji oraz przewodnictwo, a w modelu z losowym oddziaływaniem Rashby również przewodnictwo spinowe i spinowy transportowy czas relaksacji. W przypadku lokalnej struktury magnetycznej rozpatrywane jest rozpraszanie na pojedynczym obiekcie, charakteryzowane przez amplitudę i przekrój rozpraszania.

Analiza obejmuje wpływ energii nośników, amplitudy oddziaływań, parametrów geometrycznych oraz długości korelacji fluktuacji. Istotnym elementem pracy jest określenie roli relacji między charakterystyczną skalą przestrzenną zaburzenia a skalą ruchu elektronu oraz ustalenie, w jaki sposób struktura spinowa stanów wpływa na skuteczność poszczególnych procesów transportowych.

Celem analizy porównawczej nie jest bezpośrednie utożsamienie transmisji, przewodnictwa i przekroju rozpraszania, lecz wskazanie wspólnych mechanizmów mikroskopowych odpowiadających za ich zależność od przestrzennej struktury oddziaływań spinowo-zależnych. Pozwala to określić, które elementy opisu są wspólne dla analizowanych modeli, a które wynikają z odmiennej geometrii i statystycznego charakteru zaburzenia.

1.7 Układ rozprawy

Rozprawa została podzielona na dziewięć rozdziałów. Rozdział pierwszy wprowadza problematykę transportu ładunku i spinu w układach niskowymiarowych oraz określa cel i zakres pracy.

W rozdziale drugim przedstawiono podstawy teoretyczne transportu spinowo-

zależnego, w tym przewodnictwo ładunkowe i spinowe, sprzężenie spinowo-orbitalne, magnetyzację, nieuporządkowanie oraz czasy relaksacji.

Rozdział trzeci poświęcono metodom obliczeniowym. Omówiono w nim formalizm odpowiedzi liniowej, wzór Kubo, funkcje Greena, technikę Matsubary, przybliżenie Borna, poprawki wierzchołkowe oraz metody transmisyjne i falowe.

W rozdziale czwartym przedstawiono modele analizowanych układów: powierzchnię TI, 2DEG z oddziaływaniem Rashby oraz układy z magnetyzacją lokalną, barierową i losową.

W rozdziale piątym omówiono mechanizmy fizyczne modyfikujące transport w analizowanych układach, natomiast rozdział szósty zawiera zbiorczą analizę wyników transportowych z uwzględnieniem energii nośników, magnetyzacji, parametrów nieuporządkowania oraz charakterystycznych skal przestrzennych.

W rozdziale siódmym przeprowadzono wspólną interpretację mechanizmów transportowych. Przeanalizowano rolę geometrii i statystycznego charakteru zaburzenia, relacji między jego skalą przestrzenną a długością fali elektronu oraz struktury spinowej stanów. Wskazano również zakres, w którym wyniki uzyskane dla transmisji, transportu dyfuzyjnego i rozpraszania na pojedynczym obiekcie mogą być interpretowane wspólnie.

Rozdział ósmy zawiera podsumowanie rozprawy i najważniejsze wnioski wynikające ze zbiorczej analizy. W rozdziale dziewiątym zamieszczono streszczenia publikacji stanowiących podstawę rozprawy oraz informacje dotyczące udziału autorki w ich powstaniu.

Rozdział 2

Podstawy teoretyczne transportu spinowo-zależnego

W rozdziale zdefiniowano wielkości wykorzystywane do opisu transportu ładunku i spinu oraz określono warunki stosowania poszczególnych reżimów transportowych. Następnie przedstawiono rolę sprzężenia spinowo-orbitalnego, magnetyzacji i nieuporządkowania w propagacji oraz rozpraszaniu elektronów. Rozdział zamyka rozróżnienie czasów charakteryzujących zanik stanu elektronowego, relaksację prądu i dynamikę spinu. Metody obliczania tych wielkości omówiono w rozdziale trzecim.

2.1 Reżimy transportu elektronowego w układach niskowymiarowych

W półprzewodnikowym dwuwymiarowym gazie elektronowym potencjał ograniczający prowadzi do kwantowania ruchu w kierunku prostopadłym do warstwy i powstania podpasm energetycznych. Ruch w płaszczyźnie warstwy pozostaje dwuwymiarowy, lecz może podlegać rozpraszaniu na zaburzeniach potencjału oraz oddziaływaniach zależnych od spinu. Opis ten należy odróżnić od opisu stanów powierzchniowych izolatora topologicznego, których istnienie wynika z właściwości topologicznych struktury pasmowej [1, 4, 13]. W obu przypadkach reżim transportu określają relacje między rozmiarem badanego obszaru a długościami charakteryzującymi rozpraszanie i utratę koherencji fazowej.

Należy rozróżnić rozmiar układu L, średnią drogę między zdarzeniami rozpraszania ℓ, transportową drogę swobodną ℓ_{tr} oraz długość koherencji fazowej L_ϕ. W opisie izotropowym, dla nośników o energii bliskiej energii Fermiego, zachodzą zależności $\ell = v_F\tau$ oraz $\ell_{\mathrm{tr}} = v_F\tau_{\mathrm{tr}}$, gdzie v_F jest prędkością Fermiego, a czasy relaksacji są wyznaczone dla tej energii. Przy rozpatrywaniu nośników o różnych energiach stosuje się odpowiednio $\ell(\varepsilon) = v(\varepsilon)\tau(\varepsilon)$ i $\ell_{\mathrm{tr}}(\varepsilon) = v(\varepsilon)\tau_{\mathrm{tr}}(\varepsilon)$. Czas τ charakteryzuje

rozpraszanie elektronu z danego stanu, natomiast τ_{tr} uwzględnia skuteczność tego procesu w relaksacji prądu. Długości ℓ i ℓ_{tr} mogą się znacznie różnić, zwłaszcza gdy dominują procesy rozpraszania pod małymi kątami [16, 9].

W granicy balistycznej, $L \ll \ell$, elektrony przechodzą przez rozpatrywany obszar praktycznie bez rozpraszania w jego wnętrzu. Opis dyfuzyjny jest właściwy dla $L \gg \ell_{\mathrm{tr}}$, jeżeli efekty lokalizacji nie dominują w transporcie. W tym przypadku wielokrotne rozpraszanie prowadzi do utraty pamięci o początkowym kierunku ruchu nośników [1, 2].

Koherencję fazową określa odrębna relacja między L a L_ϕ. Dla $L \lesssim L_\phi$ elektron może zachowywać koherencję w skali całego układu, co umożliwia występowanie efektów interferencyjnych. Warunek ten nie przesądza o balistycznym charakterze transportu. W szczególności dla $\ell_{\mathrm{tr}} \ll L \lesssim L_\phi$ transport może być jednocześnie dyfuzyjny i koherentny [9, 17].

Odrębnego rozróżnienia wymaga transmisja przez obszar, w którym potencjał lub modyfikacja widma energetycznego tworzą barierę dla nośników. Dla bariery jednorodnej wzdłuż jej granicy składowa pędu równoległa do tej granicy jest zachowana. Przy zadanej energii i wartości tej składowej o charakterze rozwiązań wewnątrz bariery decyduje składowa wektora falowego prostopadła do granicy. W rozpatrywanym modelu bariery magnetycznej na powierzchni TI jej czysto urojona wartość odpowiada rozwiązaniom ewanescentnym, a transmisja przez obszar o skończonej szerokości zachodzi przez tunelowanie. Rzeczywista, niezerowa wartość tej składowej odpowiada stanom propagującym. W warunkach zachowania koherencji odbicia na obu granicach obszaru mogą wówczas prowadzić do interferencji i oscylacji transmisji [1, 5].

2.2 Przewodnictwo ładunkowe i przewodnictwo spinowe

Przewodnictwo ładunkowe opisuje liniową odpowiedź prądu elektrycznego na przyłożone pole elektryczne. W lokalnym opisie transportu, w granicy statycznej, zależność ta ma postać [18, 19, 1]

$$j_i = \sum_j \sigma_{ij} E_j, \tag{2.1}$$

gdzie j_i jest składową gęstości prądu, E_j oznacza składową natężenia pola elektrycznego, a σ_{ij} jest elementem tensora przewodnictwa. Indeksy i i j określają odpowiednio kierunek przepływu prądu i kierunek przyłożonego pola. Dla układu dwuwymiarowego j_i oznacza prąd przypadający na jednostkę szerokości, dlatego σ_{ij} ma jednostkę

siemensa.

Od współczynnika σ_{ij} należy odróżnić przewodność skończonej struktury G, zdefiniowaną w granicy liniowej odpowiedzi przez [1, 17]

$$I = GU, \tag{2.2}$$

gdzie I jest całkowitym prądem płynącym przez próbkę, a U przyłożoną różnicą potencjałów. Przewodność zależy od geometrii struktury, kontaktów oraz warunków transmisji elektronów. Dla jednorodnej prostokątnej warstwy dwuwymiarowej, w lokalnym opisie omowym, przy jednorodnym przepływie w kierunku x, braku odpowiedzi poprzecznej i pominięciu oporu kontaktów, zachodzi $G = \sigma_{xx}W/L$. Wielkości W i L oznaczają odpowiednio szerokość próbki i jej długość w kierunku przepływu prądu [1, 9].

Przewodnictwo spinowe jest współczynnikiem liniowej odpowiedzi wiążącym gęstość prądu określonej składowej spinu z polem wymuszającym ten przepływ. Jego definicja wymaga wskazania kierunku przepływu, transportowanej składowej spinu oraz rodzaju zaburzenia zewnętrznego. Konieczne jest również określenie operatora prądu spinowego, ponieważ w obecności sprzężenia spinowo-orbitalnego spin nie jest na ogół wielkością zachowaną [20, 10].

W analizowanym modelu dwuwymiarowego gazu elektronowego z losowym oddziaływaniem Rashby przewodnictwo spinowe opisuje odpowiedź prądu składowej spinu s_z, płynącego w kierunku x, na efektywne pole spinowe wprowadzone za pomocą zależnego od czasu spinowego potencjału wektorowego [6]. Potencjał ten jest sprzężony z operatorem prądu spinowego. Tak zdefiniowane przewodnictwo spinowe należy odróżnić od przewodnictwa spinowego Halla, które opisuje poprzeczny prąd spinowy wywołany polem elektrycznym [10].

W tym modelu przewodnictwo ładunkowe i spinowe są określone przez różne transportowe czasy relaksacji. Odmienna zależność tych czasów od energii prowadzi do różnic w zależnościach obu przewodnictw od potencjału chemicznego i temperatury [6].

2.3 Spin, prąd spinowy i akumulacja spinowa

Spin elektronu jest wewnętrznym momentem pędu, którego składowe opisują operatory [21]

$$\hat{s}_\alpha = \frac{\hbar}{2}\sigma_\alpha, \qquad \alpha = x, y, z, \tag{2.3}$$

gdzie σ_α są macierzami Pauliego.Powyższa definicja odnosi się do składowych spinu w przyjętym laboratoryjnym układzie współrzędnych. W dalszej części rozprawy, przy opisie powierzchniowych stanów izolatora topologicznego, dla zachowania konwencji

stosowanej w publikacjach stanowiących podstawę rozprawy wykorzystano unitarnie obróconą bazę spinową. Związek między macierzami Pauliego występującymi w hamiltonianie powierzchniowym a laboratoryjnymi składowymi fizycznego spinu zostanie podany przy wprowadzeniu modelu powierzchni TI. Dla operatora spinu niezależnego jawnie od czasu jego ewolucję określa równanie Heisenberga,

$$\frac{\mathrm{d}\hat{s}_\alpha}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{s}_\alpha\right]. \tag{2.4}$$

Jeżeli komutator $\left[\hat{H}, \hat{s}_\alpha\right]$ nie znika, dana składowa spinu nie jest wielkością zachowaną.

W dalszym opisie przyjęto konwencjonalny jednocząstkowy operator prądu spinowego [20, 22]

$$\hat{j}_i^{\,\alpha} = \frac{1}{2}\left\{\hat{v}_i, \hat{s}_\alpha\right\}, \tag{2.5}$$

gdzie $\{A, B\} = AB + BA$ oznacza antykomutator, a operator prędkości jest określony przez $\hat{v}_i = (i/\hbar)[\hat{H}, \hat{r}_i]$. Indeks i wskazuje kierunek przepływu, natomiast α określa transportowaną składową spinu. Makroskopową gęstość prądu spinowego otrzymuje się po uwzględnieniu obsadzenia stanów i odpowiedniej normalizacji przestrzennej.

W układach ze sprzężeniem spinowo-orbitalnym wartość oczekiwana tak zdefiniowanego operatora może być niezerowa również w równowadze termodynamicznej. Sama niezerowa wartość konwencjonalnego prądu spinowego nie stanowi więc wystarczającego kryterium nierównowagowego transportu spinu [22]. Przy wyznaczaniu przewodnictwa spinowego rozpatruje się zmianę gęstości prądu wywołaną określonym zaburzeniem zewnętrznym względem stanu równowagi. Rozróżnienie to pozwala oddzielić ewentualny wkład równowagowy od odpowiedzi transportowej.

W obecności oddziaływań niezachowujących danej składowej spinu jej lokalny bilans ma postać [20, 10]

$$\frac{\partial s_\alpha}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial j_i^{\,\alpha}}{\partial x_i} = \mathcal{T}_\alpha, \tag{2.6}$$

gdzie s_α oznacza gęstość danej składowej spinu, $j_i^{\,\alpha}$ jest gęstością prądu spinowego, a $\mathcal{T}_\alpha$ określa gęstość momentu siły działającego na spin. Zmiana lokalnej gęstości spinu może zatem wynikać zarówno z jego przepływu, jak i z oddziaływań zmieniających stan spinowy. Interpretacja prądu spinowego wymaga uwzględnienia obu składników tego bilansu.

Od przepływu spinu należy odróżnić akumulację spinową, czyli nierównowagową zmianę lokalnej gęstości spinu. Jej wartość zależy od procesów generacji, transportu i relaksacji polaryzacji spinowej [3, 23]. W układach ze sprzężeniem spinowo-orbitalnym polaryzacja może być indukowana przez prąd elektryczny. Przykładem jest efekt Edelsteina, w którym zmiana obsadzenia stanów o zależnej od pędu strukturze spinowej prowadzi do niezerowej nierównowagowej gęstości spinu [12, 10].

2.4 Sprzężenie spinowo-orbitalne i powiązanie spinu z pędem

Sprzężenie spinowo-orbitalne wiąże orbitalne i spinowe stopnie swobody elektronu. W opisie efektywnym może prowadzić do członów hamiltonianu zależnych jednocześnie od pędu i operatorów spinu. W układzie jednorodnym, w którym stany można oznaczać wektorem falowym, ich struktura spinowa może zależeć od kierunku i wartości tego wektora [4, 11]. W obecności przestrzennie niejednorodnych zaburzeń wektor falowy nie jest na ogół dobrą liczbą kwantową dokładnych stanów własnych. Stany układu niezaburzonego o określonym wektorze falowym mogą jednak stanowić bazę do opisu rozpraszania.

Przykładem sprzężenia spinowo-orbitalnego w dwuwymiarowym gazie elektronowym jest oddziaływanie Rashby, związane z asymetrią struktury w kierunku prostopadłym do płaszczyzny ruchu elektronów. Dla stałego, niezerowego parametru Rashby oddziaływanie to prowadzi do powstania dwóch gałęzi dyspersji, których stany przy tym samym niezerowym wektorze falowym mają przeciwne orientacje wartości oczekiwanej spinu. W stanach własnych izotropowego modelu Rashby wartość oczekiwana spinu leży w płaszczyźnie układu i jest prostopadła do pędu [24, 4]. Jednorodne sprzężenie modyfikuje zatem widmo i strukturę spinową stanów, lecz samo nie powoduje rozpraszania między różnymi pędami, ponieważ zachowuje symetrię translacyjną układu.

W ogólnym przypadku parametr Rashby można rozłożyć na część średnią i fluktuującą:

$$\lambda(\mathbf{r}) = \overline{\lambda} + \delta\lambda(\mathbf{r}), \qquad \langle \delta\lambda(\mathbf{r}) \rangle = 0, \tag{2.7}$$

gdzie nawiasy $\langle \ldots \rangle$ oznaczają uśrednienie po realizacjach nieuporządkowania, a $\overline{\lambda}$ jest przestrzennie jednorodną wartością średnią. Część jednorodna odpowiada za regularną modyfikację struktury pasmowej, natomiast fluktuacje $\delta\lambda(\mathbf{r})$ mogą powodować przejścia między stanami o różnych pędach i strukturach spinowych [25, 15].

W modelu analizowanym w rozprawie przyjęto $\overline{\lambda} = 0$, zatem $\lambda(\mathbf{r}) = \delta\lambda(\mathbf{r})$. Zerowa wartość średnia nie oznacza zaniku oddziaływania spinowo-orbitalnego w poszczególnych realizacjach układu. Jego fluktuacje są scharakteryzowane przez korelator $\langle \lambda(\mathbf{r})\lambda(\mathbf{r}') \rangle$ i prowadzą do rozpraszania zależnego od spinu. W zastosowanym opisie punktem wyjścia jest paraboliczne, spinowo zdegenerowane pasmo, a losowe sprzężenie Rashby uwzględnia się jako zaburzenie [6].

Powiązanie orientacji spinu z pędem, określane jako *spin-momentum locking*, występuje również w stanach powierzchniowych trójwymiarowych izolatorów topologicznych. W podstawowym izotropowym modelu niemagnetycznej powierzchni TI

stany należące do danej gałęzi stożka Diraca mają określoną teksturę spinową, a odwróceniu pędu towarzyszy odwrócenie wartości oczekiwanej spinu [13, 14].

Samo występowanie zależnej od pędu tekstury spinowej nie odróżnia więc powierzchni TI od 2DEG z jednorodnym oddziaływaniem Rashby. Różnica dotyczy struktury pasmowej oraz pochodzenia stanów: w 2DEG sprzężenie Rashby rozszczepia pasmo o parabolicznej części kinetycznej, natomiast na powierzchni TI rozpatrywane stany Diraca są związane z nietrywialną topologią pasm objętościowych [4, 13, 14]. Różnice te wpływają na elementy macierzowe zaburzeń i dostępne kanały rozpraszania, a tym samym na odpowiedź obu układów na oddziaływania zależne od spinu.

2.5 Magnetyzacja i nieuporządkowanie jako źródła rozpraszania

Rozpraszanie elektronów może być wywołane przez przestrzennie niejednorodne zaburzenia potencjałowe, magnetyczne i spinowo-orbitalne. Zaburzenia te powodują przejścia między stanami układu niezaburzonego, a ich wpływ na przewodnictwo zależy od skuteczności relaksacji prądu i rozkładu kątowego rozpraszania [26, 27]. Jeżeli stany mają zależną od pędu strukturę spinową, prawdopodobieństwa przejścia zależą również od nakładania się spinowych części funkcji falowych. Struktura spinowa stanów wpływa więc na transport także przy rozpraszaniu na potencjale niezależnym od spinu [4, 13].

Oddziaływanie elektronów z magnetyzacją opisuje się za pomocą członu wymiennego, który może mieć postać formalnie analogiczną do sprzężenia Zeemana. Przestrzennie jednorodny człon tego rodzaju modyfikuje widmo energetyczne i strukturę spinową stanów, lecz w jednorodnym układzie zachowującym symetrię translacyjną sam nie powoduje rozpraszania między różnymi pędami. Należy zatem odróżnić zmianę struktury pasmowej wywołaną jednorodną magnetyzacją od rozpraszania wynikającego z jej przestrzennej niejednorodności [13, 14].

Jeżeli magnetyzacja występuje w skończonym obszarze, stany elektronowe wewnątrz tego obszaru różnią się od stanów w jego otoczeniu. Rozwiązania funkcji falowych należy dopasować na granicach zgodnie z warunkami wynikającymi z przyjętego hamiltonianu. W rozpatrywanym modelu bariery magnetycznej magnetyzacja zmienia postać dopasowywanych stanów i wynikające z tego amplitudy odbicia oraz transmisji. Transmisja zależy wówczas od energii i kąta padania elektronu, szerokości bariery oraz wartości członu wymiennego [5].

Inny przypadek stanowi nieuporządkowanie magnetyczne, opisywane za pomocą przestrzennie losowego pola magnetyzacji [7]. Jego składowe można zapisać jako sumę

wartości średniej i fluktuacji, $M_\alpha(\mathbf{r}) = \langle M_\alpha(\mathbf{r})\rangle + \delta M_\alpha(\mathbf{r})$. Statystyczną zależność między fluktuacjami w dwóch punktach określa korelator

$$C_{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \langle \delta M_\alpha(\mathbf{r}) \delta M_\beta(\mathbf{r}')\rangle \,, \tag{2.8}$$

gdzie nawiasy $\langle \ldots \rangle$ oznaczają uśrednienie po realizacjach nieuporządkowania.

Dla statystycznie jednorodnego nieuporządkowania korelator zależy od różnicy położeń $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Wartość $C_{\alpha\alpha}(\mathbf{r},\mathbf{r})$ określa wariancję danej składowej magnetyzacji, natomiast zanik korelacji wraz z odległością wyznacza charakterystyczną skalę przestrzenną fluktuacji. Zerowa średnia magnetyzacja nie wyklucza rozpraszania elektronów na jej przestrzennych fluktuacjach. Ich amplituda i korelacje wpływają na czasy relaksacji oraz przewodnictwo elektronów powierzchniowych [7]. Rozpraszanie może również wynikać z przestrzennych fluktuacji sprzężenia spinowo-orbitalnego, jak w omówionym wcześniej modelu losowego oddziaływania Rashby [6].

Lokalna kropka lub domena magnetyczna stanowi pojedynczy obszar rozpraszający o określonym rozmiarze i profilu magnetyzacji. W tym przypadku analizuje się amplitudę i rozkład kątowy rozpraszania na danej strukturze, bez uśredniania po losowych konfiguracjach pola [8]. Różnica względem rozpraszania na potencjale skalarnym wynika z postaci operatora zaburzenia: potencjał skalarny jest proporcjonalny do operatora jednostkowego w przestrzeni spinowej, natomiast zaburzenie magnetyczne zawiera macierze Pauliego. Oba rodzaje zaburzeń działają na stany o tej samej, zależnej od pędu strukturze spinowej, lecz prowadzą do odmiennych elementów macierzowych przejść, a w konsekwencji mogą dawać różne rozkłady kątowe rozpraszania [13, 8].

2.6 Czas relaksacji i transportowy czas relaksacji

Wpływ rozpraszania na dynamikę elektronów opisuje się za pomocą czasów charakteryzujących zanik określonych stanów lub relaksację wielkości nierównowagowych. Wartość i interpretacja danego czasu zależą od rozpatrywanego procesu, dlatego należy odróżnić czas życia stanu elektronowego od czasów relaksacji prądu i polaryzacji spinowej [16, 19, 3].

Czas życia stanu kwazicząstkowego τ charakteryzuje rozpraszanie elektronu z danego stanu, natomiast transportowy czas relaksacji τ_{tr} uwzględnia skuteczność tego procesu w relaksacji prądu ładunkowego. Różnicę tę można przedstawić dla sprężystego rozpraszania w pojedynczym izotropowym paśmie, przy statystycznej izotropii mechanizmu rozpraszania [16, 1].

Jeżeli $W_{\mathbf{k}\to\mathbf{k}'}$ oznacza prawdopodobieństwo przejścia na jednostkę czasu, z uwzględ-

nieniem warunku zachowania energii, to częstość rozpraszania z danego stanu wynosi

$$\frac{1}{\tau(\mathbf{k})} = \sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}\to\mathbf{k}'}, \tag{2.9}$$

natomiast odwrotność transportowego czasu relaksacji ma postać [16, 9]

$$\frac{1}{\tau_{\mathrm{tr}}(\mathbf{k})} = \sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}\to\mathbf{k}'} \left(1 - \cos\theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\right), \tag{2.10}$$

gdzie $\theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ jest kątem między początkowym i końcowym kierunkiem prędkości.

Czynnik $1-\cos\theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ ogranicza wkład rozpraszania pod małymi kątami do relaksacji prądu. Takie zdarzenia skracają czas życia stanu, lecz słabo zmieniają kierunek przepływu nośników. Zależność (2.10) odnosi się do wskazanych założeń. W układach anizotropowych lub wielopasmowych opis relaksacji wymaga uwzględnienia pełnej struktury przejść między stanami.

W opisie dynamiki spinowej należy dodatkowo rozróżnić relaksację polaryzacji spinowej i relaksację prądu spinowego. Czas τ_s charakteryzuje zanik określonej nierównowagowej składowej polaryzacji spinowej. Jeżeli jej relaksację można opisać pojedynczym procesem wykładniczym, po wyłączeniu źródła polaryzacji i przy pominięciu transportu przestrzennego zachodzi $\delta s_\alpha(t) = \delta s_\alpha(0)\exp(-t/\tau_s)$. Wielkość δs_α oznacza odchylenie gęstości danej składowej spinu od wartości równowagowej. W ogólnym przypadku szybkość relaksacji zależy od orientacji spinu, a opis może wymagać kilku czasów lub tensora relaksacji [3, 23].

Spinowy transportowy czas relaksacji $\tau_{s,\mathrm{tr}}$ charakteryzuje natomiast relaksację rozkładu nierównowagowego odpowiedzialnego za przepływ danej składowej spinu. W modelu 2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby wielkość ta występuje w zrenormalizowanym wierzchołku prądu spinowego oraz w wyrażeniu na przewodnictwo spinowe [6]. Nie należy jej utożsamiać z czasem τ_s: polaryzacja spinowa opisuje nierównowagową gęstość spinu, natomiast prąd spinowy zależy również od kierunków i prędkości ruchu elektronów przenoszących spin.

Rozróżnienie to ma znaczenie przy porównywaniu transportu ładunku i spinu. Zdarzenie rozpraszania pod małym kątem może nieznacznie zmieniać kierunek prędkości, a jednocześnie zmieniać transportowaną składową spinu. W modelu losowego Rashby takie procesy mogą więc skutecznie relaksować prąd spinowy, mimo ich słabego udziału w relaksacji prądu ładunkowego. W konsekwencji czasy τ_{tr} i $\tau_{s,\mathrm{tr}}$ mają różne zależności od energii oraz parametrów korelacji nieuporządkowania [6].

W rozprawie czasy relaksacji wykorzystywane są przede wszystkim w analizie transportu w 2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby oraz na powierzchni TI z losową magnetyzacją. W pierwszym modelu wyznaczane są odrębne czasy transportowe dla prądu ładunkowego i spinowego, natomiast w drugim analizowany jest

wpływ rozpraszania magnetycznego na relaksację i przewodnictwo elektronów powierzchniowych [6, 7]. Metody obliczania tych wielkości przedstawiono w następnym rozdziale.

Rozdział 3

Metody obliczeniowe transportu spinowo-zależnego

W rozdziale przedstawiono metody obliczeniowe wykorzystane do opisu transportu ładunku i spinu w analizowanych układach niskowymiarowych. Rozważane modele obejmują transport przez skończone struktury magnetyczne i transport dyfuzyjny w obecności przestrzennie niejednorodnych pól spinowo-zależnych. Z tego powodu w rozprawie zastosowano kilka uzupełniających się podejść: formalizm odpowiedzi liniowej, funkcje Greena, przybliżenie Borna, poprawki wierzchołkowe oraz metody transmisyjne i rozpraszanie falowe.

Opis przewodnictwa w układach z nieuporządkowaniem opiera się na formalizmie Kubo, w którym przewodnictwo wyznacza się z korelatora prąd-prąd [18, 19, 28]. W praktyce obliczeniowej korelator ten zapisywany jest przez funkcje Greena oraz funkcję wierzchołkową. Takie podejście zastosowano w opisie 2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby oraz powierzchni TI z losową magnetyzacją [6, 7]. W obu przypadkach rozpraszanie prowadzi do poszerzenia poziomów elektronowych, skończonego czasu życia stanu oraz renormalizacji operatora prądu.

W układach o skończonej geometrii, takich jak powierzchnia TI z obszarem magnetycznym, transport opisuje się przez amplitudy odbicia i transmisji. Wówczas zagadnienie sprowadza się do rozwiązania równania Diraca w poszczególnych obszarach struktury oraz dopasowania funkcji falowych na granicach. Metoda ta pozwala wyznaczyć prawdopodobieństwo transmisji, przewodność oraz odpowiedź termoelektryczną [5]. Dla lokalnej struktury magnetycznej użyteczne są natomiast przybliżenie Borna oraz metoda fal cząstkowych, które umożliwiają analizę przekroju czynnego i kątowej asymetrii rozpraszania [8].

Celem tego rozdziału jest uporządkowanie aparatu rachunkowego stosowanego dalej w rozprawie. W kolejnych podrozdziałach podano definicje i zależności potrzebne do interpretacji wyników: wzór Kubo, funkcje Greena, kontynuację analityczną, energię własną, czas relaksacji, poprawki wierzchołkowe oraz amplitudy transmisji i

rozpraszania. W definicjach ogólnych zachowano jawnie stałą Plancka $\hbar$. W wybranych rachunkach przyjęto jednostki $\hbar = k_B = 1$, zgodnie z konwencją stosowaną w cytowanych publikacjach; przejście do tej konwencji zaznaczono przed odpowiednimi równaniami. Wektor $\mathbf{k}$ oznacza wektor falowy, a odpowiadający mu pęd jest równy $\hbar\mathbf{k}$. W hamiltonianie powierzchniowych stanów TI zachowano oznaczenie $v = \hbar v_F$, gdzie v_F jest prędkością Fermiego [7].

3.1 Formalizm odpowiedzi liniowej

Formalizm odpowiedzi liniowej stosuje się wtedy, gdy zewnętrzne zaburzenie jest na tyle słabe, że odpowiedź układu można ograniczyć do składnika pierwszego rzędu względem tego zaburzenia. W problemach transportowych takim zaburzeniem jest najczęściej pole elektryczne albo odpowiadający mu potencjał wektorowy. Dla pola przyłożonego w kierunku x gęstość prądu można zapisać jako

$$j_x(\omega) = \sigma_{xx}(\omega) E_x(\omega), \tag{3.1}$$

gdzie $\sigma_{xx}(\omega)$ jest podłużnym przewodnictwem elektrycznym. W granicy statycznej otrzymuje się przewodnictwo dc,

$$\sigma_{xx} = \lim_{\omega \to 0} \sigma_{xx}(\omega). \tag{3.2}$$

Jeżeli pole elektryczne opisuje się przez potencjał wektorowy $\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}_\omega e^{-i\omega t}$, to przy braku potencjału skalarnego zachodzi zależność

$$\mathbf{E}_\omega = \frac{i\omega}{c} \mathbf{A}_\omega. \tag{3.3}$$

W powyższym zapisie ω oznacza częstość kołową, a c jest prędkością światła. Czynnik $1/c$ wynika z zastosowania gaussowskiej konwencji jednostek elektromagnetycznych, zgodnej z zapisem sprzężenia z potencjałem wektorowym w pracy [6].

W układach nieuporządkowanych sama znajomość czasu życia stanu nie wystarcza do obliczenia przewodnictwa. Rozpraszanie modyfikuje również operator prądu, dlatego w formalizmie Kubo pojawia się zrenormalizowany wierzchołek prądowy. W dalszej części rozdziału będzie on oznaczany przez J_x. Rozróżnienie między gołym wierzchołkiem prądu a wierzchołkiem zrenormalizowanym jest konieczne zwłaszcza w modelach z rozpraszaniem spinowo-zależnym, gdzie zmiana pędu elektronu jest powiązana ze zmianą jego struktury spinowej.

3.1.1 Wzór Kubo

Wzór Kubo wiąże przewodnictwo z retardowaną funkcją korelacyjną operatorów prądu [18, 19, 28]. Dla układu dwuwymiarowego o powierzchni S i przestrzennie jednorodnego pola zewnętrznego przyjmujemy korelator znormalizowany na jednostkę powierzchni:

$$\begin{aligned} K^R_{\alpha\beta}(t) = & -\frac{i}{\hbar S}\theta(t)\int_S d^2r \int_S d^2r' \\ & \times \left\langle \left[\hat{j}_\alpha(\mathbf{r},t), \hat{j}_\beta(\mathbf{r}',0)\right]\right\rangle . \end{aligned} \tag{3.4}$$

Operator $\hat{j}_\alpha(\mathbf{r},t)$ oznacza lokalną gęstość prądu elektrycznego przy zerowym polu zewnętrznym. Całkowanie po obu współrzędnych wybiera jednorodną składową odpowiedzi, natomiast czynnik $1/S$ zapewnia normalizację właściwą dla odpowiedzi gęstości prądu. Nawias $\langle \ldots \rangle$ oznacza średnią termodynamiczną oraz, dla układu nieuporządkowanego, średnią po konfiguracjach zaburzenia.

Dla pola o zależności czasowej $e^{-i\omega t}$ stosujemy transformatę Fouriera

$$K^R_{\alpha\beta}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i(\omega+i0^+)t} K^R_{\alpha\beta}(t). \tag{3.5}$$

Wielkość ω oznacza tutaj częstość kołową. Sprzężenie liniowe z jednorodnym potencjałem wektorowym ma postać

$$\hat{H}'(t) = -\frac{1}{c}\sum_\beta A_\beta(t)\int_S d^2r\, \hat{j}_\beta(\mathbf{r}).$$

W rozważanym stanie normalnym, po uwzględnieniu wkładu kontaktowego zapewniającego brak odpowiedzi na statyczny, jednorodny potencjał wektorowy, który można usunąć przez transformację cechowania, otrzymuje się

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{i}{\omega + i0^+}\left[K^R_{\alpha\beta}(\omega) - K^R_{\alpha\beta}(0)\right]. \tag{3.6}$$

Dla hamiltonianu parabolicznego wkład kontaktowy pochodzi z części diamagnetycznej prądu. W modelu efektywnym o liniowym widmie należy zachować regularizację zgodną z niezmienniczością względem cechowania. Wielkość $K^R_{\alpha\beta}(0)$ oznacza odpowiedź statyczną wykorzystywaną w tym odjęciu.

W obliczeniach transportowych korelator prąd-prąd zapisuje się przez funkcje Greena oraz wierzchołki prądowe. Po uśrednieniu po nieuporządkowaniu goły wierzchołek prądu zostaje zastąpiony przez wierzchołek zrenormalizowany, oznaczany dalej jako J_x. Taki zapis pozwala uwzględnić wpływ rozpraszania nie tylko na czas życia stanów elektronowych, lecz także na relaksację prądu.

Dla modelu powierzchni TI z losową magnetyzacją wyrażenie na prąd w kierunku x, po uśrednieniu po nieuporządkowaniu i uwzględnieniu poprawek wierzchołkowych,

można zapisać w postaci

$$j_x = -\frac{evE_x}{2\pi}\,\mathrm{Tr}\int \frac{d^2k}{(2\pi)^2}\int d\varepsilon\, f'(\varepsilon) J_x(\mathbf{k}) G^R_{\mathbf{k}}(\varepsilon)\sigma_x G^A_{\mathbf{k}}(\varepsilon). \tag{3.7}$$

W powyższym równaniu $v = \hbar v_F$ jest parametrem hamiltonianu Diraca o wymiarze energii razy długość, natomiast $f(\varepsilon)$ oznacza funkcję Fermiego–Diraca. Wielkość $J_x(\mathbf{k})$ jest zrenormalizowanym wierzchołkiem prądowym, którego goła postać w konwencji przyjętej w publikacji wynosi $\hat{j}_x = (ev/\hbar)\sigma_x$. Ślad wykonywany jest po spinowych stopniach swobody. Taki zapis zachowuje konwencję zastosowaną w opisie transportu na powierzchni TI z losową magnetyzacją [7].

W przypadku 2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby formalizm Kubo prowadzi do analogicznego wyrażenia, lecz goły wierzchołek prądu wynika z parabolicznego widma elektronowego i jest proporcjonalny do $\hbar k_x/m^*$, czyli do k_x/m^* w jednostkach $\hbar = 1$. Po uwzględnieniu poprawek wierzchołkowych zostaje on zastąpiony przez J_x, co prowadzi do transportowego czasu relaksacji [6].

3.1.2 Funkcje Greena w opisie transportu

Funkcje Greena opisują propagację stanu elektronowego w układzie kwantowym. W zagadnieniach transportowych pozwalają uwzględnić zarówno strukturę widma, jak i wpływ rozpraszania na czas życia stanów elektronowych. W dalszych obliczeniach wykorzystywane są przede wszystkim funkcje Greena opóźniona i zaawansowana, oznaczane odpowiednio przez G^R oraz G^A [19, 28].

Dla hamiltonianu niezaburzonego $\hat{H}_0$ funkcję Greena można zapisać formalnie jako

$$G_0^{R,A}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \hat{H}_0 \pm i\delta}, \tag{3.8}$$

gdzie δ jest dodatnią wielkością infinitezymalną. Znak $+i\delta$ odpowiada funkcji opóźnionej, natomiast znak $-i\delta$ funkcji zaawansowanej. W reprezentacji pędowej, dla pojedynczego pasma o energii $\varepsilon_{\mathbf{k}}$, otrzymuje się

$$G_0^{R,A}(\varepsilon, \mathbf{k}) = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}} \pm i\delta}. \tag{3.9}$$

W obecności rozpraszania parametr δ zostaje zastąpiony przez skończone poszerzenie poziomów. Dla 2DEG o parabolicznym widmie

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \tag{3.10}$$

funkcja Greena przyjmuje postać

$$G^{R,A}(\varepsilon, \mathbf{k}) = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}} \pm i\hbar/(2\tau)}. \tag{3.11}$$

Czas τ opisuje czas życia stanu elektronowego związany z rozpraszaniem, natomiast wielkość $\hbar/(2\tau)$ określa poszerzenie energetyczne występujące w funkcji Greena. W konwencji $\hbar = 1$ poszerzenie to zapisuje się jako $1/(2\tau)$. W modelu 2DEG z przestrzennie fluktuującym oddziaływaniem Rashby wynika ono z rozpraszania na fluktuacjach parametru $\lambda(\mathbf{r})$ [6].

W bardziej ogólnym zapisie wpływ rozpraszania zawarty jest w energii własnej $\Sigma^{R,A}$. Funkcja Greena układu zaburzonego spełnia wtedy równanie Dysona,

$$G^{R,A}(\varepsilon, \mathbf{k}) = \frac{1}{\varepsilon - \hat{H}_0(\mathbf{k}) - \Sigma^{R,A}(\varepsilon, \mathbf{k})}. \tag{3.12}$$

Część rzeczywista energii własnej przesuwa położenie poziomów energetycznych, natomiast część urojona odpowiada za ich poszerzenie. W obliczeniach transportowych najważniejsza jest zwykle właśnie część urojona, ponieważ określa czas życia kwazicząstki.

Dla powierzchni TI niezaburzony hamiltonian Diraca można zapisać w postaci

$$\hat{H}_0(\mathbf{k}) = v\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}, \tag{3.13}$$

gdzie $v = \hbar v_F$, a v_F oznacza prędkość Fermiego powierzchniowych stanów Diraca. Ponieważ $\mathbf{k}$ jest wektorem falowym, parametr v ma wymiar energii pomnożonej przez długość. W równaniu (3.13) zachowano reprezentację stosowaną w publikacjach [7, 8]. Jest ona unitarnie równoważna często stosowanemu laboratoryjnemu zapisowi

$$\hat{H}_0^{\text{lab}} = v\left(\sigma_x^{\text{lab}} k_y - \sigma_y^{\text{lab}} k_x\right).$$

Macierze Pauliego występujące w równaniu (3.13) odpowiadają bazie obróconej w płaszczyźnie powierzchni i są związane z macierzami opisującymi laboratoryjne składowe fizycznego spinu zależnościami

$$\sigma_x = -\sigma_y^{\text{lab}}, \qquad \sigma_y = \sigma_x^{\text{lab}}, \qquad \sigma_z = \sigma_z^{\text{lab}}.$$

Obrót dotyczy zatem składowych leżących w płaszczyźnie powierzchni, natomiast składowa prostopadła do powierzchni pozostaje niezmieniona. Z tego względu człon magnetyczny proporcjonalny do σ_z ma tę samą postać w obu reprezentacjach. Ponieważ $\mathbf{k}$ jest wektorem falowym, parametr v ma wymiar energii razy długość. Zachowano w ten sposób oznaczenie stosowane w publikacji [7]. Macierze $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ działają w przestrzeni spinowej. Odpowiadająca temu hamiltonianowi funkcja Greena

ma postać

$$G_0^{R,A}(\varepsilon, \mathbf{k}) = \frac{\varepsilon + v\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}}{(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i0^{\pm})\,(\varepsilon + \varepsilon_{\mathbf{k}} + i0^{\pm})}, \tag{3.14}$$

gdzie

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = vk. \tag{3.15}$$

Zapis $i0^+$ odpowiada funkcji opóźnionej, a $i0^-$ funkcji zaawansowanej.

W modelu powierzchni TI z losową magnetyzacją rozpraszanie prowadzi do skończonego poszerzenia stanów. W przybliżeniu słabego rozpraszania uśredniona funkcja Greena może być zapisana jako

$$G^{R,A}(\varepsilon, \mathbf{k}) = \frac{\varepsilon + v\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}}{(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}} \pm i\gamma_1)\,(\varepsilon + \varepsilon_{\mathbf{k}} \pm i\gamma_2)}. \tag{3.16}$$

Poszerzenia obu gałęzi są jednakowe, jeżeli każde z nich wyznacza się przy energii odpowiadającej danej gałęzi:

$$\gamma_1(\varepsilon = vk, k) = \gamma_2(\varepsilon = -vk, k) \equiv \gamma(k). \tag{3.17}$$

Równość ta nie oznacza równości $\gamma_1(\varepsilon, k)$ i $\gamma_2(\varepsilon, k)$ przy dowolnej, wspólnej wartości argumentu energetycznego. Jej uzasadnienie wynika z projekcji energii własnej opisanej w równaniu (3.40). Wielkość γ ma wymiar energii i określa poszerzenie stanu. Jej związek z czasem życia jest dany zależnością [7]

$$\tau = \frac{\hbar}{2\gamma}. \tag{3.18}$$

W jednostkach $\hbar = 1$ zależność ta przyjmuje postać $\tau = 1/(2\gamma)$.

Funkcje Greena wchodzą bezpośrednio do wzoru Kubo. W granicy słabego rozpraszania główny wkład do przewodnictwa pochodzi z iloczynu funkcji opóźnionej i zaawansowanej,

$$G^R(\varepsilon, \mathbf{k})G^A(\varepsilon, \mathbf{k}). \tag{3.19}$$

Ten człon opisuje propagację elektronów w pobliżu powierzchni Fermiego i decyduje o transporcie dyfuzyjnym. W układach z nieuporządkowaniem spinowo-zależnym sam iloczyn $G^R G^A$ nie wystarcza jednak do pełnego opisu przewodnictwa. Konieczne jest również uwzględnienie renormalizacji wierzchołka prądowego, ponieważ rozpraszanie wpływa nie tylko na czas życia stanu, ale także na relaksację prądu.

3.1.3 Technika Matsubary i kontynuacja analityczna

Technika Matsubary pozwala obliczać funkcje odpowiedzi w skończonej temperaturze bez bezpośredniego przechodzenia do rzeczywistych częstości. Korelatory

zapisuje się najpierw dla częstości urojonych, a dopiero na końcu wykonuje kontynuację analityczną. W rachunku transportowym jest to wygodne, ponieważ umożliwia uporządkowane przeprowadzenie sumowania po stanach fermionowych oraz wydzielenie wkładu odpowiadającego odpowiedzi liniowej układu [19, 28].

W rachunku przedstawionym w tym podrozdziale przyjęto jednostki $\hbar = k_B = 1$, zgodnie z konwencją zastosowaną w pracy [6]. Temperatura T jest zatem wyrażona w jednostkach energii, a częstości występujące jako argumenty funkcji Greena są zapisywane w jednostkach energetycznych.

Dla fermionów i bozonów zmienne Matsubary mają odpowiednio postać

$$\varepsilon_n = (2n+1)\pi T, \qquad \omega_m = 2m\pi T, \tag{3.20}$$

gdzie $n, m \in \mathbb{Z}$. Przy jawnym zapisie stałych fizycznych odpowiadają im energie $(2n+1)\pi k_B T$ oraz $2m\pi k_B T$; odpowiednie częstości kołowe otrzymuje się przez podzielenie tych energii przez $\hbar$.

W opisie wielkiego zespołu kanonicznego potencjał chemiczny μ występuje jawnie w funkcji Greena Matsubary. Przy zachowaniu dotychczasowej definicji hamiltonianu $\hat{H}_0(\mathbf{k})$ ma ona postać

$$G(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = \left[(i\varepsilon_n + \mu)\sigma_0 - \hat{H}_0(\mathbf{k}) - \Sigma(\mathbf{k}, i\varepsilon_n)\right]^{-1}. \tag{3.21}$$

Macierz σ_0 jest macierzą jednostkową w przestrzeni spinowej. Energie własne $\hat{H}_0$ są liczone od przyjętego początku skali energii, natomiast zmienna fermionowa $i\varepsilon_n$ jest odniesiona do potencjału chemicznego [19, 28].

Aby otrzymać retardowaną funkcję Greena z argumentem ε liczonym od tego samego początku skali co energie własne $\hat{H}_0$, wykonuje się kontynuację

$$i\varepsilon_n \longrightarrow \varepsilon - \mu + i0^+. \tag{3.22}$$

Wówczas

$$G^R(\varepsilon, \mathbf{k}) = \left[(\varepsilon + i0^+)\sigma_0 - \hat{H}_0(\mathbf{k}) - \Sigma^R(\varepsilon, \mathbf{k})\right]^{-1}, \tag{3.23}$$

gdzie $\Sigma^R(\varepsilon, \mathbf{k})$ oznacza energię własną po tej samej kontynuacji analitycznej. Otrzymany zapis jest zgodny z przyjętą wcześniej reprezentacją energetyczną funkcji Greena. W tej konwencji rozkład Fermiego–Diraca wynosi

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\exp[(\varepsilon - \mu)/T] + 1}, \tag{3.24}$$

przy zachowaniu jednostek $k_B = 1$. Wielkości mierzalne otrzymuje się po przejściu do rzeczywistej częstości.

W modelu 2DEG z przestrzennie fluktuującym oddziaływaniem Rashby prąd

indukowany przez potencjał wektorowy można zapisać w formalizmie Matsubary jako

$$j_x(i\omega_m) = -\frac{eA_xT}{m^*c}\sum_{n,\mathbf{k}} \mathrm{Tr}\left[J_x(\mathbf{k}; i\varepsilon_n, i\varepsilon_n + i\omega_m)G_{\mathbf{k}}(i\varepsilon_n + i\omega_m)k_x\sigma_0 G_{\mathbf{k}}(i\varepsilon_n)\right]. \quad (3.25)$$

Wielkość A_x oznacza składową potencjału wektorowego, m^* jest masą efektywną elektronu, a σ_0 oznacza macierz jednostkową w przestrzeni spinowej. Funkcja J_x jest zrenormalizowanym wierzchołkiem prądowym. Jej postać zależy od mechanizmu rozpraszania i zostanie omówiona w podrozdziale poświęconym poprawkom wierzchołkowym. Analogiczny zapis wykorzystano w obliczeniach przewodnictwa ładunkowego dla 2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby [6].

Funkcja odpowiedzi prądowej zależy od zewnętrznej zmiennej bozonowej $i\omega_m$. Po wykonaniu sumowania po fermionowych zmiennych Matsubary odpowiedź retardowaną otrzymuje się przez kontynuację

$$i\omega_m \longrightarrow \omega + i0^+. \quad (3.26)$$

W przyjętych jednostkach $\hbar = 1$ wielkość ω oznacza energię przekazaną przez zaburzenie zewnętrzne. Przy jawnym zapisie stałych fizycznych odpowiada jej $\hbar\omega_{\mathrm{fiz}}$, gdzie ω_{fiz} jest częstością kołową pola.

Kontynuacja zmiennej bozonowej dotyczy energii przekazywanej między stanami elektronowymi i nie wymaga przesunięcia o potencjał chemiczny. Należy ją odróżnić od kontynuacji argumentu pojedynczej funkcji Greena, określonej równaniem (3.22).

W stosowanym przybliżeniu słabego rozpraszania zachowuje się dominujący wkład transportowy zawierający iloczyn $G^R(\varepsilon+\omega, \mathbf{k})G^A(\varepsilon, \mathbf{k})$. Prowadzi to do wyrażenia na prąd wykorzystywanego w analizie modelu z losowym oddziaływaniem Rashby [6].

Po wykonaniu kontynuacji analitycznej wyrażenie na prąd przyjmuje postać

$$\begin{aligned} j_x(\omega) = & -\frac{eE_x}{2\pi\omega m^*}\,\mathrm{Tr}\int\frac{d^2k}{(2\pi)^2}\,k_x\int_{-\infty}^{\infty}d\varepsilon\,\left[f(\varepsilon+\omega)-f(\varepsilon)\right] \\ & \times J_x(\mathbf{k},\varepsilon,\varepsilon+\omega)G^R_{\mathbf{k}}(\varepsilon+\omega)G^A_{\mathbf{k}}(\varepsilon). \end{aligned} \quad (3.27)$$

Funkcja $f(\varepsilon)$ oznacza rozkład Fermiego-Diraca. W granicy statycznej korzysta się z zależności

$$\frac{f(\varepsilon+\omega)-f(\varepsilon)}{\omega} \to f'(\varepsilon), \qquad \omega \to 0. \quad (3.28)$$

Otrzymane wyrażenie stanowi punkt wyjścia do wyznaczenia przewodnictwa dc.

Ostateczna postać przewodnictwa zależy od energii własnej oraz od renormalizacji wierzchołka prądowego. Dlatego transportowy czas relaksacji τ_{tr} i spinowy transpor-

towy czas relaksacji $\tau_{s,\mathrm{tr}}$ zostaną wprowadzone dopiero po omówieniu przybliżenia Borna i poprawek wierzchołkowych.

3.2 Opis rozpraszania w przybliżeniu Borna

Przybliżenie Borna stosuje się do opisu słabego rozpraszania, gdy potencjał zaburzający można traktować perturbacyjnie. W rozprawie pojawia się ono w dwóch kontekstach. Pierwszy dotyczy rozpraszania na losowych fluktuacjach pola spinowo-orbitalnego lub magnetycznego, gdzie oblicza się uśrednioną funkcję Greena, energię własną i czasy relaksacji. Drugi występuje w analizie rozpraszania na lokalnej strukturze magnetycznej, gdzie wyznacza się amplitudę rozpraszania w pierwszym rzędzie rachunku perturbacyjnego.

Dla układu opisanego hamiltonianem

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \tag{3.29}$$

człon $\hat{H}_0$ opisuje niezaburzony ruch elektronów, natomiast $\hat{V}$ odpowiada za rozpraszanie. W zależności od rozważanego modelu może to być losowe oddziaływanie Rashby, losowa magnetyzacja, potencjał skalarny domieszek albo lokalna magnetyzacja ograniczona do skończonego obszaru. Wspólną cechą tych przypadków jest to, że zaburzenie łączy stany o różnych wektorach falowych, a w układach spinowo-zależnych może również zmieniać strukturę spinową stanu.

W przypadku nieuporządkowania przestrzennego zakłada się zwykle, że średnia wartość potencjału rozpraszającego zanika,

$$\left\langle \hat{V}(\mathbf{r}) \right\rangle = 0, \tag{3.30}$$

natomiast niezerowy pozostaje jego drugi moment korelacyjny. To właśnie korelator zaburzenia określa prawdopodobieństwo przejścia między stanami $\mathbf{k}$ i $\mathbf{k}'$. Dla losowego pola Rashby rolę tę pełni korelator parametru $\lambda(\mathbf{r})$, natomiast dla losowej magnetyzacji korelator pola wymiennego $M(\mathbf{r})$. W obu przypadkach długość korelacji fluktuacji określa, które kąty rozpraszania wnoszą największy wkład do czasu relaksacji.

W drugim rzędzie rachunku perturbacyjnego wpływ rozpraszania na propagację elektronów opisuje energia własna. Dla funkcji Greena opóźnionej można ją zapisać symbolicznie jako

$$\Sigma^R(\varepsilon, \mathbf{k}) = \left\langle \hat{V} G_0^R(\varepsilon) \hat{V} \right\rangle, \tag{3.31}$$

gdzie G_0^R jest funkcją Greena układu niezaburzonego, a nawias oznacza uśrednianie po konfiguracjach nieuporządkowania. W reprezentacji pędowej zapis ten przyjmuje

postać

$$\Sigma^R(\varepsilon, \mathbf{k}) = \int \frac{d^2k'}{(2\pi)^2} \left\langle \hat{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} G_0^R(\varepsilon, \mathbf{k}') \hat{V}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \right\rangle . \tag{3.32}$$

Taka postać energii własnej jest punktem wyjścia do wyznaczania czasu życia stanu elektronowego w układach z losowym oddziaływaniem Rashby oraz z losową magnetyzacją [6, 7].

Przybliżenie Borna pozwala więc przejść od mikroskopowej postaci zaburzenia do wielkości transportowych. Część urojona energii własnej określa poszerzenie poziomów oraz czas życia stanu. Przejście od czasu życia do wielkości bezpośrednio opisujących przewodnictwo wymaga dodatkowo uwzględnienia struktury kątowej i spinowej rozpraszania.

3.2.1 Energia własna i poszerzenie poziomów

Energia własna opisuje wpływ rozpraszania na propagację elektronów. W równaniu Dysona, wprowadzonym wcześniej w równaniu (3.12), pojawia się ona jako poprawka do hamiltonianu niezaburzonego. Jej część rzeczywista prowadzi do przesunięcia poziomów energetycznych, natomiast część urojona odpowiada za ich poszerzenie. W dalszych obliczeniach najważniejsza jest część urojona, ponieważ określa czas życia stanu kwazicząstkowego.

Jeżeli rozpraszanie jest słabe, funkcję Greena można w pobliżu bieguna przedstawić w postaci skalarnej. Opis ten odnosi się do pojedynczego pasma albo do funkcji Greena po projekcji na rozważaną gałąź widma. Po pominięciu rzeczywistej części energii własnej otrzymuje się

$$G^R(\varepsilon, \mathbf{k}) \simeq \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\gamma(\varepsilon, \mathbf{k})}, \tag{3.33}$$

gdzie

$$\gamma(\varepsilon, \mathbf{k}) = -\operatorname{Im} \Sigma^R(\varepsilon, \mathbf{k}). \tag{3.34}$$

W tym zapisie Σ^R oznacza skalarną energię własną odpowiadającą rozważanemu propagatorowi. Wielkość γ ma wymiar energii i jest związana z czasem życia stanu zależnością $\tau = \hbar/(2\gamma)$, podaną w równaniu (3.18).

W układzie ze spinowymi stopniami swobody energia własna może mieć strukturę macierzową. Wówczas jej części urojonej nie można bezpośrednio utożsamiać z jedną skalarną szerokością poziomu. Poszerzenie danej gałęzi widma wyznacza się z odpowiedniego bieguna funkcji Greena lub, w przybliżeniu słabego rozpraszania, po projekcji energii własnej na stany tej gałęzi [19, 28].

Dla dwuwymiarowego gazu elektronowego z przestrzennie fluktuującym oddziaływaniem Rashby energia własna jest wyznaczana z elementów macierzowych losowego

członu spinowo-orbitalnego. W tym modelu zaburzenie ma charakter spinowo-zależny, dlatego czynnik kątowy w prawdopodobieństwie rozpraszania zależy nie tylko od zmiany pędu, ale także od struktury spinowej stanów początkowego i końcowego.

W poniższych wzorach dotyczących modelu 2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby przyjęto jednostki $\hbar = k_B = 1$, zgodnie z pracą [6]. Konwencja ta obowiązuje również w równaniach opisujących renormalizację wierzchołka prądowego oraz przewodnictwo ładunkowe i spinowe tego modelu w podrozdziale 3.3.

Dla przyjętego korelatora pola Rashby odwrotność czasu życia stanu wynosi

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_0} R^2 k^2 \int_0^{\pi} d\varphi \, e^{-2Rk|\sin(\varphi/2)|} \left(1 + \cos\varphi\right). \tag{3.35}$$

gdzie R jest długością korelacji fluktuacji Rashby, a k oznacza wartość wektora falowego elektronu. Parametr τ_0 określa skalę czasu związaną z amplitudą fluktuacji,

$$\frac{1}{\tau_0} = \left\langle \lambda^2 \right\rangle m^*. \tag{3.36}$$

Równania (3.35) i (3.36) odpowiadają wzorom stosowanym w analizie 2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby [6].

W przypadku powierzchni TI z losową magnetyzacją energia własna ma strukturę macierzową, ponieważ zaburzenie zawiera człon proporcjonalny do σ_z. Dla losowego pola wymiennego oraz skalarnego potencjału domieszek można zapisać

$$\Sigma^R(\varepsilon, \mathbf{k}) = \int \frac{d^2k'}{(2\pi)^2} \left\langle \hat{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} G_0^R(\varepsilon, \mathbf{k}') \hat{V}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \right\rangle. \tag{3.37}$$

Uśrednienie po nieuporządkowaniu daje wkład pochodzący od fluktuacji magnetyzacji oraz wkład od skalarnego potencjału domieszek. W zastosowanym przybliżeniu oba wkłady sumują się w szybkości relaksacji,

$$\gamma = \gamma_M + \gamma_0. \tag{3.38}$$

Wielkość γ_M oznacza wkład magnetyczny do poszerzenia stanu na rozważanej gałęzi widma, natomiast γ_0 jest wkładem pochodzącym od domieszek skalarnych. Wyznaczenie γ_M wymaga projekcji macierzowej energii własnej na stan tej gałęzi.

Po pominięciu części rzeczywistej energia własna ma postać [7]

$$\Sigma^R = -i\Gamma_0 \sigma_0 - i\boldsymbol{\Gamma} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \tag{3.39}$$

Dla gałęzi oznaczonej przez $s = \pm 1$, o energii $\varepsilon_s(k) = svk$, wartość oczekiwana wektora macierzy Pauliego wynosi $s\widehat{\mathbf{k}}$, gdzie $\widehat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k$. Odpowiadające poszerzenie

jest zatem równe

$$\gamma_s(\varepsilon, k) = \Gamma_0(\varepsilon, k) + s\widehat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{\Gamma}(\varepsilon, k). \tag{3.40}$$

Dla korelatora magnetyzacji przyjętego w modelu, na powierzchni stałej energii $k = k_1 = |\varepsilon|/v$, składowa $\mathbf{\Gamma}$ zawiera czynnik $-\operatorname{sgn}(\varepsilon)$. Poszerzenie stanu należy wyznaczać przy $\varepsilon = svk_1$, a więc przy $s = \operatorname{sgn}(\varepsilon)$. Po wykonaniu tej projekcji wkład magnetyczny przyjmuje postać

$$\begin{aligned}\gamma_M(\varepsilon) = \frac{k_1}{4v}\langle M^2\rangle \xi^2 e^{-2\xi^2 k_1^2} \\ \times \left[I_0(2\xi^2 k_1^2) - I_1(2\xi^2 k_1^2)\right],\end{aligned} \tag{3.41}$$

gdzie I_0 i I_1 oznaczają zmodyfikowane funkcje Bessela pierwszego rodzaju. Powyższy wynik otrzymano przez projekcję składowych energii własnej podanych w pracy [7]. Wkład pochodzący od zanieczyszczeń skalarnych można zapisać jako

$$\gamma_0 = n_i V_0^2 \frac{|\varepsilon|}{4v^2}. \tag{3.42}$$

Oba wkłady do poszerzenia zależą od $|\varepsilon|$. Stany na dodatniej i ujemnej gałęzi widma mają zatem jednakowe poszerzenia przy jednakowej wartości bezwzględnej energii. Równość ta odnosi się do poszerzeń ocenianych na odpowiednich gałęziach, przy $\varepsilon = \pm vk$.

Poszerzenie poziomów nie jest jeszcze pełnym opisem transportu. Wielkość τ określa, jak szybko zanika stan o zadanym pędzie, ale nie mówi, jak skutecznie rozpraszanie relaksuje prąd. W przypadku rozpraszania silnie skierowanego do przodu czas życia może być krótki, mimo że prąd zanika wolno. Dlatego w dalszej części rozdziału wprowadzone zostaną transportowy czas relaksacji oraz poprawki wierzchołkowe. Te wielkości są konieczne do przejścia od poszerzenia poziomów do przewodnictwa.

3.2.2 Czas życia stanu kwazicząstkowego

Czas życia stanu kwazicząstkowego określa, jak długo elektron pozostaje w stanie o zadanym pędzie i energii, zanim zostanie rozproszony do innego stanu. W opisie funkcji Greena wielkość ta jest związana z szerokością poziomu energetycznego. Dla skalarnej funkcji Greena opisanej równaniem (3.33), przy założeniu, że γ można traktować jako stałe w obrębie rozważanego maksimum, funkcja spektralna ma postać lorentzowską:

$$A(\varepsilon, \mathbf{k}) = -2\ \mathrm{Im}\, G^R(\varepsilon, \mathbf{k}) = \frac{2\gamma}{(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}})^2 + \gamma^2}. \tag{3.43}$$

Wielkość γ jest połową pełnej szerokości maksimum mierzonej w połowie jego wysokości. Pełna szerokość wynosi zatem 2γ. Większemu poszerzeniu odpowiada krótszy

czas życia stanu. W przypadku macierzowej funkcji Greena powyższa postać opisuje wkład wybranej gałęzi po wykonaniu odpowiedniej projekcji [19, 28].

Związek między czasem życia i poszerzeniem poziomu został podany wcześniej w równaniu (3.18). Można go zapisać równoważnie jako

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\gamma}{\hbar}. \tag{3.44}$$

Wielkość $1/\tau$ jest szybkością zaniku stanu kwazicząstkowego. Nie należy jej jednak utożsamiać automatycznie z szybkością zaniku prądu. Czas życia opisuje utratę informacji o stanie $\mathbf{k}$, natomiast przewodnictwo zależy od tego, jak skutecznie dane rozpraszanie zmienia kierunek ruchu nośnika.

W modelu dwuwymiarowego gazu elektronowego z losowym oddziaływaniem Rashby czas życia wynika z rozpraszania na fluktuacjach parametru $\lambda(\mathbf{r})$. Wyrażenie na $1/\tau$ zostało zapisane w równaniu (3.35). Zależność ta zawiera korelator losowego pola Rashby oraz czynnik kątowy wynikający ze spinowo-zależnego charakteru rozpraszania. Dla małych energii, czyli dla dużej długości fali elektronu, rozpraszanie na krótkiego zasięgu fluktuacjach jest mniej efektywne. Wzrost energii zwiększa natomiast dostępny zakres stanów końcowych i zmienia wartość czasu życia.

W przypadku powierzchni TI z losową magnetyzacją czas życia jest związany z rozpraszaniem na przestrzennych fluktuacjach pola wymiennego oraz na domieszkach skalarnych. Wkłady te zostały ujęte w równaniu (3.38). Odpowiada to addytywności szybkości rozpraszania,

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_M} + \frac{1}{\tau_0}, \tag{3.45}$$

gdzie τ_M oznacza czas życia związany z fluktuacjami magnetyzacji, a τ_0 z rozpraszaniem na potencjale skalarnym. Taki zapis jest użyteczny, gdy oba mechanizmy rozpraszania traktowane są w tym samym rzędzie rachunku perturbacyjnego.

Czas życia stanu kwazicząstkowego jest więc wielkością lokalną w przestrzeni pędów. Informuje o poszerzeniu poziomu oraz o zaniku pojedynczego stanu elektronowego. Do opisu przewodnictwa potrzebna jest jednak dodatkowa informacja o kierunkowości rozpraszania. Dlatego w następnym kroku wprowadza się transportowy czas relaksacji, który uwzględnia, w jakim stopniu przejścia $\mathbf{k} \to \mathbf{k}'$ prowadzą do relaksacji prądu.

3.2.3 Transportowy czas relaksacji

Czas życia stanu kwazicząstkowego określa częstość rozpraszania elektronu ze stanu o zadanym pędzie. Nie jest to jednak zawsze czas decydujący o przewodnictwie. Dla transportu istotne jest nie tylko to, że elektron ulega rozproszeniu, ale również to, jak bardzo zmienia się kierunek jego ruchu. Z tego powodu wprowadza się

transportowy czas relaksacji τ_{tr}.

W opisie rozpraszania między stanami $\mathbf{k}$ i $\mathbf{k}'$ szybkość przejść można zapisać za pomocą prawdopodobieństwa

$$W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar} \left\langle |V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2 \right\rangle \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}). \tag{3.46}$$

Zwykły czas życia stanu zawiera sumę po wszystkich możliwych stanach końcowych, niezależnie od kąta rozpraszania,

$$\frac{1}{\tau(\mathbf{k})} = \sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \tag{3.47}$$

Transportowy czas relaksacji uwzględnia natomiast tylko tę część rozpraszania, która prowadzi do relaksacji składowej prądu. Dla izotropowego układu można go zapisać w postaci

$$\frac{1}{\tau_{\mathrm{tr}}(\mathbf{k})} = \sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(1 - \cos\varphi\right), \tag{3.48}$$

gdzie φ jest kątem między wektorami $\mathbf{k}$ i $\mathbf{k}'$. Czynnik $1 - \cos\varphi$ eliminuje wkład rozpraszania dokładnie do przodu i wzmacnia znaczenie rozpraszania pod dużymi kątami. Dlatego rozpraszanie małokątowe może silnie skracać czas życia stanu, ale słabo wpływać na relaksację prądu.

W układach spinowo-zależnych postać transportowego czasu relaksacji może być bardziej złożona, ponieważ prawdopodobieństwo przejścia zawiera również strukturę spinową elementu macierzowego. W modelu dwuwymiarowego gazu elektronowego z losowym oddziaływaniem Rashby rozpraszanie zależy od fluktuacji parametru $\lambda(\mathbf{r})$ oraz od kąta między stanami początkowym i końcowym. Zwykły czas życia stanu został wprowadzony w równaniu (3.35). Transportowy czas relaksacji ma inną strukturę kątową, ponieważ opisuje zanik prądu ładunkowego, a nie tylko zanik stanu $\mathbf{k}$.

W tym modelu pełna postać τ_{tr} pojawia się po uwzględnieniu poprawki wierzchołkowej do operatora prądu. Rachunek ten zostanie przedstawiony w podrozdziale dotyczącym renormalizacji wierzchołka prądowego. W tym miejscu istotne jest rozróżnienie dwóch wielkości: τ opisuje poszerzenie poziomu energetycznego, natomiast τ_{tr} opisuje relaksację prądu ładunkowego.

Dla transportu spinowego wprowadza się analogiczną, lecz odrębną wielkość: spinowy transportowy czas relaksacji $\tau_{s,\mathrm{tr}}$. Nie opisuje on wyłącznie zmiany kierunku pędu. Uwzględnia również to, że podczas rozpraszania może zmieniać się spinowa struktura wkładu do prądu spinowego. Z tego powodu $\tau_{s,\mathrm{tr}}$ może różnić się zarówno od τ, jak i od τ_{tr}.

Różnica między tymi czasami jest widoczna w układzie 2DEG z losowym oddzia-

ływaniem Rashby. Transportowy czas relaksacji τ_{tr} odpowiada za przewodnictwo ładunkowe, natomiast $\tau_{s,\mathrm{tr}}$ za przewodnictwo spinowe. W publikacji dotyczącej tego modelu pokazano, że τ_{tr} jest niemonotoniczną funkcją energii elektronu, podczas gdy $\tau_{s,\mathrm{tr}}$ maleje wraz ze wzrostem energii podobnie jak zwykły czas życia stanu τ [6].

Na powierzchni TI z losową magnetyzacją sytuacja jest inna. Operator prądu jest bezpośrednio związany z macierzami Pauliego, a magnetyczne zaburzenie działa na spin powierzchniowych stanów Diraca. Dlatego relaksacja prądu nie jest tam sprowadzana do prostego podstawienia $\tau \to \tau_{\mathrm{tr}}$. Wpływ rozpraszania na przewodnictwo opisuje funkcja wierzchołkowa, której rola zostanie omówiona w dalszej części rozdziału [7].

Transportowy czas relaksacji należy więc traktować jako wielkość związaną z konkretną odpowiedzią układu. Dla przewodnictwa ładunkowego opisuje zanik prądu ładunkowego. Dla przewodnictwa spinowego trzeba wprowadzić osobny czas relaksacji prądu spinowego. W układach z silnym sprzężeniem spinowo-orbitalnym i zaburzeniami magnetycznymi te wielkości nie muszą być sobie równe, ponieważ rozpraszanie zmienia jednocześnie pęd i strukturę spinową stanów.

3.3 Poprawki wierzchołkowe i interpretacja diagramatyczna

W formalizmie Kubo przewodnictwo jest wyznaczane z korelatora dwóch operatorów prądu. W układzie bez nieuporządkowania wystarczy użyć gołego operatora prądu, wynikającego bezpośrednio z hamiltonianu. W obecności rozpraszania taki opis jest niepełny, ponieważ zaburzenie wpływa nie tylko na czas życia stanu elektronowego, ale również na sposób relaksacji prądu. Dlatego w korelatorze prąd-prąd goły wierzchołek prądowy zastępuje się wierzchołkiem zrenormalizowanym.

Poprawki wierzchołkowe mają znaczenie wtedy, gdy rozpraszanie jest anizotropowe albo zależne od spinu. W takich przypadkach czas życia stanu kwazicząstkowego τ, wyznaczony z części urojonej energii własnej, nie jest wystarczający do obliczenia przewodnictwa. Transport zależy od tego, jak skutecznie rozpraszanie zmienia kierunek prądu. Ten efekt jest uwzględniany przez funkcję wierzchołkową.

W modelu dwuwymiarowego gazu elektronowego z losowym oddziaływaniem Rashby poprawka wierzchołkowa prowadzi do zastąpienia czasu życia stanu przez transportowy czas relaksacji τ_{tr} w wyrażeniu na przewodnictwo ładunkowe [6]. W przypadku powierzchni TI z losową magnetyzacją sytuacja jest bardziej złożona, ponieważ operator prądu ma strukturę spinorową, a zrenormalizowany wierzchołek zawiera więcej niż jedną składową [7]. W obu modelach poprawki wierzchołkowe są konieczne do poprawnego przejścia od mikroskopowego opisu rozpraszania do

przewodnictwa.

3.3.1 Renormalizacja wierzchołka prądowego

Goły wierzchołek prądowy jest określony przez operator prądu niezaburzonego układu. W rachunku dla losowego oddziaływania Rashby uwzględniono kinetyczną część operatora prądu. Wkład związany z prędkością anomalną pominięto w przybliżeniu słabego rozpraszania, zgodnie z analizą przeprowadzoną w pracy [6]. Dla dwuwymiarowego gazu elektronowego z parabolicznym widmem ma on postać

$$\hat{j}_x(\mathbf{k}) = \frac{ek_x}{m^*}. \tag{3.49}$$

W obecności rozpraszania na fluktuacjach Rashby wierzchołek ten zostaje zrenormalizowany. W dalszym opisie oznaczamy go przez $J_x(\mathbf{k};\varepsilon,\varepsilon')$. W granicy statycznej, istotnej dla przewodnictwa dc, otrzymuje się

$$J_x(\mathbf{k};\varepsilon,\varepsilon) = \frac{ek_x}{m^*}\frac{\tau_{\mathrm{tr}}}{\tau}. \tag{3.50}$$

Równanie to pokazuje, że poprawka wierzchołkowa przekształca czas życia stanu τ w transportowy czas relaksacji τ_{tr}. Taki wynik jest charakterystyczny dla układu, w którym prąd jest związany z pędem elektronu, a rozpraszanie zmienia kierunek ruchu nośnika.

Transportowy czas relaksacji dla 2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby ma postać

$$\frac{1}{\tau_{\mathrm{tr}}} = \frac{1}{\tau_0}R^2k^2\int_0^{\pi} d\varphi\, e^{-2Rk|\sin(\varphi/2)|}\sin^2\varphi. \tag{3.51}$$

Wielkość R oznacza długość korelacji fluktuacji Rashby, k jest wartością wektora falowego elektronu, a τ_0 określa skalę rozpraszania zdefiniowaną wcześniej w równaniu (3.36). Czynnik $\sin^2\varphi$ odróżnia τ_{tr} od czasu życia stanu τ, w którym występuje inny czynnik kątowy. Rozpraszanie pod małymi kątami może więc silnie wpływać na czas życia, ale słabiej relaksować prąd.

Dla porównania, w modelu powierzchni TI z losową magnetyzacją wierzchołek prądowy nie redukuje się do prostego podstawienia $\tau \to \tau_{\mathrm{tr}}$. Operator prądu jest tam proporcjonalny do macierzy Pauliego, a rozpraszanie magnetyczne działa bezpośrednio w przestrzeni spinowej. Zrenormalizowany wierzchołek można zapisać w ogólnej postaci

$$J_x(\mathbf{k}) = \frac{ev}{\hbar}\left[k_x g_0(\mathbf{k})\sigma_0 + g_1(\mathbf{k})\sigma_x\right]. \tag{3.52}$$

Funkcje g_0 i g_1 wynikają z równania samouzgodnionego dla wierzchołka. Pierwsza składowa jest proporcjonalna do $k_x\sigma_0$, druga renormalizuje operator prądu powierzchniowych elektronów Diraca. Taka struktura pokazuje, że dla powierzchni TI z losową

magnetyzacją poprawka wierzchołkowa nie ma postaci jednego czynnika τ_{tr}/τ [7].

W modelu 2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby poprawka wierzchołkowa pozwala zatem wprowadzić transportowy czas relaksacji. W modelu powierzchni TI z losową magnetyzacją prowadzi natomiast do czynnika renormalizującego przewodnictwo, który zależy od energii, amplitudy fluktuacji magnetyzacji i długości korelacji. Oba przypadki mają wspólne źródło: rozpraszanie zmienia nie tylko czas życia stanu, lecz także korelator prąd-prąd występujący we wzorze Kubo.

3.3.2 Diagramy drabinkowe

Poprawki wierzchołkowe można przedstawić diagramatycznie jako sumę diagramów drabinkowych. Każdy szczebel drabinki odpowiada jednemu aktowi rozpraszania opisanemu przez korelator nieuporządkowania, natomiast linie propagatorów odpowiadają funkcjom Greena. W granicy słabego nieuporządkowania najważniejsze są diagramy bez krzyżujących się linii rozpraszania. Taki wybór jest zgodny z przybliżeniem Borna oraz z założeniem, że rozpraszanie można traktować perturbacyjnie [19, 28].

W korelatorze prąd-prąd występującym we wzorze Kubo pojawiają się dwa propagatory: opóźniony i zaawansowany. Poprawka wierzchołkowa opisuje wielokrotne rozpraszanie zachodzące pomiędzy tymi propagatorami. Z tego powodu zrenormalizowany wierzchołek prądowy spełnia równanie typu Bethego-Salpetera, które w zapisie symbolicznym można przedstawić jako

$$\hat{J}_x = \hat{j}_x + \left\langle \hat{V} G^A \hat{J}_x G^R \hat{V} \right\rangle . \tag{3.53}$$

W równaniu tym $\hat{j}_x$ oznacza goły wierzchołek prądowy, $\hat{J}_x$ wierzchołek zrenormalizowany, a $\hat{V}$ potencjał rozpraszający. Nawias oznacza średniowanie po konfiguracjach nieuporządkowania. Przyjęto konwencję, w której funkcja zaawansowana występuje po lewej stronie wierzchołka, a funkcja opóźniona po jego prawej stronie. Wierzchołek $\hat{J}_x$ jest operatorem w przestrzeni jednocząstkowej występującym w rachunku diagramatycznym. Równanie (3.53) odpowiada sumowaniu nieskończonego szeregu diagramów drabinkowych.

W reprezentacji pędowej równanie na wierzchołek przyjmuje postać

$$\begin{aligned} \hat{J}_x(\mathbf{k}) = \hat{j}_x(\mathbf{k}) + \int \frac{d^2k'}{(2\pi)^2} \\ \times \left\langle \hat{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} G^A(\varepsilon, \mathbf{k}') \hat{J}_x(\mathbf{k}') G^R(\varepsilon, \mathbf{k}') \hat{V}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \right\rangle . \end{aligned} \tag{3.54}$$

To równanie pokazuje, że wierzchołek prądowy w stanie $\mathbf{k}$ zależy od wkładów pochodzących ze wszystkich stanów pośrednich $\mathbf{k}'$. W układach izotropowych zależność ta

upraszcza się po wykonaniu całkowania po kącie rozpraszania.

Dla dwuwymiarowego gazu elektronowego z losowym oddziaływaniem Rashby potencjał rozpraszający ma strukturę spinowo-zależną. Element macierzowy oddziaływania Rashby można zapisać jako

$$\hat{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{\lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}{2}\left[\sigma_x(k_y+k'_y) - \sigma_y(k_x+k'_x)\right]. \tag{3.55}$$

Po podstawieniu tego elementu do równania drabinkowego otrzymuje się

$$\begin{aligned} J_x(\varepsilon,\varepsilon';\mathbf{k}) = j_x(\mathbf{k}) + \frac{1}{4}\sum_{\mathbf{k}'} J_x(\varepsilon,\varepsilon';\mathbf{k}')\left\langle|\lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2\right\rangle \\ \times\left[\sigma_x(k_y+k'_y) - \sigma_y(k_x+k'_x)\right] G^A_{\mathbf{k}'}(\varepsilon) \\ \times\left[\sigma_x(k_y+k'_y) - \sigma_y(k_x+k'_x)\right] G^R_{\mathbf{k}'}(\varepsilon'). \end{aligned} \tag{3.56}$$

Równanie (3.56) jest równaniem drabinkowym dla wierzchołka prądowego w modelu 2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby. Jego rozwiązanie w granicy $\omega = \varepsilon' - \varepsilon \to 0$ prowadzi do wyniku podanego wcześniej w równaniu (3.50), czyli do zastąpienia czasu życia stanu przez transportowy czas relaksacji τ_{tr} [6].

Dla powierzchni TI z losową magnetyzacją potencjał rozpraszający zawiera składnik magnetyczny, proporcjonalny do σ_z, oraz składnik skalarny, proporcjonalny do macierzy jednostkowej. Przy założeniu statystycznej niezależności obu rodzajów nieuporządkowania ich wkłady do jądra równania wierzchołkowego sumują się. Zgodnie z zapisem przyjętym w pracy [7] równanie to ma postać

$$\begin{aligned} \hat{J}_x(\mathbf{k}) = \hat{j}_x + n_i V_0^2 \int \frac{d^2k'}{(2\pi)^2}\, G^A(\varepsilon,\mathbf{k}')\hat{J}_x(\mathbf{k}')G^R(\varepsilon,\mathbf{k}') \\ + \int \frac{d^2k'}{(2\pi)^2}\, C(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\sigma_z G^A(\varepsilon,\mathbf{k}')\hat{J}_x(\mathbf{k}')G^R(\varepsilon,\mathbf{k}')\sigma_z, \end{aligned} \tag{3.57}$$

gdzie $\hat{j}_x = (ev/\hbar)\sigma_x$ jest gołym wierzchołkiem prądowym. Wielkość $n_i V_0^2$ określa natężenie nieuporządkowania skalarnego, natomiast $C(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$ jest transformatą Fouriera korelatora fluktuacji magnetyzacji. Macierze jednostkowe w członie skalarnym pominięto w zapisie.

Rozwiązanie równania (3.57) ma strukturę podaną w równaniu (3.52). Na powierzchni stałej energii, $k = k_1 = |\varepsilon|/v$, funkcje określające obie składowe wierzchołka wynoszą

$$g_0(k_1) = \frac{v\eta}{\kappa\varepsilon} I_1(x), \qquad g_1(k_1) = \frac{1-\eta I_1(x)}{\kappa}, \tag{3.58}$$

gdzie

$$x = 2\xi^2 k_1^2, \qquad \eta = \frac{\langle M^2\rangle \xi^2 k_1}{4v\gamma} e^{-2\xi^2 k_1^2}, \qquad \eta_0 = \frac{\gamma_0}{\gamma}. \tag{3.59}$$

W powyższych definicjach $\gamma = \gamma_M + \gamma_0$ jest całkowitym poszerzeniem energetycznym, a γ_0 oznacza wkład od domieszek skalarnych. Parametry x, η oraz η_0 są bezwymiarowe.

Wspólny mianownik funkcji g_0 i g_1 jest określony przez

$$\kappa = 1 - \frac{\eta_0}{2} + \frac{\eta}{4}\Big[3I_0(x) - 4I_1(x) + I_2(x) + \eta I_1(x)\Big(I_2(x) - I_0(x)\Big)\Big], \tag{3.60}$$

gdzie $I_n(x)$ oznacza zmodyfikowaną funkcję Bessela pierwszego rodzaju rzędu n. Równania (3.58)–(3.60) określają renormalizację wierzchołka w przybliżeniu drabinkowym dla rozważanego modelu [7].

Składnik proporcjonalny do $g_1\sigma_x$ renormalizuje goły operator prądu, natomiast składnik proporcjonalny do $k_x g_0 \sigma_0$ ma odmienną strukturę macierzową. Z tego powodu pełnego wierzchołka nie można przedstawić wyłącznie jako iloczynu gołego wierzchołka i jednego skalarnego czynnika τ_{tr}/τ.

Diagramy drabinkowe mają więc prostą interpretację fizyczną. Opisują one wielokrotne rozpraszanie, które zachodzi w czasie propagacji pary $G^R G^A$. Energia własna określa poszerzenie pojedynczego propagatora, natomiast drabinka określa, jak rozpraszanie renormalizuje korelator prąd-prąd. Dopiero uwzględnienie obu efektów pozwala przejść od czasu życia stanu kwazicząstkowego do przewodnictwa.

3.3.3 Znaczenie poprawek wierzchołkowych dla przewodnictwa

Poprawki wierzchołkowe decydują o tym, jaka wielkość relaksacyjna pojawia się w końcowym wzorze na przewodnictwo. Czas życia stanu kwazicząstkowego τ, wyznaczony z części urojonej energii własnej, opisuje poszerzenie poziomu energetycznego. Przewodnictwo zależy jednak od relaksacji prądu, a ta wymaga uwzględnienia kątowej oraz spinowej struktury rozpraszania. W formalizmie Kubo informacja ta jest zawarta w zrenormalizowanym wierzchołku prądowym [19, 28].

Dla 2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby zastosowanie wierzchołka prądowego z równania (3.50) prowadzi do prądu w granicy statycznej

$$j_x = -\frac{e^2 E_x}{4\pi^2 m^*} \int_0^\infty d\varepsilon \, f'(\varepsilon) k^2 \tau_{\mathrm{tr}}(\varepsilon). \tag{3.61}$$

Po skorzystaniu z zależności

$$\varepsilon = \frac{k^2}{2m^*} \tag{3.62}$$

otrzymuje się przewodnictwo ładunkowe

$$\sigma = -\frac{e^2}{2\pi^2}\int_0^\infty d\varepsilon\, \varepsilon f'(\varepsilon)\tau_{\rm tr}(\varepsilon). \tag{3.63}$$

Wynik ten pokazuje, że po uwzględnieniu poprawek wierzchołkowych przewodnictwo ładunkowe jest określone przez $\tau_{\rm tr}$. Czas życia stanu τ nie występuje bezpośrednio w końcowym wyrażeniu na σ. Różnica między τ i $\tau_{\rm tr}$ wynika bezpośrednio z poprawki wierzchołkowej. W przypadku rozpraszania małokątowego czas życia może być krótki, natomiast zanik prądu pozostaje słabszy, ponieważ małe zmiany kierunku pędu nie relaksują efektywnie prądu ładunkowego [6].

Analogiczny rachunek można przeprowadzić dla prądu spinowego. Wtedy zamiast transportowego czasu relaksacji prądu ładunkowego pojawia się spinowy transportowy czas relaksacji $\tau_{s,\rm tr}$. Dla 2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby ma on postać

$$\frac{1}{\tau_{s,\rm tr}} = \frac{1}{\tau_0}R^2k^2\int_0^\pi d\varphi\, e^{-2Rk|\sin(\varphi/2)|}\left(1+\cos\varphi\right)^2. \tag{3.64}$$

Odpowiadające przewodnictwo spinowe można zapisać jako

$$\sigma_s = -\frac{1}{8\pi^2}\int_0^\infty d\varepsilon\, \varepsilon f'(\varepsilon)\tau_{s,\rm tr}(\varepsilon). \tag{3.65}$$

Porównanie równań (3.63) i (3.65) pokazuje, że przewodnictwo ładunkowe i spinowe są kontrolowane przez różne czasy relaksacji. Wynika to z faktu, że rozpraszanie wpływa inaczej na prąd ładunkowy i na prąd spinowy. W modelu losowego oddziaływania Rashby małokątowe procesy rozpraszania słabo relaksują prąd ładunkowy, ale są istotne dla relaksacji prądu spinowego [6].

Dla powierzchni TI z losową magnetyzacją podstawienie wierzchołka określonego równaniami (3.52) i (3.58) do wzoru Kubo prowadzi do przewodnictwa podłużnego w postaci [7]

$$\sigma_{xx} = -\frac{e^2}{h}\int d\varepsilon\, f'(\varepsilon)\frac{|\varepsilon|}{4\gamma(\varepsilon)\kappa(\varepsilon)}. \tag{3.66}$$

Wielkość γ określa poszerzenie stanów elektronowych, natomiast bezwymiarowy parametr κ, zdefiniowany w równaniu (3.60), opisuje wpływ poprawek wierzchołkowych na przewodnictwo. Obie wielkości zależą od energii oraz od parametrów nieuporządkowania.

W granicy zaniku fluktuacji magnetyzacji, $\langle M^2\rangle = 0$, przy zachowaniu niezerowego rozpraszania skalarnego, otrzymuje się $\gamma = \gamma_0$, $\eta = 0$ oraz $\eta_0 = 1$. Wówczas

$$\kappa = \frac{1}{2}, \qquad g_0(k_1) = 0, \qquad g_1(k_1) = 2. \tag{3.67}$$

Wierzchołek prądowy przyjmuje zatem postać $\hat{J}_x = 2\hat{j}_x$, a czynnik $1/\kappa$ w wyrażeniu

na przewodnictwo wynosi 2. Oznacza to, że poprawka wierzchołkowa pozostaje niezerowa również w obecności samych punktowych domieszek skalarnych [7].

Przy niezerowych fluktuacjach magnetyzacji wierzchołek zawiera również składnik proporcjonalny do $k_x\sigma_0$. Chociaż w końcowym wyrażeniu na σ_{xx} wpływ renormalizacji jest ujęty przez czynnik $1/\kappa$, pełna struktura wierzchołka obejmuje obie składowe macierzowe.

3.4 Metody transmisyjne i rozpraszanie na lokalnych strukturach

Metody opisane w poprzednich podrozdziałach odnoszą się głównie do transportu dyfuzyjnego w układach z nieuporządkowaniem. W rozprawie występują jednak również modele, w których zaburzenie ma określoną geometrię przestrzenną. Dotyczy to powierzchni TI z magnetycznym obszarem o skończonej długości oraz powierzchni z lokalną strukturą magnetyczną. W takich przypadkach wygodniejszy jest opis transmisyjny albo bezpośredni opis rozpraszania falowego.

W układzie z magnetyczną wstęgą na powierzchni TI problem sprowadza się do przejścia elektronów Diraca przez obszar, w którym magnetyzacja prostopadła do powierzchni otwiera przerwę energetyczną. Obszar ten działa jak bariera transportowa. Podstawową wielkością nie jest wtedy czas relaksacji, lecz amplituda transmisji oraz odpowiadające jej prawdopodobieństwo transmisji. Po ich wyznaczeniu można obliczyć przewodność oraz odpowiedź termoelektryczną układu [5].

Dla lokalnej struktury magnetycznej, na przykład magnetycznej kropki lub domeny, stosuje się opis rozpraszania. Fala padająca na obszar o skończonej magnetyzacji ulega rozproszeniu, a wynik opisuje amplituda rozpraszania zależna od kąta. W tym przypadku uwzględnia się przekrój czynny, rozkład kątowy rozpraszania oraz możliwą asymetrię rozpraszania. W zależności od wartości parametrów stosuje się przybliżenie Borna albo metodę fal cząstkowych [8].

Wspólną cechą obu podejść jest bezpośrednie wykorzystanie funkcji falowej. W metodzie transmisyjnej funkcje falowe zapisuje się osobno w kolejnych obszarach struktury i dopasowuje na granicach. W metodzie rozpraszania lokalnego funkcja falowa jest przedstawiana jako suma fali padającej i rozproszonej. Oba opisy zachowują informację o spinorowej strukturze stanów powierzchniowych, co jest konieczne ze względu na spin-momentum locking.

3.4.1 Dopasowanie funkcji falowych na granicach obszarów

Metoda dopasowania funkcji falowych jest stosowana do układów, w których przestrzeń można podzielić na obszary o stałych parametrach hamiltonianu. W przy-

padku powierzchni TI z magnetyczną wstęgą wyróżnia się trzy obszary: obszar przed barierą, obszar magnetyczny oraz obszar za barierą. Magnetyzacja jest przyjmowana jako jednorodna tylko w środkowym obszarze.

Hamiltonian powierzchniowych stanów TI w obecności magnetyzacji prostopadłej do powierzchni można zapisać jako

$$\hat{H} = -iv\left(\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y\right) + m(x)\sigma_z. \tag{3.68}$$

Parametr $v = \hbar v_F$ ma wymiar energii razy długość, a v_F oznacza prędkość Fermiego. Zapis ten jest zgodny z konwencją przyjętą w pracy [5]. Wielkość $m(x)$ ma wymiar energii i określa przestrzenny profil członu wymiennego. Dla prostokątnego obszaru magnetycznego przyjmuje się

$$m(x) = \begin{cases} m_0, & 0 \le x \le L, \\ 0, & x < 0 \text{ oraz } x > L. \end{cases} \tag{3.69}$$

Taki profil odpowiada magnetycznej wstędze o długości L, umieszczonej na powierzchni TI.

Ponieważ układ jest jednorodny w kierunku y, składowa k_y wektora falowego jest zachowana. Funkcję falową można więc zapisać w postaci

$$\psi(x, y) = e^{ik_y y}\psi_{k_y}(x). \tag{3.70}$$

W obszarach niemagnetycznych, $x < 0$ oraz $x > L$, widmo ma postać

$$\varepsilon = vk, \qquad k^2 = k_x^2 + k_y^2. \tag{3.71}$$

Dla fali padającej z lewej strony funkcję falową w obszarze I można zapisać jako sumę fali padającej i odbitej:

$$\psi_I(x, y) = e^{ik_y y}\left[e^{ik_x x}\begin{pmatrix} 1 \\ \dfrac{k_x + ik_y}{k} \end{pmatrix} + r\, e^{-ik_x x}\begin{pmatrix} 1 \\ \dfrac{-k_x + ik_y}{k} \end{pmatrix}\right]. \tag{3.72}$$

Współczynnik r jest amplitudą odbicia.

W obszarze III występuje tylko fala transmitowana,

$$\psi_{III}(x, y) = t\, e^{ik_y y}e^{ik_x x}\begin{pmatrix} 1 \\ \dfrac{k_x + ik_y}{k} \end{pmatrix}, \tag{3.73}$$

gdzie t oznacza amplitudę transmisji.

W obszarze magnetycznym, $0 < x < L$, widmo spełnia zależność

$$\varepsilon^2 = m_0^2 + v^2(q_x^2 + k_y^2). \tag{3.74}$$

Dla $\varepsilon^2 > m_0^2 + v^2 k_y^2$ fala w obszarze magnetycznym ma charakter propagacyjny, natomiast dla $\varepsilon^2 < m_0^2 + v^2 k_y^2$ składowa q_x staje się urojona i opisuje zanik wykładniczy. Funkcję falową w obszarze II zapisuje się jako superpozycję dwóch niezależnych rozwiązań. Dla rzeczywistego q_x odpowiadają one falom propagującym w przeciwnych kierunkach, natomiast dla urojonego q_x mają wykładniczą zależność przestrzenną:

$$\psi_{II}(x,y) = e^{ik_y y}\left[a\, e^{iq_x x}\begin{pmatrix} 1 \\ \dfrac{v(q_x + ik_y)}{\varepsilon + m_0}\end{pmatrix} + b\, e^{-iq_x x}\begin{pmatrix} 1 \\ \dfrac{v(-q_x + ik_y)}{\varepsilon + m_0}\end{pmatrix}\right]. \tag{3.75}$$

Współczynniki a i b określają amplitudy fal wewnątrz obszaru magnetycznego.

Ponieważ równanie Diraca jest równaniem pierwszego rzędu względem pochodnych przestrzennych, na granicach obszarów wymaga się ciągłości całej funkcji spinorowej. Warunki dopasowania mają postać

$$\psi_I(0,y) = \psi_{II}(0,y), \tag{3.76}$$

oraz

$$\psi_{II}(L,y) = \psi_{III}(L,y). \tag{3.77}$$

Warunki te prowadzą do układu równań liniowych dla amplitud r, a, b oraz t. Po jego rozwiązaniu otrzymuje się amplitudę transmisji jako funkcję energii, kąta padania, długości obszaru magnetycznego oraz parametru m_0.

Metoda dopasowania funkcji falowych pozwala rozróżnić dwa reżimy transportu. W reżimie tunelowym fala w obszarze magnetycznym zanika wykładniczo, dlatego transmisja maleje ze wzrostem długości bariery. W reżimie propagacyjnym fala przechodzi przez obszar magnetyczny, a odbicia od dwóch granic prowadzą do interferencji. W tym przypadku prawdopodobieństwo transmisji może oscylować jako funkcja długości L lub energii nośników. Ten mechanizm odpowiada za oscylacje przewodności obliczone dla struktury magnetycznej na powierzchni TI [5].

3.4.2 Amplituda transmisji i prawdopodobieństwo transmisji

Po zapisaniu funkcji falowych w trzech obszarach struktury oraz po narzuceniu warunków ciągłości na granicach $x = 0$ i $x = L$, otrzymuje się układ równań liniowych dla amplitud r, a, b oraz t. Współczynnik r opisuje falę odbitą, natomiast t jest amplitudą transmisji przez obszar magnetyczny. Amplituda ta zależy od energii elektronu, kąta padania, długości bariery oraz wartości członu masowego m_0.

Dla fali padającej z lewej strony funkcje falowe w obszarach I, II i III opisują odpowiednio równania (3.72), (3.75) i (3.73). Warunki dopasowania

$$\psi_I(0,y) = \psi_{II}(0,y), \qquad \psi_{II}(L,y) = \psi_{III}(L,y) \tag{3.78}$$

prowadzą do układu

$$\mathcal{M} \begin{pmatrix} r \\ a \\ b \\ t \end{pmatrix} = \mathcal{B}, \tag{3.79}$$

gdzie macierz $\mathcal{M}$ zawiera spinory falowe w obszarach I-III, a wektor $\mathcal{B}$ pochodzi od fali padającej. Rozwiązanie tego układu wyznacza amplitudę transmisji

$$t = t(\varepsilon, k_y, L, m_0). \tag{3.80}$$

Pełna postać t dla dowolnego kąta padania jest długa, dlatego w dalszej analizie najważniejsza jest nie sama amplituda, lecz odpowiadające jej prawdopodobieństwo transmisji.

Prawdopodobieństwo transmisji definiuje się jako stosunek strumienia prawdopodobieństwa fali transmitowanej do strumienia fali padającej:

$$T(\varepsilon, k_y) = \frac{j_x^{\mathrm{tr}}}{j_x^{\mathrm{in}}}. \tag{3.81}$$

Dla rozważanego hamiltonianu składowa gęstości prądu prawdopodobieństwa w kierunku x wynosi

$$j_x^{(\mathrm{p})} = \frac{v}{\hbar}\psi^\dagger \sigma_x \psi. \tag{3.82}$$

Czynnik $v/\hbar = v_F$ wynika z operatora prędkości $\hat{v}_x = (1/\hbar)\partial\hat{H}/\partial k_x = (v/\hbar)\sigma_x$. Prąd elektryczny otrzymuje się po uwzględnieniu ładunku nośników.

Po obu stronach obszaru magnetycznego hamiltonian jest taki sam. Przy jednakowej normalizacji spinorów fali padającej i transmitowanej odpowiadające im czynniki strumieniowe są równe, dlatego

$$T(\varepsilon, k_y) = |t(\varepsilon, k_y)|^2. \tag{3.83}$$

Zależność ta dotyczy rozważanej geometrii z identycznymi obszarami wejściowym i wyjściowym [5].

Dla normalnego padania, $k_y = 0$, wyrażenia upraszczają się. W obszarze magne-

tycznym składowa wektora falowego spełnia

$$k'_x = \frac{1}{v}\sqrt{\varepsilon^2 - m_0^2}. \tag{3.84}$$

Dla dodatniej gałęzi widma i energii $\varepsilon > |m_0|$ składowa k'_x jest rzeczywista, a w obszarze magnetycznym istnieją stany propagujące. Wielokrotne odbicia na granicach tego obszaru prowadzą do interferencyjnej zależności transmisji od fazy $k'_x L$. Rezonanse transmisyjne występują przy

$$k'_x L = n\pi, \qquad n = 1, 2, \ldots. \tag{3.85}$$

W idealnym modelu rozważanej bariery warunek ten prowadzi do zaniku wypadkowej amplitudy odbicia i do pełnej transmisji, $T = 1$. Oscylacje transmisji wynikają zatem z interferencji fal propagujących wewnątrz obszaru magnetycznego [5].

Dla normalnego padania i energii $0 < \varepsilon < |m_0|$ składowa wektora falowego wewnątrz obszaru magnetycznego jest urojona. Wprowadzając

$$\kappa = \frac{1}{v}\sqrt{m_0^2 - \varepsilon^2}, \tag{3.86}$$

otrzymuje się rozwiązania o zależności przestrzennej $e^{\pm\kappa x}$. W skończonym obszarze bariery należy zachować obie składowe, a ich współczynniki wyznaczyć z warunków dopasowania na granicach.

W granicy $\varepsilon \ll |m_0|$ prawdopodobieństwo transmisji przyjmuje postać [5]

$$T_{k_y=0} \simeq \frac{2}{1 + \cosh(2\kappa L)} = \frac{1}{\cosh^2(\kappa L)}. \tag{3.87}$$

Dla $\kappa L \gg 1$ zależność ta prowadzi do asymptotycznego zaniku $T_{k_y=0} \simeq 4e^{-2\kappa L}$. Wykładnicze tłumienie transmisji odnosi się zatem do bariery szerokiej w porównaniu z długością zaniku $1/\kappa$. Ten przypadek odpowiada reżimowi tunelowemu.

Dla padania skośnego granica między propagacją i tunelowaniem zależy od zachowanej składowej k_y. Warunek propagacji w obszarze magnetycznym ma postać

$$\varepsilon^2 > m_0^2 + v^2 k_y^2. \tag{3.88}$$

Dla $\varepsilon^2 < m_0^2 + v^2 k_y^2$ składowa podłużna wektora falowego jest urojona i występuje reżim tunelowy. Równość odpowiada progowi propagacji. Przy ustalonej energii wzrost $|k_y|$ zmniejsza kwadrat podłużnej składowej wektora falowego i może prowadzić do przejścia z propagacji do tunelowania.

Prawdopodobieństwo transmisji pozwala wyznaczyć prąd elektryczny płynący przez strukturę. W granicy odpowiedzi liniowej, dla temperatury zerowej i dodatniej

energii Fermiego, sumowanie po kanałach poprzecznych prowadzi do elektrycznej gęstości prądu

$$j = \frac{e^2}{h} U \int_{-k_F}^{k_F} \frac{dk_y}{2\pi} T(\varepsilon_F, k_y), \tag{3.89}$$

gdzie U jest napięciem przyłożonym między obszarami I i III, $k_F = \varepsilon_F / v$, a j oznacza prąd przypadający na jednostkę szerokości próbki. Granice całkowania odpowiadają kanałom propagującym w obszarach niemagnetycznych. Uwzględniono pojedynczy stożek Diraca, bez dodatkowego czynnika degeneracji spinowej.

W pracy [5] analizowaną wielkość zdefiniowano jako $G = jL/U$. Zachowując tę normalizację, otrzymuje się

$$G = \frac{e^2}{h} \frac{L}{2\pi} \int_{-k_F}^{k_F} dk_y \, T(\varepsilon_F, k_y). \tag{3.90}$$

Wielkość G odpowiada przewodnictwu dwuwymiarowemu określonemu przez stosunek gęstości prądu do pola U/L. Dla próbki o szerokości W całkowity prąd wynosi $I = jW$, a przewodność dwuzaciskowa jest równa $I/U = (W/L)G$.

Zależność transmisji od fazy akumulowanej w obszarze magnetycznym prowadzi do oscylacji G w funkcji jego długości. Energetyczna zależność transmisji określa również odpowiedź termoelektryczną analizowaną w tej samej publikacji [5].

3.4.3 Przybliżenie Borna dla lokalnej magnetyzacji

Przybliżenie Borna można zastosować również do rozpraszania na pojedynczej lokalnej strukturze magnetycznej. W tym przypadku nie wykonuje się uśredniania po konfiguracjach nieuporządkowania. Profil magnetyzacji jest zadany przestrzennie i traktowany jako słabe zaburzenie hamiltonianu powierzchniowych stanów Diraca. Takie podejście zastosowano w analizie rozpraszania elektronów na magnetycznej kropce kwantowej na powierzchni TI [8].

Punktem wyjścia jest hamiltonian

$$\hat{H} = -iv\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla + g\sigma_z M(\mathbf{r}), \tag{3.91}$$

gdzie $M(\mathbf{r})$ oznacza lokalną magnetyzację skierowaną prostopadle do powierzchni, a g jest stałą sprzężenia. Dla kołowej kropki magnetycznej przyjmuje się profil

$$M(\mathbf{r}) = \begin{cases} M_0, & r < R, \\ 0, & r \geq R, \end{cases} \tag{3.92}$$

gdzie R jest promieniem obszaru magnetycznego.

Siłę rozpraszania na lokalnej magnetyzacji wygodnie opisać przez bezwymiarowy

parametr

$$\zeta = \frac{gM_0R}{v}. \tag{3.93}$$

Przybliżenie Borna jest uzasadnione dla

$$\zeta \ll 1. \tag{3.94}$$

W odróżnieniu od klasycznego problemu rozpraszania cząstki o parabolicznym widmie, kryterium to nie zależy od energii elektronu. Wynika to z liniowego widma powierzchniowych stanów Diraca oraz z faktu, że parametr v wyznacza skalę energii kinetycznej na długości R [8, 21].

Rozważmy falę padającą o wektorze falowym

$$\mathbf{k} = (k, 0) \tag{3.95}$$

oraz falę rozproszoną o wektorze

$$\mathbf{k}' = k(\cos\varphi, \sin\varphi). \tag{3.96}$$

Zmiana wektora falowego jest określona przez

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}, \qquad q = |\mathbf{q}| = 2k\left|\sin\frac{\varphi}{2}\right|. \tag{3.97}$$

Odpowiadająca jej zmiana pędu wynosi $\Delta\mathbf{p} = \hbar\mathbf{q}$.

Dla dodatniej gałęzi widma spinor stanu swobodnego można zapisać jako

$$s_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} 1 \\ \dfrac{k_x + ik_y}{k} \end{pmatrix}. \tag{3.98}$$

Spinor $s_{\mathbf{k}}$ spełnia warunek $s_{\mathbf{k}}^\dagger s_{\mathbf{k}} = 2$. Znormalizowana część spinowa stanu swobodnego ma zatem postać $s_{\mathbf{k}}/\sqrt{2}$. Element macierzowy σ_z między znormalizowanymi stanami spinowymi wynosi

$$\mu_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \frac{1}{2}\left\langle s_{\mathbf{k}'}\right| \sigma_z \left|s_{\mathbf{k}}\right\rangle. \tag{3.99}$$

Dla geometrii określonej równaniami (3.95) i (3.96) otrzymuje się

$$\mu_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \frac{1 - e^{-i\varphi}}{2}. \tag{3.100}$$

Dla rozpraszania dokładnie do przodu, $\varphi = 0$, czynnik spinowy zanika: $\mu_{\mathbf{kk}} = 0$. W konsekwencji element macierzowy zaburzenia magnetycznego, a wraz z nim amplituda rozpraszania w pierwszym przybliżeniu Borna, są w tym kierunku równe

zeru. Wynik ten odnosi się do członu liniowego względem zaburzenia $gM(\mathbf{r})\sigma_z$; nie oznacza zaniku rozpraszania do przodu w pełnym rozwiązaniu uwzględniającym wyższe rzędy oddziaływania [8].

W pierwszym rzędzie rachunku perturbacyjnego amplituda rozpraszania jest proporcjonalna do elementu macierzowego zaburzenia

$$V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = g \int d^2r\, e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} M(\mathbf{r}) \mu_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}. \tag{3.101}$$

Dla profilu kołowego z równania (3.92) całka po obszarze kropki daje

$$\int_{r<R} d^2r\, e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = 2\pi R \frac{J_1(qR)}{q}, \tag{3.102}$$

gdzie J_1 jest funkcją Bessela pierwszego rodzaju.

Amplituda rozpraszania ma dwie składowe odpowiadające składowym spinora:

$$\mathbf{f}(\varphi) = \begin{pmatrix} f^{\uparrow}(\varphi) \\ f^{\downarrow}(\varphi) \end{pmatrix}. \tag{3.103}$$

Jej normalizację określa asymptotyczna postać funkcji falowej,

$$\psi(\mathbf{r}) \simeq \frac{s_{\mathbf{k}}}{\sqrt{2}}\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}}\, \mathbf{f}(\varphi), \qquad kr \gg 1. \tag{3.104}$$

Pierwszy składnik opisuje falę padającą, natomiast drugi jest wychodzącą falą cylindryczną. W rozważanym procesie sprężystym fala padająca i fala rozproszona mają tę samą wartość prędkości. Stosunek rozproszonego strumienia radialnego do gęstości strumienia padającego prowadzi zatem do różniczkowego przekroju rozpraszania

$$\frac{dl}{d\varphi} = \mathbf{f}^{\dagger}(\varphi)\mathbf{f}(\varphi) = |f^{\uparrow}(\varphi)|^2 + |f^{\downarrow}(\varphi)|^2 \equiv |\mathbf{f}(\varphi)|^2. \tag{3.105}$$

W dwóch wymiarach przekrój ten ma wymiar długości, a składowe amplitudy mają wymiar pierwiastka z długości.

Dla kołowego profilu magnetyzacji, po uwzględnieniu czynnika spinowego i transformaty Fouriera obszaru kropki, pierwsze przybliżenie Borna daje

$$k|\mathbf{f}(\varphi)|^2 = \frac{\pi}{2} \frac{(gM_0)^2 R^2}{v^2} J_1^2(qR). \tag{3.106}$$

Wielkość $|\mathbf{f}(\varphi)|^2$ obejmuje wkłady obu składowych amplitudy spinorowej, zgodnie z normalizacją przyjętą w pracy [8].

Wynik (3.106) pokazuje, że przekrój rozpraszania zależy od promienia kropki, amplitudy lokalnej magnetyzacji oraz iloczynu qR. Funkcja Bessela opisuje wpływ

skończonego rozmiaru obszaru magnetycznego. Dla małych kątów rozpraszania, gdy qR jest małe, zachowanie przekroju wynika z granicznej postaci $J_1(qR)$. Dla większych wartości qR pojawia się oscylacyjna zależność od kąta i energii elektronu.

W przybliżeniu Borna otrzymany przekrój jest symetryczny względem kąta rozpraszania. Oznacza to, że ta metoda poprawnie opisuje słabe rozpraszanie i jego zależność od rozmiaru kropki, ale nie oddaje w pełni efektów związanych z silniejszą lokalną magnetyzacją. Dla większych wartości parametru ζ należy zastosować metodę fal cząstkowych, która uwzględnia wielokrotne rozpraszanie na obszarze magnetycznym oraz pozwala analizować asymetrię rozpraszania [8].

3.4.4 Metoda fal cząstkowych

Metoda fal cząstkowych pozwala opisać rozpraszanie na lokalnej strukturze magnetycznej poza zakresem słabego zaburzenia. W odróżnieniu od przybliżenia Borna nie ogranicza się ona do pierwszego rzędu rachunku perturbacyjnego. Uwzględnia pełne dopasowanie funkcji falowej na brzegu obszaru magnetycznego oraz wkłady od kolejnych kanałów momentu pędu. Z tego powodu jest użyteczna dla większych wartości parametru $\zeta = gM_0R/v$, gdy rozpraszanie nie ma już charakteru perturbacyjnego [8, 21].

Dla lokalnej magnetyzacji o symetrii kołowej wygodnie jest przejść do współrzędnych biegunowych. Równanie dla spinora powierzchniowego elektronu Diraca można zapisać w postaci

$$\begin{pmatrix} \varepsilon - gM(r) & ve^{-i\varphi}\left(i\partial_r + \frac{1}{r}\partial_\varphi\right) \\ ve^{i\varphi}\left(i\partial_r - \frac{1}{r}\partial_\varphi\right) & \varepsilon + gM(r) \end{pmatrix} \psi(r,\varphi) = 0. \tag{3.107}$$

Dla kropki magnetycznej przyjmuje się profil

$$M(r) = \begin{cases} M_0, & r < R, \\ 0, & r \geq R. \end{cases} \tag{3.108}$$

Ze względu na symetrię kołową hamiltonian komutuje z operatorem całkowitego momentu pędu

$$\hat{J}_z = -i\hbar\partial_\varphi + \frac{\hbar}{2}\sigma_z. \tag{3.109}$$

Funkcję falową można zatem rozwinąć w stany własne tego operatora. Dla $m \in \mathbb{Z}$ przyjmuje się postać [8]

$$\psi_m(r,\varphi) = \begin{pmatrix} \phi_m(r)e^{im\varphi} \\ \chi_m(r)e^{i(m+1)\varphi} \end{pmatrix}. \tag{3.110}$$

Obie składowe spinora odpowiadają tej samej wartości całkowitego momentu pędu, $j_z = \hbar(m + 1/2)$, chociaż ich orbitalne zależności kątowe różnią się o jeden. Liczba m oznacza więc kanał rozpraszania, a nie wartość całkowitego momentu pędu w jednostkach $\hbar$.

Po podstawieniu rozwinięcia (3.110) do równania (3.107) otrzymuje się układ równań radialnych dla funkcji $\phi_m(r)$ i $\chi_m(r)$. Każda wartość liczby całkowitej m odpowiada osobnemu kanałowi rozpraszania.

Dalsze rozwiązania zapisano dla dodatniej gałęzi widma, $\varepsilon > 0$, przy $gM_0 > 0$, zgodnie z konwencją przyjętą w pracy [8]. W pierwszej kolejności rozpatruje się zakres $0 < \varepsilon < gM_0$, w którym parametry κ i s, zdefiniowane poniżej, są rzeczywiste i dodatnie. Wewnątrz kropki magnetycznej, czyli dla $r < R$, rozwiązanie regularne w punkcie $r = 0$ można zapisać jako

$$\begin{pmatrix} \phi_m(r) \\ \chi_m(r) \end{pmatrix} = A_m \begin{pmatrix} I_m(\kappa r) \\ -isI_{m+1}(\kappa r) \end{pmatrix}, \tag{3.111}$$

gdzie I_m oznacza zmodyfikowaną funkcję Bessela, a

$$\kappa = \frac{1}{v}\sqrt{g^2M_0^2 - \varepsilon^2}, \qquad s = \sqrt{\frac{gM_0 - \varepsilon}{gM_0 + \varepsilon}}. \tag{3.112}$$

W tym zakresie energii rozwiązanie radialne wewnątrz kropki jest opisane zmodyfikowanymi funkcjami Bessela. Funkcje $I_m(\kappa r)$ wybrano ze względu na regularność rozwiązania w początku układu współrzędnych. Nie opisują one fali zanikającej wraz ze wzrostem r.

Dla $\varepsilon > gM_0$ wewnątrz kropki istnieją stany propagujące, a rozwiązania radialne można wyrazić przez zwykłe funkcje Bessela. Korzystanie w tym zakresie z zapisu zawierającego $I_m(\kappa r)$ wymaga spójnej kontynuacji parametrów κ i s. Punkt progowy $\varepsilon = gM_0$ należy rozpatrywać przez odpowiednią granicę rozwiązania.

Na zewnątrz kropki, gdzie $M(r) = 0$, rozwiązanie radialne jest kombinacją funkcji Bessela pierwszego i drugiego rodzaju [29]:

$$\begin{pmatrix} \phi_m(r) \\ \chi_m(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_m J_m(kr) + C_m Y_m(kr) \\ i\left[B_m J_{m+1}(kr) + C_m Y_{m+1}(kr)\right] \end{pmatrix}. \tag{3.113}$$

Współczynniki B_m i C_m określają udział fal regularnych i nieregularnych w danym kanale momentu pędu.

Ponieważ równanie Diraca jest równaniem pierwszego rzędu, na brzegu kropki wymaga się ciągłości całego spinora. Warunki dopasowania dla $r = R$ mają postać

$$A_m I_m(\kappa R) = B_m J_m(kR) + C_m Y_m(kR), \tag{3.114}$$

oraz

$$-sA_m I_{m+1}(\kappa R) = B_m J_{m+1}(kR) + C_m Y_{m+1}(kR). \tag{3.115}$$

Z tych równań wyznacza się stosunek

$$\gamma_m = \frac{C_m}{B_m}. \tag{3.116}$$

Po eliminacji A_m otrzymuje się

$$\gamma_m = -\frac{sI_{m+1}(\kappa R)J_m(kR) + I_m(\kappa R)J_{m+1}(kR)}{sI_{m+1}(\kappa R)Y_m(kR) + I_m(\kappa R)Y_{m+1}(kR)}. \tag{3.117}$$

Współczynnik γ_m pełni rolę parametru fazowego dla danego kanału rozpraszania. Zawiera informację o wpływie lokalnej magnetyzacji na falę o określonym momencie pędu.

Falę padającą można rozwinąć w fale cząstkowe za pomocą tożsamości [29]:

$$e^{ikr\cos\varphi} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m e^{im\varphi} J_m(kr). \tag{3.118}$$

Po uwzględnieniu asymptotycznej postaci funkcji Bessela dla $kr \gg 1$ wydziela się część odpowiadającą fali rozproszonej. Amplitudy rozpraszania dla dwóch składowych spinora można zapisać jako

$$f^{\uparrow}(\varphi) = -ie^{-i\pi/4}\sqrt{\frac{1}{\pi k}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{\gamma_m}{1+i\gamma_m} e^{im\varphi}, \tag{3.119}$$

oraz

$$f^{\downarrow}(\varphi) = f^{\uparrow}(\varphi)e^{i\varphi}. \tag{3.120}$$

Wektorowa amplituda rozpraszania ma więc postać

$$\mathbf{f}(\varphi) = \begin{pmatrix} f^{\uparrow}(\varphi) \\ f^{\downarrow}(\varphi) \end{pmatrix}. \tag{3.121}$$

Różniczkowy przekrój rozpraszania jest określony przez

$$\frac{dl}{d\varphi} = |\mathbf{f}(\varphi)|^2 = |f^{\uparrow}(\varphi)|^2 + |f^{\downarrow}(\varphi)|^2. \tag{3.122}$$

Całkowity przekrój rozpraszania ma postać

$$l = \int_{-\pi}^{\pi} |\mathbf{f}(\varphi)|^2 \, d\varphi. \tag{3.123}$$

Do opisu niesymetrycznego rozpraszania można dodatkowo wprowadzić część asyme-

tryczną

$$l_{\mathrm{as}} = \int_0^{\pi} |\mathbf{f}(\varphi)|^2 \, d\varphi - \int_{-\pi}^{0} |\mathbf{f}(\varphi)|^2 \, d\varphi. \tag{3.124}$$

Wielkość ta mierzy różnicę między rozpraszaniem na dodatnie i ujemne kąty.

W granicy słabego zaburzenia, $\zeta = gM_0R/v \ll 1$, rozwinięcie rozwiązania fal cząstkowych do pierwszego rzędu względem sprzężenia prowadzi do amplitudy Borna. Warunek ten nie określa jednak samodzielnie liczby kanałów potrzebnych do obliczenia przekroju rozpraszania. Znaczenie kolejnych kanałów zależy również od bezwymiarowego parametru $kR = \varepsilon R/v$. W analizowanej granicy długofalowej, $kR \ll 1$, główny wkład pochodzi z kanałów $m = 0$ i $m = -1$, odpowiadających $j_z = \hbar/2$ i $j_z = -\hbar/2$ [8].

W obliczeniach numerycznych zakres sumowania należy dobierać na podstawie zbieżności wyznaczanych wielkości. W analizie przedstawionej w pracy [8] podano oszacowanie $|m|_{\max} \simeq 2\zeta$. Odnosi się ono do rozpatrywanego tam zakresu parametrów i nie stanowi uniwersalnego kryterium obcięcia szeregu dla dowolnego kR. Dla wyników przedstawionych na rysunku 3 tej publikacji, przy $\zeta = 4$, zastosowano sumowanie od $m = -10$ do $m = 10$.

Metoda fal cząstkowych pokazuje, że lokalna magnetyzacja może prowadzić do kątowo asymetrycznego rozpraszania. Efekt ten nie wynika ze zwykłego potencjału skalarnego, lecz ze sprzężenia magnetyzacji z macierzą σ_z oraz ze spinowo-pędowej struktury stanów powierzchniowych. W przybliżeniu Borna rozpraszanie jest symetryczne względem kąta, natomiast pełniejsze rozwiązanie falowe ujawnia wkłady nieliniowe względem siły lokalnej magnetyzacji. Dlatego metoda fal cząstkowych jest potrzebna do opisu reżimu nieperturbacyjnego oraz do analizy asymetrii rozkładu kątowego [8].

3.5 Zestawienie metod zastosowanych w rozprawie

Tabela 3.1 pokazuje, że w rozprawie wykorzystano dwa typy podejść obliczeniowych. Pierwszy obejmuje metody transmisyjne i falowe, stosowane do układów o skończonej geometrii. Drugi obejmuje formalizm odpowiedzi liniowej, funkcje Greena i techniki diagramatyczne, używane do opisu transportu dyfuzyjnego w obecności nieuporządkowania.

W przypadku struktur magnetycznych o określonej geometrii podstawową wielkością jest amplituda transmisji albo amplituda rozpraszania. Natomiast w modelach z losowym oddziaływaniem Rashby lub losową magnetyzacją kluczowe są energia własna, czas życia stanu, transportowy czas relaksacji oraz poprawki wierzchołkowe. Zestawienie tych metod pozwala oddzielić część modelową rozprawy od aparatu obliczeniowego użytego do wyznaczania przewodnictwa i charakterystyk rozpraszania.

Tabela 3.1: Zestawienie metod obliczeniowych zastosowanych w analizowanych układach.

Układ	**Zastosowana metoda**	**Wyznaczane wielkości**	**Publikacja**
Powierzchnia TI z obszarem magnetycznym	Dopasowanie funkcji falowych na granicach obszarów; opis transmisyjny	Amplitudy transmisji i odbicia, prawdopodobieństwo transmisji, przewodność, współczynnik Seebecka	[5]
2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby	Formalizm Kubo, funkcje Greena, technika Matsubary, przybliżenie Borna, poprawki wierzchołkowe	Czas życia stanu, transportowy czas relaksacji, spinowy transportowy czas relaksacji, przewodnictwo ładunkowe i spinowe	[6]
Powierzchnia TI z losową magnetyzacją	Funkcje Greena, przybliżenie Borna, energia własna, poprawki wierzchołkowe	Poszerzenie poziomów, czas relaksacji, przewodnictwo podłużne	[7]
Powierzchnia TI z lokalną strukturą magnetyczną	Rachunek perturbacyjny, przybliżenie Borna, metoda fal cząstkowych	Amplituda rozpraszania, przekrój czynny, rozkład kątowy rozpraszania	[8]

Rozdział 4

Modele analizowanych układów niskowymiarowych

W rozdziale przedstawiono modele fizyczne układów analizowanych w dalszej części rozprawy. Opis obejmuje powierzchniowe stany TI, 2DEG z oddziaływaniem Rashby oraz układy, w których transport jest modyfikowany przez lokalną lub losową magnetyzację. Modele te stanowią podstawę obliczeń przewodnictwa, transmisji, czasów relaksacji oraz przekrojów rozpraszania [5, 6, 7, 8].

Przyjęto oznaczenia wprowadzone w poprzednich rozdziałach. W szczególności macierze Pauliego oznaczane są przez σ_i, gdzie $i = x, y, z$, wektor falowy przez $\mathbf{k}$, a położenie przez $\mathbf{r}$. Dla powierzchni TI stosowany jest efektywny hamiltonian Diraca, natomiast dla 2DEG punktem wyjścia jest paraboliczna część kinetyczna z dodatkowym członem spinowo-orbitalnym.

Celem tego rozdziału nie jest analiza zależności transportowych od parametrów układu. Wyniki przewodnictwa, transmisji i rozpraszania zostaną omówione w części wynikowej. Tutaj zdefiniowane zostaną hamiltoniany, geometria układów, przyjęte profile magnetyzacji oraz korelacje pól losowych.

4.1 Powierzchnia izolatora topologicznego

Trójwymiarowy TI ma przerwę energetyczną w widmie stanów objętościowych oraz przewodzące stany powierzchniowe. Opis transportu ograniczony do powierzchni zakłada pomijalny udział stanów objętościowych; odpowiada to w szczególności sytuacji, w której potencjał chemiczny leży w przerwie objętościowej. W pobliżu punktu Diraca stany te są opisywane przez efektywny hamiltonian liniowy w pędzie. Ich struktura spinowa wynika z silnego sprzężenia spinowo-orbitalnego, które wiąże kierunek spinu z kierunkiem ruchu elektronu [13, 14, 30, 31].

W rozprawie powierzchnia TI jest traktowana jako układ dwuwymiarowy leżący

w płaszczyźnie (x, y). Oś z jest prostopadła do powierzchni. Taka konwencja jest używana przy opisie bariery magnetycznej, losowej magnetyzacji oraz lokalnej struktury magnetycznej. W każdym z tych przypadków elektrony powierzchniowe zachowują charakter fermionów Diraca, a magnetyzacja działa przez sprzężenie ze spinem.

Powierzchniowe stany TI są realizowane eksperymentalnie między innymi w związkach z rodziny Bi_2Se_3, Bi_2Te_3 oraz Sb_2Te_3. W materiałach tych za pomocą spektroskopii ARPES obserwowano pojedynczy stożek Diraca na powierzchni, a pomiary spinowo-rozdzielcze potwierdziły helikalną strukturę spinową stanów powierzchniowych [32, 31]. Ochronę przed wstecznym rozpraszaniem badano również metodami STM, analizując interferencję kwazicząstek na powierzchni topologicznego izolatora [33]. Z tego względu model powierzchni TI stosowany w rozprawie można traktować jako efektywny opis niskoenergetycznych stanów powierzchniowych takich materiałów.

4.1.1 Hamiltonian powierzchniowych stanów Diraca

Hamiltonian niezaburzonych stanów powierzchniowych został wprowadzony w rozdziale 3, w równaniu (3.13). W przyjętej konwencji ma on postać liniową w operatorze pędu i zawiera macierze Pauliego działające w przestrzeni spinowej. Parametr v określa skalę energii związaną z prędkością Fermiego elektronów powierzchniowych. W zapisie z jawnym $\hbar$ odpowiada on wielkości $\hbar v_F$.

W reprezentacji pędowej hamiltonian ten prowadzi do dwóch gałęzi widma $\varepsilon_{1,2\mathbf{k}} = \pm vk$. Dodatnia gałąź odpowiada stanom elektronowym powyżej punktu Diraca, natomiast ujemna gałąź stanom poniżej tego punktu. Liniowa zależność energii od k odróżnia powierzchnię TI od dwuwymiarowego gazu elektronowego z parabolicznym widmem.

W reprezentacji położeniowej składowe wektora falowego zastępuje się operatorami $-i\partial_x$ i $-i\partial_y$. Odpowiedni zapis zastosowano już w hamiltonianach bariery magnetycznej i lokalnej struktury magnetycznej, odpowiednio w równaniach (3.68) i (3.91) [5, 8]. Nie wymaga on ponownego definiowania części kinetycznej. Parametr $v = \hbar v_F$ ma wymiar iloczynu energii i długości, a $\mathbf{k}$ jest wektorem falowym, któremu odpowiada pęd $\hbar\mathbf{k}$.

W modelach powierzchni TI konsekwentnie stosowana jest reprezentacja zdefiniowana przy równaniu (3.13), w której część kinetyczna ma postać $v\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}$. Macierze σ_x i σ_y odpowiadają obróconej bazie spinowej, natomiast laboratoryjne składowe fizycznego spinu otrzymuje się za pomocą podanej wcześniej transformacji. Rozróżnienie to należy uwzględniać przy interpretacji tekstury spinowej stanów powierzchniowych.

4.1.2 Helikalna struktura stanów powierzchniowych

Stany powierzchniowe izolatora topologicznego mają strukturę helikalną, w której orientacja fizycznego spinu jest jednoznacznie związana z kierunkiem wektora falowego. Spinor dodatniej gałęzi widma podano w równaniu (3.98). Po uwzględnieniu normalizacji na powierzchni S odpowiada mu stan

$$\psi_{+,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2S}}\, s_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \tag{4.1}$$

Ponieważ operator σ_z antykomutuje z niezaburzonym hamiltonianem powierzchniowym (3.13), stan należący do ujemnej gałęzi widma dla tego samego wektora falowego można wybrać w postaci

$$\psi_{-,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sigma_z \psi_{+,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \tag{4.2}$$

Indeks $s = +1$ oznacza dodatnią, natomiast $s = -1$ ujemną gałąź widma. Kierunek wektora falowego $\mathbf{k}$ w płaszczyźnie powierzchni określa kąt $\varphi_{\mathbf{k}}$, tak że

$$\frac{\mathbf{k}}{k} = \left(\cos\varphi_{\mathbf{k}}, \sin\varphi_{\mathbf{k}}\right). \tag{4.3}$$

Dla tych stanów wartość oczekiwana wektora macierzy Pauliego w reprezentacji stosowanej w hamiltonianie (3.13) wynosi

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{s,\mathbf{k}} = s\frac{\mathbf{k}}{k} = s\left(\cos\varphi_{\mathbf{k}}, \sin\varphi_{\mathbf{k}}, 0\right). \tag{4.4}$$

Należy przy tym rozróżnić macierze Pauliego występujące w przyjętej reprezentacji hamiltonianu od laboratoryjnych składowych fizycznego spinu. Zgodnie z transformacją bazy spinowej wprowadzoną przy hamiltonianie powierzchniowych stanów TI zachodzą relacje

$$\sigma_x = -\sigma_y^{\mathrm{lab}}, \qquad \sigma_y = \sigma_x^{\mathrm{lab}}, \qquad \sigma_z = \sigma_z^{\mathrm{lab}}. \tag{4.5}$$

Obrót dotyczy zatem składowych leżących w płaszczyźnie powierzchni, podczas gdy składowa prostopadła pozostaje niezmieniona.

Operator fizycznego spinu w laboratoryjnym układzie współrzędnych ma wobec tego postać

$$\hat{\mathbf{s}}_{\mathrm{lab}} = \frac{\hbar}{2}\left(\sigma_y, -\sigma_x, \sigma_z\right). \tag{4.6}$$

Korzystając z równania (4.4), otrzymuje się

$$\langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathrm{lab}} \rangle_{s,\mathbf{k}} = s\frac{\hbar}{2}\left(\sin\varphi_{\mathbf{k}}, -\cos\varphi_{\mathbf{k}}, 0\right). \tag{4.7}$$

Równoważnie zależność tę można zapisać jako

$$\langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathrm{lab}} \rangle_{s,\mathbf{k}} = -s\frac{\hbar}{2}\,\hat{\mathbf{z}} \times \frac{\mathbf{k}}{k}. \tag{4.8}$$

Wynika stąd

$$\mathbf{k} \cdot \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathrm{lab}} \rangle_{s,\mathbf{k}} = 0, \tag{4.9}$$

a zatem w izotropowym modelu powierzchniowych stanów Diraca fizyczna polaryzacja spinowa leży w płaszczyźnie powierzchni i jest prostopadła do kierunku ruchu elektronu.

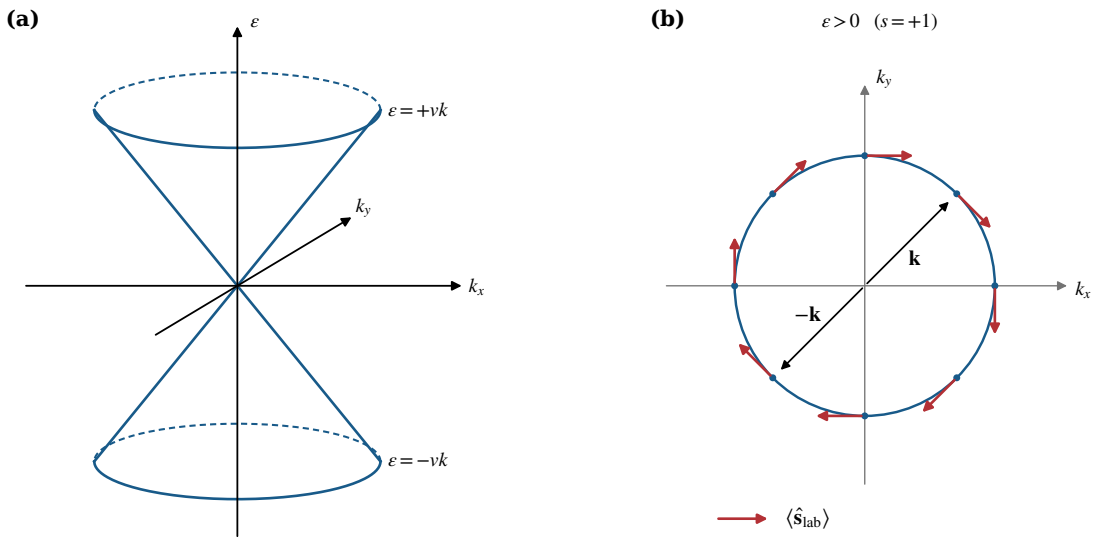
W obróconej reprezentacji zastosowanej w hamiltonianie (3.13) wektor $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{s,\mathbf{k}}$ jest równoległy albo antyrównoległy do $\mathbf{k}$, zależnie od gałęzi widma. Nie oznacza to jednak równoległego ustawienia fizycznego spinu i pędu w laboratoryjnym układzie współrzędnych. Po przetransformowaniu operatora spinu otrzymuje się poprzeczną teksturę spinową opisaną równaniami (4.7) i (4.8). Dla ustalonej gałęzi widma zmianie $\mathbf{k} \to -\mathbf{k}$ towarzyszy zmiana znaku wartości oczekiwanej fizycznego spinu,

$$\langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathrm{lab}} \rangle_{s,-\mathbf{k}} = -\langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathrm{lab}} \rangle_{s,\mathbf{k}}\,. \tag{4.10}$$

Właściwość ta stanowi istotę helikalnej struktury stanów powierzchniowych, określanej jako *spin–momentum locking*.

Helikalna struktura stanów wpływa bezpośrednio na procesy rozpraszania elektronów powierzchniowych. Element macierzowy przejścia pomiędzy stanami o wektorach falowych $\mathbf{k}$ i $\mathbf{k}'$ zależy nie tylko od przekazu pędu, lecz również od nakładania się odpowiednich części spinorowych funkcji falowych. W idealnym modelu pojedynczego stożka Diraca bezpośrednie rozpraszanie wsteczne $\mathbf{k} \to -\mathbf{k}$ na zaburzeniu niemagnetycznym zachowującym symetrię odwrócenia czasu jest tłumione przez ortogonalność stanów o przeciwnych pędach i przeciwnych polaryzacjach spinowych [13, 14]. Zaburzenia magnetyczne mogą natomiast modyfikować tę selekcję, ponieważ działają bezpośrednio w przestrzeni spinowej.

Helikalna struktura stanów powierzchniowych jest uwzględniana we wszystkich modelach TI rozpatrywanych w rozprawie. W układzie z barierą magnetyczną wpływa na dopasowanie spinorów na granicach obszaru magnetycznego i tym samym na amplitudy odbicia oraz transmisji. W modelu z losową magnetyzacją określa strukturę elementów macierzowych rozpraszania i wpływa na czasy relaksacji oraz przewodnictwo. W przypadku lokalnej struktury magnetycznej współdecyduje natomiast o kątowej charakterystyce rozpraszania elektronów Diraca [5, 7, 8].



Rysunek 4.1: Schemat widma i tekstury spinowej stanów powierzchniowych izolatora topologicznego w izotropowym modelu bez magnetyzacji. (a) Stożek Diraca o dyspersji $\varepsilon = \pm vk$. (b) Kontur stałej dodatniej energii dla gałęzi $s = +1$. Czerwone strzałki przedstawiają orientację wartości oczekiwanej fizycznego spinu w układzie laboratoryjnym, zgodną z równaniem (4.7). Spin jest prostopadły do wektora falowego, a stanom o przeciwnych wektorach falowych odpowiadają przeciwne orientacje spinu. Schemat przygotowano na podstawie równań modelu.

4.1.3 Wpływ magnetyzacji na widmo powierzchniowe

Magnetyzacja sprzęga się ze spinem elektronów powierzchniowych przez człon wymienny. Dla składowej prostopadłej do powierzchni TI człon ten ma postać

$$\hat{V}_M(\mathbf{r}) = m(\mathbf{r})\sigma_z, \qquad m(\mathbf{r}) = gM_z(\mathbf{r}). \tag{4.11}$$

Wielkość $m(\mathbf{r})$ ma wymiar energii i opisuje efektywne sprzężenie wymienne między magnetyzacją a spinem elektronów powierzchniowych.

Dla jednorodnej magnetyzacji prostopadłej do powierzchni, $m(\mathbf{r}) = m_0$, zależność dyspersyjną określa równanie (3.74). Dla jednorodnego układu wektor falowy wewnątrz obszaru magnetycznego należy w nim utożsamić z wektorem falowym stanu objętego tym opisem.

Jest to widmo typu masywnego Diraca. Parametr m_0 nie jest masą efektywną elektronu, lecz energią oddziaływania wymiennego z prostopadłą składową magnetyzacji. Składnik ten otwiera przerwę energetyczną równą $2|m_0|$ [5, 34, 35].

Ten mechanizm jest podstawą modelu bariery magnetycznej na powierzchni TI. Jeżeli magnetyzacja występuje tylko w skończonym obszarze, parametr $m(x)$ zmienia się przestrzennie. Obszar z niezerowym $m(x)$ działa wtedy jak bariera dla elektronów powierzchniowych. Dla $|\varepsilon| < |m_0|$ wewnątrz obszaru magnetycznego nie

ma propagujących stanów Diraca i transport ma charakter tunelowy. Dla $|\varepsilon| > |m_0|$ propagacja jest możliwa, o ile zachowana składowa wektora falowego równoległa do bariery spełnia warunek (3.88), a przewodnictwo może wykazywać oscylacje związane z interferencją fal elektronowych [5].

Magnetyzacja może mieć również charakter losowy lub lokalny. W modelu losowej magnetyzacji pole wymienne $M(\mathbf{r})$ jest traktowane jako przestrzennie fluktuujące zaburzenie sprzężone z σ_z. Prowadzi ono do rozpraszania powierzchniowych elektronów Diraca i do poszerzenia stanów, opisywanego przez energię własną oraz czas relaksacji [7]. W modelu lokalnej struktury magnetycznej profil $M(\mathbf{r})$ jest zadany przestrzennie, a transport opisuje się przez przekrój rozpraszania lub przez propagację pakietu falowego [8].

W dalszych częściach rozdziału powierzchnia TI będzie więc punktem wyjścia dla trzech konfiguracji: bariery magnetycznej, losowej magnetyzacji oraz lokalnej struktury magnetycznej. We wszystkich przypadkach zasadnicze znaczenie ma to, że magnetyzacja nie działa jak zwykły potencjał skalarny, lecz sprzęga się ze spinem elektronów powierzchniowych.

4.2 Dwuwymiarowy gaz elektronowy z oddziaływaniem Rashby

Drugim układem analizowanym w rozprawie jest 2DEG. Elektrony poruszają się w płaszczyźnie (x, y), natomiast ruch w kierunku prostopadłym jest ograniczony przez potencjał heterostruktury. W najprostszym opisie widmo nośników ma postać paraboliczną, a dyspersję części kinetycznej podano w równaniu (3.10).

Oddziaływanie Rashby pojawia się, gdy potencjał ograniczający nie jest symetryczny względem odbicia w płaszczyźnie gazu elektronowego. Wtedy efektywne pole elektryczne prostopadłe do warstwy prowadzi do sprzężenia pędu i spinu. Dla jednorodnego parametru Rashby otrzymuje się rozszczepienie widma, natomiast dla przestrzennie fluktuującego parametru $\lambda(\mathbf{r})$ sprzężenie spinowo-orbitalne działa jako mechanizm rozpraszania [36, 24, 4, 11, 6].

W rozprawie model 2DEG pełni inną rolę niż powierzchnia TI. W przypadku TI sprzężenie spinu z pędem jest własnością stanów powierzchniowych. W 2DEG sprzężenie Rashby jest dodatkowym składnikiem hamiltonianu, który może być jednorodny albo przestrzennie zmienny. W analizowanym modelu średnie oddziaływanie Rashby zanika, a transport jest modyfikowany przez jego lokalne fluktuacje.

2DEG z oddziaływaniem Rashby realizuje się w asymetrycznych studniach kwantowych i heterostrukturach półprzewodnikowych, na przykład InGaAs/InAlAs oraz InAs. W takich układach wartość parametru Rashby można zmieniać przez pole elek-

tryczne bramki, ponieważ sprzężenie spinowo-orbitalne zależy od asymetrii potencjału ograniczającego [37, 38, 39]. Losowy składnik Rashby może być związany z niejednorodnościami pola elektrycznego, fluktuacjami domieszek, chropowatością interfejsów lub lokalnymi zmianami potencjału elektrostatycznego. Bezpośrednie mapowanie przestrzennych zmian parametru Rashby wykonano metodą spektroskopii tunelowej w warstwie inwersyjnej InSb, gdzie zaobserwowano silne fluktuacje sprzężenia Rashby skorelowane z lokalnym potencjałem elektrostatycznym [40]. Model z losowym $\lambda(\mathbf{r})$ opisuje zatem graniczny przypadek układu, w którym średnia wartość sprzężenia Rashby może zanikać, ale jego lokalne fluktuacje pozostają źródłem rozpraszania spinowo-zależnego.

4.2.1 Model 2DEG z jednorodnym oddziaływaniem Rashby

W opisie 2DEG przyjęto jednostki $\hbar = k_B = 1$, zgodnie z konwencją stosowaną dla tego modelu w rozdziale 3. Część kinetyczna ma postać $\hat{H}_0 = \varepsilon_{\mathbf{k}}\sigma_0$, gdzie $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ jest paraboliczną energią z równania (3.10), m^* oznacza masę efektywną, a σ_0 macierz jednostkową w przestrzeni spinowej.

Dla jednorodnego parametru Rashby człon spinowo-orbitalny można zapisać jako

$$\hat{H}_R = \lambda \left(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x\right). \tag{4.12}$$

Po dodaniu części kinetycznej widmo przyjmuje postać

$$\varepsilon_{\pm}(k) = \frac{k^2}{2m^*} \pm \lambda k. \tag{4.13}$$

Jednorodne oddziaływanie Rashby stanowi punkt odniesienia dla modelu z losowym polem Rashby. Dwie gałęzie $\varepsilon_{\pm}(k)$ odpowiadają stanom o różnej orientacji spinowej związanej z kierunkiem wektora falowego. W takim modelu parametr λ jest taki sam w całej próbce, co prowadzi do globalnego rozszczepienia pasm i do uporządkowanej tekstury spinowej w przestrzeni pędów [24, 4, 11].

Model jednorodnego Rashby nie jest jednak głównym modelem obliczeniowym tej rozprawy. W publikacji dotyczącej 2DEG analizowane jest sprzężenie Rashby o zerowej wartości średniej. Warunek ten usuwa jednorodny człon odpowiedzialny za rozszczepienie (4.13), nie wyklucza jednak renormalizacji propagatora przez nieuporządkowanie. Lokalne fluktuacje $\lambda(\mathbf{r})$ prowadzą do rozpraszania zależnego od spinu [6].

4.2.2 Model 2DEG z przestrzennie fluktuującym oddziaływaniem Rashby

W modelu z losowym oddziaływaniem Rashby hamiltonian zapisuje się jako $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}^{(\mathrm{so})}$. Część kinetyczną określa paraboliczna dyspersja (3.10), natomiast dla przestrzennie zmiennego parametru $\lambda(\mathbf{r})$ człon spinowo-orbitalny przyjmuje postać

$$\hat{H}^{(\mathrm{so})} = -\frac{i}{2}\sigma_x \left\{\partial_y, \lambda(\mathbf{r})\right\} + \frac{i}{2}\sigma_y \left\{\partial_x, \lambda(\mathbf{r})\right\}. \tag{4.14}$$

Antykomutatory wynikają z przestrzennej zależności parametru Rashby i zapewniają hermitowskość hamiltonianu.

Przyjmuje się, że wartość średnia przestrzennie zmiennego parametru Rashby zanika,

$$\langle \lambda(\mathbf{r}) \rangle = 0. \tag{4.15}$$

Taki model odpowiada sytuacji, w której średnia asymetria strukturalna jest równa zeru, ale lokalne fluktuacje pola elektrycznego nie zanikają. Źródłem takich fluktuacji mogą być domieszki, nierówności interfejsów albo lokalne zmiany potencjału ograniczającego [25, 15, 40, 6].

Operator pochodnej nie komutuje z funkcją $\lambda(\mathbf{r})$; dlatego symetryzacja w równaniu (4.14) jest konieczna przy przestrzennie zmiennym sprzężeniu [6].

W reprezentacji pędowej fluktuacje Rashby łączą stany o różnych wektorach falowych. Element macierzowy tego oddziaływania został podany w równaniu (3.55). Zawiera on jednocześnie składowe pędu i macierze Pauliego, dlatego rozpraszanie na losowym polu Rashby nie jest równoważne rozpraszaniu na potencjale skalarnym. Proces $\mathbf{k} \to \mathbf{k}'$ zmienia pęd elektronu i może modyfikować jego stan spinowy.

W dalszej analizie losowe oddziaływanie Rashby prowadzi do trzech czasów relaksacji: czasu życia stanu τ, transportowego czasu relaksacji τ_{tr} oraz spinowego transportowego czasu relaksacji $\tau_{s,\mathrm{tr}}$. Ich definicje i postacie całkowe zostały wprowadzone w podrozdziale 3.2.3. W tej części istotne jest to, że wszystkie te wielkości wynikają z tego samego mechanizmu rozpraszania, ale opisują różne aspekty transportu.

4.2.3 Korelacje przestrzenne losowego sprzężenia spinowo-orbitalnego

Losowe pole Rashby jest opisywane statystycznie przez korelator $\langle \lambda(\mathbf{r})\lambda(\mathbf{r}') \rangle$. Wielkość ta określa, jak szybko zmienia się lokalne sprzężenie spinowo-orbitalne w przestrzeni. Jeżeli korelacje są krótkiego zasięgu, fluktuacje zmieniają się na małych

odległościach i mogą skutecznie rozpraszać elektrony pod dużymi kątami. Jeżeli korelacje są długozasięgowe, dominują procesy o małym przekazie pędu.

W reprezentacji pędowej korelator fluktuacji Rashby przyjęto w postaci

$$\left\langle |\lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2 \right\rangle = 2\pi \left\langle \lambda^2 \right\rangle R^2 \exp\left(-|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|R\right). \tag{4.16}$$

Parametr R oznacza promień korelacji fluktuacji Rashby, natomiast $\langle\lambda^2\rangle$ określa ich średni kwadrat amplitudy [6]. Wartość R decyduje o tym, które procesy rozpraszania $\mathbf{k} \to \mathbf{k}'$ dają największy wkład do relaksacji.

Dla $kR \ll 1$ korelator słabo zależy od kąta rozpraszania. Nie oznacza to izotropowego prawdopodobieństwa przejścia, ponieważ element macierzowy Rashby zawiera dodatkowy czynnik kątowy. Dla $kR \gg 1$ korelator tłumi procesy o dużej zmianie wektora falowego i uprzywilejowuje rozpraszanie małokątowe. Zmiana R wpływa także na prefaktor R^2, dlatego nie sprowadza się wyłącznie do zmiany rozkładu kątowego. Ta różnica jest istotna dla porównania τ i τ_{tr}, ponieważ zwykły czas życia stanu i czas relaksacji prądu mają inne czynniki kątowe w całkach rozpraszania.

Losowe sprzężenie Rashby wpływa również na transport spinowy. Spinowy transportowy czas relaksacji $\tau_{s,\mathrm{tr}}$ zależy od korelacji $\lambda(\mathbf{r})$ inaczej niż τ_{tr}, ponieważ prąd spinowy zawiera dodatkową strukturę spinową. Dlatego przewodnictwo spinowe nie musi powtarzać zależności przewodnictwa ładunkowego od energii elektronu, temperatury i promienia korelacji R [6].

Korelator losowego pola Rashby stanowi część definicji modelu rozpraszania w 2DEG. Od jego amplitudy i zasięgu zależą czasy relaksacji oraz przewodnictwo ładunkowe i spinowe analizowane w dalszych rozdziałach.

4.3 Powierzchnia izolatora topologicznego z obszarem magnetycznym

Pierwszy model powierzchni TI dotyczy układu z obszarem magnetycznym o skończonej długości. Magnetyzacja występuje w wydzielonym obszarze powierzchni TI i skierowana prostopadle do niej. Taka orientacja wprowadza do hamiltonianu człon proporcjonalny do σ_z, omówiony w podrozdziale 4.1.3. Składnik ten działa jak człon masowy hamiltonianu Diraca i otwiera przerwę energetyczną w obszarze magnetycznym [5].

W rozważanym modelu elektrony propagują się po powierzchni TI w płaszczyźnie (x, y). Obszar magnetyczny zajmuje przedział $0 \leq x \leq L$ i jest jednorodny w kierunku y. Z tego powodu składowa k_y wektora falowego jest zachowana podczas przejścia przez barierę, a problem transmisji można sprowadzić do zagadnienia jednowymiarowego w kierunku x. Formalny opis dopasowania funkcji falowych i

amplitudy transmisji został przedstawiony w rozdziale trzecim.

4.3.1 Magnetyczna bariera na powierzchni izolatora topologicznego

Punktem wyjścia jest hamiltonian powierzchniowych stanów Diraca z członem magnetycznym, zapisany w równaniu (3.68). Magnetyzacja prostopadła do powierzchni jest opisana przez funkcję $m(x) = gM_z(x)$. Dla prostokątnej bariery magnetycznej przyjmuje się profil podany w równaniu (3.69). Parametr m_0 określa energię oddziaływania wymiennego w obszarze magnetycznym. Nie jest to masa efektywna elektronu, lecz amplituda członu masowego w hamiltonianie Diraca.

W obszarach poza barierą elektrony są bezmasowymi fermionami Diraca. W obszarze $0 < x < L$ obecność magnetyzacji zmienia warunki propagacji, ponieważ widmo zawiera przerwę wyznaczoną przez m_0. Zależności dyspersyjne poza barierą i wewnątrz obszaru magnetycznego zostały podane odpowiednio w równaniach (3.71) oraz (3.74). Zachowanie składowej k_y wynika z translacyjnej niezmienniczości układu wzdłuż osi y, co zapisano w równaniu (3.70).

Magnetyczny obszar na powierzchni TI można realizować przez lokalne sprzężenie powierzchni TI z materiałem ferromagnetycznym albo przez magnetyczne domieszkowanie wybranego obszaru cienkiej warstwy TI. Eksperymentalnie pokazano, że domieszkowanie magnetyczne może prowadzić do złamania symetrii odwrócenia czasu i otwarcia przerwy w widmie powierzchniowych stanów Diraca [34]. Inną drogą jest efekt bliskości w heterostrukturach TI/ferromagnetyczny izolator, na przykład Bi_2Se_3/EuS, gdzie sprzężenie wymienne wprowadza magnetyczne oddziaływanie na powierzchni TI bez konieczności wprowadzania domieszek do samego TI [41]. Realizacja jednorodnej magnetyzacji prostopadłej do powierzchni stanowi dodatkowe założenie modelowe; samo sprzężenie z ferromagnetykiem nie przesądza o jego spełnieniu. W modelu bariery magnetycznej skończony obszar magnetyczny jest opisany efektywnym członem $m_0\sigma_z$, który reprezentuje magnetyzację prostopadłą do powierzchni.

4.3.2 Transmisja przez obszar z magnetyzacją

Transmisję wyznacza się z warunku ciągłości funkcji falowych na granicach $x = 0$ oraz $x = L$. W obszarze przed barierą funkcja falowa jest sumą fali padającej i odbitej, w obszarze magnetycznym jest kombinacją dwóch rozwiązań odpowiadających propagacji albo zanikaniu wzdłuż osi x, natomiast za barierą pozostaje tylko fala transmitowana. Szczegółowy zapis funkcji falowych i procedura dopasowania zostały przedstawione w rozdziale trzecim.

Amplitudę transmisji oznacza się przez $t(\mathbf{k})$. Prawdopodobieństwo transmisji dla danego stanu zostało zdefiniowane w równaniu (3.83). Wielkość ta określa wkład stanu o wektorze falowym $\mathbf{k}$ do prądu przechodzącego przez strukturę. Prąd otrzymuje się przez zsumowanie wkładów kanałów poprzecznych, zgodnie z równaniem (3.89). Wielkość G z równania (3.90) jest zdefiniowana przez normalizację $G = jL/U$. Dla próbki o szerokości W odpowiada jej przewodność dwuzaciskowa $(W/L)G$; rozróżnienie to jest istotne przy interpretacji zależności od geometrii układu.

Dla normalnego padania, czyli dla $k_y = 0$, problem upraszcza się do ruchu wzdłuż osi x. Składowa wektora falowego w obszarze magnetycznym ma wtedy postać podaną w równaniu (3.84). Dla niezerowego k_y transmisja zależy również od kąta padania. Warunek propagacji w obszarze magnetycznym został zapisany w równaniu (3.88). Im większa jest składowa k_y, tym trudniej spełnić ten warunek, ponieważ część energii nośnika jest związana z ruchem równoległym do bariery.

Parametrami modelu kontrolującymi transmisję są energia elektronu, długość bariery L, amplituda magnetyzacji m_0 oraz kąt padania określony przez stosunek składowych k_x i k_y.

4.3.3 Reżim tunelowy i reżim oscylacyjny

Charakter transmisji zależy od relacji między energią elektronu a przerwą otwartą przez magnetyzację. Jeżeli w obszarze magnetycznym nie istnieją stany propagujące, fala ma charakter zanikający i transport zachodzi przez tunelowanie. Jeżeli natomiast warunek propagacji z równania (3.88) jest spełniony, fala rozchodzi się wewnątrz bariery, a odbicia od granic $x = 0$ i $x = L$ prowadzą do interferencji.

W reżimie tunelowym składowa wektora falowego w kierunku x staje się urojona i opisuje zanik funkcji falowej w obszarze magnetycznym. Dla normalnego padania reżim ten odpowiada $|\varepsilon| < |m_0|$. Graniczną postać transmisji podano w równaniu (3.87); zastosowanie granicy niskoenergetycznej wymaga dodatkowo $|\varepsilon| \ll |m_0|$, a asymptotyki wykładniczej - bariery długiej w porównaniu z długością zaniku fali. Przypadek progowy, w którym podłużny wektor falowy zanika, wymaga obliczenia odpowiedniej granicy. Wzrost długości bariery powoduje wtedy silne tłumienie transmisji.

W reżimie propagacyjnym fala przechodzi przez obszar magnetyczny i gromadzi fazę zależną od długości bariery oraz energii elektronu. Odbicia od obu granic prowadzą do interferencji. Warunek rezonansowej transmisji został zapisany w równaniu (3.85). Dla normalnego padania w rozważanym idealnym modelu spełnienie warunku rezonansu prowadzi do jednostkowego prawdopodobieństwa transmisji, natomiast poza rezonansem transmisja zależy oscylacyjnie od L oraz energii.

Reżim tunelowy i reżim propagacyjny prowadzą do odmiennych zależności prze-

wodności od parametrów bariery. W pierwszym przypadku decydująca jest długość zaniku w obszarze magnetycznym, dlatego transmisja szybko maleje ze wzrostem L. W drugim przypadku transport jest kontrolowany przez fazę zgromadzoną wewnątrz bariery, co prowadzi do oscylacji przewodności jako funkcji długości obszaru namagnesowanego albo potencjału chemicznego. Analiza ilościowa tych zależności należy do części wynikowej rozprawy.

4.4 Powierzchnia izolatora topologicznego z losową magnetyzacją

Kolejny model dotyczy powierzchni TI w obecności przestrzennie fluktuującej magnetyzacji. W odróżnieniu od bariery magnetycznej z podrozdziału 4.3, magnetyzacja nie tworzy tu jednego obszaru o zadanej długości L. Pole wymienne zmienia się w płaszczyźnie powierzchni i działa jako źródło rozpraszania powierzchniowych elektronów Diraca.

Model ten opisuje sytuację, w której powierzchnia TI jest sprzężona z niejednorodnym polem magnetycznym lub z warstwą magnetyczną o przestrzennie fluktuującym namagnesowaniu. W takim układzie średnia wartość pola wymiennego może być równa zeru, ale jego drugi moment statystyczny pozostaje skończony. Transport zależy wtedy od amplitudy fluktuacji, długości korelacji oraz od obecności dodatkowych zanieczyszczeń skalarnych [7].

4.4.1 Model przestrzennie fluktuującej magnetyzacji

Powierzchniowe elektrony Diraca opisuje hamiltonian $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, którego część niezaburzoną określa równanie (3.13). Potencjał rozpraszający ma postać

$$\hat{V}(\mathbf{r}) = M(\mathbf{r})\sigma_z + V_0(\mathbf{r})\sigma_0. \tag{4.17}$$

Składnik $M(\mathbf{r})\sigma_z$ opisuje losowe pole wymienne związane ze składową magnetyzacji prostopadłą do powierzchni, natomiast $V_0(\mathbf{r})\sigma_0$ odpowiada niemagnetycznym zanieczyszczeniom skalarnym.

Wielkość $M(\mathbf{r})$ jest mierzona w jednostkach energii. Oznacza to, że zawiera już stałą sprzężenia wymiennego między lokalną magnetyzacją a spinem elektronów powierzchniowych. Losowego pola $M(\mathbf{r})\sigma_z$ nie można utożsamić z jednorodnym członem $m_0\sigma_z$ otwierającym przerwę w całym układzie. Działa jako przestrzennie zmienny człon masowy hamiltonianu Diraca i prowadzi do rozpraszania zależnego od spinu [7].

W modelu przyjmuje się zerową wartość średnią magnetyzacji,

$$\langle M(\mathbf{r})\rangle = 0. \tag{4.18}$$

Oznacza to brak jednorodnego namagnesowania prostopadłego do powierzchni. W rozpatrywanym przybliżeniu słabego nieuporządkowania fluktuacje pola wymiennego uwzględnia się poprzez energię własną i poprawki wierzchołkowe. Sama zerowa średnia pola nie stanowi ogólnego dowodu braku zmian widma przy dowolnie silnym nieuporządkowaniu. Z tego powodu model różni się od bariery magnetycznej opisanej równaniem (3.69).

Potencjał zanieczyszczeń skalarnych można zapisać jako

$$V_0(\mathbf{r}) = \sum_i V_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i), \tag{4.19}$$

gdzie $\mathbf{R}_i$ oznaczają położenia zanieczyszczeń. Przyjmuje się, że losowe pola skalarne i magnetyczne są statystycznie niezależne. Jednorodną średnią potencjału skalarnego można włączyć do definicji potencjału chemicznego; dla pozostałych fluktuacji przyjmuje się zerową średnią i drugi moment amplitud $\langle V_i^2\rangle = V_0^2$. Dla przestrzennie nieskorelowanych zanieczyszczeń korelator używany w całkach pędowych ma postać

$$\left\langle |V_{0,\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2 \right\rangle = n_i V_0^2, \tag{4.20}$$

gdzie n_i jest koncentracją zanieczyszczeń. Wprowadzenie części skalarnej pozwala porównać wkład rozpraszania magnetycznego z wkładem pochodzącym od zwykłych zanieczyszczeń niemagnetycznych.

Losowa magnetyzacja na powierzchni TI odpowiada sytuacji, w której magnetyczne oddziaływanie nie jest jednorodne przestrzennie. Taki przypadek może pojawić się w magnetycznie domieszkowanych izolatorach topologicznych, gdzie rozkład domieszek i lokalne uporządkowanie magnetyczne prowadzą do przestrzennych fluktuacji pola wymiennego. Domieszkowane magnetycznie cienkie warstwy $(\mathrm{Bi},\mathrm{Sb})_2\mathrm{Te}_3$ są podstawą eksperymentalnej realizacji kwantowego anomalnego efektu Halla [42]. Badania ARPES i STM pokazały także, że magnetyczne oraz niemagnetyczne domieszki na powierzchni $\mathrm{Bi}_2\mathrm{Se}_3$ wpływają na strukturę elektronową i rozpraszanie stanów powierzchniowych [43]. Wyniki te motywują badania wpływu oddziaływań magnetycznych na stany powierzchniowe, ale nie stanowią bezpośredniego potwierdzenia modelu pola o zerowej średniej. W szczególności realizacja kwantowego anomalnego efektu Halla nie jest równoznaczna ze spełnieniem warunku (4.18). Model z polem $M(\mathbf{r})\sigma_z$ opisuje wybrany przypadek niejednorodnego sprzężenia wymiennego.

4.4.2 Korelacje magnetycznego nieuporządkowania

Losowa magnetyzacja jest opisywana statystycznie przez funkcję korelacji. Drugi moment losowej magnetyzacji definiuje się jako

$$\langle M(\mathbf{r})M(\mathbf{r}')\rangle = C(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{4.21}$$

W reprezentacji pędowej przyjęto korelator gaussowski

$$C(q) = \left\langle M^2 \right\rangle \xi^2 \exp\left(-q^2\xi^2\right). \tag{4.22}$$

Korelator $C(q)$ określa widmowy rozkład przestrzennych fluktuacji pola wymiennego. Parametr ξ wyznacza ich zasięg korelacji, a $q = |\mathbf{k}-\mathbf{k}'|$ jest wartością zmiany wektora falowego w procesie rozpraszania; odpowiadająca zmiana pędu ma wartość $\hbar q$.

W równaniu (4.22) zachowano prefaktor oraz oznaczenie $\langle M^2\rangle$ stosowane w publikacji [7]. Parametr ten ustala amplitudę korelatora widmowego. Przy konwencji odwrotnej transformaty Fouriera z miarą $d^2q/(2\pi)^2$ lokalna wariancja wynosi $C(\mathbf{0}) = \langle M^2\rangle/(4\pi)$. Nie należy więc utożsamiać parametru $\langle M^2\rangle$ z lokalną wariancją bez uwzględnienia normalizacji transformaty. Zachowanie prefaktora zapewnia zgodność z wyrażeniami transportowymi z rozdziału 3.

Dla $k\xi \ll 1$ fluktuacje magnetyzacji zmieniają się na krótkich odległościach. Wtedy rozpraszanie może obejmować większe wartości przekazu pędu, także procesy pod większym kątem. Dla $k\xi \gg 1$ magnetyzacja zmienia się wolniej w przestrzeni, a dominują procesy o mniejszym przekazie pędu. Ta różnica wpływa na czas relaksacji i przewodnictwo powierzchniowych elektronów Diraca [7].

W zapisie macierzowym losowa magnetyzacja daje element rozpraszający

$$\hat{V}^{M}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\sigma_z, \tag{4.23}$$

gdzie $M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ jest składową Fouriera pola $M(\mathbf{r})$. Po uśrednieniu po konfiguracjach nieuporządkowania otrzymuje się zależność od korelatora $C(|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|)$. Właśnie ta wielkość wchodzi do energii własnej i do funkcji wierzchołkowej w obliczeniach przewodnictwa.

Korelacje magnetyczne określają zasięg fluktuacji oraz współkształtują rozkład kątowy rozpraszania. Prawdopodobieństwo przejścia zależy ponadto od elementu macierzowego σ_z między spinorami stanów powierzchniowych. Dla elastycznego rozpraszania w obrębie jednej gałęzi czynnik spinorowy jest proporcjonalny do $1-\cos\varphi$, podczas gdy dla potencjału skalarnego jest proporcjonalny do $1+\cos\varphi$. Sam korelator nie wyznacza zatem całego rozkładu kątowego. Z tego powodu długość korelacji ξ jest jednym z parametrów kontrolujących transport powierzchniowy w

modelu losowej magnetyzacji.

W analizie zależności temperaturowych przyjęto fenomenologiczną długość korelacji zastosowaną w pracy [7],

$$\xi(T) = \xi_0 \left[1 - \exp\left(-\frac{\Delta}{k_B T}\right)\right]. \tag{4.24}$$

Parametr ξ_0 oznacza graniczną długość korelacji przy $T \to 0$, natomiast $\Delta > 0$ jest skalą energii oddziaływań magnetycznych. W tym wzorze pozostawiono jawne k_B. W korelatorze występuje $\xi(T)$, dlatego oznaczeń ξ i ξ_0 nie należy stosować zamiennie. Zależność ta opisuje zmianę statystyki przestrzennej nieuporządkowania z temperaturą, bez wprowadzania jawnej dynamiki czasowej pola. Temperatura wpływa zatem na transport zarówno przez rozkład Fermiego, jak i przez korelacje pola wymiennego.

4.4.3 Rozpraszanie powierzchniowych elektronów Diraca

Rozpraszanie na losowej magnetyzacji różni się od rozpraszania na potencjale skalarnym. Potencjał skalarny jest proporcjonalny do σ_0 i nie działa bezpośrednio na spin. Losowe pole wymienne jest proporcjonalne do σ_z, dlatego sprzęga się ze spinem elektronów powierzchniowych. W układzie ze sprzężeniem kierunku spinu i wektora falowego oznacza to, że rozpraszanie zależy od spinowej struktury stanów początkowych i końcowych.

W modelu powierzchni TI z losową magnetyzacją nie oblicza się transmisji przez pojedynczą barierę, tak jak w podrozdziale 4.3. Zamiast tego wykonuje się uśrednianie po konfiguracjach pola $M(\mathbf{r})$ oraz po położeniach zanieczyszczeń skalarnych. Wpływ rozpraszania wchodzi do funkcji Greena przez energię własną oraz do przewodnictwa przez poprawki wierzchołkowe.

Uśredniona funkcja Greena dla tego modelu została podana w równaniu (3.16). Poszerzenie poziomów opisuje parametr γ, który zawiera wkład magnetyczny i skalarny, $\gamma = \gamma_M + \gamma_0$. Odpowiadający czas życia stanu określa zależność (3.18). Parametr γ oznacza poszerzenie bieguna po projekcji na odpowiednią gałąź widma; nie jest całą macierzową energią własną ani samym jej składnikiem skalarnym. Wkład magnetyczny do poszerzenia zależy od korelatora $C(q)$, a więc od amplitudy $\langle M^2 \rangle$ i długości korelacji ξ.

W przewodnictwie istotna jest także funkcja wierzchołkowa. Dla powierzchniowych elektronów Diraca operator prądu jest związany z macierzami Pauliego, dlatego samo poszerzenie funkcji Greena nie wystarcza do pełnego opisu transportu. Wyrażenie Kubo dla prądu w modelu losowej magnetyzacji zostało zapisane w równaniu (3.7), natomiast końcowa postać przewodnictwa w równaniu (3.66).

Opis wpływu losowej magnetyzacji na transport obejmuje dwa powiązane elementy. Pierwszy to skrócenie czasu życia stanów powierzchniowych, wynikające z rozpraszania na fluktuacjach pola wymiennego. Drugi to zmiana relaksacji prądu, zawarta w poprawce wierzchołkowej. Oba mechanizmy zależą od korelacji przestrzennych magnetyzacji. Dlatego w części wynikowej analiza przewodnictwa będzie prowadzona jako funkcja energii, temperatury, amplitudy fluktuacji oraz długości korelacji ξ.

4.5 Lokalna struktura magnetyczna na powierzchni izolatora topologicznego

Ostatni model rozważany w tym rozdziale dotyczy lokalnej struktury magnetycznej na powierzchni TI. W odróżnieniu od bariery magnetycznej z podrozdziału 4.3, obszar magnetyczny nie jest nieskończony w kierunku y. Ma skończony rozmiar w obu kierunkach powierzchni i działa jak lokalne centrum rozpraszające dla powierzchniowych elektronów Diraca.

Model ten opisuje kropkę lub domenę magnetyczną umieszczoną na powierzchni TI. Magnetyzacja jest skierowana prostopadle do powierzchni, dlatego sprzęga się ze spinem przez człon proporcjonalny do σ_z. Podstawowy hamiltonian lokalnej struktury magnetycznej został zapisany wcześniej w równaniu (3.91). W tej części doprecyzowany zostaje fizyczny sens profilu $M(\mathbf{r})$ oraz sposób opisu rozpraszania [8].

W przeciwieństwie do modelu losowej magnetyzacji z podrozdziału 4.4, tutaj nie wykonuje się uśredniania po konfiguracjach pola magnetycznego. Profil magnetyzacji jest zadany przestrzennie, a analizowany problem ma charakter rozpraszania na pojedynczym obiekcie magnetycznym.

4.5.1 Model kropki lub domeny magnetycznej

W publikacji [8] rozważana jest kołowa kropka magnetyczna o promieniu R. Magnetyzacja jest jednorodna wewnątrz kropki i zanika poza nią. Przyjęty profil pola magnetycznego został podany w równaniu (3.92). Parametr M_0 określa amplitudę lokalnej magnetyzacji, a R rozmiar obszaru magnetycznego.

Dla takiego profilu powierzchniowy elektron Diraca porusza się swobodnie poza kropką, natomiast wewnątrz obszaru $r < R$ odczuwa dodatkowe sprzężenie wymienne. Składnik $g\sigma_z M_0$ ma ten sam charakter jak człon masowy w hamiltonianie Diraca, ale działa tylko lokalnie. Nie prowadzi więc do globalnej przerwy energetycznej na całej powierzchni TI, lecz do rozpraszania elektronów przechodzących w pobliżu obszaru magnetycznego.

Wygodną miarą siły lokalnej struktury magnetycznej jest bezwymiarowy parametr ζ, zdefiniowany w równaniu (3.93). Parametr ten zawiera amplitudę magnetyzacji, rozmiar kropki oraz parametr prędkości v, dlatego opisuje łączną siłę rozpraszania na lokalnym obszarze magnetycznym. Parametrem określającym stosunek rozmiaru kropki do długości fali jest ponadto kR. Dla $|\zeta| \ll 1$ stosuje się przybliżenie Borna. W przypadku większych wartości $|\zeta|$ konieczny jest opis z wykorzystaniem rozwinięcia na fale cząstkowe [8].

Lokalna struktura magnetyczna na powierzchni TI może być interpretowana jako uproszczony opis pojedynczej domeny magnetycznej, wyspy ferromagnetycznej albo skupiska atomów magnetycznych osadzonych na powierzchni TI. Takie układy badano eksperymentalnie przez nanoszenie atomów Fe, Co lub innych domieszek magnetycznych na powierzchnie Bi_2Se_3 i Bi_2Te_3, a ich właściwości analizowano metodami STM, STS, ARPES oraz technikami magnetycznymi [44, 43, 45]. Badania te wskazują na znaczenie lokalnych oddziaływań magnetycznych, lecz nie każda konfiguracja adsorbatów realizuje jednorodne namagnesowanie prostopadłe do powierzchni. Kołowy profil i stała orientacja magnetyzacji są idealizacjami przyjętymi w modelu. W takim ujęciu magnetyczna kropka o promieniu R jest modelem lokalnego centrum rozpraszającego, które modyfikuje spinową strukturę stanu powierzchniowego i prowadzi do kątowo zależnego rozpraszania.

4.5.2 Rozpraszanie na lokalnej magnetyzacji

Rozpraszanie na kropce magnetycznej opisuje się przez funkcję falową w dużej odległości od obszaru magnetycznego. Dla fali padającej o wektorze falowym skierowanym wzdłuż osi x amplituda rozpraszania w metodzie fal cząstkowych została zapisana w równaniu (3.121), i zależy od kąta rozproszenia φ. Jej postać spinorowa wynika z tego, że rozpraszany stan zachowuje strukturę spinową powierzchniowego elektronu Diraca.

Różniczkowy przekrój rozpraszania w układzie dwuwymiarowym ma wymiar długości. Jego definicję podano w równaniu (3.122). Całkowity przekrój rozpraszania oraz asymetryczny przekrój rozpraszania zostały zdefiniowane odpowiednio w równaniach (3.123) oraz (3.124). Ponieważ lokalna magnetyzacja sprzęga się ze spinem, rozkład kątowy rozpraszania nie musi mieć takiej samej postaci jak dla zwykłego potencjału skalarnego.

Wielkość l_{as} określa różnicę całkowitego rozpraszania do dwóch przeciwległych półpłaszczyzn kątowych i stanowi miarę asymetrii rozkładu względem kierunku padania. Jeżeli $l_{\mathrm{as}} \neq 0$, rozpraszanie nie jest symetryczne względem kierunku padania. Zerowa wartość l_{as} nie dowodzi jednak symetrii całego rozkładu kątowego. Taka asymetria może wynikać ze spinowej struktury stanów powierzchniowych oraz z

faktu, że lokalna magnetyzacja działa przez macierz σ_z [8].

W przybliżeniu Borna dla kołowej kropki magnetycznej wkład do rozpraszania zależy od zmiany wektora falowego $q = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|$. Dla jednorodnie namagnesowanej kropki pojawia się funkcja Bessela $J_1(qR)$, wynikająca z całkowania po kołowym obszarze magnetycznym. W tym ujęciu rozkład kątowy jest określony przez rozmiar kropki, amplitudę magnetyzacji oraz spinorowy czynnik macierzowy związany z operatorem σ_z [8]. Wyznaczone przekroje charakteryzują pojedyncze centrum rozpraszania; obliczenie makroskopowego przewodnictwa wymagałoby dodatkowego określenia koncentracji i rozmieszczenia takich centrów.

4.5.3 Spinowa struktura trajektorii elektronowej

Rozpraszanie na lokalnej magnetyzacji można interpretować również przez ruch pakietu falowego. Na powierzchni TI operator prędkości jest związany z macierzami Pauliego,

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{v}{\hbar}(\sigma_x, \sigma_y). \tag{4.25}$$

Oznacza to, że prędkość elektronu jest bezpośrednio związana ze stanem spinowym. Ewolucja składowych polaryzacji spinowej w płaszczyźnie powierzchni wpływa zatem na średnią prędkość elektronu.

Zależność (4.25) wynika z $\hat{\mathbf{v}} = \hbar^{-1}\partial\hat{H}/\partial\mathbf{k}$ i zachowuje konwencję $v = \hbar v_F$. Dla jednorodnego wnętrza obszaru magnetycznego oraz ustalonego wektora falowego $\mathbf{k} = (k, 0)$ równania Heisenberga dla macierzy Pauliego przyjmują postać

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\sigma_x\\ \sigma_y\\ \sigma_z\end{pmatrix} = \frac{2}{\hbar}\begin{pmatrix}0 & -gM_0 & 0\\ gM_0 & 0 & -kv\\ 0 & kv & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sigma_x\\ \sigma_y\\ \sigma_z\end{pmatrix}. \tag{4.26}$$

Równania te opisują precesję wokół efektywnego wektora $(vk, 0, gM_0)$, a zatem uwzględniają zarówno część kinetyczną, jak i sprzężenie wymienne. Dla stanu własnego jednorodnego hamiltonianu wartość oczekiwana spinu pozostaje stała; dynamika pojawia się dla odpowiedniej superpozycji stanów własnych. Ponieważ średnia prędkość jest związana z $\langle\sigma_x\rangle$ i $\langle\sigma_y\rangle$, ewolucja spinowa może zmieniać kierunek ruchu środka pakietu. Wyznaczenie całej trajektorii wymaga jednak uwzględnienia przestrzennej struktury pakietu oraz jego przejścia przez granice kropki; nie wynika wyłącznie z równań dla ustalonego $\mathbf{k}$.

Ten mechanizm odróżnia rozpraszanie powierzchniowych elektronów TI od rozpraszania cząstek o parabolicznym widmie na potencjale skalarnym. W przypadku zwykłego potencjału skalarnego zmieniają się głównie faza i pęd elektronu. W lokalnej strukturze magnetycznej na powierzchni TI zmiany polaryzacji spinowej są powiązane ze zmianami średniej prędkości i kierunku propagacji. Dlatego kształt

oraz magnetyzacja lokalnego obszaru mogą służyć do kontroli sprzężonej dynamiki ładunku i spinu [8].

Rozdział 5

Mechanizmy wpływające na transport ładunku i spinu

W rozdziale 4 zdefiniowano modele 2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby oraz powierzchni TI z barierą magnetyczną, losową magnetyzacją i lokalną strukturą magnetyczną. Poniżej przeanalizowano mechanizmy łączące postać tych oddziaływań z transmisją, rozpraszaniem oraz relaksacją prądów ładunkowego i spinowego. Rozróżniono modyfikację widma w obszarze jednorodnym, koherentne rozpraszanie na zadanym profilu magnetyzacji oraz relaksację wywołaną statystycznie opisanym nieuporządkowaniem. Takie rozróżnienie stanowi podstawę interpretacji wyników ilościowych przedstawionych w następnym rozdziale [5, 6, 7, 8].

Sprzężenie spinowo-orbitalne, magnetyzacja i nieuporządkowanie nie są niezależnymi kategoriami zaburzeń: fluktuacje parametru Rashby stanowią nieuporządkowanie spinowo-orbitalne, a fluktuacje pola wymiennego — nieuporządkowanie magnetyczne. O ich wpływie na transport decydują zarówno macierzowa postać oddziaływania, jak i jego zależność przestrzenna. Zachowano konwencje wcześniejszych rozdziałów: $\mathbf{k}$ jest wektorem falowym, $v = \hbar v_F$ w modelach TI, a we wzorach dla 2DEG stosuje się jednostki $\hbar = k_B = 1$. Odwołania do przewodnictwa spinowego dotyczą odpowiedzi zdefiniowanej dla danego modelu i nie oznaczają automatycznie spinowego efektu Halla.

5.1 Rola oddziaływania spinowo-orbitalnego

Oddziaływanie spinowo-orbitalne jest elementem występującym we wszystkich modelach analizowanych w rozprawie. Jego szczegółowa postać zależy jednak od układu. W 2DEG występuje jako składnik Rashby, natomiast na powierzchni TI jest wbudowane w samą strukturę stanów Diraca. W obu przypadkach prowadzi do powiązania pędu elektronu z jego stanem spinowym [4, 11, 13, 14].

Współczesny przegląd fizyki oddziaływań typu Rashby wskazuje, że połączenie sprzężenia spinowo-orbitalnego i braku symetrii inwersji może prowadzić do różnych tekstur spinowych oraz mechanizmów odpowiedzi nierównowagowej [46]. W niniejszej analizie wykorzystuje się określony model efektywny: liniowy człon Rashby w 2DEG oraz izotropowy hamiltonian powierzchniowy TI. Wnioski ilościowe odnoszą się do tych hamiltonianów; nie obejmują automatycznie wielopasmowości, dodatkowej tekstury orbitalnej ani anizotropii występujących w bardziej złożonych materiałach.

W 2DEG oddziaływanie Rashby wynika z asymetrii strukturalnej i efektywnego pola elektrycznego prostopadłego do płaszczyzny układu. Dla jednorodnego parametru Rashby hamiltonian ma postać podaną w równaniu (4.12), a widmo rozszczepia się na dwie gałęzie opisane równaniem (4.13). W modelu rozważanym w rozprawie średni parametr Rashby zanika, zgodnie z równaniem (4.15). Istotne pozostają natomiast lokalne fluktuacje $\lambda(\mathbf{r})$, które prowadzą do rozpraszania zależnego od spinu [25, 15, 6].

Losowe pole Rashby ma strukturę odmienną od potencjału skalarnego. Element macierzowy (3.55) zawiera składowe wektorów falowych oraz macierze Pauliego. Rozpraszanie pomiędzy stanami $\mathbf{k}$ i $\mathbf{k}'$ może zatem zmieniać zarówno ruch orbitalny, jak i polaryzację spinową. Ten sam operator zaburzenia wyznacza czas życia stanu, transportowy czas relaksacji prądu ładunkowego oraz spinowy transportowy czas relaksacji, lecz każda z tych wielkości odpowiada innej składowej nierównowagowego rozkładu elektronów [6].

Czas życia τ określa poszerzenie stanu w uśrednionej funkcji Greena. Czas τ_{tr} charakteryzuje relaksację składowej rozkładu odpowiedzialnej za prąd ładunkowy, natomiast $\tau_{s,\mathrm{tr}}$ — relaksację rozpatrywanego prądu spinowego. Różnice między nimi wynikają z kątowej i spinowej struktury operatora zderzeń. Ich definicje podano w podrozdziale 3.2.3; w modelu losowego Rashby zależą one od energii, promienia korelacji R i amplitudy fluktuacji $\langle\lambda^2\rangle$ [6].

Na powierzchni TI rola sprzężenia spinowo-orbitalnego jest inna. Hamiltonian (3.13) jest liniowy w wektorze falowym i opisuje niskoenergetyczne stany powierzchniowe. Postać spinorów stanów powierzchniowych określają równania (4.1) i (4.2), natomiast orientację fizycznego spinu opisuje równanie (4.7), z uwzględnieniem obrotu bazy (4.5). Oznacza to spin-momentum locking, czyli powiązanie kierunku spinu z kierunkiem ruchu elektronu [13, 14, 30, 31].

Spinorowa struktura stanów powierzchniowych określa odpowiedź na zaburzenia skalarne i magnetyczne. Potencjał proporcjonalny do σ_0 nie sprzęga się bezpośrednio ze spinem, lecz jego elementy macierzowe nadal zależą od nakładania się spinorów. Człon wymienny $m(\mathbf{r})\sigma_z$, zdefiniowany w równaniu (4.11), ma inną strukturę macierzową. Jednorodna składowa prostopadła do powierzchni otwiera przerwę w widmie, natomiast jej zależność przestrzenna prowadzi również do rozpraszania. Rozdzielenie

obu efektów wymaga określenia profilu pola wymiennego.

W modelu bariery magnetycznej warunki transmisji wynikają z dyspersji i dopasowania spinorowych funkcji falowych na granicach obszarów. Parametrami kontrolnymi są energia elektronu, zachowana składowa k_y, amplituda członu wymiennego m_0 i długość bariery L. Oddziaływanie spinowo-orbitalne określa strukturę stanów, natomiast przestrzenny profil magnetyzacji ustala, gdzie zmieniają się warunki propagacji. Powstają w ten sposób reżimy tunelowy i propagacyjny, opisane w rozdziałach 3 i 4 [5].

W układzie z losową magnetyzacją wpływ sprzężenia spinowo-orbitalnego jest zawarty w propagatorach i elementach macierzowych stanów Diraca. Fluktuacje $M(\mathbf{r})\sigma_z$ zmieniają czas życia stanów oraz relaksację prądu. Wyrażenia (3.7) i (3.66) uwzględniają oba efekty przez energię własną i zrenormalizowany wierzchołek prądowy. W rachunku pozostaje również wkład nieuporządkowania skalarnego [7].

Dla lokalnej struktury magnetycznej związek między polaryzacją spinową a ruchem wynika z operatora prędkości (4.25). Zmiany wartości oczekiwanych składowych macierzy Pauliego w płaszczyźnie powierzchni wpływają na średnią prędkość pakietu falowego. Opis ten uzupełnia analizę amplitudy rozpraszania, ale jej nie zastępuje: rozkład kątowy wymaga rozwiązania problemu przestrzennego z zadanym profilem magnetyzacji [8].

Zasadnicza różnica między modelami dotyczy zatem miejsca, w którym sprzężenie spinowo-orbitalne występuje w rachunku. Dla 2DEG losowy człon Rashby jest potencjałem rozpraszającym. Dla TI liniowy hamiltonian o strukturze spinorowej jest hamiltonianem odniesienia, a rozpraszanie wywołują dodane pola wymienne i skalarne. Wspólnym elementem obu opisów jest konieczność uwzględnienia struktury spinowej przy obliczaniu elementów macierzowych przejść.

5.2 Rola zjawiska spin-momentum locking w transporcie powierzchniowym izolatorów topologicznych

W reprezentacji hamiltonianu (3.13) wartość oczekiwana wektora macierzy Pauliego jest równoległa albo antyrównoległa do $\mathbf{k}$, zgodnie z równaniem (4.4). Fizyczny spin w układzie laboratoryjnym określa jednak operator (4.6). Jego wartość oczekiwana ma poprzeczną orientację opisaną równaniami (4.7) i (4.8). Rozróżnienie to zachowuje się we wszystkich modelach powierzchni TI. Dla transportu istotne jest, że stany o różnych kierunkach $\mathbf{k}$ mają różne spinory, a prawdopodobieństwo przejścia zależy od operatora zaburzenia działającego pomiędzy nimi [13, 14].

Dla elastycznego rozpraszania w obrębie jednej gałęzi idealnego, bezmasowego

stożka Diraca kwadrat nakładania się znormalizowanych spinorów dla zaburzenia skalarnego jest równy $(1 + \cos\varphi)/2$, gdzie φ oznacza kąt rozpraszania. Dla $\varphi = \pi$ element macierzowy zanika. Jest to przejaw zakazu elastycznego rozpraszania pomiędzy partnerami Kramersa przez zaburzenie zachowujące symetrię odwrócenia czasu. Nie oznacza to zaniku rozpraszania pod innymi kątami ani nieskończonego przewodnictwa powierzchni [13, 14, 33].

Dla prostopadłego pola wymiennego element macierzowy zawiera σ_z. Z równania (3.100) wynika czynnik $(1 - \cos\varphi)/2$ w prawdopodobieństwie przejścia. W pierwszym przybliżeniu Borna eliminuje on rozpraszanie dokładnie do przodu, natomiast dopuszcza rozpraszanie wsteczne. Różnica względem zaburzenia skalarnego wynika bezpośrednio z algebry spinorów. Obowiązuje dla stanów odniesienia bez jednorodnej przerwy i nie powinna być bez dodatkowego rachunku przenoszona na stany wewnątrz namagnesowanego obszaru.

Dla bariery magnetycznej konsekwencją tej struktury jest konieczność zachowania ciągłości obu składowych funkcji falowej. W obszarze namagnesowanym spinory są wyznaczane przez hamiltonian z członem masowym. Jeżeli istnieją rozwiązania propagujące, interferencja fal odbitych na obu granicach może prowadzić do rezonansowej transmisji. Gdy podłużny wektor falowy jest urojony, transport odbywa się poprzez rozwiązania zanikające. Przejście między tymi przypadkami określa warunek (3.88); nie jest ono osobnym procesem relaksacji spinu [5].

W modelu losowej magnetyzacji czynniki spinorowe wchodzą do uśrednionego prawdopodobieństwa rozpraszania, a następnie do energii własnej i równania wierzchołkowego. Uśrednianie po konfiguracjach pola o zerowej średniej nie usuwa rozpraszania: pozostaje jego drugi moment. Zależności (3.7) i (3.66) pokazują, że odpowiedź prądowa zależy zarówno od poszerzenia stanów, jak i od korelacji pomiędzy propagatorami uwzględnionych w poprawce wierzchołkowej [7].

Długość korelacji ξ wyznacza zakres zmian wektora falowego istotnych w rozpraszaniu. Korelator jest jednak tylko jednym z czynników prawdopodobieństwa przejścia. Nawet przy jednakowej zależności przestrzennej pola zaburzenia skalarne i magnetyczne mają odmienne wagi kątowe, wynikające z odpowiednich elementów macierzowych. Dlatego nie można utożsamić ich wpływu na relaksację prądu wyłącznie na podstawie długości korelacji.

W modelu kropki magnetycznej spinorowa amplituda opisuje stan fali wychodzącej w każdym kierunku. Operator (4.25) wiąże jej polaryzację z przepływem prawdopodobieństwa. Pozwala to interpretować rozpraszanie w kategoriach sprzężonej dynamiki ruchu i spinu, lecz samo istnienie takiego związku nie dowodzi asymetrii rozkładu względem $\varphi \to -\varphi$. Asymetrię należy ocenić z obliczonego przekroju rozpraszania, z uwzględnieniem rzędu przybliżenia [8].

Po projekcji na ustaloną gałąź widma możliwy jest opis kinetyczny za pomocą

prawdopodobieństw przejść, o ile zawierają one właściwe czynniki spinorowe. Pełny opis macierzowy jest potrzebny na etapie wyznaczania tych prawdopodobieństw oraz wtedy, gdy istotne są koherencje pomiędzy składowymi stanu. Spin-momentum locking nie wyklucza więc opisu kinetycznego; określa jego strukturę i zakres stosowalności.

5.3 Magnetyzacja jako mechanizm kontroli transportu

Magnetyzacja jest jednym z mechanizmów zmieniających transport powierzchniowych elektronów Diraca. W analizowanych modelach sprzęga się ona ze spinem przez macierz σ_z, czyli przez składową prostopadłą do powierzchni TI. Taki składnik nie jest zwykłym potencjałem skalarnym. Zmienia strukturę spinorową stanów powierzchniowych, może otwierać przerwę energetyczną, tworzyć barierę transportową albo prowadzić do rozpraszania zależnego od spinu [5, 7, 8].

W tej sekcji rozpatrzono trzy konsekwencje obecności zadanego pola wymiennego: otwarcie przerwy w obszarze jednorodnym, modyfikację transmisji przez barierę oraz zmianę kątowego rozkładu rozpraszania na lokalnej kropce. Pole losowe wymaga dodatkowo określenia statystyki fluktuacji i jest omówione w sekcji 5.5. Jednorodny człon wymienny stanowi przy tym lokalny punkt odniesienia dla obszarów magnetycznych, a nie dodatkowy, niezależny model transportowy.

5.3.1 Magnetyzacja jako źródło przerwy energetycznej

Składowa magnetyzacji prostopadła do powierzchni TI wprowadza do hamiltonianu człon proporcjonalny do σ_z, zapisany w równaniu (4.11). W przypadku jednorodnej magnetyzacji parametr ten przyjmuje wartość stałą m_0. Widmo zmienia się wtedy z bezmasowego widma Diraca na widmo z przerwą, opisane równaniem (3.74).

Parametr m_0 jest energią sprzężenia wymiennego, a nie masą efektywną elektronu. Jego niezerowa wartość prowadzi w rozważanym modelu do przerwy o szerokości $2|m_0|$. Składowa magnetyzacji prostopadła do powierzchni łamie symetrię odwrócenia czasu i wprowadza człon antykomutujący z częścią kinetyczną hamiltonianu. Taki mechanizm opisuje modelowo powstawanie masy fermionów Diraca w obecności sprzężenia magnetycznego [34, 35, 5].

Dla $|\varepsilon| < |m_0|$ jednorodnie namagnesowany obszar nie zawiera propagujących stanów należących do rozpatrywanego widma. Jeżeli ma on skończoną szerokość, możliwe jest tunelowanie pomiędzy obszarami bez magnetyzacji. Poza przerwą istnieją stany propagujące, lecz ich dostępność przy zadanym kącie padania zależy również

od zachowanej składowej k_y. Warunek energetyczny $|\varepsilon| > |m_0|$ jest zatem konieczny, ale dla padania skośnego nie jest wystarczający.

Zmiana amplitudy m_0 modyfikuje szerokość przerwy i zakres stanów dostępnych dla transmisji. Efekt ten należy odróżnić od działania jednorodnego potencjału skalarnego, który w idealnym modelu przesuwa energię punktu Diraca. Również jednorodna magnetyzacja w płaszczyźnie powierzchni ma inny skutek: w liniowym hamiltonianie przesuwa położenie stożka w przestrzeni wektorów falowych zamiast otwierać przerwę. Wnioski o przerwie odnoszą się więc do określonej orientacji pola wymiennego [13, 14].

Szerszy kontekst roli magnetyzacji przedstawia przegląd kwantowego anomalnego efektu Halla [47]. W tym zjawisku złamanie symetrii odwrócenia czasu współwystępuje z nietrywialną topologią pasm, a transport jest związany z chiralnymi stanami brzegowymi. Otwarcie lokalnej przerwy w modelu bariery nie jest samo w sobie dowodem realizacji takiego reżimu. Rozpatrywany tutaj problem transmisji przez obszar magnetyczny należy odróżnić od wyznaczenia liczby Cherna i skwantowanego przewodnictwa Halla całego układu.

5.3.2 Magnetyzacja jako bariera transportowa

Jeżeli magnetyzacja występuje tylko w skończonym obszarze powierzchni TI, tworzy barierę transportową. W modelu rozważanym w publikacji [5] obszar magnetyczny znajduje się w przedziale $0 \leq x \leq L$ i jest opisany równaniem (3.69). Elektrony powierzchniowe przechodzą wtedy przez trzy obszary: przed barierą, wewnątrz bariery i za barierą.

Rozwiązanie problemu wymaga dopasowania obu składowych spinora na granicach obszaru magnetycznego. Warunek ten obowiązuje dla fermionów Diraca również w obecności bariery skalarnej; różnica wynika z postaci hamiltonianu wewnątrz bariery, a nie z samej konieczności użycia spinorów. Prawdopodobieństwo transmisji z równania (3.83) jest stosunkiem transmitowanego i padającego strumienia. W rozważanej geometrii jednakowe obszary po obu stronach bariery pozwalają utożsamić je z $|t(\mathbf{k})|^2$.

Charakter rozwiązań wewnątrz bariery wyznacza relacja dyspersyjna (3.74). Dla padania skośnego rzeczywisty, niezerowy podłużny wektor falowy istnieje po spełnieniu nierówności (3.88). Po stronie tunelowej jest on urojony, a jego moduł określa odwrotność długości zaniku. Wzór (3.86) dotyczy szczególnego przypadku $k_y = 0$ i nie może być bez zmiany stosowany do padania skośnego. Na granicy obu reżimów podłużna składowa wektora falowego zanika i rozwiązanie należy wyznaczyć przez przejście graniczne.

W reżimie tunelowym transmisja maleje wraz ze wzrostem długości bariery. Jej

niskoenergetyczną postać dla normalnego padania przedstawiono w równaniu (3.87). Dla bariery znacznie dłuższej od długości zaniku funkcji falowej zależność ta przyjmuje asymptotycznie postać wykładniczą. W reżimie propagacyjnym fale elektronowe gromadzą fazę zależną od energii i długości bariery L, co prowadzi do interferencji między falami odbijanymi na jej granicach. Warunek (3.85) wyznacza położenia rezonansów dla normalnego padania, przy których w idealnym modelu transmisja osiąga jedność. Sumowanie wkładów od kanałów o różnych wartościach k_y oraz uśrednianie po energiach może zmniejszać kontrast obserwowanych oscylacji [5].

Aby wyznaczyć wielkości transportowe, należy zsumować wkłady od poszczególnych kanałów poprzecznych, zgodnie z równaniami (3.89) i (3.90). W przyjętej normalizacji $G = jL/U$, natomiast konduktancja dwuzaciskowa próbki o szerokości W wynosi $(W/L)G$. Takie rozróżnienie pozwala uwzględnić geometryczny czynnik przeliczeniowy przy analizie zależności przewodzenia od parametrów bariery. Amplituda magnetyzacji m_0, długość L oraz energia nośników określają warunki propagacji i położenia rezonansów transmisyjnych.

5.3.3 Magnetyzacja jako źródło asymetrycznego rozpraszania

W odróżnieniu od bariery magnetycznej, jednorodnej w kierunku poprzecznym, kropka magnetyczna zajmuje skończony obszar powierzchni izolatora topologicznego. Jej rozkład przestrzenny opisuje profil (3.92). Brak symetrii translacyjnej w kierunku y oznacza, że składowa k_y nie jest zachowywana podczas rozpraszania. Charakterystykę rozpraszania określa się zatem przez zależność amplitudy od kąta między kierunkiem padania a kierunkiem propagacji fali rozproszonej [8].

Asymptotyczną postać funkcji falowej przedstawiono w równaniu (3.104), natomiast amplitudę spinorową określa równanie (3.121). Na tej podstawie wyznacza się różniczkowy i całkowity przekrój rozpraszania, opisane równaniami (3.122) i (3.123). Do ilościowego opisu asymetrii zastosowano wielkość l_{as}, zdefiniowaną w równaniu (3.124) jako różnicę przekrojów scałkowanych po dodatnich i ujemnych kątach rozpraszania. Niezerowa wartość l_{as} wskazuje na nierównomierny rozkład rozproszonego strumienia po obu stronach kierunku padania. Wartość zerowa oznacza natomiast równość całkowitych wkładów z obu półpłaszczyzn, choć sam rozkład kątowy nie musi być symetryczny.

Magnetyzacja łamie symetrię odwrócenia czasu, stwarzając warunki do wystąpienia asymetrycznego rozpraszania. Jego opis zależy jednak od zastosowanego przybliżenia. Dla kołowej kropki magnetycznej pierwsze przybliżenie Borna prowadzi do przekroju określonego równaniem (3.106). Zależność $q = 2k|\sin(\varphi/2)|$ sprawia, że przekrój ten jest funkcją parzystą kąta φ, wobec czego $l_{\mathrm{as}} = 0$. Opis niezerowej

asymetrii wymaga uwzględnienia wyższych rzędów rozpraszania. W metodzie fal cząstkowych asymetria może wynikać z interferencji kanałów o różnych momentach pędu.

Fizyczną interpretację oddziaływania magnetyzacji ze spinem elektronów powierzchniowych uzupełniają równania ruchu operatorów spinowych. Związek operatora prędkości z macierzami Pauliego podano w równaniu (4.25), a ich ewolucję w jednorodnym wnętrzu kropki, dla ustalonego wektora falowego, opisują równania (4.26). W zastosowanej reprezentacji spinowej efektywny wektor, wokół którego zachodzi precesja, zawiera wkłady pochodzące zarówno z części kinetycznej hamiltonianu, jak i oddziaływania wymiennego. Fizyczne składowe spinu wyznacza się za pomocą transformacji (4.6). Dla stanu własnego hamiltonianu wartość oczekiwana spinu pozostaje stała. Opis ruchu pakietu falowego wymaga ponadto uwzględnienia jego struktury przestrzennej oraz warunków na granicy obszaru magnetycznego, które wpływają na amplitudy i kierunki fal rozproszonych.

Istotnym parametrem charakteryzującym rozpraszanie jest ζ, zdefiniowany w równaniu (3.93), łączący siłę sprzężenia wymiennego z rozmiarem obszaru magnetycznego. Dla $|\zeta| \ll 1$ można stosować przybliżenie Borna, odpowiadające słabemu zaburzeniu. Przy silniejszym sprzężeniu właściwszy jest opis metodą fal cząstkowych, z uwzględnieniem zakresu energii, dla którego wyznaczono rozwiązania radialne. Na liczbę kanałów istotnych dla rozpraszania wpływa również iloczyn kR, określający stosunek rozmiaru kropki do charakterystycznej skali długości fali elektronu.

Wyniki analizy pokazują, że lokalna magnetyzacja może modyfikować kątowy rozkład elektronów rozproszonych na powierzchni izolatora topologicznego, prowadząc w określonych warunkach również do jego asymetrii. Wyznaczone amplitudy i przekroje odnoszą się do pojedynczego centrum rozpraszania. Obliczenie przewodnictwa makroskopowego układu zawierającego wiele kropek magnetycznych wymaga dodatkowego uwzględnienia ich koncentracji, rozkładu przestrzennego i orientacji magnetyzacji w odpowiednim modelu transportowym.

Zagadnienie rozpraszania elektronów powierzchniowych na lokalnych strukturach magnetycznych rozwinęli Wolski, Dugaev i Sherman [48], rozpatrując pojedyncze obszary magnetyzacji oraz struktury tworzące siatkę dyfrakcyjną. Przeanalizowali zależność przestrzennych rozkładów ładunku i spinu od energii elektronów, rozmiarów obszarów magnetycznych oraz ich magnetyzacji. Wyniki te rozszerzają opis możliwości kształtowania rozpraszania elektronów powierzchniowych za pomocą lokalnych struktur magnetycznych. Przy porównywaniu wyników należy uwzględnić różnice w stosowanych miarach asymetrii. W niniejszej pracy wielkość l_{as} jest określona przez różnicę przekrojów rozpraszania dla obu półpłaszczyzn, zgodnie z równaniem (3.124).

5.4 Nieuporządkowanie spinowo-orbitalne w dwuwymiarowym gazie elektronowym

Nieuporządkowanie spinowo-orbitalne w 2DEG jest opisane przestrzennymi fluktuacjami $\lambda(\mathbf{r})$ o zerowej średniej, zgodnie z równaniem (4.15). Warunek ten eliminuje jednorodny człon Rashby odpowiedzialny za rozszczepienie (4.13), ale nie eliminuje energii własnej wywołanej fluktuacjami. W zastosowanym rachunku uwzględniono przede wszystkim ich wpływ na poszerzenie stanów i odpowiedź transportową [25, 15, 6].

Element macierzowy (3.55) zawiera sumy składowych wektorów falowych oraz macierze σ_x i σ_y. W bazie stanów własnych σ_z człon ten łączy przeciwne polaryzacje spinowe. Nawet niewielka zmiana kierunku ruchu może więc zmieniać wkład elektronu do prądu składowej s_z. Wyjaśnia to, dlaczego relaksacja prądu spinowego nie podlega takiemu samemu osłabieniu dla małych kątów jak relaksacja prądu ładunkowego [6].

Statystykę fluktuacji określa korelator (4.16), którego parametrami są promień korelacji R i średni kwadrat amplitudy $\langle\lambda^2\rangle$. O rozkładzie kątowym decyduje bezwymiarowy iloczyn kR. Dla $kR \ll 1$ korelator słabo zależy od kąta, lecz całe prawdopodobieństwo rozpraszania zachowuje zależność kątową pochodzącą z elementu macierzowego. Dla $kR \gg 1$ tłumione są procesy o dużej zmianie wektora falowego. Wpływ R na całkowitą szybkość rozpraszania obejmuje również prefaktor R^2, a nie wyłącznie czynnik wykładniczy.

Wpływ rozpraszania zależy od tego, jaka wielkość transportowa jest analizowana. Czas życia stanu τ jest związany z poszerzeniem funkcji Greena i opisuje zanik informacji o stanie początkowym. Transportowy czas relaksacji τ_{tr} określa relaksację składowej odpowiedzialnej za prąd ładunkowy. Spinowy transportowy czas relaksacji $\tau_{s,\mathrm{tr}}$ dotyczy prądu spinowego. Odpowiednie wyrażenia zostały zapisane w równaniach (3.35), (3.51) oraz (3.64).

Różnice między czasami wynikają wprost z wag kątowych w powyższych całkach. Dla czasu życia pojawia się $1 + \cos\varphi$, dla relaksacji prądu ładunkowego $\sin^2\varphi$, a dla relaksacji prądu spinowego $(1 + \cos\varphi)^2$. Gdy $\varphi \to 0$, waga transportu ładunkowego zanika, podczas gdy pozostałe pozostają skończone. Procesy małokątowe mogą zatem skutecznie relaksować prąd spinowy przy znacznie słabszym wpływie na prąd ładunkowy. Wniosek ten wynika z operatorów użytych w modelu i nie stanowi uniwersalnej reguły dla dowolnego rodzaju prądu spinowego.

Przewodnictwo ładunkowe określa równanie (3.63), a spinowe równanie (3.65). Dodatnia waga $-f'(\varepsilon)$ wyznacza zakres energii uczestniczących w liniowej odpowiedzi. W gazie zdegenerowanym koncentruje się ona w otoczeniu potencjału chemicznego o szerokości rzędu $k_B T$; przy wyższej temperaturze nie można ograniczać interpretacji do stanów na powierzchni Fermiego. Zależność obu przewodnictw od temperatury

wynika z tego uśredniania oraz z energetycznej zależności odpowiednich czasów. Przy stałej koncentracji należy ponadto uwzględnić zmianę $\mu(T)$ [6].

Przewodnictwo spinowe w tym rachunku dotyczy odpowiedzi prądu składowej s_z, płynącego w kierunku x, na efektywne pole sprzężone z prądem spinowym. Nie jest ono współczynnikiem poprzecznego prądu spinowego indukowanego zwykłym polem elektrycznym. Zachowanie tej definicji jest konieczne przy porównywaniu wyników z literaturą dotyczącą spinowego efektu Halla lub akumulacji spinowej [6, 10]. Odmienne czasy transportowe oznaczają różną odpowiedź na zaburzenia zewnętrzne, nie zaś prostą równoważność pomiędzy przewodnictwem a czasem zaniku dowolnej polaryzacji spinowej.

W tym modelu losowe oddziaływanie Rashby jest jedynym uwzględnionym źródłem rozpraszania. Rozbieżność czasów w granicy zaniku skuteczności tego mechanizmu nie oznacza, że rzeczywista próbka zachowuje nieskończony czas życia: dodatkowe domieszki, fonony lub granice układu mogą ograniczać transport. Interpretacja wyników wymaga zachowania reżimu słabego nieuporządkowania i dominacji rozpatrywanych fluktuacji. Dla rzeczywistego, statycznego parametru $\lambda(\mathbf{r})$ oddziaływanie to zachowuje symetrię odwrócenia czasu, mimo że nie zachowuje ogólnie składowej s_z; pod tym względem różni się od pola wymiennego [15, 6].

5.5 Nieuporządkowanie magnetyczne na powierzchni izolatora topologicznego

Nieuporządkowanie magnetyczne na powierzchni TI opisuje przestrzenne fluktuacje pola wymiennego sprzężonego ze spinem elektronów powierzchniowych. W analizowanym modelu pole to jest reprezentowane przez składnik $M(\mathbf{r})\sigma_z$, wprowadzony w równaniu (4.17). Oznacza to, że zaburzenie działa na składową spinu prostopadłą do powierzchni i ma charakter losowego członu masowego hamiltonianu Diraca [7].

Przyjęty warunek (4.18) oznacza brak jednorodnego składnika pola wymiennego. W rozważanym przybliżeniu Borna oddziaływanie fluktuacji opisuje się przez energię własną i poprawki wierzchołkowe, a nie przez zastąpienie ich stałą masą m_0. Sama zerowa średnia nie dowodzi jednak braku zmian widma przy dowolnej sile nieuporządkowania. Parametrami tego konkretnego modelu są amplituda korelatora oznaczona przez $\langle M^2 \rangle$ oraz długość korelacji ξ, przy normalizacji określonej w podrozdziale 4.4.2.

Funkcję korelacji i jej reprezentację w przestrzeni wektorów falowych podano w równaniach (4.21) i (4.22). Dla elastycznego rozpraszania przy zadanym k zmiana wektora falowego ma wartość $q = 2k|\sin(\varphi/2)|$, a zmiana pędu wynosi $\hbar q$. Iloczyn $k\xi$ określa, czy korelator dopuszcza szeroki zakres kątów, czy ogranicza procesy do

małych kątów. Całkowite prawdopodobieństwo zawiera ponadto czynnik spinorowy zaburzenia magnetycznego, opisany w sekcji 5.2.

Każda niezerowa realizacja prostopadłego pola wymiennego łamie symetrię odwrócenia czasu. Nawet jeśli rozkład statystyczny jest symetryczny względem $M \to -M$, drugi moment pola pozostaje niezerowy i umożliwia rozpraszanie magnetyczne. Statystyczna symetria zespołu realizacji nie odtwarza zakazu rozpraszania wstecznego właściwego dla pojedynczego zaburzenia niemagnetycznego. Fluktuacje wpływają więc zarówno na szerokość stanów, jak i na relaksację prądu [13, 14, 7].

Uśredniona funkcja Greena ma postać (3.16). Parametr γ opisuje poszerzenie bieguna na rozpatrywanej gałęzi widma i jest wyznaczany przez projekcję macierzowej energii własnej, zgodnie z równaniem (3.40). Nie należy utożsamiać go z samą składową skalarną tej macierzy. Przy założeniu niezależności obu rodzajów nieuporządkowania wkłady magnetyczny i skalarny sumują się w przybliżeniu Borna według równania (3.38). Czas życia odpowiadający poszerzeniu określa zależność (3.18).

Opis przewodnictwa wymaga ponadto równania wierzchołkowego, ponieważ czas życia stanu nie zawiera pełnej informacji o relaksacji prądu. Końcowy wynik (3.66) zależy od γ i od parametru κ, zdefiniowanego w równaniu (3.60). Obie wielkości uwzględniają rozpraszanie magnetyczne i skalarne. Poprawka wierzchołkowa nie jest więc dodatkowym, niezależnym mechanizmem rozpraszania, lecz częścią spójnego rachunku odpowiedzi transportowej na to samo nieuporządkowanie [7].

Potencjał skalarny $V_0(\mathbf{r})\sigma_0$ nie obraca bezpośrednio spinu, lecz w helikalnym paśmie także jego prawdopodobieństwo rozpraszania zależy od spinorów. Oba rodzaje zaburzeń mogą zmieniać rozkład pędów i polaryzacji zajmowanych stanów, jednak z odmiennymi wagami kątowymi. Dlatego nie należy opisywać ich jako całkowicie rozdzielonych oddziaływań na część orbitalną i spinową. Różnica dotyczy macierzowej struktury operatora zaburzenia i wynikających z niej reguł przejść.

Kontrolę siły i charakteru rozpraszania zapewniają amplituda korelatora, długość ξ oraz natężenie nieuporządkowania skalarnego. Przy porównywaniu zmian parametrów trzeba równocześnie uwzględniać poszerzenie i wierzchołek. Zwiększenie jednego wkładu do energii własnej nie wystarcza do wyznaczenia pełnej zależności przewodnictwa. Model dotyczy podłużnej odpowiedzi powierzchniowej w zakresie stosowalności rachunku słabego nieuporządkowania, bez automatycznego rozszerzenia na reżim silnej lokalizacji lub transport przez sieć domen.

5.6 Znaczenie długości korelacji fluktuacji przestrzennych

Długość korelacji określa przestrzenny zasięg fluktuacji zaburzenia. W analizowanych modelach pojawia się w dwóch kontekstach: jako promień korelacji R losowego pola Rashby w 2DEG oraz jako długość korelacji ξ fluktuacji magnetyzacji na powierzchni TI. W obu przypadkach parametr ten decyduje, jakie wartości przekazu pędu są istotne w procesach rozpraszania. Porównanie długości korelacji z długością fali wymaga użycia kR lub $k\xi$; określenia krótkich i długich korelacji zawsze odnoszą się do energii analizowanych stanów.

W modelu 2DEG korelator (4.16) zawiera jednocześnie czynnik R^2 i funkcję wykładniczą zależną od qR. Przy ustalonych k i $\langle\lambda^2\rangle$ zwiększanie R zmienia zatem zarówno amplitudę widmową zaburzenia, jak i rozkład kątowy przejść. Dla $kR \ll 1$ zależność wykładnicza jest słaba, natomiast dla $kR \gg 1$ istotne pozostają głównie kąty rzędu $(kR)^{-1}$. Nie można z samego wygładzania pola w przestrzeni wnioskować, że każda szybkość relaksacji maleje [6].

Równania (3.35), (3.51) i (3.64) pokazują, jak różne wagi kątowe reagują na to zawężenie. Dla $kR \gg 1$ waga prądu ładunkowego jest mała w obszarze, w którym korelator ma największą wartość. Wagi czasu życia i prądu spinowego pozostają tam skończone. W efekcie τ_{tr} może rosnąć przy zwiększaniu kR, podczas gdy τ i $\tau_{s,\mathrm{tr}}$ maleją. W pracy [6] prowadzi to do niemonotonicznej zależności τ_{tr} od energii i odmiennego zachowania czasu transportu spinowego.

Konsekwencje dla przewodnictwa określają całki (3.63) i (3.65). Przy ustalonym rozkładzie Fermiego zwiększenie odpowiedniego czasu w całym istotnym przedziale energii zwiększa daną odpowiedź transportową. Jeżeli jednak zmienia się potencjał chemiczny lub temperatura, równocześnie zmieniają się wagi energetyczne. Nie można wtedy przenosić zależności pojedynczego czasu bezpośrednio na zależność przewodnictwa. Różnice między odpowiedzią ładunkową i spinową wynikają z całych jąder energetycznych, a nie wyłącznie z wartości czasu w jednym punkcie.

Na powierzchni TI korelator (4.22) zawiera analogiczną konkurencję pomiędzy prefaktorem ξ^2 a tłumieniem dużych q. Jej wynik zależy dodatkowo od czynnika spinorowego σ_z. Wnioski dotyczące zmiany ξ należy formułować przy określonych wartościach energii, amplitudy korelatora i nieuporządkowania skalarnego. Inne założenie o wielkości utrzymywanej na stałym poziomie mogłoby prowadzić do innej zależności szybkości rozpraszania.

Dla ustalonego niezerowego k i amplitudy $\langle M^2\rangle$ z projekcyjnego wzoru (3.41) wynika, że wkład magnetyczny zanika zarówno przy $k\xi \to 0$, jak i przy $k\xi \to \infty$. W pierwszej granicy zachowuje się proporcjonalnie do ξ^2, a w drugiej do ξ^{-1}. Drugą zależność otrzymuje się z asymptotyki różnicy $e^{-x}[I_0(x) - I_1(x)]$ dla dużego $x = 2k^2\xi^2$.

Skończone maksimum poszerzenia jest więc konsekwencją przyjętego korelatora i projekcji na gałąź widma. Nie przesądza ono o położeniu ekstremum przewodnictwa, które zależy także od κ i uśredniania energetycznego.

Wpływ ξ na przewodnictwo opisuje równanie (3.66). Zmiana tego parametru modyfikuje jednocześnie γ i κ, a obecność rozpraszania skalarnego ogranicza możliwość zaniku całkowitego poszerzenia. Przy interpretacji zależności temperaturowej należy ponadto rozróżnić $\xi(T)$ i ξ_0. Pierwsza wielkość występuje w korelatorze, druga jest graniczną długością korelacji przy zerowej temperaturze w modelu (4.24). Temperatura zmienia zatem zarówno obsadzenie stanów, jak i statystykę pola wymiennego [7].

W obu modelach długość korelacji kontroluje zakres zmian wektora falowego, lecz nie określa samodzielnie relaksacji. Dla pola Rashby i pola wymiennego występują odmienne elementy macierzowe oraz różne struktury wierzchołków prądowych. Przedstawione zależności odnoszą się do statycznego nieuporządkowania i zakresu, w którym uzasadnione jest przybliżenie Borna. W granicy bardzo słabego rozpraszania skończony rozmiar próbki może zmienić reżim transportu z dyfuzyjnego na balistyczny; formalnie duży czas transportowy nie uzasadnia wtedy bezwarunkowego stosowania opisu dyfuzyjnego [1, 9].

5.7 Czas relaksacji jako wielkość opisująca efektywność transportu

Czas życia stanu łączy opis mikroskopowy z funkcją spektralną. W obecności nieuporządkowania stan płaskofalowy układu niezaburzonego nie jest na ogół stanem własnym pełnego hamiltonianu. Jego skończony czas życia przejawia się poszerzeniem w uśrednionym propagatorze, opisanym dla 2DEG równaniem (3.11), a dla TI równaniem (3.16). Nie oznacza to zaniku dokładnego stanu własnego statycznego, hermitowskiego hamiltonianu. Rozróżnienie dotyczy stanu odniesienia użytego do opisu rozpraszania [19, 28].

Krótki czas życia oznacza dużą częstość przejść poza stan początkowy, ale nie określa samodzielnie szybkości zaniku prądu. W izotropowym opisie kinetycznym różnicę ujawniają równania (3.47) i (3.48): w drugim występuje dodatkowa waga $1-\cos\varphi$. Rozpraszanie małokątowe niewiele zmienia składową prędkości w kierunku przepływu, dlatego może dawać znaczny wkład do τ^{-1}, a mały do τ_{tr}^{-1}. Jest to standardowe rozróżnienie czasu życia i czasu transportowego [16, 49].

W modelu 2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby różnica ta jest widoczna bezpośrednio. Czas życia stanu opisuje równanie (3.35), natomiast transportowy czas relaksacji równanie (3.51). Oba wyrażenia zależą od tego samego korelatora

losowego pola Rashby, ale zawierają różne czynniki kątowe. W konsekwencji zmiana promienia korelacji R może inaczej wpływać na poszerzenie poziomów, a inaczej na przewodnictwo ładunkowe [6].

Transportowy czas relaksacji pojawia się w zrenormalizowanym wierzchołku prądowym, zapisanym w równaniu (3.50). Oznacza to, że τ_{tr} nie jest tylko parametrem fenomenologicznym. Jest wyznaczany przez równanie wierzchołkowe i opisuje relaksację prądu ładunkowego. Dlatego przewodnictwo ładunkowe w modelu losowego Rashby zależy od τ_{tr}, zgodnie z równaniem (3.63).

Dla transportu spinowego odrębną wielkością jest $\tau_{s,\mathrm{tr}}$ z równania (3.64). Charakteryzuje on zanik rozpatrywanego prądu spinowego i uwzględnia zmianę zarówno ruchu, jak i polaryzacji spinowej. Nie jest z definicji czasem zaniku przestrzennie jednorodnej akumulacji spinowej ani jednym z fenomenologicznych czasów T_1 i T_2. Takie utożsamienie wymagałoby oddzielnego rozwiązania dynamiki odpowiedniej składowej spinu. W publikacji [6] czas transportu spinowego odróżniono od czasu życia stanu i od relaksacji polaryzacji.

Dla stanów powierzchniowych izolatora topologicznego zależność między czasem życia a szerokością bieguna funkcji Greena określa równanie (3.18). Przy założeniu niezależności pól rozpraszających, w rozpatrywanym rzędzie rachunku zaburzeń, poszczególne wkłady do γ sumują się zgodnie z równaniem (3.38). Nie prowadzi to jednak bezpośrednio do addytywności oporności, ponieważ oba mechanizmy rozpraszania należy uwzględnić również w równaniu wierzchołkowym [7].

W zastosowanym opisie macierzowym przewodnictwo powierzchniowe TI zależy od parametrów γ i κ, które uwzględniają odpowiednio poszerzenie stanów elektronowych oraz poprawki wierzchołkowe. Alternatywnie, w opisie kinetycznym można posługiwać się efektywnym czasem relaksacji odpowiedniej harmonicznej rozkładu, o ile pozwalają na to przyjęte przybliżenia. Poprawki wierzchołkowe występują także w przypadku rozpraszania na potencjale skalarnym, co wynika z granicy (3.67). Nie są więc związane wyłącznie z obecnością nieuporządkowania magnetycznego.

W analizowanych modelach należy rozróżnić czas życia stanu elektronowego oraz czasy charakteryzujące relaksację prądu ładunkowego i spinowego. Czas życia stanu nie jest przy tym tożsamy z czasem utraty koherencji fazowej. Rozpraszanie elastyczne na statycznym nieuporządkowaniu prowadzi do zmiany pędu elektronu, ale samo w sobie nie stanowi mechanizmu nieelastycznej dekoherencji. O możliwości zastosowania opisu dyfuzyjnego decyduje relacja między rozmiarami układu a transportową drogą swobodną, natomiast długość koherencji fazowej określa skalę przestrzenną, na której istotne pozostają efekty interferencyjne [1, 49].

5.8 Porównanie mechanizmów rozpraszania w analizowanych układach

Analizie porównawczej poddano cztery zagadnienia transportowe, w których zastosowano różne warunki brzegowe i metody uśredniania. Dla 2DEG zaburzeniem jest losowe pole Rashby. Na powierzchni TI rozpatruje się zadany profil bariery, statystycznie opisane pole wymienne z dodatkowym nieuporządkowaniem skalarnym oraz pojedynczą kropkę magnetyczną. W każdym przypadku struktura spinowa jest istotna, lecz obliczane wielkości nie są tożsame [5, 6, 7, 8].

W dwuwymiarowym gazie elektronowym (2DEG) rozpraszanie wywołane przestrzennymi fluktuacjami sprzężenia Rashby opisuje element macierzowy (3.55). Przewodnictwo ładunkowe i spinowe wyznacza się na podstawie odpowiednich czasów relaksacji transportowej, τ_{tr} i $\tau_{s,\mathrm{tr}}$, zgodnie z równaniami (3.63) i (3.65). Wielkości te charakteryzują różne odpowiedzi liniowe układu, związane z właściwymi dla nich zaburzeniami zewnętrznymi.

W przypadku bariery magnetycznej analizuje się transmisję i odbicie elektronów na określonej strukturze. Prawdopodobieństwo transmisji $T(\mathbf{k})$, obliczone na podstawie amplitudy $t(\mathbf{k})$ z uwzględnieniem normalizacji strumieni, służy do wyznaczenia przewodnictwa zgodnie z równaniem (3.90). Charakter transportu zależy od warunków propagacji, interferencji fal elektronowych oraz liczby i obsadzenia dostępnych kanałów. W odróżnieniu od modeli statystycznie jednorodnego nieuporządkowania transport przez barierę opisuje się bezpośrednio za pomocą współczynników transmisji i odbicia [5].

W modelu izolatora topologicznego z losową magnetyzacją przewodnictwo powierzchniowe oblicza się po uśrednieniu po konfiguracjach potencjału (4.17). Rachunek uwzględnia zarówno poszerzenie stanów elektronowych, jak i poprawki wierzchołkowe. Analiza pozwala określić zależność przewodnictwa od energii i temperatury, a także amplitudy i długości korelacji fluktuacji pola wymiennego oraz natężenia nieuporządkowania skalarnego [7].

Rozpraszanie elektronów na pojedynczej kropce magnetycznej stanowi odrębne zagadnienie. Ze względu na skończone rozmiary obiektu i przestrzenny rozkład magnetyzacji istotne są amplituda rozpraszania oraz przekroje czynne, które określają kątowy rozkład rozproszonych elektronów. Pełne rozwiązanie pozwala również uwzględnić asymetrię rozpraszania. Wyznaczenie przewodnictwa układu zawierającego wiele takich obiektów wymagałoby dodatkowego opisu ich rozmieszczenia i mechanizmów transportu [8].

Wspólnym elementem modeli jest zależność przejść od struktury spinorowej stanów i operatora zaburzenia. Dla losowego Rashby istotne są jednocześnie składowe wektorów falowych i macierze Pauliego, natomiast dla pola wymiennego na TI —

Tabela 5.1: Porównanie mechanizmów rozpraszania i wielkości obliczanych w analizowanych modelach [5, 6, 7, 8].

Układ	Źródło rozpraszania	Konsekwencja fizyczna	Obliczane wielkości
2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby	Fluktuacje $\lambda(\mathbf{r})$	Odmienna relaksacja prądu ładunkowego i spinowego	τ, τ_{tr}, $\tau_{s,\mathrm{tr}}$; σ, σ_s
TI z barierą magnetyczną	Zadany profil $m(x)$	Tunelowanie, interferencja i rezonanse transmisji	$t(\mathbf{k})$, $T(\mathbf{k})$, G
TI z losową magnetyzacją	Fluktuacje $M(\mathbf{r})$ i potencjał skalarny $V_0(\mathbf{r})$	Poszerzenie stanów i relaksacja prądu	γ, τ, κ; σ_{xx}
TI z lokalną strukturą magnetyczną	Pojedyncza kropka lub domena magnetyczna	Zmiana rozkładu kątowego; możliwa asymetria poza pierwszym przybliżeniem Borna	$\mathbf{f}(\varphi)$, $dl/d\varphi$, l, l_{as}

elementy macierzowe magnetyzacji pomiędzy stanami helikalnymi. Informacji tej nie zastępuje sama amplituda pola ani liczba dostępnych stanów. Wagi kątowe i warunki propagacji decydują, w jaki sposób zaburzenie modyfikuje konkretną obserwablę.

Różnice zestawione w tabeli 5.1 wyznaczają zakres porównań ilościowych. Przewodność struktury transmisyjnej, przewodnictwo jednorodnego statystycznie układu i przekrój rozpraszania na pojedynczej kropce mają odmienne definicje oraz normalizacje. Porównanie mechanizmów dotyczy wpływu amplitudy, zasięgu przestrzennego i struktury spinowej oddziaływania na te wielkości. Nie wymaga utożsamiania przekroju rozpraszania z przewodnictwem ani stosowania jednego czasu relaksacji do wszystkich rozpatrywanych geometrii.

Rozdział 6

Zbiorcza analiza wyników transportowych

W rozdziale przedstawiono zbiorczą analizę wyników otrzymanych dla powierzchni izolatora topologicznego z barierą magnetyczną, dwuwymiarowego gazu elektronowego z losowym oddziaływaniem Rashby, powierzchni izolatora topologicznego z losową magnetyzacją oraz lokalnej struktury magnetycznej na powierzchni TI [5, 6, 7, 8]. W odróżnieniu od wcześniejszych rozdziałów, w których przedstawiono modele i metody obliczeniowe, w tej części punktem wyjścia są zależności otrzymanych wielkości od parametrów fizycznych układu.

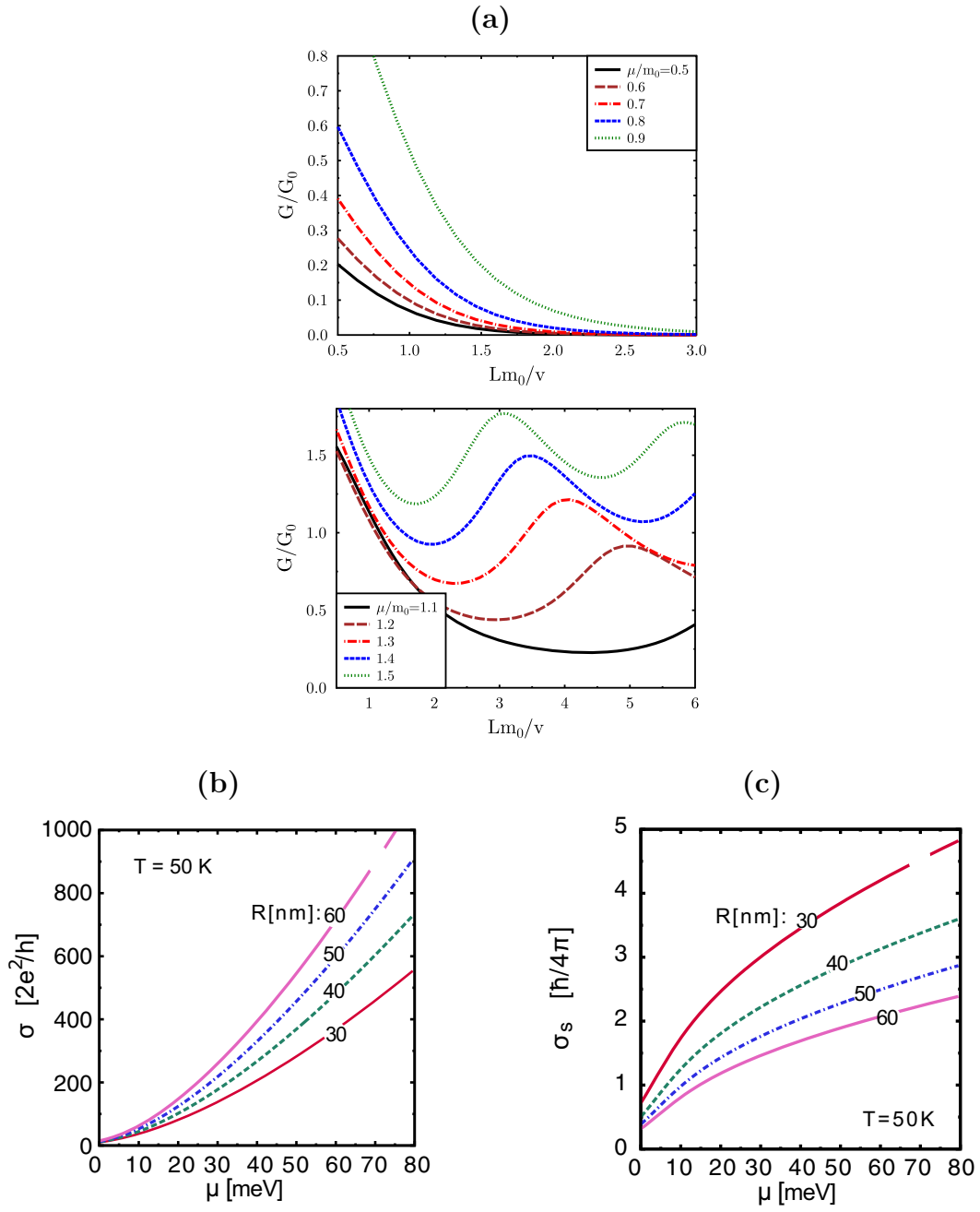
Analiza została uporządkowana według parametrów wpływających na otrzymane wyniki. Rozpatrzono kolejno zależności od energii nośników, magnetyzacji oraz parametrów nieuporządkowania przestrzennego. Następnie zestawiono reżimy transportu występujące w analizowanych modelach oraz zależności pomiędzy czasami relaksacji a przewodnictwem ładunkowym i spinowym.

W poszczególnych modelach analizowane są różne wielkości fizyczne: przewodnictwo, prawdopodobieństwo transmisji, czasy relaksacji oraz przekroje rozpraszania. Ich wartości nie są zatem porównywane bezpośrednio. Zestawienie służy określeniu, w jaki sposób zmiana danego parametru fizycznego wpływa na wielkość właściwą dla konkretnego modelu oraz które cechy obserwowanych zależności wynikają z mechanizmu transportowego występującego w danym układzie.

6.1 Wpływ parametrów energetycznych na transport

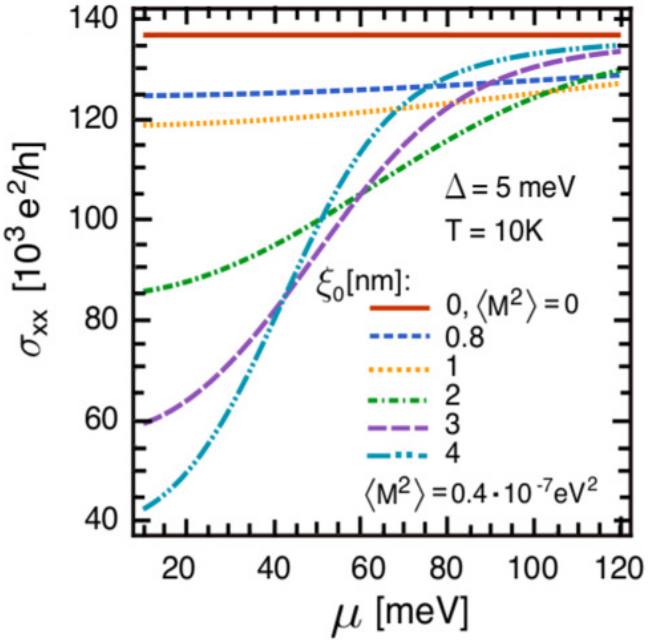
Energia nośników wpływa na wszystkie analizowane układy, jednak jej znaczenie zależy od rodzaju rozpatrywanego procesu. W układach opisanych w ramach odpowiedzi liniowej położenie potencjału chemicznego określa zakres stanów uczestniczących

w przewodzeniu, natomiast w strukturze z barierą magnetyczną energia decyduje dodatkowo o charakterze stanów wewnątrz obszaru magnetycznego. W przypadku lokalnej struktury magnetycznej energia elektronu określa natomiast wektor falowy stanu padającego i przez to wpływa na charakterystykę rozpraszania. Zestawienie odpowiednich zależności przedstawiono na rysunku 6.1.

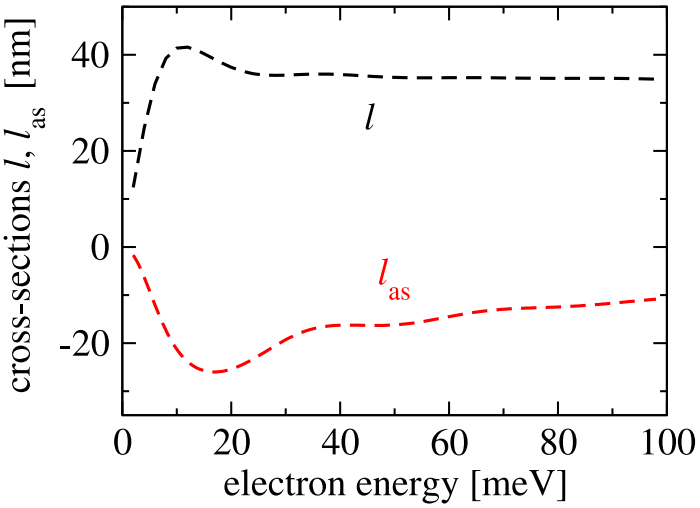


Rysunek 6.1: Wpływ parametrów energetycznych na transport i rozpraszanie. (a) Przewodnictwo przez barierę magnetyczną na powierzchni izolatora topologicznego w funkcji Lm_0/v dla różnych μ/m_0: górny wykres – $\mu < m_0$, dolny – $\mu > m_0$. Zachowano normalizację publikacji źródłowej, $G_0 = e^2/\hbar$. Przedruk rys. 4 z pracy P. R. Rzeszutko, S. Kudła, V. K. Dugaev, *Phys. Status Solidi B* **254**, 1600685 (2017), © 2017 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. (b) Przewodnictwo ładunkowe i (c) przewodnictwo spinowe w 2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby w funkcji potencjału chemicznego. Przedruk odpowiednio rys. 2(a) i 4(a) z pracy S. Kudła i wsp., *Phys. Rev. B* **97**, 245307 (2018), © 2018 American Physical Society. Oznaczenia paneli dostosowano do zestawienia.

(d)



(e)



Rysunek 6.1: Wpływ parametrów energetycznych na transport i rozpraszanie – ciąg dalszy. (d) Przewodnictwo powierzchniowe izolatora topologicznego z losową magnetyzacją w funkcji potencjału chemicznego dla różnych ξ_0. Przedruk rys. 3(c) z pracy S. Kudła i wsp., *Phys. Rev. B* **100**, 205428 (2019), © 2019 American Physical Society. (e) Całkowity przekrój rozpraszania l oraz asymetryczny przekrój rozpraszania l_{as} w funkcji energii elektronu dla magnetycznej kropki na powierzchni izolatora topologicznego. Dla kropki magnetycznej przyjęto $R = 10\,\text{nm}$, $gM_0 = 100\,\text{meV}$ i $v = 2.5\,\text{eVÅ}$; wyniki uzyskano metodą fal cząstkowych. Przedruk rys. 3 z pracy S. Kudła i wsp., *Solid State Communications* **342**, 114555 (2022), © 2021 Elsevier Ltd. Oznaczenia paneli dostosowano do zestawienia.

W przypadku bariery magnetycznej na powierzchni TI energia nośników określa charakter rozwiązań wewnątrz obszaru magnetycznego. Warunek istnienia stanów propagujących został wyprowadzony wcześniej w równaniu (3.88). W ogólnym przypadku zależy on zarówno od energii elektronu, jak i od zachowanej składowej k_y wektora falowego. Dla normalnego padania, $k_y = 0$, granica pomiędzy rozwiązaniami ewanescentnymi i propagującymi odpowiada $|\varepsilon| = |m_0|$.

Zależności przedstawione na rysunku 6.1(a) ilustrują konsekwencje tej zmiany dla przewodnictwa. W zakresie $\mu/m_0 < 1$ brak stanów propagujących wewnątrz obszaru magnetycznego prowadzi do silnego tłumienia przewodnictwa wraz ze wzrostem długości bariery. Dla $\mu/m_0 > 1$ dostępny staje się zakres kanałów propagacyjnych. Odbicia na obu granicach obszaru magnetycznego prowadzą wówczas do zależności oscylacyjnej od Lm_0/v. Wzrost energii nie powoduje więc jedynie ilościowego zwiększenia przewodnictwa, lecz zmienia charakter jego zależności od długości struktury [5].

Dla 2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby przewodnictwo ładunkowe przedstawione na rysunku 6.1(b) wzrasta wraz z potencjałem chemicznym w analizowanym zakresie parametrów. Zależność ta wynika z łącznego udziału czynnika energetycznego, transportowego czasu relaksacji i funkcji $-f'(\varepsilon)$ w równaniu (3.63). Zmiana μ przesuwa zakres energii stanów wnoszących wkład do przewodnictwa, a wraz z nim zmieniają się kinematyczne i relaksacyjne składniki odpowiedzi. Wzrostu przewodnictwa nie należy zatem utożsamiać wyłącznie ze wzrostem τ_{tr} [6].

Przewodnictwo spinowe, pokazane na rysunku 6.1(c), również wykazuje zależność od potencjału chemicznego, lecz jest określone przez spinowy transportowy czas relaksacji $\tau_{s,\mathrm{tr}}$, zgodnie z równaniem (3.65). W analizowanym zakresie σ_s rośnie ze wzrostem μ. Zależność ta nie powinna być jednak interpretowana jako bezpośredni odpowiednik wzrostu przewodnictwa ładunkowego, ponieważ oba prądy są relaksowane przez różne kombinacje procesów rozpraszania. Szczegółowe porównanie τ_{tr} i $\tau_{s,\mathrm{tr}}$ przedstawiono w dalszej części rozdziału.

Rodziny krzywych na rysunkach 6.1(b) i 6.1(c) wskazują ponadto, że energetyczna zależność obu rodzajów przewodnictwa jest sprzężona z promieniem korelacji fluktuacji Rashby. Rola parametru R nie jest jednak przedmiotem tej sekcji i zostanie przeanalizowana oddzielnie w sekcji 6.3.

Dla niezerowej amplitudy fluktuacji magnetyzacji krzywe na rysunku 6.1(d) wykazują wzrost przewodnictwa wraz z potencjałem chemicznym w przedstawionym zakresie. Krzywa referencyjna dla $\langle M^2 \rangle = 0$ pozostaje w tym zakresie w przybliżeniu stała. Zależność ta jest wynikiem energetycznej zależności wielkości wchodzących do wyrażenia (3.66), w szczególności poszerzenia stanów oraz poprawki wierzchołkowej. Zmiana μ wpływa więc jednocześnie na stany uczestniczące w przewodzeniu oraz na efektywność relaksacji prądu wywołanej rozpraszaniem [7].

Krzywe odpowiadające różnym wartościom ξ_0 na rysunku 6.1(d) pokazują, że

wpływ korelacji magnetyzacji zależy od potencjału chemicznego. Dla małych μ większym wartościom ξ_0 odpowiada niższe przewodnictwo, lecz wraz ze wzrostem μ część krzywych przecina się i ich kolejność ulega zmianie. Nie można więc przypisać zwiększaniu ξ_0 jednego kierunku zmiany przewodnictwa w całym pokazanym zakresie energii. Wpływ długości korelacji zostanie omówiony szczegółowo w sekcji 6.3.

Odmienną wielkość analizuje się dla lokalnej struktury magnetycznej na powierzchni TI. W tym przypadku rysunek 6.1(e) przedstawia całkowity przekrój rozpraszania l oraz asymetryczny przekrój rozpraszania l_{as} jako funkcje energii elektronu. Nie jest to zatem zależność przewodnictwa makroskopowego, lecz charakterystyka rozpraszania na pojedynczym obiekcie magnetycznym.

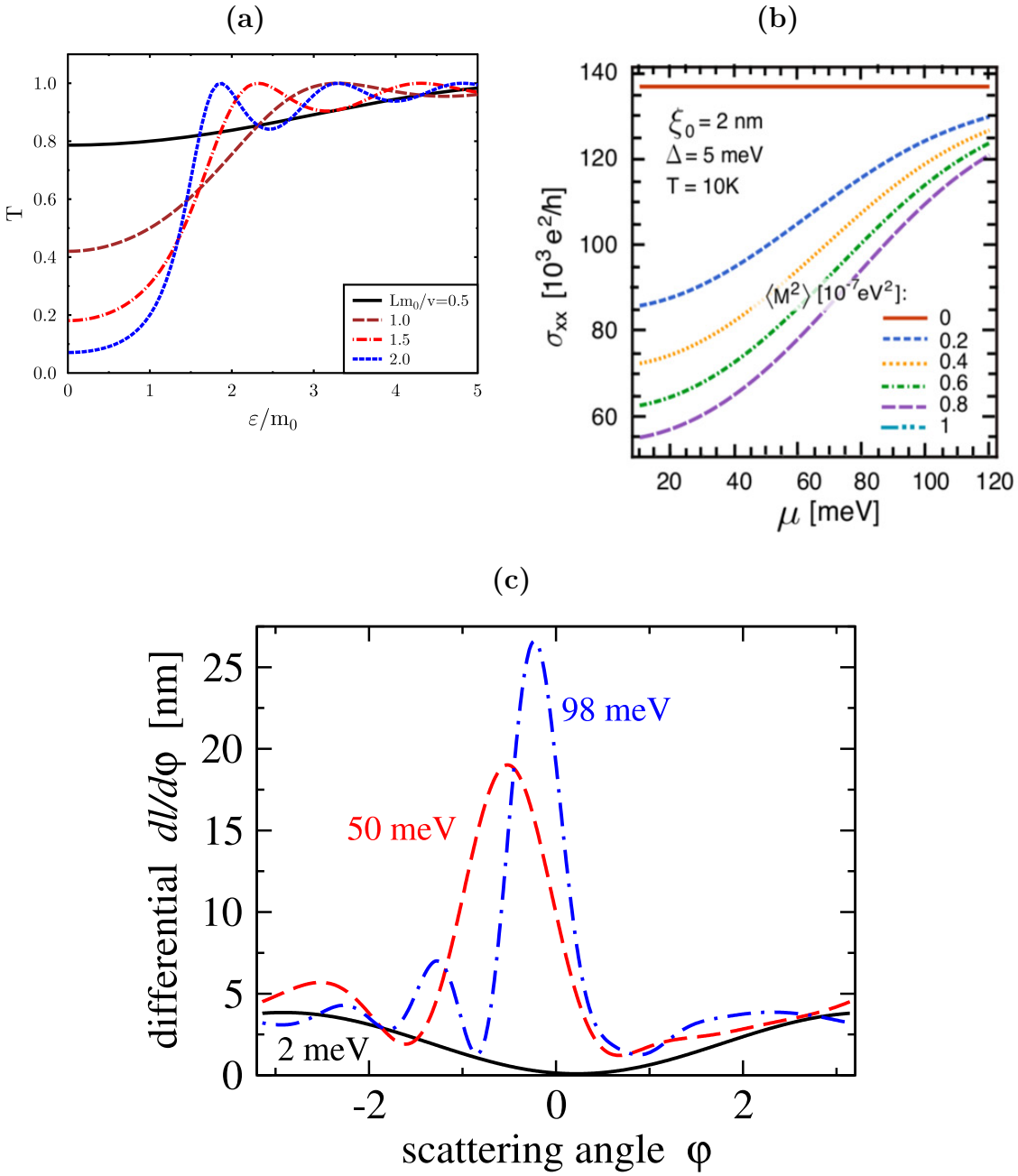
Zmiana energii prowadzi do zmiany zarówno całkowitego przekroju, jak i asymetrycznego przekroju rozpraszania. Oznacza to, że energia stanu padającego wpływa nie tylko na całkowitą intensywność rozpraszania, lecz również na jego asymetrię kątową [8]. Wynik ten należy interpretować na poziomie pojedynczego centrum rozpraszającego; wyznaczenie makroskopowych właściwości transportowych układu zawierającego wiele takich struktur wymagałoby dodatkowego uwzględnienia ich koncentracji i rozmieszczenia.

Zestawienie wyników na rysunku 6.1 pokazuje, że zależność od energii pełni odmienną funkcję w poszczególnych modelach. W barierze magnetycznej zmiana energii może prowadzić do zmiany charakteru stanów w obszarze magnetycznym i w konsekwencji do przejścia od tłumionej transmisji do reżimu z kanałami propagacyjnymi. W układach z nieuporządkowaniem zmiana potencjału chemicznego modyfikuje wartości czasów relaksacji i przewodnictwa. Dla lokalnej struktury magnetycznej energia określa natomiast charakterystykę rozpraszania na pojedynczym obiekcie.

6.2 Wyniki transportowe dla różnych profili magnetyzacji

Zestawienie na rysunku 6.2 porównuje wyniki dla trzech przestrzennych realizacji oddziaływania magnetycznego na powierzchni TI. Poszczególne panele przedstawiają jednak odmienne zmiany parametrów: zależność transmisji od energii przy różnych wartościach Lm_0/v, wpływ amplitudy fluktuacji magnetycznych na przewodnictwo oraz energetyczną zależność rozkładu kątowego rozpraszania. Zestawienie służy więc porównaniu odpowiedzi różnych struktur magnetycznych, a nie wyznaczeniu jednakowo zdefiniowanej zależności od amplitudy magnetyzacji [5, 7, 8].

W modelu bariery magnetycznej magnetyzacja jest ograniczona do skończonego obszaru powierzchni TI. Jej wpływ na transmisję jest związany ze zmianą widma elektronów wewnątrz tego obszaru oraz z dopasowaniem spinorowych funkcji falo-



Rysunek 6.2: Wyniki dla różnych profili magnetyzacji na powierzchni izolatora topologicznego. (a) Prawdopodobieństwo transmisji przy normalnym padaniu w funkcji energii ε/m_0 dla różnych wartości bezwymiarowej długości bariery Lm_0/v. Przedruk rys. 2 z pracy P. R. Rzeszutko, S. Kudła, V. K. Dugaev, *Phys. Status Solidi B* **254**, 1600685 (2017), © 2017 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. (b) Przewodnictwo powierzchniowe w obecności losowej magnetyzacji w funkcji potencjału chemicznego dla różnych wartości $\langle M^2 \rangle$, przy pozostałych parametrach podanych na wykresie. Przedruk rys. 3(d) z pracy S. Kudła i wsp., *Phys. Rev. B* **100**, 205428 (2019), © 2019 American Physical Society. (c) Różniczkowy przekrój rozpraszania na magnetycznej kropce w funkcji kąta rozpraszania dla trzech energii elektronu. Przedruk rys. 4 z pracy S. Kudła i wsp., *Solid State Communications* **342**, 114555 (2022), © 2021 Elsevier Ltd. Oznaczenia paneli dostosowano do zestawienia.

wych na jego granicach. Szczegółowy profil bariery został zdefiniowany wcześniej w równaniu (3.69), a warunek istnienia stanów propagujących w równaniu (3.88).

Na rysunku 6.2(a) przedstawiono prawdopodobieństwo transmisji jako funkcję energii elektronu dla różnych wartości parametru Lm_0/v. W zakresie, w którym w obszarze magnetycznym nie istnieją stany propagujące, transmisja jest silnie tłumiona, a wzrost długości bariery dodatkowo zmniejsza jej wartość. Po przekroczeniu progu propagacji pojawiają się natomiast oscylacje transmisji związane z interferencją fal wewnątrz obszaru magnetycznego. Zwiększenie Lm_0/v zmienia położenia maksimów i minimów, co odzwierciedla zmianę fazy gromadzonej podczas propagacji przez obszar magnetyczny [5].

Parametr Lm_0/v łączy długość bariery ze skalą energetyczną członu magnetycznego. Przy ustalonym m_0 jego zmiana odpowiada zmianie długości obszaru. Nie jest to jednak ogólnie równoważne zmianie m_0 przy ustalonej energii elektronu, ponieważ taka zmiana modyfikuje również stosunek ε/m_0 i warunek propagacji. Interpretacja rodziny krzywych wymaga zatem wskazania, które parametry fizyczne pozostają stałe.

Inny charakter ma wpływ magnetyzacji losowej. W tym przypadku nie występuje pojedynczy obszar magnetyczny, lecz przestrzennie fluktuujący człon $M(\mathbf{r})\sigma_z$. Średnia wartość magnetyzacji zanika, natomiast jej intensywność jest opisana przez parametr amplitudy korelatora $\langle M^2 \rangle$. Przewodnictwo powierzchniowe zależy od poszerzenia stanów oraz poprawki wierzchołkowej występujących w równaniu (3.66) [7].

Na rysunku 6.2(b) wzrostowi $\langle M^2 \rangle$ odpowiada obniżenie przewodnictwa w analizowanym zakresie potencjału chemicznego. Zmiana ta jest zgodna ze wzrostem wkładu rozpraszania magnetycznego do relaksacji stanów powierzchniowych. Nie jest ona jednak opisana wyłącznie przez zmianę czasu życia stanu, ponieważ końcowa wartość przewodnictwa zawiera również poprawkę wierzchołkową. Wzrost amplitudy fluktuacji wpływa zatem jednocześnie na poszerzenie stanów oraz na renormalizację odpowiedzi prądowej.

Wpływ amplitudy magnetyzacji należy przy tym oddzielić od wpływu jej długości korelacji. Krzywe przedstawione na rysunku 6.2(b) charakteryzują zmianę przewodnictwa wywołaną zmianą $\langle M^2 \rangle$, natomiast zależność od przestrzennej skali fluktuacji zostanie przeanalizowana osobno w sekcji 6.3.

W przypadku lokalnej struktury magnetycznej analizowana wielkość ma inne znaczenie fizyczne. Nie wyznacza się tu makroskopowego przewodnictwa układu rozciągłego, lecz charakterystykę rozpraszania na pojedynczym obiekcie magnetycznym. Profil struktury został określony wcześniej w równaniu (3.92). Na rysunku 6.2(c) przedstawiono różniczkowy przekrój rozpraszania dla kilku wartości energii elektronu.

Rozkład kątowy nie jest izotropowy, a jego kształt zmienia się wraz z energią stanu padającego. Oznacza to, że lokalna magnetyzacja modyfikuje nie tylko całkowite

prawdopodobieństwo rozpraszania, lecz także względny udział poszczególnych kierunków wyjściowych. W rozpatrywanym modelu jest to bezpośrednia charakterystyka pojedynczego centrum rozpraszającego, a nie przewodnictwa całej próbki [8].

Znaczenie różnic między geometrią bariery, statystyką pola losowego i lokalnym centrum rozpraszającym omówiono w podrozdziale 7.2.

6.3 Wpływ nieuporządkowania i długości korelacji na transport

Wpływ nieuporządkowania przestrzennego analizowano w dwóch układach: dwuwymiarowym gazie elektronowym z losowym oddziaływaniem Rashby oraz na powierzchni TI z losową magnetyzacją [6, 7]. W obu przypadkach średnia wartość losowego pola zanika, natomiast jego wpływ na transport jest określony przez statystyczne własności fluktuacji, w szczególności ich amplitudę i długość korelacji.

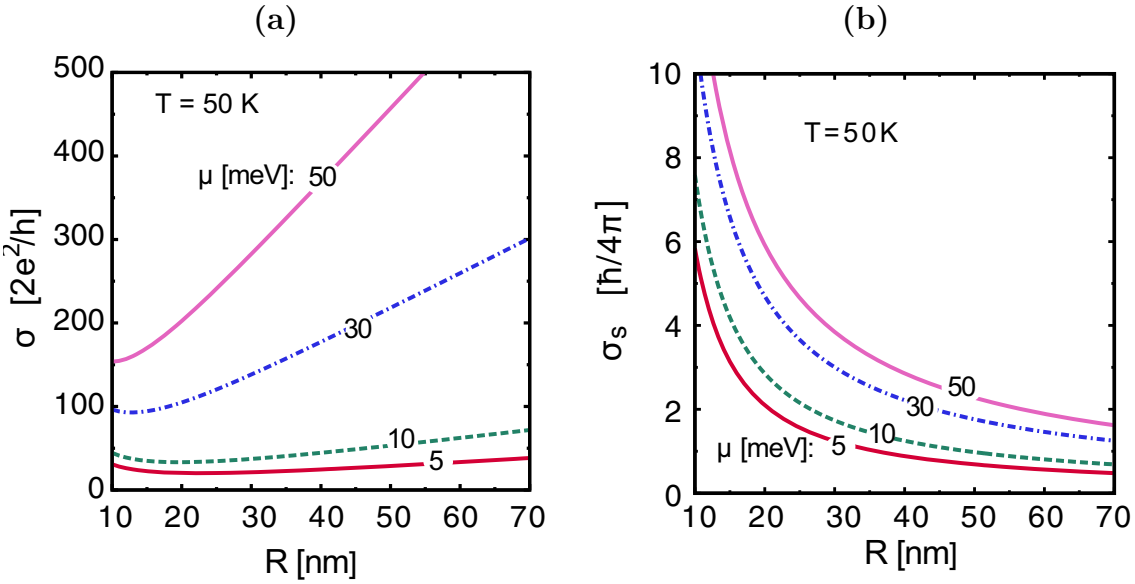
Rysunek 6.3 przedstawia zależności przewodnictwa ładunkowego i spinowego od promienia korelacji R w modelu losowego oddziaływania Rashby. Wpływ parametru ξ_0 w modelu losowej magnetyzacji ilustrują natomiast krzywe przewodnictwa w funkcji μ na rysunku 6.1(d). Parametry R i ξ_0 opisują różne rodzaje nieuporządkowania i nie są wielkościami bezpośrednio równoważnymi. W dalszej analizie rozpatrywany jest wpływ każdego z nich na odpowiedź transportową właściwą dla danego modelu.

W modelu 2DEG przestrzenną strukturę fluktuacji oddziaływania Rashby opisuje korelator wprowadzony w równaniu (4.16). Promień korelacji R wpływa na rozkład prawdopodobieństwa procesów $\mathbf{k} \to \mathbf{k}'$ o różnych przekazach pędu. Dla większych wartości kR względnie silniej tłumione są procesy związane z dużą zmianą wektora falowego, a większe znaczenie uzyskuje rozpraszanie małokątowe. Jednocześnie zmiana R wpływa również na prefaktor korelatora w reprezentacji pędowej, dlatego jej skutków nie można sprowadzić wyłącznie do zmiany rozkładu kątowego rozpraszania.

Przy ustalonej wartości $\langle\lambda^2\rangle$ zmiana prefaktora R^2 dotyczy korelatora w reprezentacji pędowej. Nie oznacza zwiększenia lokalnego średniego kwadratu pola Rashby, lecz zmianę jego korelacji przestrzennych i rozkładu wagi względem przekazu pędu.

Zależność przewodnictwa ładunkowego od R przedstawiono na rysunku 6.3(a). Nie jest ona monotonicznie rosnąca w całym pokazanym zakresie. Zwłaszcza dla mniejszych wartości potencjału chemicznego widoczny jest początkowy spadek przewodnictwa, minimum, a następnie wzrost. Położenie minimum i zakres obserwowanego wzrostu zależą od μ. Zmiana μ wpływa na wektor falowy stanów uczestniczących w przewodzeniu, a tym samym na wartość bezwymiarowego parametru kR. Energetyczna i przestrzenna skala problemu są więc ze sobą powiązane.

Przewodnictwo ładunkowe jest związane z transportowym czasem relaksacji τ_{tr},



Rysunek 6.3: Wpływ promienia korelacji R na przewodnictwo w dwuwymiarowym gazie elektronowym z losowym oddziaływaniem Rashby. (a) Przewodnictwo ładunkowe i (b) przewodnictwo spinowe jako funkcje R dla różnych wartości potencjału chemicznego μ, przy temperaturze $T = 50\,\mathrm{K}$. Panele (a) i (b) przedrukowano odpowiednio z rys. 2(b) i 4(b) pracy S. Kudła, A. Dyrdał, V. K. Dugaev, E. Ya. Sherman, J. Barnaś, *Phys. Rev. B* **97**, 245307 (2018). © 2018 American Physical Society. Oznaczenia paneli dostosowano do zestawienia.

zgodnie z równaniem (3.63). Pojedynczy proces małokątowy słabiej zmienia kierunek ruchu elektronu niż rozpraszanie pod dużym kątem. Sama zmiana względnego udziału takich procesów nie przesądza jednak o monotonicznym wzroście przewodnictwa ze wzrostem R. Zależność tę należy interpretować z uwzględnieniem pełnej postaci korelatora, obejmującej zarówno prefaktor, jak i zależność od przekazu pędu [6].

Odmienną zależność od promienia korelacji wykazuje przewodnictwo spinowe, przedstawione na rysunku 6.3(b). W analizowanym zakresie większe wartości σ_s odpowiadają mniejszym wartościom R, natomiast zwiększanie promienia korelacji prowadzi do obniżenia przewodnictwa spinowego. Wielkość ta jest związana ze spinowym transportowym czasem relaksacji $\tau_{s,\mathrm{tr}}$, występującym w równaniu (3.65).

Różne zależności σ i σ_s od tego samego parametru R wskazują, że zmiana przestrzennej struktury fluktuacji Rashby nie wpływa jednakowo na relaksację prądu ładunkowego i spinowego. Nie oznacza to przy tym prostego związku pomiędzy wartością przewodnictwa spinowego i częstością rozpraszania. Odpowiedź spinowa zależy od odpowiedniego transportowego czasu relaksacji, którego struktura uwzględnia spinowy charakter elementów macierzowych rozpraszania. Szczegółowe porównanie τ, τ_{tr} i $\tau_{s,\mathrm{tr}}$ przedstawiono w dalszej części rozdziału.

W modelu powierzchni TI przestrzenny zasięg fluktuacji magnetyzacji opisuje długość korelacji ξ. Jeżeli uwzględniono zależność temperaturową (4.24), w korelatorze

występuje $\xi(T)$, natomiast ξ_0 jest jej wartością graniczną przy $T \to 0$. Rodziny krzywych oznaczone różnymi wartościami ξ_0 należy interpretować z uwzględnieniem temperatury i skali energii Δ przyjętych w obliczeniach. Parametrów ξ i ξ_0 nie należy utożsamiać poza granicą, w której $\xi(T) \simeq \xi_0$.

Wpływ ξ_0 na przewodnictwo powierzchniowe ilustruje rodzina krzywych na rysunku 6.1(d). Oś pozioma przedstawia potencjał chemiczny μ, natomiast ξ_0 jest parametrem poszczególnych krzywych. Dla małych μ większym wartościom ξ_0 odpowiada niższe przewodnictwo. Przy większych μ część krzywych przecina się, dlatego wniosek o obniżaniu przewodnictwa ze wzrostem ξ_0 nie obowiązuje w całym pokazanym zakresie.

Przewodnictwo w tym modelu jest określone przez poszerzenie stanów oraz poprawkę wierzchołkową, zgodnie z równaniem (3.66). Zmiana ξ_0 wpływa na obie te wielkości poprzez korelator fluktuacji magnetycznych. Zmian przewodnictwa przy zmianie ξ_0 nie należy zatem interpretować jako prostego wzrostu lub spadku "siły rozpraszania", lecz jako wynik łącznej zmiany poszerzenia stanów i renormalizacji wierzchołka prądowego [7].

Porównanie rysunku 6.3(a),(b) z rysunkiem 6.1(d) pokazuje, że wpływ długości korelacji zależy od rodzaju losowego oddziaływania, analizowanej odpowiedzi i zakresu parametrów. W 2DEG przeciwne tendencje przewodnictwa ładunkowego i spinowego występują w tych przedziałach R, w których przewodnictwo ładunkowe rośnie, podczas gdy spinowe maleje. Nie jest to reguła obejmująca cały przedstawiony zakres R. W modelu TI z losową magnetyzacją zmiana ξ_0 modyfikuje przewodnictwo poprzez poszerzenie stanów i poprawkę wierzchołkową. Opis nieuporządkowania wymaga zatem uwzględnienia zarówno amplitudy fluktuacji, jak i ich struktury przestrzennej.

6.4 Porównanie reżimów transportu

W porównaniu wyników należy odróżnić charakter rozwiązania falowego w obszarze magnetycznym od reżimu transportu w rozciągłym układzie. Określenia „ewanescentny" i „propagacyjny" dotyczą rozwiązań wewnątrz bariery, natomiast opis dyfuzyjny odnosi się do odpowiedzi układu, w którym istotna jest relaksacja prądu wskutek wielokrotnego rozpraszania.

Dla bariery warunek (3.88) należy stosować oddzielnie do każdego kanału o ustalonej poprzecznej składowej pędu. Przy dodatnich μ i m_0 przekroczenie $\mu/m_0 = 1$ umożliwia pojawienie się kanałów propagujących, lecz nie oznacza, że wszystkie kąty padania odpowiadają propagacji wewnątrz bariery. Przewodnictwo obejmuje sumaryczny wkład dostępnych kanałów, zgodnie z przyjętą procedurą całkowania.

W modelach nieuporządkowanych zastosowano opis odpowiedzi uśrednionej po

konfiguracjach pola losowego. Interpretacja tej odpowiedzi jako transportu dyfuzyjnego odnosi się do odpowiedniego zakresu skal długości i czasu oraz do założeń słabego rozpraszania przyjętych w rachunku. Sama obecność losowego pola nie wystarcza do uzasadnienia reżimu dyfuzyjnego.

Zestawienie w tabeli 6.1 porządkuje te różne aspekty opisu.

Tabela 6.1: Charakter rozwiązań w barierze oraz opis transportu w układach nieuporządkowanych.

Rodzaj opisu	Warunek fizyczny	Charakter transportu	Przykładowe wyniki
Ewanescentny (tunelowy)	brak stanów propagujących w obszarze magnetycznym	zanik amplitudy fali w barierze i tłumienie transmisji ze wzrostem długości obszaru magnetycznego	rys. 6.1(a), rys. 6.2(a)
Propagacyjny	spełnienie warunku (3.88)	propagacja w obszarze magnetycznym i interferencja fal odbitych od jego granic; oscylacyjna zależność transmisji	rys. 6.1(a), rys. 6.2(a)
Dyfuzyjny	wielokrotne rozpraszanie na przestrzennym nieuporządkowaniu	relaksacja prądu opisana przez czasy relaksacji, poszerzenie stanów i poprawki wierzchołkowe	rys. 6.3, rys. 6.4

6.5 Czasy relaksacji a przewodnictwo ładunkowe i spinowe

Zależność między rozpraszaniem a przewodnictwem najpełniej można przeanalizować dla 2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby, dla którego wyznaczono czas życia stanu τ, transportowy czas relaksacji τ_{tr} oraz spinowy transportowy czas relaksacji $\tau_{s,\mathrm{tr}}$ [6]. Wielkości te zostały zdefiniowane wcześniej; w tej części analizowane są przede wszystkim ich zależności od energii i promienia korelacji oraz konsekwencje tych zależności dla przewodnictwa ładunkowego i spinowego.

Czas τ charakteryzuje zanik stanu o zadanym pędzie i jest związany z poszerzeniem poziomów energetycznych. Nie określa jednak bezpośrednio szybkości zaniku prądu, ponieważ poszczególne akty rozpraszania w różnym stopniu zmieniają kierunek ruchu elektronu. Wielkością właściwą dla relaksacji prądu ładunkowego jest τ_{tr}, natomiast

relaksację prądu spinowego opisuje $\tau_{s,\mathrm{tr}}$. Odpowiednie wyrażenia zostały podane w równaniach (3.35), (3.63) oraz (3.65).

Na rysunku 6.4(a) przedstawiono zależność czasu τ od energii elektronu. W analizowanym zakresie τ maleje ze wzrostem energii, a jego wartość zależy również od promienia korelacji R. Obie zależności wynikają z faktu, że zmiana energii wpływa na wartość wektora falowego k, natomiast zmiana R modyfikuje korelator fluktuacji Rashby. Istotna jest więc kombinacja tych parametrów, w szczególności wartość kR, która wpływa na udział procesów o różnych przekazach pędu.

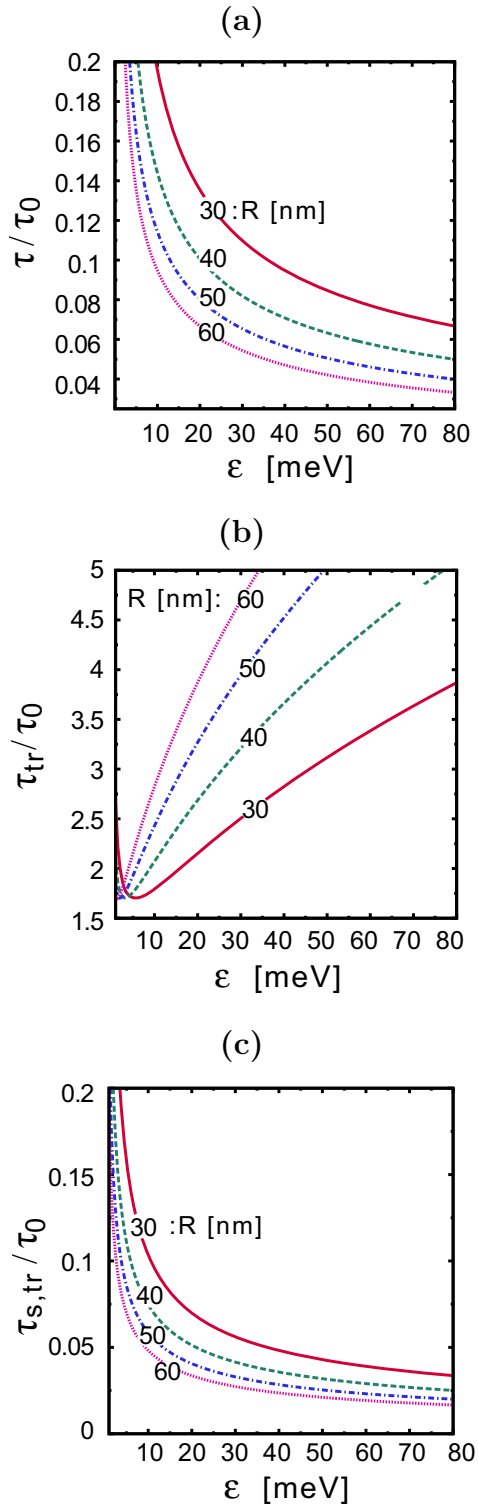
Transportowy czas relaksacji τ_{tr}, przedstawiony na rysunku 6.4(b), ma niemonotoniczną zależność od energii, z minimum rozdzielającym zakres początkowego spadku i późniejszego wzrostu. Zachowanie to odróżnia go od czasu życia stanu τ oraz spinowego transportowego czasu relaksacji. W modelu losowego Rashby granice $kR \ll 1$ i $kR \gg 1$ odpowiadają odmiennemu udziałowi procesów małokątowych w relaksacji prądu. Dla dużego kR ich rosnące względne znaczenie prowadzi do wzrostu τ_{tr}, mimo że czas życia stanu nie wykazuje analogicznego wzrostu [6].

Jeszcze inną zależność wykazuje spinowy transportowy czas relaksacji $\tau_{s,\mathrm{tr}}$, przedstawiony na rysunku 6.4(c). W tym przypadku znaczenie ma nie tylko zmiana kierunku pędu, lecz również spinowy charakter elementu macierzowego losowego oddziaływania Rashby. W analizowanym zakresie $\tau_{s,\mathrm{tr}}$ może być krótszy od τ_{tr} i wykazuje odmienną zależność od promienia korelacji [6]. Oznacza to, że proces słabo relaksujący prąd ładunkowy nie musi być równie mało efektywny w relaksacji prądu spinowego.

Różnice pomiędzy τ_{tr} i $\tau_{s,\mathrm{tr}}$ znajdują bezpośrednie odzwierciedlenie w przewodnictwach. Przewodnictwo ładunkowe jest związane z τ_{tr} zgodnie z równaniem (3.63), natomiast przewodnictwo spinowe ze spinowym transportowym czasem relaksacji zgodnie z równaniem (3.65). Podobna postać obu wyrażeń nie oznacza zatem identycznej odpowiedzi na zmianę parametrów układu.

Zależności te są widoczne na rysunkach 6.1(b),(c). W analizowanym zakresie zarówno przewodnictwo ładunkowe, jak i spinowe zmieniają się wraz z potencjałem chemicznym, jednak odpowiednie zależności są kontrolowane przez różne czasy transportowe. Nie należy więc interpretować wzrostu σ_s jako bezpośredniej konsekwencji wzrostu σ ani odwrotnie.

Różnice odpowiedzi na zmianę promienia korelacji pokazano na rysunku 6.3(a),(b). Przewodnictwo spinowe maleje ze wzrostem R, natomiast przewodnictwo ładunkowe dla części pokazanych wartości μ przechodzi przez minimum. Przeciwne kierunki zmian obu przewodnictw występują więc tylko w przedziałach, w których przewodnictwo ładunkowe rośnie. Rysunek 6.4 uzupełnia to porównanie o zależności czasów relaksacji od energii dla kilku ustalonych wartości R; nie przedstawia bezpośrednio zależności tych czasów od R. Rozróżnienie tych dwóch rodzajów zależności jest



Rysunek 6.4: Zależności czasów relaksacji od energii elektronu w dwuwymiarowym gazie elektronowym z losowym oddziaływaniem Rashby, dla różnych promieni korelacji R. (a) Czas życia stanu τ/τ_0. (b) Transportowy czas relaksacji $\tau_{\mathrm{tr}}/\tau_0$. (c) Spinowy transportowy czas relaksacji $\tau_{s,\mathrm{tr}}/\tau_0$. Czasy znormalizowano przez skalę τ_0 przyjętą w publikacji źródłowej. Panele (a), (b) i (c) przedrukowano odpowiednio z rys. 1(a), 1(c) i 3(a) pracy S. Kudła, A. Dyrdał, V. K. Dugaev, E. Ya. Sherman, J. Barnaś, *Phys. Rev. B* **97**, 245307 (2018). © 2018 American Physical Society. Oznaczenia paneli dostosowano do zestawienia.

konieczne przy zestawianiu wyników dla czasów relaksacji i przewodnictw [6].

W przypadku powierzchni TI z losową magnetyzacją relacja między czasem życia stanu a przewodnictwem ma inną postać. Czas życia jest związany z poszerzeniem stanów γ zgodnie z równaniem (3.18), natomiast przewodnictwo zależy dodatkowo od poprawki wierzchołkowej, zgodnie z równaniem (3.66) [7]. Samo poszerzenie stanów nie jest więc wystarczające do określenia relaksacji prądu powierzchniowego.

Wyniki dla obu układów nieuporządkowanych wskazują, że czas życia stanu i czas charakterystyczny dla zaniku prądu opisują różne aspekty rozpraszania. Dla 2DEG różnica ta jest wyrażona bezpośrednio przez τ, τ_{tr} i $\tau_{s,\mathrm{tr}}$, natomiast w modelu TI z losową magnetyzacją wpływ procesów rozpraszania na odpowiedź transportową jest zawarty w poszerzeniu stanów i poprawce wierzchołkowej.

Rozdział 7

Wspólna interpretacja mechanizmów transportu ładunku i spinu

W poprzednim rozdziale omówiono zależności wyników transportowych od parametrów poszczególnych modeli. Niniejszy rozdział poświęcono ich interpretacji porównawczej: określeniu, które cechy odpowiedzi elektronowej wynikają z przestrzennej organizacji oddziaływania, które z jego struktury spinowej, a które zależą od geometrii i przyjętego sposobu opisu transportu [5, 6, 7, 8].

Punktem wyjścia jest zestawienie deterministycznych struktur magnetycznych z układami opisanymi statystycznie. Na tej podstawie porównano znaczenie skal przestrzennych, rolę spinowej struktury rozpraszania oraz relację między modyfikacją stanów elektronowych a relaksacją prądu. Dyskusja dotyczy mechanizmów fizycznych w granicach zastosowanych modeli i przybliżeń.

7.1 Wspólny problem mikroskopowy

Punktem wspólnym analizowanych modeli jest oddziaływanie przestrzennie niejednorodnego zaburzenia spinowo-zależnego ze stanami elektronowymi. Hamiltonian można zapisać schematycznie jako

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \tag{7.1}$$

gdzie $\hat{H}_0$ opisuje układ niezaburzony, a $\hat{V}$ odpowiedni operator zaburzenia. W modelach magnetycznych zawiera on przestrzenny profil pola wymiennego i macierz σ_z, natomiast w modelu losowego oddziaływania Rashby również operatory pędu.

W opisie perturbacyjnym podstawową rolę odgrywa element macierzowy

$$V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \left\langle \mathbf{k}' \middle| \hat{V} \middle| \mathbf{k} \right\rangle, \tag{7.2}$$

w którym stany początkowy i końcowy obejmują także ich strukturę spinorową. Dla lokalnego członu magnetycznego proporcjonalnego do σ_z element ten łączy transformatę Fouriera profilu magnetyzacji z elementem macierzowym σ_z między spinorami. Dla losowego oddziaływania Rashby występuje ponadto jawna zależność od wektorów falowych, zgodnie z równaniem (3.55). Z tego względu jednakowy zasięg przestrzenny dwóch zaburzeń nie wystarcza do uzyskania jednakowej struktury rozpraszania: istotna jest także postać operatora działającego w przestrzeni spinowej.

W pierwszym przybliżeniu Borna element macierzowy zaburzenia wyznacza amplitudę rozpraszania. W opisie nieuporządkowania jego uśredniony kwadrat modułu określa prawdopodobieństwa przejść, z których wyznacza się odpowiednie wielkości relaksacyjne. Natomiast transmisja przez barierę oraz rozpraszanie opisane metodą fal cząstkowych wymagają rozwiązania problemu falowego z właściwymi warunkami brzegowymi. Ich interpretacja nie ogranicza się zatem do pojedynczego elementu macierzowego w przybliżeniu Borna.

Porównanie 2DEG i powierzchni TI ujawnia również różnicę w miejscu występowania sprzężenia między ruchem elektronu a jego spinem. W rozpatrywanym modelu 2DEG losowe oddziaływanie Rashby stanowi spinowo-zależny mechanizm rozpraszania. Na powierzchni TI zależność struktury spinorowej od kierunku pędu jest zawarta już w niezaburzonym hamiltonianie Diraca, zdefiniowanym w równaniu (3.13). Zaburzenie magnetyczne działa więc na stany o uprzednio określonej zależności między pędem a strukturą spinową [5, 6, 7, 8].

Wspólna interpretacja wymaga zatem jednoczesnego uwzględnienia profilu przestrzennego zaburzenia, jego struktury operatorowej oraz spinorów stanów elektronowych. Żaden z tych elementów rozpatrywany oddzielnie nie określa pełnej odpowiedzi transportowej.

7.2 Znaczenie geometrii i statystycznego charakteru zaburzenia

Różnice między analizowanymi modelami wynikają przede wszystkim z geometrii oraz statystycznego charakteru przestrzennej niejednorodności. Czynniki te określają zarówno właściwą metodę obliczeniową, jak i wielkość fizyczną opisującą odpowiedź układu.

W modelu bariery magnetycznej profil magnetyzacji jest ustalony i ma charakter deterministyczny. Człon masowy jest niezerowy w skończonym obszarze zgodnie z

równaniem (3.69). Problem ma więc charakter transmisyjny. Elektron przechodzi kolejno przez granice obszaru magnetycznego, a podstawowym zagadnieniem jest dopasowanie spinorowych funkcji falowych oraz wyznaczenie prawdopodobieństwa transmisji. Magnetyzacja zmienia lokalne widmo stanów powierzchniowych, co prowadzi do powstania reżimu ewanescentnego albo propagacyjnego. Wynikająca z tego zależność transmisji i przewodnictwa została przedstawiona na rysunkach 6.1(a) oraz 6.2(a) [5].

Inny charakter ma transport w 2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby oraz na powierzchni TI z losową magnetyzacją. W obu przypadkach nie analizuje się pojedynczego przestrzennego profilu zaburzenia, lecz jego własności statystyczne. Odpowiedź transportowa wymaga uśrednienia po konfiguracjach nieuporządkowania, a podstawową informację o jego strukturze przestrzennej zawiera korelator. Dla losowego oddziaływania Rashby odpowiada mu zależność (4.16), natomiast ogólną postać korelatora fluktuacji magnetyzacji przedstawiono w równaniu (2.8).

W tych układach pojedynczy akt rozpraszania nie jest bezpośrednio obserwowaną wielkością transportową. Istotny jest skumulowany wpływ wielu zdarzeń rozpraszania na nierównowagowy rozkład elektronów. Dlatego transport opisuje się przez funkcje Greena, czasy relaksacji oraz poprawki wierzchołkowe w formalizmie Kubo [6, 7].

Lokalna struktura magnetyczna, podobnie jak bariera, jest opisana zadanym profilem pola wymiennego. Różnica dotyczy geometrii: bariera jest jednorodna w kierunku poprzecznym, natomiast lokalna struktura magnetyczna ma skończony zasięg w obu kierunkach powierzchni. Jej profil określa równanie (3.92). W pierwszym przypadku można rozpatrywać transmisję przy ustalonej poprzecznej składowej pędu; w drugim opisuje się rozkład kątowy fali rozproszonej. Naturalnymi wielkościami charakteryzującymi lokalną strukturę są amplituda rozpraszania, różniczkowy i całkowity przekrój rozpraszania oraz asymetryczny przekrój rozpraszania [8].

Zależność pomiędzy charakterem zaburzenia, metodą obliczeniową i analizowaną wielkością zestawiono w tabeli 7.1.

Zestawienie w tabeli 7.1 pokazuje, że podobna struktura operatorowa oddziaływania nie narzuca jednej metody opisu transportu. Wybór między problemem transmisyjnym, rozpraszaniem na pojedynczym obiekcie i statystycznym opisem relaksacji zależy od geometrii oraz sposobu zadania niejednorodności.

7.3 Skala przestrzenna zaburzenia a długość fali elektronu

Wpływ przestrzennej skali zaburzenia należy rozpatrywać w odniesieniu do charakterystycznych wektorów falowych w danym modelu. W układach nieuporządkowanych

Tabela 7.1: Porównanie charakteru zaburzenia, metod obliczeniowych i wielkości transportowych w analizowanych modelach.

Układ	Charakter zaburzenia	Opis transportu	Podstawowe wielkości
TI z barierą magnetyczną	deterministyczny profil $m(x)\sigma_z$	dopasowanie funkcji falowych, transmisja koherentna	prawdopodobieństwo transmisji, przewodność
2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby	losowe $\lambda(\mathbf{r})$	formalizm Kubo, funkcje Greena, poprawki wierzchołkowe	τ, τ_{tr}, $\tau_{s,\mathrm{tr}}$, σ, σ_s
TI z losową magnetyzacją	losowe $M(\mathbf{r})\sigma_z$	formalizm Kubo, funkcje Greena, poprawki wierzchołkowe	poszerzenie stanów, poprawka wierzchołkowa, przewodnictwo
TI z lokalną strukturą magnetyczną	lokalny profil $M(\mathbf{r})\sigma_z$	przybliżenie Borna i metoda fal cząstkowych	różniczkowy, całkowity i asymetryczny przekrój rozpraszania

kombinacje kR i $k\xi$ porównują długość korelacji z odwrotnością modułu wektora falowego elektronu. Symbol R oznacza przy tym promień korelacji w modelu losowego Rashby, natomiast w modelu lokalnej struktury magnetycznej jest promieniem obiektu. W tym drugim przypadku parametr kR charakteryzuje rozmiar centrum rozpraszającego względem długości fali padającej.

Dla bariery magnetycznej właściwe porównanie dotyczy jej długości oraz skali propagacji lub zaniku fali wewnątrz obszaru magnetycznego. Odpowiednie bezwymiarowe parametry określają fazę nabytą podczas przejścia przez barierę albo tłumienie rozwiązania ewanescentnego. Zależą one również od energii, magnetyzacji i kąta padania.

W modelu losowego oddziaływania Rashby promień korelacji R występuje w korelatorze (4.16). Dla większych wartości kR tłumione są procesy z dużym przekazem pędu, a większy względny udział uzyskuje rozpraszanie małokątowe. Zmiana R nie oznacza jednak wyłącznie zmiany rozkładu kątowego, ponieważ parametr korelacji występuje również w amplitudzie korelatora. W konsekwencji zależności czasów relaksacji od R wynikają jednocześnie ze zmiany siły oraz struktury kątowej rozpraszania [6].

Zmiana korelatora wpływa na różne wielkości relaksacyjne poprzez właściwe im wagi procesów rozpraszania. Konsekwencje tego rozróżnienia dla odpowiedzi ładunkowej i spinowej omówiono w podrozdziale 7.4.

Analogiczna zależność między przestrzenną skalą nieuporządkowania i przekazem

pędu występuje dla losowej magnetyzacji na powierzchni TI. Długość korelacji ξ określa przestrzenny zasięg fluktuacji członu magnetycznego. Zmienia przez to rozkład dostępnych procesów rozpraszania oraz ich wkład do poszerzenia stanów i poprawki wierzchołkowej. W końcowym wyrażeniu na przewodnictwo, równaniu (3.66), wpływ rozpraszania występuje zarówno przez poszerzenie $\gamma(\varepsilon)$, jak i parametr $\kappa(\varepsilon)$ opisujący renormalizację wierzchołka prądowego [7]. Wpływ ξ_0 ilustrują krzywe przewodnictwa w funkcji μ na rysunku 6.1(d). Ich przecięcia pokazują, że kierunek zmiany przewodnictwa przy zmianie długości korelacji zależy od zakresu μ.

W barierze magnetycznej rola długości L jest odmienna. Parametr ten nie określa korelacji nieuporządkowania, lecz odległość między dwiema granicami obszaru o zmodyfikowanym widmie. W reżimie ewanescentnym zwiększenie L prowadzi do silniejszego tłumienia amplitudy fali. W reżimie propagacyjnym długość obszaru określa fazę nabytą podczas propagacji i wpływa na warunki interferencji. Z tego powodu przewodnictwo może oscylować jako funkcja L [5].

Rozmiar lokalnej struktury magnetycznej również należy porównywać ze skalą długości fali elektronu. W tym przypadku zmiana relacji między promieniem obszaru magnetycznego i wektorem falowym wpływa na udział poszczególnych fal cząstkowych oraz na kątowy charakter rozpraszania [8].

Wspólnym elementem analizowanych modeli jest zależność odpowiedzi elektronowej od przestrzennej skali oddziaływania. Jej znaczenie jest jednak odmienne: długość korelacji kształtuje widmo przestrzenne nieuporządkowania, długość bariery określa fazę lub tłumienie fali wewnątrz obszaru magnetycznego, a promień lokalnej struktury wpływa na udział kanałów rozpraszania. Podobieństwo parametrów bezwymiarowych nie oznacza zatem równoważności mechanizmów ani jednakowej zależności obserwabli od rozmiaru zaburzenia.

7.4 Struktura spinowa a relaksacja prądu ładunkowego i spinowego

Porównanie wielkości relaksacyjnych wymaga rozróżnienia między utratą obsadzenia określonego stanu elektronowego a zanikiem prądu. Czas życia stanu uwzględnia procesy rozpraszania z tego stanu, natomiast relaksacja prądu zależy także od tego, jak dane przejście zmienia wielkość przenoszoną przez elektrony.

W modelu 2DEG z losowym oddziaływaniem Rashby rozróżnienie to dotyczy zarówno prądu ładunkowego, jak i spinowego. W wyrażeniach (3.63) oraz (3.65) występują odpowiednio czasy τ_{tr} i $\tau_{s,\mathrm{tr}}$. Wynikają one z odpowiedzi różnych operatorów prądu na ten sam mechanizm nieuporządkowania. Odmienność tych czasów nie oznacza więc występowania dwóch niezależnych źródeł rozpraszania, lecz różną

efektywność tych samych procesów w relaksacji obu prądów [6].

Procesy małokątowe słabo zmieniają kierunek prędkości elektronu, dlatego mogą mieć niewielki udział w relaksacji prądu ładunkowego. Losowe oddziaływanie Rashby działa jednak również w przestrzeni spinowej, co pozwala na odmienną odpowiedź prądu spinowego. Zestawienie czasów na rysunku 6.4 ilustruje konsekwencje tego rozróżnienia. Nie można zatem odtwarzać zachowania przewodnictwa spinowego wyłącznie na podstawie przewodnictwa ładunkowego. Spinowy transportowy czas relaksacji nie jest również tożsamy z czasem zaniku jednorodnej polaryzacji spinowej.

W modelu powierzchni TI z losową magnetyzacją analogiczne znaczenie ma rozróżnienie między poszerzeniem stanów a relaksacją prądu. Pierwsza z tych wielkości wynika z energii własnej, natomiast opis przewodnictwa uwzględnia także renormalizację wierzchołka prądowego. Samo poszerzenie nie stanowi zatem pełnej charakterystyki odpowiedzi transportowej [7].

W modelach deterministycznej bariery i lokalnej struktury magnetycznej wpływ struktury spinowej jest natomiast zawarty w rozwiązaniu problemu transmisji lub rozpraszania. W przypadku lokalnej struktury zależność operatora prędkości od macierzy Pauliego, podana w równaniu (4.25), wiąże strukturę spinorową fali z rozkładem prądu [8]. Nie wprowadza to jednak bezpośredniego odpowiednika $\tau_{s,\mathrm{tr}}$ z modelu losowego Rashby.

Porównanie tych przypadków pokazuje, że znaczenie struktury spinowej należy odnosić do konkretnej obserwabli. W układach nieuporządkowanych wpływa ona na relaksację prądów, a w problemach koherentnego rozpraszania na amplitudy i rozkład przestrzenny prądu wynikający z funkcji falowej.

7.5 Modyfikacja widma i rozpraszanie jako dwa skutki oddziaływań spinowo-zależnych

Modyfikacja stanów elektronowych i rozpraszanie nie stanowią rozłącznych skutków oddziaływania spinowo-zależnego. W analizowanych modelach różni się natomiast sposób ich uwzględnienia: w strukturach deterministycznych rozwiązuje się problem falowy dla zadanego profilu, a w układach losowych wyznacza się odpowiedź uśrednioną po konfiguracjach nieuporządkowania.

W magnetycznym obszarze na powierzchni TI człon proporcjonalny do σ_z ma ustaloną wartość w skończonym przedziale przestrzeni. Wewnątrz tego obszaru zmienia lokalne widmo stanów powierzchniowych i otwiera przerwę energetyczną. Konsekwencją jest zmiana charakteru rozwiązań równania Diraca: w zależności od energii i zachowanej składowej pędu mogą występować stany propagujące albo ewanescentne. Magnetyzacja pełni tu przede wszystkim rolę parametru modyfikującego lokalne

widmo i warunki transmisji [5].

W układzie z losową magnetyzacją średnia wartość pola zanika, natomiast skończone pozostają jego fluktuacje i korelacje. Nie występuje więc pojedynczy obszar o jednolicie zmodyfikowanym widmie. Przestrzenne fluktuacje członu $M(\mathbf{r})\sigma_z$ powodują przejścia między stanami powierzchniowymi i prowadzą do poszerzenia stanów oraz renormalizacji wierzchołka prądowego. Ich łączny wpływ na przewodnictwo jest zawarty w równaniu (3.66) [7].

Analogiczne rozróżnienie występuje w 2DEG. Jednorodne oddziaływanie Rashby prowadziłoby do regularnej modyfikacji widma i struktury spinowej stanów. W modelu analizowanym w rozprawie jego wartość średnia jest jednak równa zeru, a podstawową rolę pełnią lokalne fluktuacje $\lambda(\mathbf{r})$. To one powodują przejścia między stanami o różnych wektorach falowych i stanowią mechanizm relaksacji [6].

Lokalna kropka magnetyczna ponownie łączy oba aspekty w skali skończonego obszaru. W jej wnętrzu stan elektronu podlega oddziaływaniu magnetycznemu, natomiast granica i skończony rozmiar struktury prowadzą do rozpraszania. Ostateczną konsekwencją nie jest jednak przewodnictwo całej próbki, lecz amplituda i rozkład kątowy rozproszonej fali [8].

Rozróżnienie to nie oznacza, że struktury deterministyczne wyłącznie modyfikują widmo, a nieuporządkowanie wyłącznie rozprasza elektrony. W barierze i kropce zmiana stanów wewnątrz obszaru magnetycznego współistnieje z odbiciem lub rozpraszaniem związanym z jego przestrzennym ograniczeniem. W opisie układów nieuporządkowanych wpływ zaburzenia na propagację jest zawarty w energii własnej, natomiast obliczenie odpowiedzi prądowej wymaga również uwzględnienia wierzchołka prądowego. Wspólny charakter oddziaływania nie usuwa więc różnicy między wyznaczeniem stanów elektronowych a określeniem ich udziału w transporcie.

7.6 Zakres wspólnej interpretacji

Przedstawione porównanie dotyczy mechanizmów mikroskopowych i nie ustanawia bezpośredniej zależności ilościowej między transmisją przez barierę, przewodnictwem układu nieuporządkowanego a przekrojem rozpraszania na pojedynczej strukturze magnetycznej. Przejście między tymi opisami wymagałoby dodatkowych założeń dotyczących badanego układu.

W szczególności przekrój rozpraszania na pojedynczej kropce nie określa samodzielnie przewodnictwa próbki zawierającej wiele takich obiektów. Potrzebne byłyby informacje o ich koncentracji, rozmieszczeniu i korelacjach oraz wybór przybliżenia opisującego wielokrotne rozpraszanie. Podobnie wynik dla pojedynczej bariery nie jest sam w sobie opisem transportu w losowym polu magnetyzacji.

Ograniczenia dotyczą także porównania skal przestrzennych. Długość korelacji

pola losowego i rozmiar deterministycznego obszaru magnetycznego nie są parametrami zamiennymi. Ponadto ocena wpływu długości korelacji wymaga określenia, które pozostałe parametry korelatora są utrzymywane na stałym poziomie. Zmiana zasięgu korelacji może bowiem równocześnie zmieniać wagę poszczególnych przekazów pędu i efektywną siłę rozpraszania.

Wyniki odnoszą się również do zakresów stosowalności metod omówionych w rozdziale metodologicznym. Zgodność interpretacji jakościowej nie oznacza, że opis perturbacyjny, metoda fal cząstkowych i rozwiązanie problemu transmisyjnego są wymienne. Przeniesienie wniosku między modelami wymaga sprawdzenia geometrii, struktury stanów i założeń przyjętych w danym przybliżeniu.

W tych granicach wspólna analiza pozwala wskazać, które różnice w odpowiedzi transportowej wiążą się z przestrzenną organizacją oddziaływania, a które z jego działaniem na spinory stanów elektronowych. Stanowi to podstawę syntezy wyników przedstawionej we wnioskach końcowych.

Rozdział 8

Podsumowanie i wnioski końcowe

Celem rozprawy było określenie wpływu przestrzennego profilu oddziaływań spinowo-orbitalnych i wymiennych oraz struktury spinorowej stanów na transport elektronowy w wybranych układach niskowymiarowych. W tym celu opracowano łącznie wyniki czterech publikacji wieloautorskich dotyczących transmisji przez barierę magnetyczną, transportu w obecności losowego oddziaływania Rashby i losowej magnetyzacji oraz rozpraszania na lokalnej strukturze magnetycznej [5, 6, 7, 8].

W modelu bariery magnetycznej na powierzchni izolatora topologicznego określono wpływ magnetyzacji, energii elektronu i długości obszaru magnetycznego na transmisję. Magnetyzacja prostopadła do powierzchni wprowadza lokalny człon masowy, zmieniając warunki propagacji wewnątrz bariery. W zależności od energii i poprzecznej składowej pędu rozwiązania mają charakter propagacyjny lub ewanescentny. Długość obszaru magnetycznego kontroluje odpowiednio fazę propagującej fali albo stopień jej tłumienia. Wyniki opisują zatem zarówno oscylacyjny charakter transmisji związany z interferencją, jak i tłumienie tunelowania przez obszar magnetyczny [5].

Dla dwuwymiarowego gazu elektronowego z losowym oddziaływaniem Rashby wykazano, że ten sam mechanizm nieuporządkowania prowadzi do odmiennej relaksacji prądu ładunkowego i spinowego. Czas życia stanu, transportowy czas relaksacji prądu ładunkowego oraz spinowy transportowy czas relaksacji nie są wielkościami zamiennymi i wykazują odmienne zależności od parametrów modelu. Różnice te znajdują odzwierciedlenie w odpowiedzi przewodnictwa ładunkowego i spinowego na zmianę energii oraz promienia korelacji fluktuacji Rashby. Wynik ten wskazuje, że charakterystyka transportu ładunkowego nie wystarcza do określenia odpowiedzi spinowej tego układu [6].

W modelu powierzchni izolatora topologicznego z losową magnetyzacją określono wpływ przestrzennych korelacji pola wymiennego na przewodnictwo elektronów powierzchniowych. Korelator magnetyzacji wpływa zarówno na poszerzenie stanów,

jak i na renormalizację wierzchołka prądowego. Zależność przewodnictwa od długości korelacji wynika z łącznego udziału tych wielkości i nie może być wyjaśniona wyłącznie zmianą czasu życia stanu. Analiza pokazuje ponadto, że interpretacja wpływu długości korelacji wymaga uwzględnienia sposobu parametryzacji całego korelatora, w tym jego amplitudy [7].

Dla lokalnej struktury magnetycznej na powierzchni izolatora topologicznego scharakteryzowano rozpraszanie na pojedynczym obiekcie o skończonym rozmiarze. Wyznaczono zależności przekrojów rozpraszania od parametrów układu, w tym energii elektronu, oraz przeanalizowano asymetrię kątową rozpraszania. Wyniki wskazują, że lokalna magnetyzacja wpływa zarówno na całkowite rozpraszanie, jak i na rozkład kierunków rozproszonego prądu. Przypadek ten uzupełnia opis barier i pól losowych o charakterystykę pojedynczego magnetycznego centrum rozpraszającego [8].

Wspólna analiza tych wyników pozwala odpowiedzieć na cel rozprawy: wpływ oddziaływania spinowo-zależnego na transport jest określony przez jego profil przestrzenny w połączeniu ze strukturą operatorową i spinorami stanów elektronowych. Przy tej samej strukturze operatorowej członu magnetycznego zmiana jego przestrzennej realizacji prowadzi do odmiennych warunków transmisji, relaksacji prądu lub rozpraszania kątowego. Z kolei porównanie odpowiedzi ładunkowej i spinowej w modelu losowego Rashby pokazuje, że również przy ustalonej statystyce zaburzenia jego wpływ zależy od rozpatrywanej wielkości transportowej.

Wnioski te odnoszą się do analizowanych hamiltonianów, geometrii oraz zakresów stosowalności przyjętych przybliżeń. Wspólna interpretacja porządkuje mikroskopowe mechanizmy odpowiedzialne za uzyskane wyniki, nie ustanawiając uniwersalnej zależności ilościowej między transmisją, przewodnictwem i przekrojem rozpraszania.

Rozdział 9

Publikacje stanowiące podstawę rozprawy – streszczenia i udział autorki

9.1 Publikacja 1

P. R. Rzeszutko, S. Kudła, V. K. Dugaev, *Transmission of charge and spin in a topological-insulator-based magnetic structure*, Physica Status Solidi B **254**, 1600685 (2017).

Abstrakt

W publikacji przeanalizowano transport ładunku i spinu w strukturze opartej na izolatorze topologicznym, na którego powierzchni umieszczono cienki obszar magnetyczny o skończonej długości. Rozważono przypadek magnetyzacji skierowanej prostopadle do powierzchni izolatora topologicznego. Taka konfiguracja prowadzi do otwarcia przerwy energetycznej w widmie stanów powierzchniowych i powoduje, że obszar magnetyczny działa jako efektywna bariera dla elektronów Diraca.

W ramach modelu wyznaczono transmisję elektronów przez obszar magnetyczny oraz obliczono przewodnictwo struktury. Pokazano, że przewodnictwo zależy od długości obszaru namagnesowanego oraz od parametrów magnetyzacji. W reżimie propagacyjnym przewodnictwo może wykazywać oscylacje wynikające z interferencji fal elektronowych odbitych i transmitowanych na granicach obszaru magnetycznego. W reżimie podbarierowym transmisja ma charakter tunelowy i maleje wraz ze wzrostem długości bariery.

Ze względu na sprzężenie spinu z kierunkiem ruchu elektronów powierzchniowych transport ładunku jest w tym układzie powiązany z transportem spinu. W publikacji przeanalizowano również odpowiedź termoelektryczną struktury poprzez oblicze-

nie współczynnika Seebecka w sytuacji, gdy przepływ elektronów jest wymuszony gradientem temperatury. Uzyskane wyniki pokazują, że lokalna magnetyzacja na powierzchni izolatora topologicznego może być wykorzystana do kontroli transmisji elektronowej, przewodnictwa oraz odpowiedzi termoelektrycznej układu.

Zakres udziału autorki rozprawy w powstaniu publikacji: Udział w opracowaniu modelu teoretycznego opisującego transport ładunku i spinu w strukturze opartej na izolatorze topologicznym, wykonanie obliczeń numerycznych, analiza właściwości transportowych badanego układu, interpretacja wyników oraz współudział w przygotowaniu manuskryptu.

9.2 Publikacja 2

S. Kudła, A. Dyrdał, V. K. Dugaev, E. Ya. Sherman, J. Barnaś, *Charge and spin conductivity of a two-dimensional electron gas with a random Rashba interaction*, Physical Review B **97**, 245307 (2018).

Abstrakt

W publikacji rozważono dwuwymiarowy gaz elektronowy, w którym oddziaływanie spinowo-orbitalne Rashby ma charakter przestrzennie losowy, a jego wartość średnia zanika. Taka sytuacja może występować w układach o symetrycznym potencjale ograniczającym, gdzie jednorodne sprzężenie Rashby jest wykluczone przez symetrię, lecz lokalne fluktuacje pola spinowo-orbitalnego pozostają możliwe. Celem pracy było określenie wpływu tych fluktuacji na transport ładunku i spinu.

W ramach przyjętego modelu wyznaczono czas relaksacji transportowej odpowiedzialny za przewodnictwo ładunkowe oraz czas relaksacji transportowej spinu, który określa przewodnictwo spinowe. Obliczenia wykonano przy użyciu formalizmu funkcji Greena oraz formuły Kubo, z uwzględnieniem poprawek wierzchołkowych. Pokazano, że czas relaksacji transportowej dla ładunku ma niemonotoniczną zależność od energii elektronu. Odmiennie zachowuje się czas relaksacji transportowej spinu, który maleje wraz ze wzrostem energii, podobnie jak zwykły czas relaksacji stanu elektronowego.

Różnice między relaksacją prądu ładunkowego i spinowego prowadzą do nietypowych zależności przewodnictwa od temperatury, potencjału chemicznego oraz długości korelacji fluktuacji pola Rashby. Wyniki pokazują, że losowe oddziaływanie spinowo-orbitalne może istotnie modyfikować zarówno transport ładunku, jak i transport spinu w dwuwymiarowych strukturach elektronowych.

Zakres udziału autorki rozprawy w powstaniu publikacji: Opracowanie i implementacja numeryczna modelu transportowego, wykonanie obliczeń analitycznych i numerycznych, analiza i interpretacja wyników, przygotowanie materiałów graficznych oraz współudział w przygotowaniu manuskryptu.

9.3 Publikacja 3

S. Kudła, A. Dyrdał, V. K. Dugaev, J. Berakdar, J. Barnaś, *Conduction of surface electrons in a topological insulator with spatially random magnetization*, Physical Review B **100**, 205428 (2019).

Abstrakt

W publikacji zbadano przewodnictwo elektronów powierzchniowych w izolatorze topologicznym w obecności przestrzennie losowej magnetyzacji. Magnetyzacja została opisana jako skorelowane losowe pole wymienne, oddziałujące ze spinem elektronów powierzchniowych. Dodatkowo uwzględniono rozpraszanie na losowo rozmieszczonych niemagnetycznych domieszkach skalarnych. Rozważany model pozwala opisać sytuację, w której zaburzenia magnetyczne pojawiają się na powierzchni izolatora topologicznego wskutek kontaktu z warstwą magnetyczną, domieszkowania magnetycznego lub niejednorodności interfejsu.

Do analizy zastosowano metodę funkcji Greena. Wyznaczono wkład fluktuacji magnetyzacji oraz domieszek skalarnych do czasu relaksacji elektronów powierzchniowych. Następnie obliczono przewodnictwo podłużne, uwzględniając poprawki wierzchołkowe istotne dla poprawnego opisu transportu w układach z nieuporządkowaniem. Szczególną uwagę poświęcono roli długości korelacji fluktuacji magnetyzacji, ponieważ parametr ten wpływa na efektywność rozpraszania elektronów o zadanej energii.

Wyniki pokazują, że losowa magnetyzacja może silnie modyfikować czas relaksacji oraz przewodnictwo powierzchniowych stanów izolatora topologicznego. Efekt ten zależy od energii elektronów, amplitudy fluktuacji magnetycznych, długości korelacji oraz udziału rozpraszania skalarnego. W publikacji omówiono również możliwą zależność długości korelacji od temperatury, co prowadzi do nietrywialnej zależności przewodnictwa od temperatury.

Zakres udziału autorki rozprawy w powstaniu publikacji: Opracowanie modelu opisującego wpływ losowej magnetyzacji na transport elektronów powierzchniowych w izolatorze topologicznym, wykonanie obliczeń teoretycznych i numerycznych, analiza właściwości transportowych i magnetotransportowych układu, interpretacja wyników oraz współudział w przygotowaniu artykułu.

9.4 Publikacja 4

S. Kudła, S. Wolski, T. Szczepański, V. K. Dugaev, E. Ya. Sherman, *Electron scattering by magnetic quantum dot in topological insulator*, Solid State Communications **342**, 114555 (2022).

Abstrakt

W artykule przeanalizowano rozpraszanie elektronów powierzchniowych izolatora topologicznego na lokalnym obszarze magnetycznym w postaci magnetycznej kropki kwantowej. Układ opisano za pomocą hamiltonianu Diraca dla stanów powierzchniowych izolatora topologicznego, w którym lokalna magnetyzacja wprowadza człon zależny od macierzy Pauliego σ_z. Rozważana struktura pozwala badać wpływ lokalnego profilu magnetyzacji na dynamikę elektronów, których spin jest związany z kierunkiem pędu.

Do opisu procesu rozpraszania zastosowano podejście perturbacyjne oraz metodę sumowania fal cząstkowych. Analiza objęła różne reżimy rozpraszania zależne od energii elektronu, promienia kropki magnetycznej oraz amplitudy magnetyzacji. Pokazano, że sprzężenie spinowo-pędowe prowadzi do własności rozpraszania istotnie różnych od klasycznego rozpraszania na potencjale niezależnym od spinu. Różnice te przejawiają się między innymi w anizotropii przekroju czynnego oraz w nietypowej zależności przekroju rozpraszania od energii elektronu.

Uzyskane wyniki wskazują, że lokalne struktury magnetyczne na powierzchni izolatorów topologicznych mogą być używane do sterowania rozpraszaniem elektronów oraz do projektowania przestrzennych profili magnetyzacji wpływających na sprzężony transport ładunku i spinu. Praca stanowi uzupełnienie analizy układów z magnetycznym nieuporządkowaniem, ponieważ opisuje elementarny proces rozpraszania na pojedynczym lokalnym obiekcie magnetycznym.

Zakres udziału autorki rozprawy w powstaniu publikacji: Udział w opracowaniu modelu rozpraszania elektronów na magnetycznej kropce kwantowej w izolatorze topologicznym, wykonanie obliczeń teoretycznych, analiza przekrojów czynnych rozpraszania oraz właściwości transportowych układu, interpretacja wyników i współredagowanie publikacji.

Dorobek naukowy autorki

Inne publikacje naukowe

1. S. Kudła, V. K. Dugaev, J. Barnaś, A. Dyrdał, *Longitudinal magnetoresistance in graphene with random Rashba spin-orbit interaction*, Phys. Rev. B **111**, 075413 (2025).

Wystąpienia konferencyjne

Prezentacje posterowe związane z rozprawą na międzynarodowych konferencjach naukowych

1. *The European Conference Physics of Magnetism – PM'17*, 26–30 czerwca 2017 r., Poznań, Polska.

   Prezentacja posteru pt. *"Controllable transport of surface electron in a topological insulator"*.

2. *10th International School and Conference on Physics and Applications of Spin Phenomena in Solids – PASPS10*, 5–9 sierpnia 2018 r., Linz, Austria.

   Prezentacja posteru pt. *"Effect of spatially fluctuating Rashba spin-orbit interaction on charge and spin conductivity in a two dimensional electron gas"*.

3. *13th International School on Theoretical Physics: Symmetry and Structural Properties of Condensed Matter*, 10–15 września 2018 r., Rzeszów, Polska.

   Prezentacja posteru pt. *"Role of Spatially Random Rashba Coupling in Charge and Spin Transport Phenomena"*.

4. *The European Conference Physics of Magnetism – PM'23*, 26–30 czerwca 2023 r., Poznań, Polska.

   Prezentacja posteru pt. *"Influence of spatially random magnetization on the conduction of surface electrons in a topological insulator"*.

Bibliografia

[1] Supriyo Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge: Cambridge University Press, 1995. ISBN: 978-0-521-59943-6. DOI: 10.1017/CBO9780511805776.

[2] Yoseph Imry. *Introduction to Mesoscopic Physics*. 2 wyd. Oxford: Oxford University Press, 2002. ISBN: 978-0-19-850738-3.

[3] Igor Žuti'c, Jaroslav Fabian i S. Das Sarma. „Spintronics: Fundamentals and applications". W: *Reviews of Modern Physics* 76.2 (2004), s. 323–410. DOI: 10.1103/RevModPhys.76.323.

[4] Roland Winkler. *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*. T. 191. Springer Tracts in Modern Physics. Berlin, Heidelberg: Springer, 2003. ISBN: 978-3-540-01187-3. DOI: 10.1007/b13586.

[5] P. R. Rzeszutko, S. Kudła i V. K. Dugaev. „Transmission of charge and spin in a topological-insulator-based magnetic structure". W: *physica status solidi (b)* 254.9 (2017), s. 1600685. DOI: 10.1002/pssb.201600685.

[6] S. Kudła i in. „Charge and spin conductivity of a two-dimensional electron gas with a random Rashba interaction". W: *Physical Review B* 97 (2018), s. 245307. DOI: 10.1103/PhysRevB.97.245307.

[7] S. Kudła i in. „Conduction of surface electrons in a topological insulator with spatially random magnetization". W: *Physical Review B* 100 (2019), s. 205428. DOI: 10.1103/PhysRevB.100.205428.

[8] S. Kudła i in. „Electron scattering by magnetic quantum dot in topological insulator". W: *Solid State Communications* 342 (2022), s. 114555. DOI: 10.1016/j.ssc.2021.114555.

[9] C. W. J. Beenakker i H. van Houten. „Quantum Transport in Semiconductor Nanostructures". W: *Solid State Physics*. T. 44. Academic Press, 1991, s. 1–228. DOI: 10.1016/S0081-1947(08)60091-0.

[10] Jairo Sinova i in. „Spin Hall effects". W: *Reviews of Modern Physics* 87.4 (2015), s. 1213–1260. DOI: 10.1103/RevModPhys.87.1213.

[11] A. Manchon i in. „New perspectives for Rashba spin-orbit coupling". W: *Nature Materials* 14.9 (2015), s. 871–882. DOI: 10.1038/nmat4360.

[12] V. M. Edelstein. „Spin polarization of conduction electrons induced by electric current in two-dimensional asymmetric electron systems". W: *Solid State Communications* 73.3 (1990), s. 233–235. DOI: 10.1016/0038-1098(90)90963-C.

[13] M. Z. Hasan i C. L. Kane. „Colloquium: Topological insulators". W: *Reviews of Modern Physics* 82.4 (2010), s. 3045–3067. DOI: 10.1103/RevModPhys.82.3045.

[14] Xiao-Liang Qi i Shou-Cheng Zhang. „Topological insulators and superconductors". W: *Reviews of Modern Physics* 83.4 (2011), s. 1057–1110. DOI: 10.1103/RevModPhys.83.1057.

[15] M. M. Glazov, E. Ya. Sherman i V. K. Dugaev. „Two-dimensional electron gas with spin-orbit coupling disorder". W: *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 42.9 (2010), s. 2157–2177. DOI: 10.1016/j.physe.2010.04.021.

[16] J. M. Ziman. *Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids*. Oxford: Oxford University Press, 1960.

[17] Yuli V. Nazarov i Yaroslav M. Blanter. *Quantum Transport: Introduction to Nanoscience*. Cambridge: Cambridge University Press, 2009. ISBN: 978-0-521-83246-5. DOI: 10.1017/CBO9780511626906.

[18] Ryogo Kubo. „Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems". W: *Journal of the Physical Society of Japan* 12.6 (1957), s. 570–586. DOI: 10.1143/JPSJ.12.570.

[19] Gerald D. Mahan. *Many-Particle Physics*. 3 wyd. New York: Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2000. ISBN: 978-0-306-46338-9.

[20] Junren Shi i in. „Proper Definition of Spin Current in Spin-Orbit Coupled Systems". W: *Physical Review Letters* 96 (2006), s. 076604. DOI: 10.1103/PhysRevLett.96.076604.

[21] L. D. Landau i E. M. Lifshitz. *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*. 3 wyd. T. 3. Course of Theoretical Physics. Oxford: Pergamon Press, 1977.

[22] Emmanuel I. Rashba. „Spin currents in thermodynamic equilibrium: The challenge of discerning transport currents". W: *Physical Review B* 68.24 (2003), s. 241315. DOI: 10.1103/PhysRevB.68.241315.

[23] M. I. Dyakonov, red. *Spin Physics in Semiconductors*. T. 157. Springer Series in Solid-State Sciences. Berlin, Heidelberg: Springer, 2008. ISBN: 978-3-540-78819-5. DOI: 10.1007/978-3-540-78820-1.

[24] Yu. A. Bychkov i E. I. Rashba. „Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy". W: *JETP Letters* 39.2 (1984), s. 78–81.

[25] E. Ya. Sherman. „Random spin-orbit coupling and spin relaxation in symmetric quantum wells". W: *Applied Physics Letters* 82.2 (2003), s. 209–211. DOI: 10.1063/1.1533839.

[26] Patrick A. Lee i T. V. Ramakrishnan. „Disordered electronic systems". W: *Reviews of Modern Physics* 57.2 (1985), s. 287–337. DOI: 10.1103/RevModPhys.57.287.

[27] Eric Akkermans i Gilles Montambaux. *Mesoscopic Physics of Electrons and Photons*. Cambridge: Cambridge University Press, 2007. ISBN: 978-0-521-85512-9.

[28] Jørgen Rammer. *Quantum Field Theory of Non-equilibrium States*. Cambridge: Cambridge University Press, 2007. DOI: 10.1017/CBO9780511618956.

[29] Milton Abramowitz i Irene A. Stegun, red. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. T. 55. Applied Mathematics Series. Washington, DC: National Bureau of Standards, 1964.

[30] H. Zhang i in. „Topological insulators in Bi_2Se_3, Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with a single Dirac cone on the surface". W: *Nature Physics* 5 (2009), s. 438–442. DOI: 10.1038/nphys1270.

[31] D. Hsieh i in. „Observation of Unconventional Quantum Spin Textures in Topological Insulators". W: *Science* 323 (2009), s. 919–922. DOI: 10.1126/science.1167733.

[32] Y. Xia i in. „Observation of a large-gap topological-insulator class with a single Dirac cone on the surface". W: *Nature Physics* 5 (2009), s. 398–402. DOI: 10.1038/nphys1274.

[33] P. Roushan i in. „Topological surface states protected from backscattering by chiral spin texture". W: *Nature* 460 (2009), s. 1106–1109. DOI: 10.1038/nature08308.

[34] Y. L. Chen i in. „Massive Dirac Fermion on the Surface of a Magnetically Doped Topological Insulator". W: *Science* 329 (2010), s. 659–662. DOI: 10.1126/science.1189924.

[35] L. A. Wray i in. „A topological insulator surface under strong Coulomb, magnetic and disorder perturbations". W: *Nature Physics* 7 (2011), s. 32–37. DOI: 10.1038/nphys1838.

[36] E. I. Rashba. „Properties of semiconductors with an extremum loop. I. Cyclotron and combinational resonance in a magnetic field perpendicular to the plane of the loop". W: *Soviet Physics–Solid State* 2 (1960), s. 1109–1122.

[37] J. Nitta i in. „Gate Control of Spin-Orbit Interaction in an Inverted $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ Heterostructure". W: *Physical Review Letters* 78 (1997), s. 1335–1338. DOI: 10.1103/PhysRevLett.78.1335.

[38] D. Grundler. „Large Rashba Splitting in InAs Quantum Wells due to Electron Wave Function Penetration into the Barrier Layers". W: *Physical Review Letters* 84 (2000), s. 6074–6077. DOI: 10.1103/PhysRevLett.84.6074.

[39] T. Koga i in. „Rashba Spin-Orbit Coupling Probed by the Weak Antilocalization Analysis in InAlAs/InGaAs/InAlAs Quantum Wells as a Function of Quantum Well Asymmetry". W: *Physical Review Letters* 89 (2002), s. 046801. DOI: 10.1103/PhysRevLett.89.046801.

[40] J. R. Bindel i in. „Probing variations of the Rashba spin-orbit coupling at the nanometre scale". W: *Nature Physics* 12 (2016), s. 920–925. DOI: 10.1038/nphys3774.

[41] P. Wei i in. „Exchange-Coupling-Induced Symmetry Breaking in Topological Insulators". W: *Physical Review Letters* 110 (2013), s. 186807. DOI: 10.1103/PhysRevLett.110.186807.

[42] Cui-Zu Chang i in. „Experimental Observation of the Quantum Anomalous Hall Effect in a Magnetic Topological Insulator". W: *Science* 340 (2013), s. 167–170. DOI: 10.1126/science.1234414.

[43] T. Valla i in. „Photoemission Spectroscopy of Magnetic and Nonmagnetic Impurities on the Surface of the Bi_2Se_3 Topological Insulator". W: *Physical Review Letters* 108 (2012), s. 117601. DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.117601.

[44] J. Honolka i in. „In-Plane Magnetic Anisotropy of Fe Atoms on $Bi_2Se_3(111)$". W: *Physical Review Letters* 108 (2012), s. 256811. DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.256811.

[45] P. Sessi i in. „Signatures of Dirac fermion-mediated magnetic order". W: *Nature Communications* 5 (2014), s. 5349. DOI: 10.1038/ncomms6349.

[46] Gustav Bihlmayer i in. „Rashba-like physics in condensed matter". W: *Nature Reviews Physics* 4 (2022), s. 642–659. DOI: 10.1038/s42254-022-00490-y.

[47] Cui-Zu Chang, Chao-Xing Liu i Allan H. MacDonald. „Colloquium: Quantum anomalous Hall effect". W: *Reviews of Modern Physics* 95 (2023), s. 011002. DOI: 10.1103/RevModPhys.95.011002.

[48] S. Wolski, V. K. Dugaev i E. Ya. Sherman. „Magnetic scattering with spin-momentum locking: Single scatterers and diffraction grating". W: *Physical Review Research* 5 (2023), s. 023164. DOI: 10.1103/PhysRevResearch.5.023164.

[49] Eric Akkermans i Gilles Montambaux. *Mesoscopic Physics of Electrons and Photons*. Cambridge: Cambridge University Press, 2007.