

05

Эффект управления спиновой поляризацией электронов проводимости через деформацию ферромагнетика

© В.К. Игнатьев, Н.Г. Лебедев, Д.А. Станкевич

Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия
E-mail: nikolay.lebedev@volsu.ru

Поступило в Редакцию 13 сентября 2022 г.

В окончательной редакции 13 сентября 2022 г.

Принято к публикации 13 октября 2022 г.

Предложена модель обменного взаимодействия коллективизированных электронов проводимости с электронами намагниченности в деформированном ферромагнетике с учетом спин-орбитальных поправок. В условиях дисторсии неоднородного кручения спин электронов проводимости в домене ориентирован вдоль вектора обменного взаимодействия. Если вектор плотности тока проводимости ортогонален оси кручения, то средний спин электронов проводимости будет ориентирован преимущественно вдоль вектора плотности тока.

Ключевые слова: спин-орбитальное взаимодействие, переходные металлы, функции Ванье, дисторсия кручения.

DOI: 10.21883/PJTF.2022.23.53949.19363

Современная спинтроника посвящена изучению эффектов, в которых существенную роль играют спиновые степени свободы. Одним из ее направлений является изучение спиновых потоков в проводниках и полупроводниках с целью их использования в различного рода устройствах микроэлектроники [1]. Динамика спина коллективизированных электронов проводимости в системах спинтроники традиционно моделируется гамильтонианами Рашбы и Дрессельхауса, учитывающими энергию спин-орбитального взаимодействия электрона проводимости [2]. Оценки показывают, что это взаимодействие может обеспечить когерентность спиновой поляризации на расстояниях порядка $0.1 \mu\text{m}$, но его недостаточно для эффективной макроскопической (порядка 1mm) поляризации спиновых токов в полукристаллах. В последние десятилетия сформировалось новое научное направление физики конденсированного состояния — стрейнтроника, использующая физические эффекты в веществе, обусловленные деформациями, возникающими в микро-, нано- и гетероструктурах под действием внешних управляющих полей, приводящих к изменению электронного строения, электрических, магнитных, оптических и других свойств материалов [3]. Одна из ветвей стрейнтроники направлена на изучение влияния механических напряжений на электронные свойства вещества.

В рамках построенных ранее авторских моделей деформированного ферромагнетика показано, что кристаллическое поле эффективно взаимодействует со спиновыми моментами локализованных электронов [4], учет спин-орбитального взаимодействия может эффективно поляризовать электроны проводимости в макроскопической области [5].

Новизна предлагаемого подхода заключается в учете в модельном гамильтониане обменного взаимодействия коллективизированных электронов проводимости с электронами намагниченности в кристаллическом поле деформированного ферромагнетика релятивистских спин-орбитальных поправок второго порядка. Ранее такое взаимодействие не принималось во внимание, так как в недеформированном кристалле оно не создает макроскопической когерентной поляризации спиновых токов.

Рассмотрим обменное взаимодействие двух электронов, коллективизированного и локализованного, в домене однородного и изотропного ферромагнетика с учетом спин-орбитального взаимодействия, т.е. релятивистских поправок во втором порядке по величине $1/c$, где c — скорость света. Энергия кулоновского взаимодействия рассматриваемых электронов друг с другом, а также с остальными электронами домена, как коллективизированными, так и локализованными в ионах, т.е. с кристаллом, в рамках метода самосогласованного поля учтена заменой их массы m на эффективную массу m^* .

Спин-орбитальные добавки в энергию двух электронов, находящихся в точках с радиус-векторами \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , имеют традиционный вид [6]:

$$\hat{V} = \frac{\hbar e}{2m^*c^2} \left(\left[\mathbf{E}_1(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{p}}_1 \right] \hat{\mathbf{s}}_1 + \left[\mathbf{E}_2(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{p}}_2 \right] \hat{\mathbf{s}}_2 \right), \quad (1)$$

где \hbar — постоянная Дирака, \mathbf{p}_i и \mathbf{s}_i — операторы импульса и спина i -го электрона. Аргумент поля \mathbf{E} такой же, как у волновой функции, на которую действует оператор.

Рассматривая сумму (1) как возмущение, найдем его среднее значение V в состоянии

$$\psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \mathbf{r}_2, \sigma_2) = (\psi_1(\mathbf{r}_1, \sigma_1)\psi_2(\mathbf{r}_2, \sigma_2) - \psi_1(\mathbf{r}_2, \sigma_2)\psi_2(\mathbf{r}_1, \sigma_1))/\sqrt{2},$$

составленном из одночастичных спин-орбиталей $\psi(\mathbf{r}_i, \sigma_i)$, σ_i — спиновая переменная i -го электрона. Примем, что первый электрон — коллективизированный электрон проводимости i -го узла, а второй электрон локализован в j -м узле кристаллической решетки домена, и запишем волновую функцию коллективизированного электрона в виде функции Ванье

$$\psi_1(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N W_C(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i - \mathbf{R}_n) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_n),$$

$$\psi_2(\mathbf{r}) = W_L(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad (2)$$

где $W_C(\mathbf{r})$ и $W_L(\mathbf{r})$ — водородоподобные функции коллективизированного и локализованного электронов; \mathbf{R}_n — вектор трансляции; линейная комбинация векторов решетки $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$; \mathbf{r}_i и \mathbf{r}_j — координаты i -го и j -го узлов решетки.

Будем считать, что все спины локализованных электронов в домене из-за обменного взаимодействия ориентированы одинаково (например, вдоль оси легчайшего намагничивания), соответственно все $\mathbf{s}_j = \mathbf{s}_L$. Рассматривая энергию обменного взаимодействия коллективизированного электрона проводимости со всеми локализованными электронами намагниченности как сумму его парных взаимодействий вида (1), подставим в формулы (1) соотношения (2), пренебрегая зависимостью водородоподобных функций от спин-спинового взаимодействия. После суммирования по спиновым переменным получаем

$$V = (\mathbf{J}_C \mathbf{s}_i)(\mathbf{s}_i \mathbf{s}_L) + (\mathbf{J}_L \mathbf{s}_L)(\mathbf{s}_i \mathbf{s}_L). \quad (3)$$

В формуле (3) введены следующие обозначения:

$$\mathbf{J}_L = -\frac{2DZ}{\hbar N} \sum_{j=1}^N \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)} \times \left\langle \Psi_C^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m + \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \frac{\hat{\mathbf{I}}}{r^3} \Psi_L(\mathbf{r}) \right\rangle \times \langle \Psi_L^*(\mathbf{r}) \Psi_C(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n + \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \rangle, \quad (4)$$

$$\mathbf{J}_C = -\frac{2DZ}{\hbar N} \sum_{j=1}^N \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)} \times \left\langle \Psi_L^*(\mathbf{r}) \frac{\hat{\mathbf{I}}}{r^3} \Psi_C(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m + \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \right\rangle \times \langle \Psi_C^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n + \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \Psi_L(\mathbf{r}) \rangle = \mathbf{J}_L^*. \quad (5)$$

Здесь Z — эффективный заряд ионного остатка, \mathbf{I} — оператор орбитального момента электрона. Его можно оценить, приравняв координату максимума радиальной компоненты водородоподобной волновой функции к радиусу ионного остатка Me^{3+} . Для железа и кобальта радиус ионного остатка равен $6.3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$, что соответствует эффективному заряду $Z \approx 5.2$. Величина $D = \hbar^2 e^2 / (8\pi \epsilon_0 m^* c^2) \approx 2 \cdot 10^{-51} \text{ J} \cdot \text{m}^3$ при $m^* \approx 0.3m$. Под действием кристаллического поля орбитали электронов ориентируются по осям симметрии кристалла. Поэтому можно считать, что оси, в которых рассчитаны интегралы (4), (5) и последующие, жестко связаны с базисными векторами \mathbf{a}_ν кристалла.

Водородоподобные функции малы при $r > na_B/Z$, где $a_B = 5.3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ — боровский радиус, n — главное квантовое число. Поэтому первый интеграл в (4) и (5) отличен от нуля только при $\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i - \mathbf{R}_m = 0$ или $\pm \mathbf{a}_\nu$, а второй — при $\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i - \mathbf{R}_n = 0$ или $\pm \mathbf{a}_\nu$. При $\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i - \mathbf{R}_n = 0$ или $\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i - \mathbf{R}_m = 0$ соответствующие интегралы в недеформированном кристаллите равны нулю, так как различные атомные функции одного атома ортогональны. В переходных металлах s - и p -зоны перекрываются [7]. Поэтому электроны проводимости могут формироваться из p -орбиталей. Для p - d -взаимодействия формула (4) принимает вид

$$\mathbf{J}_L = -2DZ \langle \Psi_P(\mathbf{r}) \Psi_D^*(\mathbf{r}) \rangle \left\langle \Psi_P^*(\mathbf{r}) \frac{\hat{\mathbf{I}}}{r^3} \Psi_D(\mathbf{r}) \right\rangle - 4DZi \sum_{\nu=1}^3 \sin(\mathbf{k}\mathbf{a}_\nu) \times \left\{ \langle \Psi_P(\mathbf{r} + \mathbf{a}_\nu) \Psi_D^*(\mathbf{r}) \rangle \left\langle \Psi_P^*(\mathbf{r}) \frac{\hat{\mathbf{I}}}{r^3} \Psi_D(\mathbf{r}) \right\rangle + \langle \Psi_P(\mathbf{r}) \Psi_D^*(\mathbf{r}) \rangle \left\langle \Psi_P^*(\mathbf{r} + \mathbf{a}_\nu) \frac{\hat{\mathbf{I}}}{r^3} \Psi_D(\mathbf{r}) \right\rangle \right\}. \quad (6)$$

Здесь в интегралах, содержащих функции $\Psi_P(\mathbf{r} - \mathbf{a}_\nu)$, выполнена замена переменных $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ с учетом нечетности функции $\Psi_P(\mathbf{r})$ и опущено слагаемое второго порядка малости по параметру $\exp(-|\mathbf{a}_\nu|/a_B)$. В недеформированном кристаллите величина $\mathbf{J}_L = 0$.

Энергия обменного взаимодействия электрона проводимости с электронами намагниченности в ферромагнетике порядка энергии обменного взаимодействия соседних локализованных электронов и намного больше энергии магнитной анизотропии. Поэтому в (3) можно положить $\mathbf{s}_i = \mathbf{s}_L$ и $\mathbf{s}_L \mathbf{s}_i = 3/4$. Тогда, обозначив $\mathbf{J} = \text{Re} \mathbf{J}_L$, получаем

$$V = 3\mathbf{J}\mathbf{s}_i/2. \quad (7)$$

При неоднородной дисторсии точка, в том числе узел кристалла с координатой \mathbf{r} , смещается в новое положение с координатой \mathbf{r}' на вектор \mathbf{u} [7]:

$$r'_\alpha = r_\alpha + u_\alpha(\mathbf{r}), \quad dr'_\alpha = \left(\delta_{\alpha\beta} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial r_\beta} \right) dr_\beta,$$

$$dr_\beta = \left(\delta_{\alpha\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial r_\alpha} \right)^{-1} dr'_\alpha \approx \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{\partial u_\beta}{\partial r_\alpha} \right) dr'_\alpha,$$

$$\frac{\partial}{\partial r'_\alpha} = \frac{\partial r_\beta}{\partial r'_\alpha} \frac{\partial}{\partial r_\beta} = \frac{\partial}{\partial r_\alpha} - \frac{\partial u_\beta}{\partial r_\alpha} \frac{\partial}{\partial r_\beta},$$

$$\hat{l}'_\alpha = -i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} r'_\beta \frac{\partial}{\partial r'_\gamma} = \hat{l}_\alpha - i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \left(u_\beta \frac{\partial}{\partial r_\gamma} - r_\beta \frac{\partial u_\delta}{\partial r_\gamma} \frac{\partial}{\partial r_\delta} \right),$$

$$\Psi(\mathbf{r}') = \Psi(\mathbf{r}) + \frac{\partial \Psi}{\partial r_\alpha} u_{\alpha\beta} r_\beta,$$

где $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ — единичный антисимметричный тензор Леви–Чивитты, $u_{\alpha\beta} = \partial_\beta u_\alpha$ — тензор дисторсии, $\alpha, \beta, \gamma = x, y, z$. Соответственно меняется ориентация кристаллических осей и орбиталей валентных электронов. При дисторсии кручения образца вдоль оси \mathbf{n} вида $\Omega(\mathbf{r}) = \mathbf{n}(\mathbf{r}\mathbf{n})\omega$, где ω — погонное кручение, ограничиваясь первой степенью дисторсии, получаем

$$u_\beta = \omega \varepsilon_{\beta\sigma\nu} n_\sigma n_\mu r_\nu r_\mu,$$

$$u_{\gamma\delta} = \omega \varepsilon_{\delta\sigma\nu} n_\sigma n_\mu (r_\nu \delta_{\mu\gamma} + r_\mu \delta_{\nu\gamma})$$

$$= \omega \varepsilon_{\delta\sigma\nu} n_\sigma n_\gamma r_\nu + \omega \varepsilon_{\delta\sigma\gamma} n_\sigma n_\mu r_\mu,$$

$$\hat{\mathbf{l}}' = \hat{\mathbf{l}} + \omega(\mathbf{n}\mathbf{r})[\mathbf{n} \times \hat{\mathbf{l}}] + \omega(\mathbf{n}\hat{\mathbf{l}})[\mathbf{n} \times \mathbf{r}],$$

$$\hat{l}'_\alpha = \hat{l}_\alpha + \omega \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} n_\beta n_\delta (r_\delta \hat{l}_\gamma + r_\gamma \hat{l}_\delta),$$

$$\Psi(\mathbf{r}') = \Psi(\mathbf{r}) + i\Omega(\mathbf{r})\hat{\mathbf{l}}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r}) + i\omega n_\beta n_\delta r_\delta \hat{l}_\beta \Psi(\mathbf{r}). \quad (8)$$

Из соотношений (8) с учетом эрмитовости оператора момента и коммутационных соотношений $[\hat{l}_\alpha, \hat{l}_\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{l}_\gamma$, $[\hat{l}_\alpha, r_\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} r_\gamma$ в линейном по ω приближении получаем

$$\langle \Psi'_C | \Psi'_L \rangle - \langle \Psi_C | \Psi_L \rangle = \omega n_\beta n_\delta \{ i \langle \Psi_C | r_\delta \hat{l}_\beta \Psi_L \rangle$$

$$- i \langle r_\delta \hat{l}_\beta \Psi_C | \Psi_L \rangle \} = \omega \varepsilon_{\beta\delta\gamma} n_\beta n_\delta \langle \Psi_C | r_\gamma | \Psi_L \rangle = 0,$$

$$\langle \Psi'_C | \hat{l}'_\alpha | \Psi'_L \rangle - \langle \Psi_C | \hat{l}_\alpha | \Psi_L \rangle = \omega n_\beta n_\delta \{ i \langle \Psi_C | \hat{l}_\alpha | r_\delta \hat{l}_\beta \Psi_L \rangle$$

$$- i \langle r_\delta \hat{l}_\beta \Psi_C | \hat{l}_\alpha | \Psi_L \rangle + \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \langle \Psi_C | r_\delta \hat{l}_\gamma + r_\gamma \hat{l}_\delta | \Psi_L \rangle \}$$

$$= 2\omega \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} n_\beta n_\delta \langle \Psi_C | r_\gamma \hat{l}_\delta | \Psi_L \rangle.$$

Подставим эти соотношения в уравнение (6) и в первом порядке малости по ω и $\mathbf{k}\mathbf{a}_v$ получим

$$J_{\alpha'} = \varepsilon_{\alpha'\beta'\gamma'} n_{\beta'} n_{\delta'} k_{\sigma'} a_{\nu\sigma'} B_{\nu\gamma'\delta'},$$

$$B_{\nu\gamma'\delta'} = 4ZD\omega \text{Im} \left\{ \langle \Psi_P(\mathbf{r} + \mathbf{a}_v) \Psi_D^*(\mathbf{r}) \rangle \langle \Psi_P^*(\mathbf{r}) \frac{r_{\gamma'} \hat{l}_{\delta'}}{r^3} \Psi_D(\mathbf{r}) \rangle \right\}. \quad (9)$$

Соотношение (9) записано в системе координат, связанной с кристаллическими осями домена. Из уравнения (7) следует, что средний спин электронов проводимости в домене ориентирован вдоль вектора \mathbf{J} . Рассмотрим макроскопическую область многодоменного ферромагнетика, однородного и изотропного в отсутствие

деформаций. Введем лабораторную систему координат, связанную с приборами, которые задают деформации и измеряют компоненты спина. Компоненты векторов и тензоров в лабораторной системе будем обозначать индексами без штриха, а в системе координат, связанной с кристаллическими осями домена, — индексами со штрихом. Зададим в лабораторной системе кручение на угол $\Omega(\mathbf{r})$.

Преобразуем вектор кручения и волновой вектор из лабораторной системы в систему кристаллических осей: $n_{\beta'} = p_{\beta'\beta} n_\beta$, $k_{\sigma'} = p_{\sigma'\sigma} k_\sigma$, где $p_{\beta'\beta}$ — унитарная матрица поворота. Подставив это преобразование в уравнение (9), преобразуем компоненты векторов \mathbf{J} и \mathbf{l}_L из системы кристаллических осей в лабораторную систему

$$J_\alpha = m^* p_{\alpha\alpha'}^{-1} p_{\beta'\beta} p_{\delta'\delta} p_{\sigma'\sigma} j_\sigma \varepsilon_{\alpha'\beta'\gamma'} n_{\beta'} n_{\delta'} a_{\nu\sigma'} B_{\nu\gamma'\delta'} / (ne\hbar), \quad (10)$$

где j — плотность тока проводимости, n — концентрация электронов проводимости.

Усредним вектор \mathbf{J} (10) в макроскопической области по случайным ориентациям кристаллитов. Матрицу поворота удобно выразить через углы Эйлера. Аналитическое усреднение дает выражение для усредненного вектора \mathbf{J} в виде

$$\bar{\mathbf{J}} = \frac{2m^* ZD\omega}{3ne\hbar} \text{Im} \left\{ \langle \Psi_P(\mathbf{r} + \mathbf{a}_v) \Psi_D^*(\mathbf{r}) \rangle \right.$$

$$\left. \times \left\langle \Psi_P^*(\mathbf{r}) \frac{\mathbf{a}_v [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{l}}]}{r^3} \Psi_D(\mathbf{r}) \right\rangle \right\} [\mathbf{n} \times [\mathbf{n} \times \mathbf{j}]]. \quad (11)$$

Скаляр в фигурных скобках в формуле (11), где подразумевается суммирование по ν , зависит только от свойств недеформированного кристалла. Его можно вычислить в осях симметрии кристалла. Двойное векторное произведение в (11) состоит из векторов, заданных в лабораторной системе координат и описывающих воздействие на поликристаллический образец. Его модуль максимален, когда вектор плотности тока проводимости ортогонален оси кручения. В этом случае средний спин электронов проводимости будет ориентирован преимущественно вдоль вектора плотности тока.

За последние годы появился ряд экспериментальных работ, в которых обнаруженные эффекты спинтроники и спинкалоритроники еще не получили объяснения: управление направлением потока тепла магнитно-термоэлектрическим эффектом в деформированном металлческом магнетике [8], расширение температурного диапазона накачки тепла с помощью эластокалорического эффекта [9], аномальный эффект Риги–Ледюка в ферромагнитных материалах [10]. Представленная в работе модель может лечь в основу теории новых эффектов.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда № 22-22-20035

(<https://rscf.ru/project/22-22-20035/>) и за счет средств бюджета Волгоградской области.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Н.Г. Бебенин, ЖЭТФ, **161** (5), 737 (2022). DOI: 10.31857/S004445102205011X [N.G. Bebenin, JETP, **134** (5), 630 (2022). DOI: 10.1134/S1063776122050028].
- [2] S. Zhang, in *Spin current*, ed. by S. Maekawa, S.O. Valenzuela, E. Saitoh, T. Kimura (University Press, Oxford, 2012), p. 424.
- [3] А.А. Бухараев, А.К. Звездин, А.П. Пятаков, Ю.К. Фетисов, УФН, **188** (12), 1288 (2018). DOI: 10.3367/UFNr.2018.01.038279 [A.A. Bukharaev, A.K. Zvezdin, A.P. Pyatakov, Yu.K. Fetisov, Phys. Usp., **61** (12), 1175 (2018). DOI: 10.3367/UFNe.2018.01.038279].
- [4] V.K. Ignatiev, N.G. Lebedev, A.A. Orlov, S.V. Perchenko, J. Magn. Magn. Mater., **494**, 165658 (2020). DOI: 10.1016/j.jmmm.2019.165658
- [5] В.К. Игнатъев, Н.Г. Лебедев, Д.А. Станкевич, в сб. *Материалы Междунар. науч.-практ. конф. „Материаловедение, формообразующие технологии и оборудование 2022“* (Симферополь, 2022), с. 438.
- [6] В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, *Квантовая электродинамика* (Физматлит, М., 2002). [V.B. Berestetskii, E.M. Lifshitz, L.P. Pitaevskii, *Quantum electrodynamics*, 2nd ed. (Elsevier, Amsterdam, 1982), vol. 4].
- [7] Г.С. Кринчик, *Физика магнитных явлений* (Изд-во МГУ, М., 1976).
- [8] S. Ota, K.-I. Uchida, R. Iguchi, P.V. Thach, H. Awano, D. Chiba, Sci. Rep., **9**, 13197 (2019). DOI: 10.1038/s41598-019-49567-2
- [9] R. Snodgrass, D. Erickson, Sci. Rep., **9**, 18532 (2019). DOI: 10.1038/s41598-019-54411-8
- [10] D.-K. Zhou, Q.-L. Xu, X.-Q. Yu, Z.-G. Zhu, G. Su, Sci. Rep., **10**, 11732 (2020). DOI: 10.1038/s41598-020-68669-w