

***Ab initio* расчеты времени и длины спиновой релаксации возбужденных электронов в металлах методом GW с включенным спин-орбитальным взаимодействием**

© В.П. Жуков^{*,**}, Е.В. Чулков^{***,***}

* Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, Россия

** Donostia International Physics Center (DIPC), San Sebastian, Basque Country, Spain

*** Departamento de Fizika de Materiales, Facultad de Ciencias Quimicas, UPV/EHU and Centro Mixto CSIC-UPV/EHU, San Sebastian, Basque Country, Spain

E-mail: zhukov@ihim.uran.ru

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 6 декабря 2008 г.)

На основе метода GW с включенным спин-орбитальным взаимодействием развит *ab initio* метод расчета времени спиновой релаксации возбужденных электронов в металлах. Выполнены расчеты времени и длины спиновой релаксации в Al, Cu, Au, Nb и Ta. Введена концепция фазового пространства поворота спина. Показано, что отношение времени релаксации спина к времени жизни возбужденного электрона хорошо объясняется на базе данной концепции. Время и длина спиновой релаксации в Nb оказываются гораздо меньше, чем в Al, Cu и Au. В особенности малы эти величины для Ta в соответствии с сильным спин-орбитальным взаимодействием. Сопоставление результатов с предыдущими данными по времени и пути спиновой релаксации из-за взаимодействия с примесями и фононами показывает, что при энергии возбужденного электрона около 1 eV неупругое электрон-электронное рассеяние в присутствии спин-орбитального взаимодействия является доминирующим механизмом спиновой релаксации.

Работа выполнена при поддержке Департамента образования правительства Страны Басков, Испания, Министерства науки и технологий Испании (грант № MAT2001) и проекта Европейского сообщества „6th Network of Excellence NANOQUANTA (NMP-4-CT-2004-500198)“.

PACS: 71.15.Qe, 72.15.Lh, 85.75.-d

1. Введение

Спиновая динамика делокализованных электронов в металлах и полупроводниках является одним из важнейших объектов исследований, связанных с современной спиновой электроникой. В частности, в течение последних 10–15 лет интенсивно исследовались механизмы спиновой релаксации [1]. Была разработана теория механизмов спиновой релаксации для возбужденных электронов с энергией вблизи уровня Ферми. В ней было показано, что основными являются механизмы Эллиотта–Яфета, Дьяконова–Переля, Бира–Аронова–Пикуса и механизм сверхтонкого взаимодействия [1]. Наиболее важным из них является механизм Эллиотта–Яфета, согласно которому релаксация спина, т. е. потеря его ориентации в пространстве, осуществляется через взаимодействие с примесями при низких температурах и фононами при высоких температурах, причем оба типа взаимодействий опосредованы спин-орбитальным спариванием. На основе этого механизма был выполнен ряд реалистических расчетов времени спиновой релаксации τ_{sr} ; был также получен ряд предсказаний, касающихся, например, температурной зависимости τ_{sr} , которые получили экспериментальное подтверждение [1–3]. Расчеты τ_{sr} весьма важны для разработки новых спинтронных приборов, поскольку эта величина является одной из базисных характеристик процессов в спин-

тронных приборах, например процессов инъекции спин-поляризованных электронов через интерфейсы металл–металл [1,2,4].

В настоящее время расчеты скорости релаксации спинов проводятся в основном исходя из модельных представлений о зонной структуре металлов, тогда как использование *ab initio* расчетов весьма ограничено. Ввиду низкой точности модельных расчетов важной задачей является развитие полностью *ab initio* методов расчета динамики спиновой релаксации. Однако авторам известны лишь два примера методов расчета из первых принципов спиновой релаксации на основе механизма Эллиотта–Яфета, а именно расчеты спиновой релаксации при энергии вблизи уровня Ферми для алюминия [2] и полупроводников GaAs, GaN [3].

Неудовлетворительным является уровень теоретических исследований, относящихся к спиновой релаксации электронов с энергией выше энергии тепловых возбуждений. Важность таких исследований вытекает из использования тонких изолирующих слоев между проводящими металлическими слоями спинтронных приборов [5,6]. Нанесение таких слоев является средством преодоления проблемы рассогласования проводимости металлических слоев, которая является препятствием к достижению высокой эффективности процессов инъекции спина. Высота потенциальных барьеров между проводящими слоями может достигать нескольких де-

сятых электронвольта. В особенности высокие барьеры, до 1 eV, могут существовать в спин-клапанных и магнитных туннельных транзисторах, которые являются перспективными классами спинтронных приборов [1,5]. При таких условиях можно ожидать, что значительная часть носителей тока имеет энергию, близкую к высоте потенциального барьера. Длина свободного пробега электронов с такой энергией интенсивно изучалась в экспериментах [5]. Надавню времена жизни и длины свободного пробега возбужденных электронов во многих металлах были успешно вычислены с использованием *ab initio* метода GW [7]. Однако подходы ко времени и длине спиновой релаксации из первых принципов при таких энергиях пока отсутствуют.

Можно предполагать, что при энергии около 1 eV для возбужденных электронов в металлах и узкозонных полупроводниках (в дополнение к указанным выше механизмам спиновой релаксации) также важными, а вероятно, и более эффективными могут быть процессы релаксации спина вследствие неупругого электрон-электронного рассеяния с передачей энергии на возбуждение электрон-дырочных пар. Обоснованность этого предположения следует из того, что неупругое электрон-электронное рассеяние является важнейшим из всех механизмов, определяющих время жизни возбужденных электронов в металлах [8–11]. Очевидно, однако, что релаксация спинов в таких процессах может идти только при наличии спин-орбитального взаимодействия (СОВ), которым в расчетах времени жизни обычно пренебрегают. Ранее роль подобных релаксационных процессов на модельном уровне была изучена в работе [12] для возбужденных электронов в полупроводниках при высокой температуре. Такие процессы можно рассматривать как еще один вид релаксации по Эллиотту–Яфету, в которой передача энергии в присутствии СОВ происходит не к фононам, а к электрон-дырочным парам. В настоящей работе мы развиваем *ab initio* подход к расчетам времени жизни электронных возбуждений и времени спиновой релаксации исходя из механизма релаксации такого вида. Наш подход базируется на методе GW многочастичной теории возмущений [13–15], но он учитывает СОВ. Мы изучаем времена жизни электронных возбуждений, времена и длины релаксации спинов возбужденных электронов в Al, Cu, Au, Nb и Ta. В ходе расчетов мы приходим к некоторым нетривиальным результатам, относящимся к изменениям времени релаксации в исследованном ряду объектов. Мы вводим концепцию фазового пространства поворота спина, которая позволяет дать объяснение этим результатам. Сравнивая наши расчетные результаты с предыдущими экспериментальными данными по спиновой релаксации, приходим к выводам об эффективности неупругого электрон-электронного рассеяния в присутствии СОВ.

2. Теория

Большинство *ab initio* подходов к динамике возбужденных электронов базируются на собственно энергетическом формализме многочастичной теории (см., на-

пример, [9,13–17]). В этом формализме уравнение движения для функции Грина $G(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t')$ возбужденного электрона (или дырки) в твердом теле имеет вид

$$[i(\partial/\partial t) - h(\mathbf{x}) - V_H(\mathbf{x}, t)]G(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') - \int d\mathbf{x}'' dt'' \Sigma(\mathbf{x}t, \mathbf{x}''t'')G(\mathbf{x}''t'', \mathbf{x}'t') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(t - t') \quad (1)$$

(в этом разделе используются атомные единицы Хартри, т. е. $\hbar = e = m_e = 1$, где e — заряд электрона, а m_e — его масса). Оператор $h(\mathbf{x})$ включает кинетическую энергию и энергию взаимодействия с ядрами, $\Sigma(\mathbf{x}t, \mathbf{x}''t'')$ — оператор собственной энергии, а $V_H(\mathbf{x}, t)$ — электростатическая энергия Хартри

$$V_H(\mathbf{x}, t) = \int d\mathbf{r}' V_c(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}'), \quad (2)$$

которая определяется обычным кулоновским потенциалом V_c и электронной плотностью ρ . Здесь используются обозначения вида $\mathbf{x} = (\mathbf{r}, \sigma)$, где \mathbf{r} и σ — соответственно пространственная и спиновая переменные. Уравнение (1) эквивалентно известному уравнению Дайсона [16]

$$G(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = G_0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') + G_0(\mathbf{x}t, \mathbf{x}''t'')\Sigma(\mathbf{x}''t'', \mathbf{x}'''t''')G(\mathbf{x}'''t''', \mathbf{x}'t'), \quad (3)$$

в котором G_0 — функция Грина без взаимодействия, т. е. решение уравнения (1) при $\Sigma = 0$, и по повторяющимся переменным предполагается интегрирование. В стационарных условиях, т. е. когда свойства системы зависят от разности $t-t'$, а не от конкретных t и t' , преобразование Фурье по отношению к $t-t'$ приводит уравнение (1) к виду

$$[\omega - h(\mathbf{x}) - V_H(\mathbf{x})]G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega) - \int d\mathbf{x}'' \Sigma(\mathbf{x}, \mathbf{x}'', \omega)G(\mathbf{x}'', \mathbf{x}', \omega) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (4)$$

Общий подход к расчету G заключается в использовании спектрального представления

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}, \omega)\psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{x}', \omega)}{\omega - E_{\mathbf{k}}(\omega)}, \quad (5)$$

где $\psi_{\mathbf{k}}$ — функции, удовлетворяющие квазичастичному уравнению

$$[E_{\mathbf{k}}(\omega) - h(\mathbf{x}) - V_H(\mathbf{x})]\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}, \omega) - \int d\mathbf{x}' \Sigma(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \omega)\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}', \omega) = 0. \quad (6)$$

Собственные значения этого уравнения являются комплексными, т. е. $E_{\mathbf{k}} = \text{Re } E_{\mathbf{k}} + i \text{Im } E_{\mathbf{k}}$. Из разложения (5) следует, что мнимая часть G (спектральная функция) состоит из серии пиков Лоренца с максимумами

на частотах $\omega_{\mathbf{k}} = \text{Re } E_{\mathbf{k}}$ и с шириной на полувысоте $\Gamma_{\mathbf{k}} = 2 \text{Im } E_{\mathbf{k}}$. В многочастичной теории доказывается, что для электронной функции Грина величины $\text{Re } E_{\mathbf{k}}$ соответствуют энергиям возбуждения $N + 1$ -электронной системы (с одним добавочным электроном), а для дырочной функции Грина — энергиям возбуждения $N - 1$ -электронной системы (т. е. с добавленной дыркой). Доказывается также, что временная эволюция функции Грина при $\omega = E_{\mathbf{k}}$ следует закону $\exp(-\Gamma_{\mathbf{k}}t)$. Таким образом, из уравнения (6) можно получить скорость затухания электронного или дырочного возбужденного состояния $\Gamma_{\mathbf{k}}$ и его время жизни, которое определяется как $\tau_{\mathbf{k}} = \hbar/\Gamma_{\mathbf{k}}$. Обычно используется версия собственно энергетического формализма при $\sigma = \sigma'$, т. е. для состояний, чистых по спину. Смешивание спиновых координат за счет СОВ может быть включено в теорию следующим образом.

Выражение для оператора СОВ, получаемое из уравнения Дирака после преобразования Фолди–Ваутхаузена, имеет вид [18]

$$\hat{H}^{\text{SO}} = -\frac{1}{4c^2} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{E} \times \mathbf{p}), \quad (7)$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ — вектор матриц Паули, $\mathbf{E} = -\nabla V$ — электрическое поле, а \mathbf{p} — оператор импульса. В присутствии СОВ зонная структура парамагнитного твердого тела с центром симметрии из вырожденных состояний со спиновыми компонентами [1]

$$\begin{aligned} \xi_{\mathbf{p},+} &= \rho_{\mathbf{p}}^{\uparrow} | \uparrow \rangle + \rho_{\mathbf{p}}^{\downarrow} | \downarrow \rangle, \\ \xi_{\mathbf{p},-} &= \rho_{-\mathbf{p}}^{\uparrow*} | \downarrow \rangle - \rho_{-\mathbf{p}}^{\downarrow*} | \uparrow \rangle. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь $\rho_{\mathbf{p}}^{\uparrow}$, $\rho_{\mathbf{p}}^{\downarrow}$ — веса чистых состояний со спином вверх и со спином вниз для спин-смешанного состояния с импульсом \mathbf{p} ; предполагается обычная нормировка $|\rho_{\mathbf{p}}^{\uparrow}|^2 + |\rho_{\mathbf{p}}^{\downarrow}|^2 = 1$. Обычно $\rho_{\mathbf{p}}^{\uparrow} \gg \rho_{\mathbf{p}}^{\downarrow}$, потому мы отнесли к вырожденным состояниям псевдоспиновые „квантовые числа“ $+$ и $-$. В отличие от экранированного электрон-электронного взаимодействия, по степеням которого в многочастичной теории производится разложение собственной энергии, СОВ в приведенном выше виде является локальным и мгновенным, что облегчает его рассмотрение. А именно, следуя по пути, по которому выводится уравнение движения для функции Грина (1) без СОВ [19], можно показать, что с учетом СОВ собственную энергию следует определить как

$$\begin{aligned} \Sigma^{\text{SO}}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') &= \Sigma(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') \\ &+ \frac{1}{4c^2} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \nabla V(\mathbf{r}') [\mathbf{p}' \times \boldsymbol{\sigma}]. \end{aligned} \quad (9)$$

При переопределенной таким образом собственной энергии для функции Грина получается такое же уравнение (4), но квазичастичное уравнение (6) изменяется следующим образом.

Квазичастичное уравнение, в котором введено СОВ и спиновые переменные представлены в явном виде, принимает форму

$$\begin{aligned} h_0(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma}(\mathbf{r}, \omega) + \sum_{\sigma'} \int d^3 \mathbf{r}' \Sigma_{\sigma\sigma'}^{\text{SO}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma'}(\mathbf{r}', \omega) \\ = E_{\mathbf{k}}(\omega) \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma}(\mathbf{r}, \omega). \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь мы ввели двухкомпонентные квазичастичные волновые функции $(\psi_{\mathbf{k}}^{\uparrow}(\mathbf{r}, \omega), \psi_{\mathbf{k}}^{\downarrow}(\mathbf{r}, \omega))$ и оператор Хартри $h_0 = h + V_H$. Чтобы решить это уравнение для периодического потенциала в твердом теле, можно использовать приближение $\psi_{\mathbf{k}}^{\sigma}(\mathbf{r}, \omega) = \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma}(\mathbf{r})$, где $\psi_{\mathbf{k}}^{\sigma}(\mathbf{r})$ — σ -компонента спин-смешанного состояния с энергией $\omega = e_{\mathbf{k}}^{\text{SO}}$, которое может быть вычислено методами теории функционала электронной плотности при включенном СОВ. Таким образом, мы предполагаем, что компоненты смешанного по спину состояния $\psi_{\mathbf{k}}^{\sigma}$ удовлетворяют уравнению $\sum_{\sigma'} [h_0 + H_{\sigma\sigma'}^{\text{SO}} + V_{\sigma'}^{xc}] \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma'} = e_{\mathbf{k}}^{\text{SO}} \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma}$, в котором $V_{\sigma'}^{xc}$ — обменно-корреляционный потенциал, зависящий от спина. Умножая уравнение (10) слева на $\psi_{\mathbf{k}}^{\sigma}(\mathbf{r})$, интегрируя по \mathbf{r}, \mathbf{r}' и суммируя по спиновым переменным, приходим к уравнению

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} \langle \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma} | h_0 | \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma} \rangle + \sum_{\sigma} \langle \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma} | \Sigma_{\sigma\sigma}^{\text{SO}}(\omega) | \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma} \rangle \\ + \sum_{\sigma} \langle \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma} | H_{\sigma, -\sigma}^{\text{SO}}(\omega) | \psi_{\mathbf{k}}^{-\sigma} \rangle = E_{\mathbf{k}}(\omega). \end{aligned} \quad (11)$$

Включая в уравнение (11) $\pm \sum_{\sigma} \{H_{\sigma\sigma}^{\text{SO}} + V_{\sigma}^{xc}\}$, получаем

$$\begin{aligned} e_{\mathbf{k}}^{\text{SO}} + \sum_{\sigma} \langle \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma} | \Sigma_{\sigma\sigma}^{\text{SO}}(\omega) | \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma} \rangle - \sum_{\sigma} \langle \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma} | V_{\sigma}^{xc} | \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma} \rangle \\ - \sum_{\sigma} \langle \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma} | H_{\sigma, \sigma}^{\text{SO}} | \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma} \rangle = E_{\mathbf{k}}(\omega). \end{aligned} \quad (12)$$

Определяя $\Delta \Sigma_{\sigma}(\omega) = \Sigma_{\sigma\sigma}^{\text{SO}}(\omega) - V_{\sigma}^{xc} - H_{\sigma\sigma}^{\text{SO}}$, приходим к уравнению

$$E_{\mathbf{k}}(\omega) = e_{\mathbf{k}}^{\text{SO}} + \sum_{\sigma} \langle \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma} | \Delta \Sigma_{\sigma}(\omega) | \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma} \rangle \quad (13)$$

(здесь и далее опускаем вторую σ для собственной энергии, диагональной по спину). Таким образом, в конечном счете мы имеем квазичастичное уравнение, подобное тому, что имеется в отсутствие СОВ (см. [19,20]), но в присутствии СОВ оно включает суммирование по спиновым координатам и вычитание спин-диагональных компонент СОВ. Для вещественной и мнимой частей квазичастичной энергии из уравнения (13) следует

$$\text{Re } E_{\mathbf{k}}(\omega) = e_{\mathbf{k}}^{\text{SO}} + \sum_{\sigma} \langle \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma} | \text{Re } \Delta \Sigma_{\sigma}(\omega) | \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma} \rangle, \quad (14)$$

$$\text{Im } E_{\mathbf{k}}(\omega) = \sum_{\sigma} \langle \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma} | \text{Im } \Delta \Sigma_{\sigma}(\omega) | \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma} \rangle. \quad (15)$$

Применяя к уравнению (15) приближение $\omega = e_{\mathbf{k}}^{\text{SO}}$ (так называемое приближение „on mass shell“ [9,10]), получаем

$$\text{Im } E_{\mathbf{k}} = \sum_{\sigma} \langle \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma} | \text{Im } \Delta \Sigma_{\sigma} (e_{\mathbf{k}}^{\text{SO}}) | \psi_{\mathbf{k}}^{\sigma} \rangle. \quad (16)$$

Величина $2 \text{Im } E_{\mathbf{k}}$ является скоростью угасания квазичастицы, а обратная ей величина является временем жизни квазичастицы, т.е. электрона или дырки.

При отсутствии смешивания спиновых координат обычный путь нахождения собственной энергии заключается в использовании уравнений Хедина [13–17]. Поскольку уравнения Хедина следуют из уравнения движения для функции Грина, при включении СОВ они не изменяются. Поэтому в качестве первого приближения можно использовать так называемое GW-приближение, в котором учитывается лишь член первого порядка в разложении собственной энергии по экранированному потенциалу электрон-электронного взаимодействия W . В таком приближении собственная энергия и функция Грина диагональны по спину, и уравнение для собственной энергии в частотном представлении сводится к

$$\Sigma_{\sigma}^{\text{SO}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{i}{2\pi} \int d\omega' G_{\sigma\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega + \omega') W(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega'). \quad (17)$$

В присутствии СОВ спектральное представление для входящей в (17) функции Грина включает суммирование по состояниям с псевдоспином вверх и вниз. Полученное с применением спектрального представления выражение для половины скорости угасания электрона в состоянии $\psi_{\mathbf{k}n}$ с волновым вектором \mathbf{k} и энергией $e_{\mathbf{k}n}$ (n — номер состояния) имеет вид

$$\langle \text{Im } \Delta \Sigma_{\sigma} (e_{\mathbf{k}n}) \rangle = \sum_{\mathbf{q}} \sum_{n'}^{\text{unocc}} \text{Im } \Delta \Sigma_{\sigma}(\mathbf{k}, n; \mathbf{q} - \mathbf{k}, n'). \quad (18)$$

Здесь мы определили величину

$$\begin{aligned} \text{Im } \Delta \Sigma_{\sigma}(\mathbf{k}, n; \mathbf{q} - \mathbf{k}, n') &= - \sum_{i,j} \text{Im } W_{i,j}(\mathbf{q}, e_{\mathbf{k}n} - e_{\mathbf{q}-\mathbf{k},n'}) \\ &\times \langle \psi_{\mathbf{k}n}^{\sigma} \psi_{\mathbf{q}-\mathbf{k},n'}^{\sigma} | B_{\mathbf{q}i} \rangle \langle B_{\mathbf{q}j} | \psi_{\mathbf{q}-\mathbf{k},n'}^{\sigma} \psi_{\mathbf{k}n}^{\sigma} \rangle \Theta(e_{\mathbf{k}n} - e_{\mathbf{q}-\mathbf{k},n'}), \end{aligned} \quad (19)$$

которая является вкладом в скорость угасания от перехода электрона из первичного состояния $\psi_{\mathbf{k}n}$ во вторичное состояние $\psi_{\mathbf{q}-\mathbf{k},n'}$ с более низкой энергией. Здесь мы использовали функции $B_{\mathbf{q}j}$ некоторого полного базисного набора состояний; W — матрица экранированного взаимодействия в данном базисе.

На практике можно, как обычно, вычислять экранированный потенциал в приближении случайных фаз [13–17]. Для этого необходимо сначала вычислить поляризационную функцию в этом приближении P^0 . Такие вычисления обсуждались в работе [17]. Было показано, что в присутствии спинового смешивания поляризационная функция в приближении случайных фаз выражается как $P^0(\mathbf{r}_1 t_1, \mathbf{r}_2 t_2) = -i \sum_{\sigma\sigma'} G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}_1 t_1, \mathbf{r}_2 t_2) G_{\sigma'\sigma}(\mathbf{r}_2 t_2, \mathbf{r}_1 t_1^+)$.

Применяя к функции Грина представление (5), делая преобразование Фурье и применяя разложения по полному набору базисных функций $B_{\mathbf{q}i}$, мы получаем выражение для P^0

$$\begin{aligned} P_{ij}^0(\mathbf{q}, \omega) &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_n^{\text{occ}} \sum_{n'}^{\text{unocc}} \left\{ \frac{1}{\omega - e_{\mathbf{k}+\mathbf{q},n'} + e_{\mathbf{k}n} + i\delta} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\omega + e_{\mathbf{k}+\mathbf{q},n'} - e_{\mathbf{k}n} - i\delta} \right\} \\ &\times \sum_{\sigma, \sigma'} \langle B_{\mathbf{q}i} \psi_{\mathbf{k}n}^{\sigma} | \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},n'}^{\sigma} \rangle \langle \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},n'}^{\sigma'} | \psi_{\mathbf{k}n}^{\sigma'} B_{\mathbf{q}j} \rangle. \end{aligned} \quad (20)$$

После того как вычислена функция P^0 , можно вычислить функцию отклика $R = (1 - v_c P^0)^{-1} P^0$, обратную диэлектрическую функцию $\epsilon^{-1} = 1 + v_c R$ и экранированный потенциал $W = \epsilon^{-1} V_c$.

Результаты расчетов GW можно использовать следующим образом для оценки времени поворота спина τ_{sf} . Выражение для σ -компоненты половины скорости угасания (см. (18)) имеет в GW-приближении вид $\text{Im } \Delta \Sigma_{\sigma} = \text{Im } \Delta \Sigma_{\sigma+} + \text{Im } \Delta \Sigma_{\sigma-}$, где первый член включает суммирование по вторичным состояниям с псевдоспином вверх, а второй член содержит суммирование по вторичным состояниям с псевдоспином вниз. Отсюда следует, что половину скорости угасания можно представить как сумму четырех компонент

$$\text{Im } E_{\mathbf{k}} = \text{Im } \Delta \Sigma_{\uparrow+} + \text{Im } \Delta \Sigma_{\downarrow-} + \text{Im } \Delta \Sigma_{\downarrow+} + \text{Im } \Delta \Sigma_{\uparrow-}. \quad (21)$$

Первые два члена связаны с угасанием без поворота спина, тогда как два последующих соответствуют угасанию с поворотом спина, вызванному присутствием СОВ. Тогда время поворота спина может быть вычислено как

$$\frac{1}{\tau_{\mathbf{k}n}^{\text{sf}}} = - \text{Im } \Delta \Sigma^{\text{sf}}(e_{\mathbf{k}n}), \quad (22)$$

где

$$\text{Im } \Delta \Sigma^{\text{sf}}(e_{\mathbf{k}n}) = \text{Im } \Delta \Sigma_{\downarrow+}(e_{\mathbf{k}n}) + \text{Im } \Delta \Sigma_{\downarrow-}(e_{\mathbf{k}n}). \quad (23)$$

В дальнейшем считаем, что первичное состояние $\psi_{\mathbf{k}n}$ является состоянием с псевдоспином вверх, т.е. угасание первичного состояния с поворотом спина происходит посредством его перехода на нижние вакантные состояния с псевдоспином вниз. Учитывая, что и первичное, и вторичные состояния являются смешанными по спину, можно вычислить часть собственной энергии, соответствующую угасанию с поворотом спина, посредством уравнений (15) и (18), но с суммированием в уравнении (18) только по состояниям с псевдоспином вниз и величиной $\text{Im } \Delta \Sigma_{\uparrow}(\mathbf{k}, n; \mathbf{q} - \mathbf{k}, n') + \text{Im } \Delta \Sigma_{\downarrow}(\mathbf{k}, n; \mathbf{q} - \mathbf{k}, n')$, замещенной на

$$\begin{aligned} \text{Im } \Delta \Sigma^{\text{sf}}(\mathbf{k}, n; \mathbf{q} - \mathbf{k}, n') &= p_{\mathbf{k}n} (1 - p_{\mathbf{q}-\mathbf{k},n'}) \text{Im } \Delta \Sigma_{\uparrow}(e_{\mathbf{k}n}) \\ &+ p_{\mathbf{q}-\mathbf{k},n'} (1 - p_{\mathbf{k}n}) \text{Im } \Delta \Sigma_{\uparrow}(e_{\mathbf{k}n}), \end{aligned} \quad (24)$$

где $p_{\mathbf{k}n} = |\rho_{\mathbf{k}n}|^2$. В пределе нулевого СОВ определенная таким образом величина $\text{Im } \Delta \Sigma^{\text{sf}}$ обращается в нуль. При конечном СОВ в первом члене правой части

уравнения (24) суммируются вероятности перехода из компоненты со спином вверх первичного состояния в компоненты со спином вниз вторичных состояний, а во втором члене суммируются вероятности перехода из компоненты со спином вниз первичного состояния в компоненты со спином вверх вторичных состояний.

Поскольку время $\tau_{\text{sp}}^{\text{sf}}$ является временем поворота спина первичного электрона, разумно определить время релаксации спина, т.е. время потери его пространственной ориентации, как половину времени поворота спина. Это соответствует определению времени релаксации, введенному в феноменологической теории инъекции спина в ферромагнитных материалах [1].

3. Детали расчетов

Мы рассчитываем зонную структуру линейным методом muffin-tin-орбиталей (ЛМТО) в представлении сильной связи [20] с СОВ, включенном по рецептам работы [21]. Проблемой расчетов зон с включением СОВ является плохая сходимость процесса самосогласования, в особенности, для объектов с большой плотностью состояний на уровне Ферми. Другой проблемой является чрезмерно большое время вычислений. Это связано с требованиями вести вычисления для большого числа волновых векторов в зоне Бриллюэна, не менее 8000, что необходимо для получения надежных данных, усредненных по векторам зоны Бриллюэна. Поэтому в практических расчетах мы используем следующие упрощения.

Расчеты зонной структуры проводятся в минимальном базисе s -, p -, d -орбиталей. Сначала мы проводим процесс самосогласования, пренебрегая СОВ. Последующие расчеты поляризации, функции отклика, диэлектрической функции и экранированного потенциала также выполняются без учета СОВ. Данный этап расчетов весьма близок к тому, что был описан в работе [22], посвященной расчету времен жизни электронных возбуждений в металлах. Базисный набор, используемый в этих расчетах и в последующих расчетах для собственной энергии, строится из $s \times s$, $s \times p$, $s \times d$, $p \times p$, $p \times d$ — произведений линейных muffin-tin-орбиталей по рецептам работы [23]; обычно число таких орбиталей 45–50. На втором этапе проводятся самосогласованные расчеты зонной структуры при включении СОВ. Это обеспечивает получение величин ρ_{qn} , необходимых для расчетов компонент собственной энергии. Ожидаемые значения мнимой части собственной энергии, вычисленные для зонных состояний при всех учтенных волновых векторах, усредняющая по волновым векторам, и затем вычисляются времена жизни состояний и времена релаксации спина.

4. Результаты и обсуждение

На рис. 1–5 мы приводим зависимости времени жизни электронных возбуждений и времени поворота спина от энергии электрона для Al, Cu, Au, Nb и Ta. Мы выбрали

эти металлы в качестве представителей разных типов зонной структуры. Алюминий, спиновая релаксация в котором изучалась экспериментально в работах [24,25] и теоретически в [2], является типичным металлом с

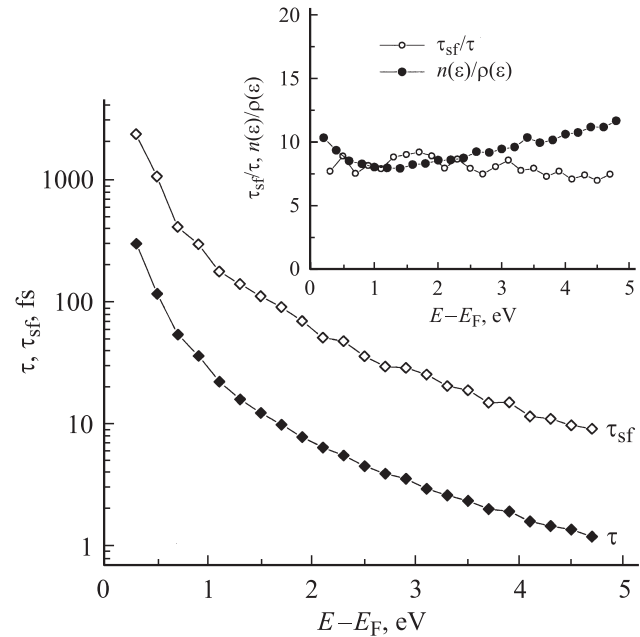


Рис. 1. Усредненное по волновому вектору время жизни τ и время поворота спина τ_{sf} для алюминия в зависимости от избыточной энергии электрона $E - E_F$. На вставке показаны отношение этих величин и отношение фазового пространства угасания возбужденного состояния к фазовому пространству поворота спина $n(\epsilon)/\rho(\epsilon)$ (см. текст).

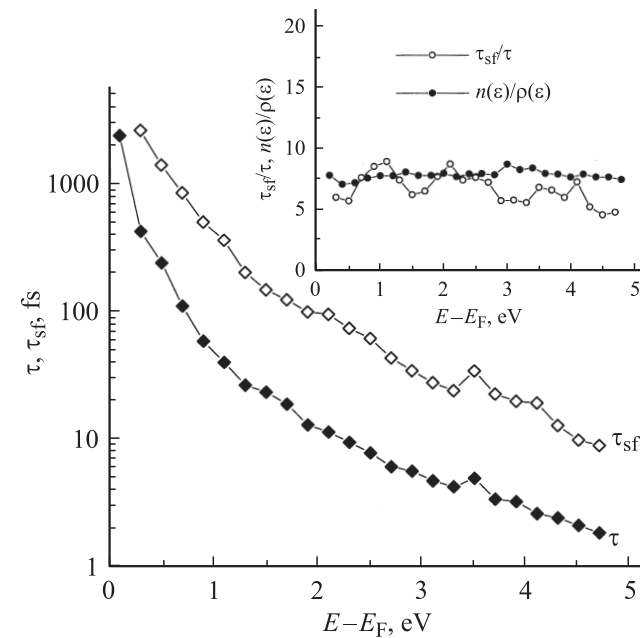


Рис. 2. Усредненное по волновому вектору время жизни τ и время поворота спина τ_{sf} для меди в зависимости от избыточной энергии электрона $E - E_F$. На вставке — то же, что на рис. 1, для Cu.

почти свободными электронами и относительно низкой и медленно изменяющейся с энергией плотностью состояний. Медь и золото, спиновая релаксация в которых изучалась в работах [26,27], — это благородные металлы с зоной d -состояний ниже уровня Ферми и зоной почти свободных электронов вблизи и выше уровня Ферми. Величина СОВ в золоте значительно выше, чем в меди. (Мы изучали также времена релаксации в серебре, но

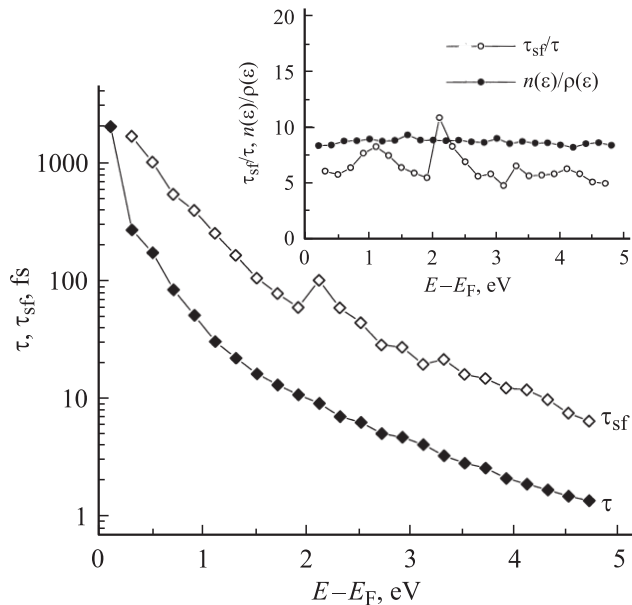


Рис. 3. Усредненное по волновому вектору время жизни τ и время поворота спина τ_{sf} для золота в зависимости от избыточной энергии электрона $E - E_F$. На вставке — то же, что на рис. 1, для Au.

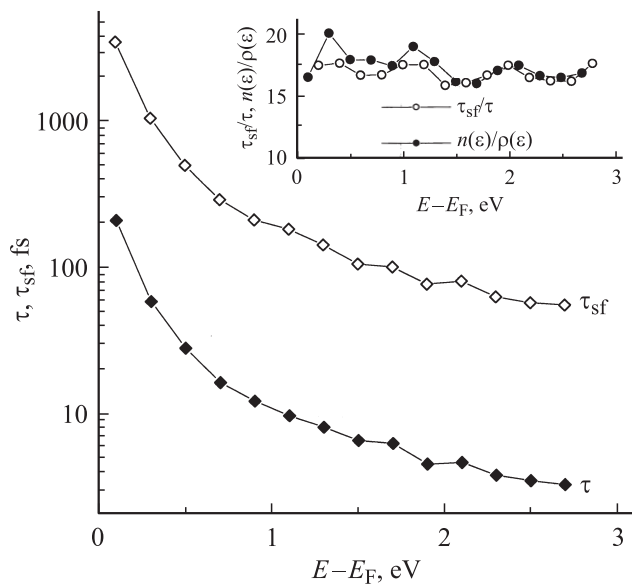


Рис. 4. Усредненное по волновому вектору время жизни τ и время поворота спина τ_{sf} для ниобия в зависимости от избыточной энергии электрона $E - E_F$. На вставке — то же, что на рис. 1, для Nb.

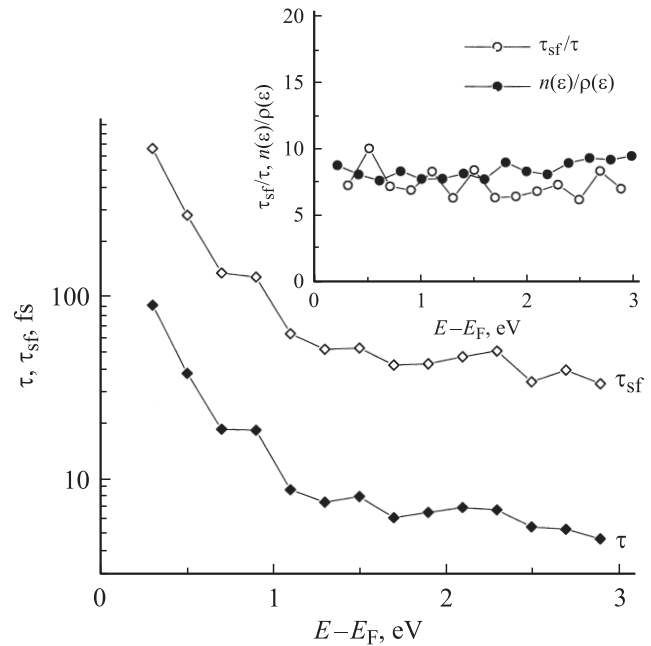


Рис. 5. Усредненное по волновому вектору время жизни τ и время поворота спина τ_{sf} для тантала в зависимости от избыточной энергии электрона $E - E_F$. На вставке — то же, что на рис. 1, для Ta.

опускаем их обсуждение, так как они близки к времени релаксации в меди.) Ниобий — типичный переходный металл с d -состояниями на уровне Ферми и в его окрестности; экспериментальное изучение времени спиновой релаксации в ниобии описано в работе [28]. Зонная структура тантала близка к зонной структуре ниобия, но СОВ в тантале значительно сильнее.

Рассчитанные времена жизни электронных возбуждений находятся в разумном соответствии с временами жизни из предыдущих GW-расчетов в базе ЛМТО [29–32]. Различия в 20–25% связаны с учетом СОВ в новых расчетах. Кроме того, в предыдущих расчетах времени жизни учитывался фактор ренормализации Z функции Грина, который был опущен в описываемых здесь расчетах.

Времена поворота спина τ_{sf} оказываются много больше времен жизни τ . Отношение τ_{sf}/τ находится в пределах 8.2 ± 1.2 для Al, 7.8 ± 3 для Cu, 6.5 ± 2 для Au, 18 ± 2 для Ta. Убывание τ_{sf}/τ от Al к Cu и Au и последующее возрастание к Nb могут быть объяснены на основе расчетов так называемого фазового пространства. Под фазовым пространством $n(\epsilon)$ для угасания возбужденного электрона с избыточной энергией ϵ (т.е. его энергией по отношению к уровню Ферми) понимается число свободных состояний с энергией меньше ϵ , которые может занять возбужденный электрон, теряя энергию. Обычно считается, что скорость угасания электронного возбуждения пропорциональна фазовому пространству: $1/\tau(\epsilon) \sim n(\epsilon)$. В случае поворота спина для каждой энергии ϵ мы можем определить величину спинового смешивания $\beta(\epsilon)$ и вес основной спиновой компоненты

Сопоставление времен и длин спиновой релаксации, полученных в разных экспериментальных подходах, с теоретическими данными

Металл	Вид эксперимента	$\tau_{\text{sr}}^{\text{imp}}$, ps	$\tau_{\text{sr}}^{\text{ph}}$, ps	λ_{sr} , nm	τ_{sr}^e , ps	λ_{sr}^e , nm
Алюминий	Спиновая инъекция [33]	100	85	780		
	Спиновая инъекция [27]	70	124	1200	1.15(0.15)	1300(170)
Медь	То же	40	14	560	1.3(0.26)	1290(250)
Золото	Вращение Керра [34]	—	45	—	0.8(0.15)	980(230)
Ниобий	Спиновая инъекция [28]	—	560	789	0.5(0.1)	160(30)
Тантал	—	—	—	—	0.3(0.06)	86(18)

Примечание. $\tau_{\text{sr}}^{\text{imp}}$ — экспериментальное время спиновой релаксации при электрон-примесном рассеянии, $\tau_{\text{sr}}^{\text{ph}}$ — экспериментальное время спиновой релаксации при электрон-фононном рассеянии, λ — экспериментальная длина спиновой релаксации, τ_{sr}^e — расчетное время спиновой релаксации при электрон-электронном рассеянии (настоящая работа), λ_{sr}^e — расчетная длина спиновой релаксации при электрон-электронном рассеянии (настоящая работа). Теоретические данные перед скобками относятся к энергии 0.3 eV, а в скобках — к энергии 0.9 eV.

$1 - \beta(\varepsilon)$, где $\beta(\varepsilon)$ получается усреднением по всем зонным состояниям с энергией ε величин $p_{\mathbf{p}-\mathbf{k},n'}$ из уравнения (24). Тогда фазовое пространство для поворота спина возбужденного электрона при энергии ε_i может быть определено как

$$p(\varepsilon_i) = [1 - \beta(\varepsilon_i)] \int_{E_F}^{\varepsilon_i} \beta(\varepsilon) dn(\varepsilon). \quad (25)$$

Из данного определения можно ожидать, что величина $p(\varepsilon_i)$ играет для поворота спина роль, аналогичную роли обычного фазового пространства для угасания электронного возбуждения, т. е. $1/\tau_{\text{sr}}(\varepsilon_i) \sim p(\varepsilon_i)$. Таким образом, можно ожидать также, что $\tau_{\text{sr}}(\varepsilon)/\tau(\varepsilon) \approx n(\varepsilon)/p(\varepsilon)$. Расчеты величин $n(\varepsilon)/p(\varepsilon)$, результаты которых представлены на вставках к рис. 1–5, вполне подтверждают эту идею. Они находятся в пределах 9.6 ± 1.6 для Al, 8.7 ± 0.5 для Cu, 8.0 ± 1.0 для Au, 16.7 ± 0.8 для Nb, 8 ± 2 для Ta в хорошем соответствии со значениями величин τ_{sr}/τ . Таким образом, фазовое пространство поворота спина является основным фактором, определяющим разности в скоростях релаксации спина в металлах. Величины τ_{sr}/τ имеют ярче выраженные вариации с энергией, чем величины $n(\varepsilon)/p(\varepsilon)$, что связано с зависимостью матричных элементов уравнения (19), определяющих время поворота спина, от энергии и направления волнового вектора.

Достойным упоминания результатом расчетов является отсутствие корреляции между усредненным по волновому вектору времени поворота спина и спин-орбитальным расщеплением зонных энергий в симметричных точках зоны Бриллюэна (подобный факт был также отмечен для полупроводников GaAs, GaN в работе [3]). Подходящий пример для этого получается при сопоставлении результатов для Cu и Au. В этих металлах заметное спин-орбитальное расщепление имеется для шестикратно вырожденного в отсутствие СОВ состояния $\Gamma_{25'}$ ниже уровня Ферми. В присутствии СОВ это состояние расщепляется на четырех- и двукратно вырожденные состояния. Наши расчеты дают величину этого расщепления, равную 0.18 eV для меди и 1.2 eV

для золота. Из данных рис. 1 и 2 мы можем заключить, однако, что время поворота спина для электронных возбужденных состояний в золоте только на 15% выше, чем в меди. Это противоречие объясняется тем, что незанятые электронные состояния в меди и золоте в пределе до 5 eV выше уровня Ферми в присутствии СОВ не расщепляются.

Еще один примечательный факт заключается в том, что относительное время поворота спина τ_{sr}/τ в ниобии (~ 18) значительно больше, чем в остальных металлах (6.5–8.2). Это связано со значениями матричных элементов операторов СОВ χ . Для примера сравним медь и ниобий. Для p -состояний меди такой матричный элемент равен $\langle p|\chi|p \rangle = 0.14$ eV, а для d -состояний меди $\langle d|\chi|d \rangle = 0.09$ eV. Для d -состояний ниобия имеем $\langle d|\chi|d \rangle = 0.05$ eV, что в 3 раза меньше, чем для p -состояний меди. Поэтому смешивание спина вверх со спином вниз в низкоэнергетических свободных d -состояниях ниобия значительно меньше, чем смешивание в почти свободных p -состояниях меди, что и обеспечивает более низкое значение τ_{sr}/τ в ниобии. Однако само значение времени поворота спина (см. таблицу) в ниобии меньше, чем в алюминии, меди и золоте из-за низкого значения времени жизни τ , которое имеет место из-за высокой плотности состояний выше уровня Ферми, т. е. большего фазового пространства. Для тантала, несмотря на сходство зонной структуры тантала и ниобия, значения τ_{sr}/τ , и τ_{sr} значительно ниже из-за более сильного СОВ, для которого $\langle d|\chi|d \rangle = 1.69$ eV.

Расчеты времени жизни электронного возбуждения и времени поворота спина позволяют также оценить длину релаксации спина λ_{sr} , которую мы определим как расстояние, проходимое электроном за время релаксации спина τ_{sr} . Из того, что время поворота спина τ_{sr} и время релаксации спина $\tau_{\text{sr}} = \tau_{\text{sr}}/2$ значительно больше времени жизни, следует, что возбужденный электрон при начальной избыточной энергии ε сначала движется баллистически в течение времени жизни τ с групповой скоростью $v(\varepsilon)$, а затем, потеряв избыточную энергию, продолжает двигаться со скоростью Ферми v_F , поэтому мы имеем $\lambda_{\text{sr}}(\varepsilon) = v(\varepsilon)\tau(\varepsilon) + [\tau_{\text{sr}}(\varepsilon) - \tau(\varepsilon)]v_F$. Вычисленные таким образом зависимости длины релаксации

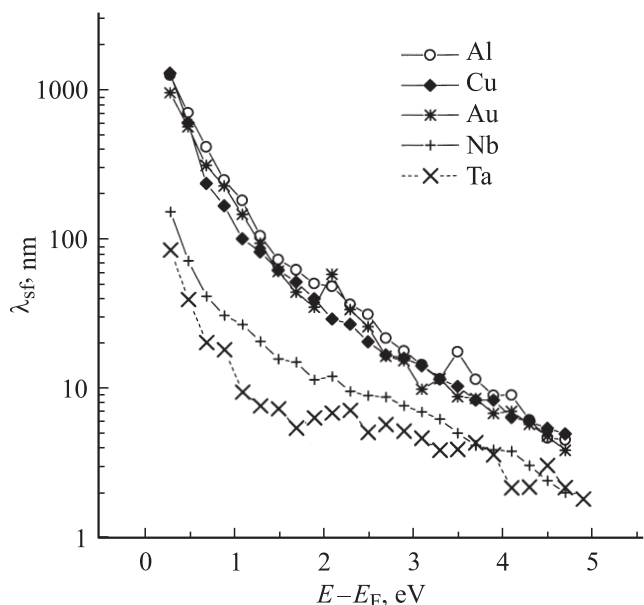


Рис. 6. Рассчитанная длина спиновой релаксации λ_{sf} в зависимости от избыточной энергии электрона $E - E_F$ для Al, Cu, Au, Nb, Ta.

спина от энергии возбужденного электрона показаны на рис. 6. В таблице мы сравниваем также наши времена и длины релаксации спина с предыдущими экспериментальными и теоретическими данными. Наши данные относятся к энергии 0.3 eV выше уровня Ферми, а также к энергии 0.9 eV, которая является типичной высотой барьеров в спин-клапанном и магнитном туннельном транзисторах. Скорости $v(\varepsilon)$ были вычислены вдоль радиальных направлений в зоне Бриллюэна и усреднены по всем состояниям при энергии ε [30]. Приведенные литературные данные относятся к избыточной энергии, близкой к энергии теплового равновесия, и они были получены главным образом из экспериментов при 4 К и при комнатной температуре. Основным механизмом спиновой релаксации в этих условиях является релаксация по Эллиотту-Яфету с участием примесей и фононов.

Видно, что почти свободные электроны в алюминии, меди и золоте имеют очень близкие длины спиновой релаксации, а длина релаксации для ниобия ниже почти на порядок, несмотря на более низкое значение матричного элемента $\langle d|\chi|d \rangle$. Это можно объяснить различиями во временах жизни и скоростях. Время жизни возбуждения и время поворота электронного спина в ниобии значительно меньше из-за гораздо более высокого фазового пространства d -электронов. Групповая скорость d -электронов в ниобии также примерно в 3 раза меньше, чем скорость p -электронов в меди и золоте. В особенности короткой является длина релаксации электронов в тантале, что связано с малостью скорости, времени жизни возбуждения и времени релаксации спина. Согласно расчетам, направление поляризации спина в тантале теряется на расстоянии около 60 атомных (100)-плоскостей. Поскольку эта дистанция сопоставима

с типичной толщиной пленок в спинтронных приборах, тантал вряд ли может быть эффективно использован в таких приборах. Экспериментальные данные по длине релаксации спина в тантале отсутствуют.

Из таблицы видно также, что время спиновой релаксации при 0.3 eV и тем более при 0.9 eV меньше времени релаксации из-за процессов Эллиотта-Яфета. Что касается длины релаксации, то наше расчетное значение для алюминия при 0.3 eV еще сравнимо с длиной релаксации по Эллиотту-Яфету, а для меди оно даже больше. Поэтому для возбуждений с энергией в несколько десятых eV мы еще можем ожидать сравнимых вкладов электрон-фононного, электрон-примесного и неэластического электрон-электронного рассеяния в спиновую релаксацию. Но при возрастании энергии до 0.9 eV наша длина релаксации сокращается в 5–10 раз и становится значительно короче длины релаксации по Эллиотту-Яфету.

5. Заключение

Мы предложили метод расчета времени спиновой релаксации в металлах, основанный на методе GW с включенным спин-орбитальным взаимодействием, и применили его к Al, Cu, Ag, Au, Nb и Ta. Также была предложена простая модель фазового пространства поворота спина, которая хорошо объясняет тенденции в изменении относительного времени спиновой релаксации для данных металлов. Мы нашли, что при энергии возбуждения около 1 eV время и длина спиновой релаксации в металлах с почти свободными возбужденными электронами, т.е. Al, Cu и Au, значительно длиннее, чем в d -электронных металлах Nb и Ta. Короткое время релаксации в переходных металлах объясняется коротким временем поворота спина, относительно малой групповой скоростью и высокой плотностью состояний вблизи уровня Ферми, поэтому можно ожидать, что все переходные металлы тяжелее, чем Nb, будут иметь малые время и длину спиновой релаксации. Расчеты демонстрируют также существенное понижение времени и длины спиновой релаксации с понижением энергии возбужденного электрона. Сопоставление наших расчетных данных с предыдущими данными по спиновой релаксации, связанной с процессами Эллиотта-Яфета, показывает, что при энергии вблизи 1 eV неэластическое электрон-электронное рассеяние в присутствии спин-орбитального взаимодействия является доминирующим механизмом спиновой релаксации.

Выражаем благодарность В.И. Анисимову и А.О. Шорикову (Институт физики металлов УрО РАН) за предоставление программы LMTO + U + SO и помощь в расчетах.

Список литературы

- [1] I. Žutić, J. Fabian, S. Das Sarma. Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004).
- [2] J. Fabian, S. Das Sarma. Phys. Rev. Lett. **83**, 1211 (1999).

- [3] Z.G. Yu, S. Krishnamurthy, M. van Schilfgarde, N. Newman. *Phys. Rev. B* **71**, 245 312 (2005).
- [4] P. Mavropoulos, M. Ležaić, S. Blügel. *Phys. Rev. B* **72**, 174 428 (2005).
- [5] R. Jansen. *J. Phys. D* **36**, R 298 (2003).
- [6] D. Connelly, C. Faulkner, P.A. Clifton, D.E. Grupp. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 012 105 (2006).
- [7] V.P. Zhukov, E.V. Chulkov, P.M. Echenique. *Phys. Rev. B* **73**, 125 105 (2006).
- [8] M. Aeschlimann, M. Bauer, S. Pawlik, R. Knorren, G. Bouze-rar, K.H. Bennemann. *Appl. Phys. A* **71**, 485 (2000).
- [9] J.M. Pitarke, V.P. Zhukov, R. Keiling, E.V. Chulkov, P.M. Echenique. *Chem. Phys. Chem.* **5**, 1284 (2004).
- [10] E.V. Chulkov, A.G. Borisov, J.P. Gauyacq, D. Sánchez-Portal, V.M. Silkin, V.P. Zhukov, P.M. Echenique. *Chem. Rev.* **106**, 4160 (2006).
- [11] V.P. Zhukov, E.V. Chulkov, P.M. Echenique. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 096 401 (2004).
- [12] P. Boguslawski. *Solid State Commun.* **33**, 389 (1980).
- [13] L. Hedin, S. Lundqvist. *Solid state physics / Eds H. Ehrenreich, F. Seitz, D. Turnbull.* Academic Press, N.Y. (1969). V. 23. P. 1.
- [14] W.G. Aulbur, L. Jonsson, J.W. Wilkins. *Solid State Phys.* **54**, 1 (2000).
- [15] F. Aryasetiawan. *Strong coulomb correlations in electronic structure calculations.* Gordon and Beach, Singapore (2001). P. 1.
- [16] G.D. Mahan. *Many-particle physics.* Plenum Press, N.Y. (1990). 1032 p.
- [17] F. Aryasetiawan, K. Karlsson. *Phys. Rev. B* **60**, 7419 (1999).
- [18] W. Greiner. *Relativistic quantum mechanics.* Springer, Berlin (1997). 476 p.
- [19] A.L. Fetter, J.D. Walecka. *Quantum theory of many-particle systems.* McGraw-Hill, N.Y. (1971). 373 p.
- [20] O.K. Andersen, O. Jepsen, M. Šob. *Electronic band structure and its applications. Lecture notes in physics / Ed. M. Yussouff.* Springer, Heidelberg (1987). V. 283. P. 1.
- [21] A.O. Shorikov, A.V. Lukoyanov, M.A. Korotin, V.I. Anisimov. *Phys. Rev. B* **72**, 024 458 (2005).
- [22] И.А. Нечаев, В.П. Жуков, Е.В. Чулков. *ФТТ* **49**, 1729 (2007).
- [23] F. Aryasetiawan, O. Gunnarsson. *Phys. Rev. B* **49**, 16 214 (1994).
- [24] M. Johnson, R.H. Silsbee. *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1790 (1985); *Phys. Rev. B* **37**, 5312 (1988); **37**, 5326 (1988).
- [25] D. Lubzens, S. Schultz. *Phys. Rev. Lett.* **36**, 1104 (1976).
- [26] F.J. Jedema, A.T. Filip, B.J. van Wees. *Nature* **410**, 345 (2001).
- [27] F.J. Jedema, M.S. Nijboer, A.T. Filip, B.J. van Wees. *Phys. Rev. B* **67**, 085 319 (2003).
- [28] M. Johnson. *Appl. Phys. Lett.* **65**, 1460 (1994).
- [29] V.P. Zhukov, F. Aryasetiawan, E.V. Chulkov, I.G. de Gurtubay, P.M. Echenique. *Phys. Rev. B* **64**, 195 122 (2001).
- [30] V.P. Zhukov, F. Aryasetiawan, E.V. Chulkov, P.M. Echenique. *Phys. Rev. B* **65**, 115 116 (2002).
- [31] V.P. Zhukov, E.V. Chulkov. *J. Phys.: Cond. Matter* **14**, 1937 (2002).
- [32] V.P. Zhukov, E.V. Chulkov, P.M. Echenique. *Phys. Rev. B* **72**, 155 109 (2005); **73**, 125 105 (2006).
- [33] F.J. Jedema, H.B. Heersche, A.T. Filip, J.J.A. Baselmans, B.J. van Wees, *Nature* **416**, 713 (2002).
- [34] A.Y. Elazzabi, M.R. Freeman. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3220 (1996).