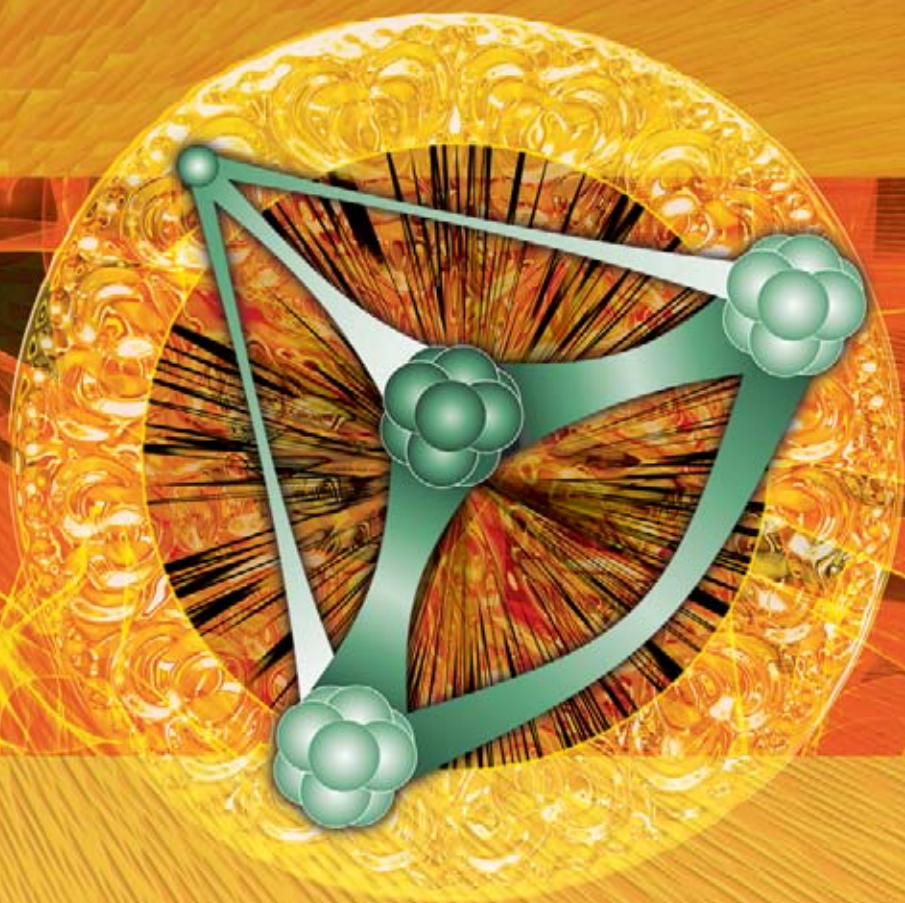


УЧЕБНИК ДЛЯ ВЫСШЕЙ ШКОЛЫ

В. Е. Борисенко, А. Л. Данилюк, Д. Б. Мигас

СПИНТРОНИКА



ЛАБОРАТОРИЯ

ПИЛОТ

УДК 621.382(075.8)
ББК 22.31+32.844.1+32.85+32.843я73
Б82

Серия основана в 2009 г.

Рецензенты:

кафедра физической электроники и нанотехнологий
Белорусского государственного университета,
чл.-корр. НАН Беларуси д-р ф.-м. н., проф. Ф. Ф. Комаров;
академик НАН Беларуси, д-р ф.-м. н., проф. С. В. Гапоненко
Борисенко В. Е.

Б82 Спинтроника [Электронный ресурс] : учебное пособие / В. Е. Борисенко, А. Л. Данилюк, Д. Б. Мигас. — Эл. изд. — Электрон. текстовые дан. (1 файл pdf : 232 с.). — М. : Лаборатория знаний, 2017. — (Учебник для высшей школы). — Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10".

ISBN 978-5-00101-538-3

В данном учебном пособии обобщены теоретические представления и фундаментальные закономерности явлений, лежащих в основе спинтроники. Также рассмотрены принципы функционирования и конструкции спинтронных элементов и систем для обработки информации. Издание подготовлено на основе материала курса лекций и практических занятий, проводимых по дисциплине «Спинтроника» для студентов первой ступени высшего образования и магистрантов, обучающихся по специальностям «Микро- и нанoeлектронные технологии и системы», «Квантовые информационные системы», «Нанотехнологии и наноматериалы (в электронике)» в Белорусском государственном университете информатики и радиоэлектроники.

Для студентов и магистрантов учреждений высшего образования по специальностям микро- и нанoeлектронной техники, а также для всех интересующихся новейшими материалами и электронными технологиями.

УДК 621.382(075.8)
ББК 22.31+32.844.1+32.85+32.843я73

Деривативное электронное издание на основе печатного аналога: Спинтроника : учебное пособие / В. Е. Борисенко, А. Л. Данилюк, Д. Б. Мигас. — М. : Лаборатория знаний, 2017. — 229 с. : ил. — (Учебник для высшей школы). — ISBN 978-5-906828-49-1.

В соответствии со ст. 1299 и 1301 ГК РФ при устранении ограничений, установленных техническими средствами защиты авторских прав, правообладатель вправе требовать от нарушителя возмещения убытков или выплаты компенсации

ISBN 978-5-00101-538-3

© Лаборатория знаний, 2017

ОГЛАВЛЕНИЕ

Об авторах	5
Введение	7
Глава 1. Спин электронов, ядер и атомов	10
1.1. Спин квантовых частиц	10
1.2. Разрешенные энергетические состояния электронов в твердом теле	14
1.3. Обменное взаимодействие	17
1.4. Спин-орбитальное взаимодействие	22
1.5. Электронно-ядерное спиновое взаимодействие	26
1.6. Взаимосвязь между спиновыми взаимодействиями и магнитными свойствами твердых тел	29
Глава 2. Магнитные и спиновые свойства объемных материалов, тонких пленок и наноразмерных частиц.	37
2.1. Классификация материалов по их магнитным свойствам	37
2.2. Параметры, характеризующие магнитные и спиновые свойства материалов ..	44
2.3. Магнитные проводящие материалы	48
2.4. Магнитные полупроводники	50
2.5. Диэлектрики	55
2.6. Тонкие пленки магнитных материалов.	58
2.7. Наноразмерные частицы из магнитных материалов.	62
Глава 3. Спиновые эффекты в твердотельных структурах.	70
3.1. Гигантское магнитосопротивление.	70
3.2. Туннельное магнитосопротивление	76
3.3. Передача спинового момента от свободных носителей заряда магнитным атомам	83
3.4. Спиновый эффект Холла	86
3.5. Тепловые спиновые эффекты	90
3.6. Эффект Кондо	97
Глава 4. Инжекция спин-поляризованных носителей заряда в твердотельные структуры.	102
4.1. Инжекция через невыпрямляющий контакт	103

4.2. Туннелирование через потенциальный барьер	109
4.3. Спиновая фильтрация носителей заряда с использованием низкоразмерных структур	113
Глава 5. Перенос спин-поляризованных носителей заряда в полупроводниках	116
5.1. Изменение ориентации спина электронов по механизму Эллиотта–Яфета	117
5.2. Изменение ориентации спина электронов по механизму Дьяконова–Переля	122
5.3. Изменение ориентации спина электронов по механизму Бира–Аронова–Пикуса	124
5.4. Изменение ориентации спина электронов в результате их сверхтонкого взаимодействия с ядрами атомов	127
5.5. Эффективность проявления механизмов релаксации спина электронов в полупроводниках	133
5.6. Особенности релаксации спина электронов в низкоразмерных структурах	138
Глава 6. Определение спиновых характеристик свободных носителей заряда в твердотельных структурах	143
6.1. Оптические методы	143
6.2. Электрические методы	156
Глава 7. Элементы обработки информации на спиновых эффектах	163
7.1. Датчики магнитных полей	163
7.2. Считывающая магнитная головка на эффекте гигантского магнитосопротивления	168
7.3. Спиновые транзисторы	169
7.4. Энергонезависимая память на эффекте гигантского магнитосопротивления	179
7.5. Энергонезависимая память на основе спин-зависимого туннелирования	181
7.6. Спиновая логика	188
Глава 8. Квантовая обработка информации с использованием спинов ядер атомов и электронов в твердотельных структурах	193
8.1. Основы квантовой обработки информации	194
8.2. Квантовый бит информации	195
8.3. Квантовый компьютер	201
8.4. Материалы элементов для квантовой обработки информации на спинах электронов и ядер атомов	204
8.5. Элементы для квантовой обработки информации на спинах ядер атомов	210
8.6. Элементы для квантовой обработки информации на спинах электронов в квантовых точках	216
Рекомендуемая литература	223
Обозначения и величины наиболее часто встречающихся фундаментальных констант	224
Предметный указатель	225

СПИН ЭЛЕКТРОНОВ, ЯДЕР И АТОМОВ

Наличие у электронов, ядер атомов и ионов собственного механического и связанного с ним магнитного момента определяет макроскопические магнитные свойства твердых тел. В данной главе с исторической ретроспективой, где это целесообразно, в рамках современных представлений и интерпретации рассмотрены спиновые свойства этих важнейших для спинтроники объектов.

1.1. Спин квантовых частиц

Собственный механический и связанный с ним магнитный момент квантовых частиц, впоследствии интерпретированный как спин частиц, впервые обнаружен в 1896 г. П. Зеemanом в экспериментах по расщеплению эмиссионных линий паров металлов, помещенных в магнитное поле¹⁸. В рамках современных представлений *эффект Зеemана* (*Zeeman effect*) интерпретируют как расщепление в магнитном поле вырожденных уровней энергии электронов, атомов и молекул, проявляющееся в спектрах испускания и поглощения света.

Нормальным эффектом Зеemана называют расщепление спектральных линий излучения атомов в магнитном поле на три подуровня, которое получило свое объяснение в рамках классической электронной теории, разработанной Х. Лоренцем. За исследования по влиянию магнетизма на радиационные явления П. Зеeman и Х. Лоренц в 1902 г. были удостоены Нобелевской премии по физике.

При последующих детальных исследованиях обнаружилось, что спектры излучения многих веществ расщепляются в магнитном поле более сложным образом, давая большее число спектральных линий. Это явление назвали *аномальным эффектом Зеemана* (*anomalous Zeeman effect*). Объяснить его удалось только в рамках квантовой теории строения вещества с развитием представлений о спине квантовых частиц.

¹⁸ Впервые описан в: P. Zeeman, *Verslag. Koninkl. Akad. Wet. Amsterdam* **5**, 181–242 (1897); P. Zeeman, On the influence of magnetism on the nature of the light emitted by a substance, *Phil. Mag.* **43**, 226 (1897); P. Zeeman, The effect of magnetisation on the nature of light emitted by a substance, *Nature* **55**, 347 (1897).

Предположение о наличии у электрона собственных магнитных свойств было высказано А. Комптоном¹⁹. Классическим же экспериментальным доказательством этого считают опыты О. Штерна и В. Герлаха²⁰. В них зарегистрировано квантование магнитного момента атомов, пропущенных через неоднородное магнитное поле. В частности, было обнаружено симметричное расщепление пучка атомов водорода, имеющих по одному электрону на внешней орбите. Механический момент орбитального электрона, а вместе с ним и магнитный момент, связанный с его орбитальным движением, равны нулю вследствие сферической формы орбиты электрона в атоме водорода. Между тем, факт расщепления пучка атомов водорода в магнитном поле на две симметричные компоненты показывает, что данные атомы все-таки обладают магнитным моментом. Это возможно, если электроны в атомах водорода имеют собственный магнитный момент и проекция этого момента на выделенное направление может принимать два значения, различающиеся знаком. Этот момент обозначают буквой s , а соответствующее ему квантовое число — m_s .

Аргументом в пользу наличия собственного магнитного момента у электрона служит тот факт, что при взаимодействии магнитного момента, создаваемого движущимся по своей сферической орбите электроном (орбитального магнитного момента), с внешним магнитным полем, квантовое число m_s должно принимать три значения: 0 и ± 1 , а не два, как в опытах Штерна–Герлаха. Данный парадокс привел Дж. Уленбека и С. Гаудсмита²¹ к заключению, что электроны в атомах наряду с орбитальным моментом должны обладать еще и собственным механическим угловым, а следовательно, и собственным магнитным моментом. Этот механический момент назвали **спином** электрона (от английского *to spin* — вертеть), предполагая его связь с вращением электрона вокруг собственной оси (рис. 1.1).

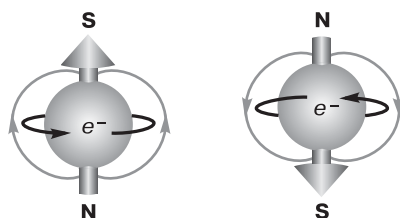


Рис. 1.1. Спин электрона

¹⁹ А. Н. Compton, Magnetic electron, *J. Frankl. Inst.* **192**, 145–155 (1921).

²⁰ W. Gerlach, O. Stern, Der experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld, *Z. Phys.* **9**(6), 349–352 (1922). В 1943 г. О. Штерн был удостоен Нобелевской премии по физике за открытие магнитного момента у протона.

²¹ G. E. Uhlenbeck, S. A. Goudsmit, Ersetzung der hypothese vom unmechanischen zwang durch eine forderung bezüglich des inneren verhaltens jedes einzelnen electrons, *Naturwiss.* **13**, 953–954 (1925); G. E. Uhlenbeck, S. A. Goudsmit, Spinning electrons and the structure of spectra, *Nature* **117**, 264–265 (1926).

Согласно гипотезе Уленбека–Гаудсмита, проекция собственного механического момента электрона на выделенное направление z может принимать только два фиксированных (квантованных) значения: $s_z = \pm 1/2 \hbar$. Следовательно, квантовое число, которое характеризует эту проекцию, должно принимать не целочисленные, а полуцелочисленные значения ($m_s = \pm 1/2$). Характерное отличие целочисленных квантовых чисел (например, орбитального l , магнитного m) от полуцелочисленных (спинового m_s) сводится прежде всего к числу возможных состояний. Целочисленные квантовые числа всегда дают нечетное число состояний (при $l = 0$ существует одно состояние $m = 0$; при $l = 1$ возможно три состояния $m = 0, +1, -1$ и т. д.). Полуцелочисленные же квантовые числа дают четное число состояний (например, при $s = 1/2 \hbar$ имеется два состояния с $m_s = +1/2, -1/2$; при $s = 3/2 \hbar$ — их четыре и т. д.).

В ходе развития представлений о спине электрона нашли свое объяснение не только мультиплетное расщепление спектральных линий атомов в магнитном поле, но и проявление магнитных свойств материалов. Установлено, что элементарная частица материи — электрон, являющаяся основной составной частью атома (его оболочки), может быть двояким источником магнетизма — спинового и орбитального. Первый связан с собственным механическим моментом электрона — его спином, а второй — с орбитальным движением электронов в атомах или движением свободных электронов в материале.

В рамках современных представлений наличие спина у электрона принято характеризовать магнитным спиновым квантовым числом m_s , принимающим только одно из двух фиксированных значений: $+1/2$ или $-1/2$. Абсолютное значение величины спина электрона равно

$$|s| = \sqrt{m_s(m_s + 1)} \hbar = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar. \quad (1.1)$$

Существуют лишь две возможные проекции спина электрона на любое выделенное направление (ось квантования) z , равные по величине и обратные по знаку:

$$s_z = m_s \hbar = \pm \frac{1}{2} \hbar. \quad (1.2)$$

Соответствующие спину электрона с массой m_0 проекции магнитного момента имеют величину (с учетом отрицательного заряда электрона, $e < 0$)

$$\mu_z = \pm \frac{e \hbar}{2m_0} = \mp \frac{|e| s_z}{m_0} = \pm |\mu_B|, \quad (1.3)$$

где

$$\mu_B = e \hbar / (2m_0) \quad (1.4)$$

называют **магнетон Бора** и используют в качестве единицы измерения элементарного магнитного момента.

Из (1.3) следует, что спиновый магнитный момент электрона по направлению антипараллелен спину (из-за отрицательного знака заряда электрона). По абсолютной величине его проекции равны магнетону Бора μ_B .

Абсолютная величина спинового магнитного момента равна

$$|\mu_s| = \sqrt{3} |e| \hbar / (2m_0) = \sqrt{3} \mu_B. \quad (1.5)$$

Наличие спина характерно не только для электронов, но и для других квантовых частиц. Так, нейтроны и протоны, образующие ядра атомов, обладая определенными спинами, обуславливают спиновые (а через них и магнитные) свойства атомному ядру в целом.

Протон является ядерной частицей, имеющей положительный заряд, равный заряду электрона; массу, в 1836 раз превышающую массу электрона; спин, равный $1/2\hbar$. Нейтрон также относят к ядерным частицам, но в отличие от протона он электрически нейтрален. Его масса в 1839 раз больше массы электрона, а спин равен $1/2\hbar$.

Момент импульса ядра атома — спин ядра — складывается из собственных спинов протонов и нейтронов и из их орбитальных моментов импульса, обусловленных движением этих элементарных частиц внутри ядра. Это векторные величины, поэтому спин ядра представляет их векторную сумму. Спин ядра квантуется по закону

$$L_n = \hbar\sqrt{I(I+1)}, \quad (1.6)$$

где I — спиновое ядерное квантовое число (его часто называют просто спином ядра), которое принимает целые или полуцелые значения $0, 1/2, 1, 3/2, \dots$. Ядра с четными значениями суммарного числа протонов и нейтронов в ядре характеризуются целыми значениями I , с нечетными — полуцелыми. Поэтому спин ядра, состоящего из четного числа частиц, является целым числом в единицах \hbar . Спин ядра, состоящего из нечетного числа частиц, является полуцелым.

Основой для сравнения магнитных моментов ядер служит ядерный магнетон

$$\mu_N = e\hbar/(2m_p), \quad (1.7)$$

где m_p — масса протона.

Магнитный момент атома складывается из орбитальных и собственных моментов, входящих в его состав электронов, а также из магнитного момента ядра, который обусловлен магнитными моментами образующих его элементарных частиц — протонов и нейтронов. Из сравнения магнетона Бора (1.4), характеризующего магнитный момент электрона, и ядерного магнетона (1.7), характеризующего магнитный момент ядра, очевидно, что в атоме магнитный момент ядра значительно меньше моментов окружающих его электронов. Поэтому в ряде случаев им можно пренебречь и считать, что магнитный момент атома равен векторной сумме магнитных моментов электронов на его орбитах.

Атомы различных химических элементов в зависимости от строения, могут иметь суммарный магнитный момент, равный нулю или отличающийся от нуля. Если суммарный магнитный момент атома равен нулю, то образованное такими атомами вещество не обладает магнитными свойствами. Это наблюдается у атомов с полностью заполненными электронными оболочками. Если суммарный магнитный момент атома не равен нулю, то он обладает определенными магнитными свойствами. Наиболее ярко это проявляется у атомов переходных и редкоземельных элементов, у которых не полностью заполнены d - и f -электронные оболочки, а также у ионов, из которых вследствие определенного химического взаимодействия удалена часть электронов с внешней валентной оболочки.

Вопросы для самопроверки

1. В чем состоит эффект Зеемана?
2. Что показали опыты О. Штерна и В. Герлаха?
3. Что такое спин электрона?
4. Чем характеризуется спин электрона?
5. Как определяется магнитный момент электрона?
6. Чем определяется спин ядра и его магнитный момент?
7. От чего зависят спиновые свойства атомов и ионов?

1.2. Разрешенные энергетические состояния электронов в твердом теле

Поведение электронов в твердых телах, определяемое разрешенными энергетическими состояниями, контролируется не только их электростатическим взаимодействием между собой и с ядрами атомов твердого тела, но и квантовыми, в том числе и спиновыми, свойствами взаимодействующих электронных и ядерных систем.

Квантовые частицы в отличие от классических частиц не просто одинаковы, но и неразличимы — они тождественны. В квантовой механике частицы описываются с помощью волновых функций, позволяющих вычислить не точное положение, а лишь вероятность нахождения частицы в определенной точке пространства. Если волновые функции нескольких тождественных частиц перекрываются, то невозможно достоверно определить, какая из частиц находится в данной точке. Это связано с тем, что вероятность нахождения квантовой частицы в определенной точке пространства определяется квадратом модуля ее волновой функции и не чувствительна к ее знаку, задающему направление движения частицы. Квантовый принцип тождественности частиц требует, чтобы при перестановке двух тождественных частиц волновая функция либо изменяла знак (антисимметричное состояние), либо не меняла знак (симметричное состояние).

Симметричными волновыми функциями описываются частицы с целочисленным спином — **бозоны** (фотоны, пионы, альфа-частицы). Распределение бозонов по энергиям подчиняется **статистике Бозе-Эйнштейна** (*Bose-Einstein statistics*)²², описываемой функцией:

$$f(E) = \frac{1}{\exp[E/(k_B T)] - 1}, \quad (1.8)$$

где E — энергия частицы, T — абсолютная температура, при которой находятся частицы. Согласно этой статистике, в одном квантовом состоянии может одновременно находиться неограниченное количество тождественных бозонов (рис. 1.2).

²² Впервые описана в: S. N. Bose, Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese, *Z. Phys.* **26**(3), 178–181 (1924); A. Einstein, Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. Erste Abhandlung, *Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. Berlin* **22**, 262–267 (1924).

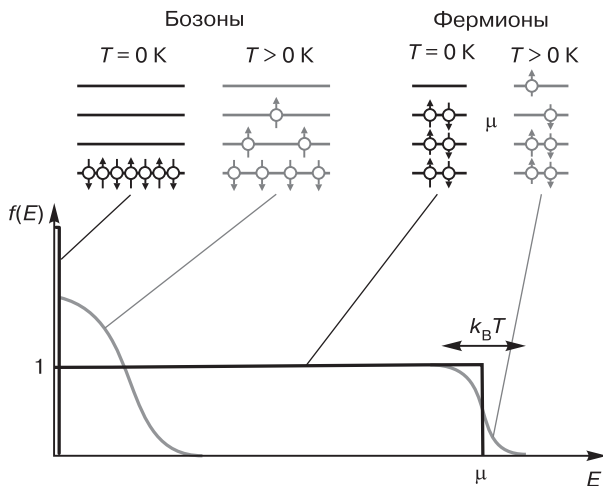


Рис. 1.2. Распределение по энергиям бозонов (статистика Бозе–Эйнштейна) и фермионов (статистика Ферми–Дирака)

Антисимметричными волновыми функциями описываются частицы с полуцелочисленным спином — **фермионы** (электроны, протоны, нейтроны, нейтрино). Впервые на взаимосвязь между симметрией волновой функции, разрешенными энергетическими состояниями и спином электронов указал В. Паули²³, сформулировав принцип, названный впоследствии его именем. **Принцип запрета (исключительности) Паули (Pauli exclusion principle)** гласит: в любой квантово-механической системе (в том числе и в атоме) не может быть двух электронов, находящихся в одинаковых стационарных состояниях, определяемых одинаковым набором четырех квантовых чисел: главного n , орбитального l , магнитного m и магнитного спинового m_s . Это один из фундаментальных принципов квантовой механики, из которого следует, что два и более тождественных фермиона не могут одновременно находиться в одном квантовом состоянии. За его открытие В. Паули был награжден Нобелевской премией по физике в 1945 г.

Принцип Паули ограничивает количество электронов, которые могут находиться на одной орбитали в атоме. Согласно принципу Паули, на любой орбитали может находиться не более двух электронов и то лишь в том случае, если они имеют противоположные спины (неодинаковые спиновые числа). Поэтому в атоме не может быть двух электронов с одинаковыми четырьмя квантовыми числами n , l , m , m_s . Следовательно, каждая атомная орбиталь, характеризующаяся одинаковыми значениями главных квантовых чисел может быть занята не более чем двумя электронами, спины которых имеют противоположную ориентацию — разные m_s . Два таких электрона, находящиеся на одной орбитали и обладающие

²³ W. Pauli, Über den Zusammenhang des Abschlusses der Elektronengruppen im Atom mit der Komplexstruktur der Spektren, *Z. Phys.* **31**(10), 765–783 (1925); W. Pauli, The connection between spin and statistics, *Phys. Rev.* **58**(8), 716–722 (1940).

противоположно направленными спинами, называют *спаренными*, в отличие от одиночного (неспаренного) электрона, занимающего какую-либо одну орбиталь.

В газе свободных электронов их распределение по энергиям контролируется принципом Паули и квантово-механическим *принципом неопределенности Гейзенберга* (*Heisenberg's uncertainty principle*)²⁴, согласно которому состояние квантовых частиц можно различить, только если произведение неопределенности их координат Δr и неопределенности их импульсов Δp не меньше, чем $\hbar/2$. Данные представления лежат в основе статистики для фермионов. Распределение электронов по энергиям подчиняется *статистике Ферми–Дирака* (*Fermi-Dirac statistics*)²⁵:

$$f(E) = \frac{1}{\exp[(E - \mu)/(k_B T)] + 1}, \quad (1.9)$$

где μ — химический потенциал в системе частиц, который обычно заменяют *энергией (уровнем) Ферми* (*Fermi energy (level)*) и обозначают E_F . При абсолютной нулевой температуре все энергетические состояния вплоть до этого уровня полностью заняты — см. рис. 1.2. Выше него — полностью свободны. Энергия Ферми, определенная из условия, что все N электронов в электронном газе, занимающем объем V , размещаются на уровнях с энергией $E \leq E_F$ есть

$$E_F = \left(\frac{3N}{8\pi V} \right)^{2/3} \frac{h^2}{2m_0}. \quad (1.10)$$

Используя энергию Ферми вместо химического потенциала, следует иметь в виду, что энергия Ферми, как характеристика энергетически наивысшего заполненного состояния, зависит от температуры. При любой ненулевой температуре значение функции распределения Ферми–Дирака $f(E_F) = 0,5$.

Статистика Ферми–Дирака учитывает наличие нецелочисленного спина у фермионов и связанное с этим ограничение на разрешенные энергетические состояния для них. Она позволяет определять максимальное число электронов, которое может находиться на различных энергетических уровнях, подуровнях или в энергетических зонах, как в атомах, так и свободных электронов в твердотельных структурах.

Вопросы для самопроверки

1. Что отличает квантовые частицы от классических?
2. Какие виды волновых функций описывают поведение квантовых систем?

²⁴ Впервые описан в: W. Heisenberg, Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik, *Z. Phys.* **43**(3/4), 172–198 (1927). В 1932 г. В. К. Гейзенберг получил Нобелевскую премию по физике за создание квантовой механики, применение которой наряду с прочим привело к открытию аллотропных форм водорода.

²⁵ Впервые описана в: E. Fermi, Zur quantelung des idealen einatomigen gases, *Z. Phys.* **36**(11/12), 902–912 (1926); P. A. M. Dirac, Theory of quantum mechanics, *Proc. Roy. Soc. Ser. A*, **112**, 661–677 (1926).

3. Как называются частицы с целочисленным и полуцелочисленным спином?
4. Какой статистике подчиняются частицы с целочисленным спином?
5. Какие принципы определяют распределение по энергиям свободных электронов?
6. Какую информацию предоставляет статистика Ферми–Дирака?

1.3. Обменное взаимодействие

Одной из важных особенностей квантовых частиц является существование между ними специфического вида взаимодействия, которое называют *обменным взаимодействием* (*exchange interaction*). Это взаимное влияние, впервые обнаруженное независимо В. Гейзенбергом и П. Дираком²⁶, представляет собой сугубо квантовый эффект, являющийся следствием принципа запрета Паули. Он характерен для тождественных квантовых частиц и приводит к зависимости энергии системы частиц от значения ее полного спина.

Вследствие неразличимости квантовых частиц одного типа волновая функция системы таких частиц должна обладать определенной симметрией относительно перестановки двух одинаковых частиц, т. е. их координат и спинов. Для частиц с нулевым и целочисленным спином — бозонов — волновая функция системы не меняется при такой перестановке и является симметричной. При перестановке частиц с полуцелочисленным спином — фермионов — волновая функция системы меняет знак, т. е. она антисимметрична. Если силы взаимодействия между частицами не зависят от их спинов, волновую функцию системы можно представить в виде произведения двух функций, одна из которых зависит только от координат частиц, а другая — только от их спинов. В этом случае из принципа тождественности следует, что координатная часть волновой функции, описывающая движение частиц в пространстве, должна обладать определенной симметрией относительно перестановки координат одинаковых частиц, зависящей от симметрии спиновой функции. Наличие такой симметрии означает, что имеет место определенная согласованность (корреляция) движения одинаковых частиц, которая сказывается на энергии системы даже в отсутствие какого-либо другого взаимодействия между частицами. Поскольку обычно влияние частиц друг на друга является результатом действия между ними каких-либо сил, о взаимном влиянии одинаковых частиц, вытекающем из принципа тождественности, говорят как о проявлении обменного взаимодействия.

Обменная энергия дополняет энергию системы взаимодействующих частиц в квантовой механике, которая обуславливается перекрытием волновых функций при ненулевом значении полного спина системы частиц. В случае непосредственного перекрытия двух волновых функций квантовых систем говорят о *прямом*

²⁶ W. Heisenberg, Mehrkörperproblem und Resonanz in der Quantenmechanik, *Z. Phys.* **38**(6–7), 411–426 (1926); P. A. M. Dirac, On the theory of quantum mechanics, *Proc. Royal Soc. London, Series A* **112**(762), 661–677 (1926).

обмене между ними, а в случае присутствия частиц-посредников, через которые происходит взаимодействие, — о *косвенном обмене*. В твердом теле прямое обменное взаимодействие осуществляется через непосредственное перекрытие волновых функций соседних атомов. Косвенное обменное взаимодействие в них происходит с участием свободных электронов (электронов проводимости) или немагнитных ионов.

Зависимость энергетических состояний системы, состоящей из двух фермионов, от прямого обменного взаимодействия между ними описывают оператором, учитывающим их спины \mathbf{s}_1 и \mathbf{s}_2 :

$$V_{ex} = -2J \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_2, \quad (1.11)$$

где обменный интеграл

$$J = \iint \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \psi_1^*(\mathbf{r}_1) \psi_2^*(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (1.12)$$

Здесь $\psi_1(\mathbf{r}_1)$ и $\psi_2(\mathbf{r}_2)$ — волновые функции первой и второй квантовой частицы; $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ — координаты частиц.

Если $J > 0$, то обменное взаимодействие стремится ориентировать спины электронов параллельно друг другу. Обменное взаимодействие создает эффективное молекулярное поле, которое действует на электроны так же, как внешнее магнитное поле.

Антисимметричность полной волновой функции системы из двух электронов приводит к зависимости изменения энергии их обменного взаимодействия от взаимной ориентации спинов вида $\Delta E = E_c - (1/2)J - 2\mathbf{s}_1 \mathbf{s}_2$, где E_c — энергия прямого кулоновского взаимодействия между двумя электронами.

Для системы, состоящей из большого количества электронов, зависящая от спина часть гамильтониана взаимодействия записывается в виде

$$\mathbf{H}_{ex} = - \sum_{ij(i \neq j)} J_{ij} \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j, \quad (1.13)$$

где сумма берется по всем электронам.

Прямое обменное взаимодействие между электронами, а также между однотипными атомами и ионами оказывает существенное влияние на свойства твердых тел. Оно объясняет природу химической связи и диамагнетизм молекул, в том числе сильный ферромагнетизм твердых тел.

Косвенное обменное взаимодействие между магнитными ионами с участием электронов называют *взаимодействием Рудермана–Киттеля–Касуйи–Йосиды*, или *РККИ-обменным взаимодействием* (*Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida exchange interaction, RKKY-exchange interaction*)²⁷. Это взаимодействие присуще материалам, содержащим достаточное количество свободных электронов, которые играют роль

²⁷ Впервые описано в: М. А. Ruderman, С. Kittel, Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons, *Phys. Rev.* **96**(1), 99–102 (1954); Т. Kasuya, A theory of metallic ferro- and antiferromagnetism on Zener's model, *Progr. Theor. Phys.*, **16**(1), 45–57 (1956); К. Yosida, Magnetic properties of Cu–Mn alloys, *Phys. Rev.* **106**(5), 893–898, (1957).

посредников во взаимодействии. Магнитный ион индуцирует осциллирующую спиновую поляризацию находящихся вблизи него свободных электронов. Причина того, что эта поляризация носит осциллирующий характер, состоит в том, что свободные электроны стремятся экранировать своими спинами магнитный момент иона так же, как их заряд экранирует заряд иона, но их волновые функции обладают ограниченным набором длин волн. Экранирующая поляризация ослабевает с увеличением расстояния от данного иона, но ее влияние распространяется сравнительно далеко. Такая модулированная спиновая поляризация в системе свободных электронов ощущается соседними магнитными ионами, что и приводит к появлению осциллирующего непрямого взаимодействия между ними.

Описывают РККИ-обменное взаимодействие при помощи представления о том, что свободные электроны движутся в эффективном магнитном поле, создаваемом локализованными магнитными моментами двух ионов i и j в узлах магнитной подрешетки твердого тела, имеющих координаты \mathbf{r}_i , \mathbf{r}_j и спины \mathbf{s}_i и \mathbf{s}_j . Энергия этого взаимодействия определяется магнитной восприимчивостью $\chi(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ электронного газа

$$E(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{J^2}{\mu_0(g\mu_B)^2} \chi(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j), \quad (1.14)$$

где g — g -фактор²⁸ электрона.

Для свободных электронов магнитную восприимчивость в общем виде представляют как

$$\chi(x) = \frac{x \cos x - \sin x}{x^4}, \quad (1.15)$$

при условии, что $x = 2k_F r_{ij} \gg 1$. Здесь k_F — волновой вектор на уровне Ферми, $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ — расстояние между взаимодействующими ионами.

Энергия РККИ-обменного взаимодействия имеет знакопеременный осциллирующий характер как функция расстояния между ионами, т. е. это взаимодействие может приводить к притяжению или отталкиванию взаимодействующих частиц. Знакопеременность энергии взаимодействия приводит к тому, что в зависимости от расстояния между ионами материал будет проявлять ферромагнитные свойства, если взаимодействие способствует параллельному выстраиванию спинов ионов, или антиферромагнитные свойства в противоположном случае.

РККИ-обменное взаимодействие в неупорядоченной системе, где ионы располагаются на случайных расстояниях друг от друга, можно обнаружить как положительное (притяжение), так и отрицательное (отталкивание) взаимодействие между их магнитными моментами. Это приводит к возможности возникновения

²⁸ g -Фактор — множитель, связывающий гиромангнитное отношение частицы γ с классическим значением гиромангнитного отношения γ_0 : $\gamma = g\gamma_0$ (гиромангнитное отношение — отношение дипольного магнитного момента элементарной частицы к ее механическому моменту). Для классической частицы g -фактор равен 1, для свободных квантовых частиц со спином $1/2$ эта величина равна 2. Для реальных частиц экспериментально определенное значение g -фактора может отличаться как от 1, так и от 2, и является одной из характеристик частиц.

таких ситуаций в системе на макроскопическом уровне, когда магнитные моменты ионов вынуждены реагировать на прямо противоположные воздействия. Данная ситуация называется *фрустрацией* (*frustration*). Это понятие широко используется во многих отраслях науки и называется также *структурной неравновесностью*. Фрустрированная система такова, что, не будучи способной достичь состояния, в котором полностью уравнивались бы все оказываемые на нее микроскопические воздействия, она обладает множеством равновероятных неравновесных состояний. Фрустрированная система не имеет однозначного микроскопического расположения магнитных моментов в основном состоянии, в ней имеется по существу бесконечное число допустимых эквивалентных состояний, поэтому фрустрированная магнитная система обнаруживает метастабильность, характеризующуюся гистерезисными явлениями, зависящими от времени релаксации к равновесному состоянию, или зависимостью свойств материала от его термической или магнитной предыстории.

Косвенное обменное взаимодействие между магнитными ионами в твердом теле может происходить и при посредничестве расположенных между ними немагнитных ионов, таких как например ионы кислорода O^{2-} . Х. Крамерс, опираясь на идею Ф. Блоха, в 1934 г. показал²⁹, что обменная связь магнитных ионов, окруженных диамагнитными ионами, может осуществляться через виртуальные возбуждения диамагнитной подсистемы кристалла. Позже, в 1950 г., эту идею развил Ф. Андерсон³⁰ и применил ее к объяснению антиферромагнитных свойств химических соединений d -металлов типа MnO . Природу косвенного обменного взаимодействия в рамках *модели Крамерса–Андерсона* (*Kramers-Anderson model*) можно пояснить на простой системе «трех центров, четырех электронов», являющейся предельной идеализацией случая MnO (рис. 1.3).

В материалах, состоящих из магнитных $3d$ -ионов, разделенных такими немагнитными ионами, как O^{2-} , Vr , Cl и др., создается ситуация, когда расстояние для непосредственного взаимодействия $3d$ -орбиталей слишком велико и обменное взаимодействие осуществляется перекрытием волновых функций $3d$ -орбиталей магнитных ионов и p -орбиталей немагнитных ионов. Эти орбитали оказываются гибридными, а их электроны становятся общими для нескольких ионов. Обменный процесс включает следующие этапы: перескок электрона с заполненной p -орбитали немагнитного иона (иона O^{2-}) на d -орбиталь одного из соседних магнитных ионов (Mn^{2+}) — рис. 1.3, б; переворот спина оставшегося в немагнитном ионе p -электрона и спина d -электрона в другом магнитном ионе вследствие прямого обменного взаимодействия — рис. 1.3, в; перескок d -электрона с орбитали первого магнитного иона на p -орбиталь немагнитного иона — рис. 1.3, г. При таких переходах возникает выигрыш в энергии основного состояния системы

²⁹ Впервые описано в: Н. А. Kramers, L'interaction entre les atomes magnétogènes dans un cristal paramagnétique, *Physica* 1(1–6), 182–192 (1934).

³⁰ Впервые описано в: Р. W. Anderson, Antiferromagnetism. Theory of superexchange interaction, *Phys. Rev.* 79(2), 350–356 (1950).

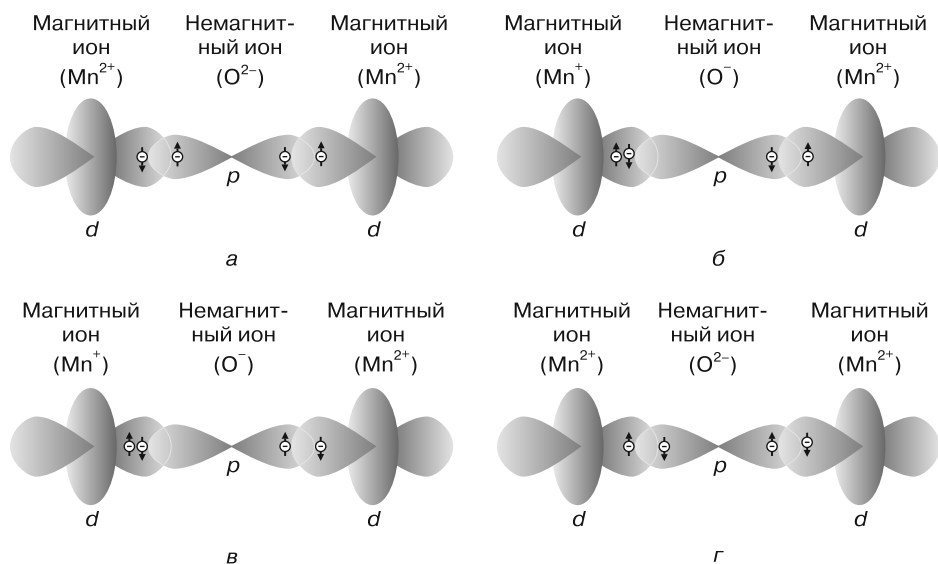


Рис. 1.3. Косвенное обменное взаимодействие между магнитными ионами через немагнитный ион

с антипараллельными спинами относительно состояния с параллельными спинами, в котором один из процессов *б* или *в* невозможен. Возникающая зависимость полной энергии кристалла от суммарного спина в данном случае благоприятствует антиферромагнитному упорядочению магнитных моментов. Энергия косвенного обменного взаимодействия Крамерса–Андерсона пропорциональна четвертой степени интеграла перекрытия d -волновой функции магнитного иона и p -волновой функции электронов в немагнитном ионе.

Знак и относительная величина косвенного обменного взаимодействия в магнитных диэлектриках в зависимости от электронной конфигурации магнитного иона, симметрии кристаллического окружения и угла между направлениями от немагнитного к магнитному иону позволяют определить полуэмпирические **правила Гуденафа–Канамори** (*Goodenough-Kanamori rules*)³¹. Первое: если у соседних ионов перекрываются наполовину заполненные орбитали, то обмен оказывается антипараллельным и достаточно сильным. Второе: если у соседних ионов перекрываются занятая и свободная орбитали, обмен является параллельным и относительно слабым. Имеется зависимость такого взаимодействия от угла между направлениями от немагнитного к магнитному иону, которая проявляется в том, что при достижении критического угла $\sim 110^\circ$ меняется знак взаимодействия.

³¹ Впервые описаны в: J. B. Goodenough, Theory of the role of covalence in the perovskite-type manganites $[La,M(II)]MnO_3$, *Phys. Rev.* **100**(2), 564–573 (1955); J. Kanamori, Superexchange interaction and symmetry properties of electron orbitals, *J. Phys. Chem. Solids* **10**(2–3), 87–98 (1959).

В реальных твердых телах в той или иной мере присутствуют все рассмотренные виды обменного взаимодействия, которые определяют их магнитные свойства. Прямое обменное взаимодействие экспоненциально затухает с увеличением расстояния между магнитными ионами, поэтому оно наиболее значимо в твердых телах, образованных такими ионами. В разбавленных магнитных материалах наиболее важную роль играет косвенное обменное взаимодействие, энергия которого имеет степенную зависимость от расстояния между ионами в кристаллической решетке твердого тела.

Вопросы для самопроверки

1. Каковы причины возникновения обменного взаимодействия?
2. Как проявляется и чем характеризуется прямое обменное взаимодействие?
3. Что такое косвенное обменное взаимодействие?
4. Какие типы косвенного обменного взаимодействия существуют?
5. Каковы особенности РККИ-обменного взаимодействия?
6. Как проявляется обменное взаимодействие Крамерса–Андерсона?
7. Как формулируются правила Гуденафа–Канамори?

1.4. Спин-орбитальное взаимодействие

Спин-орбитальное взаимодействие (*spin-orbit interaction*) представляет собой взаимодействие электронов, зависящее от величин и взаимной ориентации их орбитального и спинового моментов количества движения, вследствие чего возникает прецессия спинов электронов и расщепление разрешенных электронных состояний по спину, особенно ярко проявляющиеся в полупроводниках и полупроводниковых структурах. Это взаимодействие имеет специфические особенности, зависящие от пространственной асимметрии кристаллической структуры твердого тела и связанной с ней асимметрией собственного потенциального рельефа.

Асимметричность кристаллической структуры двух видов определяет закономерности спин-орбитального взаимодействия. Это асимметрия, характеризуемая отсутствием центра инверсии объемной кристаллической решетки полупроводника (*bulk inversion asymmetry*), впервые теоретически проанализирована Ж. Дрессельхаусом³². Другим вариантом является асимметрия, связанная с неоднородностью полупроводниковой структуры по своему составу, приводящая к асимметрии потенциала кристаллической решетки такой гетероструктуры (*structure inversion asymmetry*), впервые рассмотренная Э. Рашбой³³. Возникающие вследствие объемной и структурной асимметрии эффекты, приводящие к расщеплению разрешенных энергетических состояний свободных электронов в полупроводниковых структурах, получили, соответственно, названия — **связывание**

³² G. Dresselhaus, Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures, *Phys. Rev.* **100**(2), 580–586 (1955).

³³ Э. И. Рашба, В. И. Шека, Симметрия энергетических зон в кристаллах типа вюрцита. II. Симметрия зон с учетом спиновых взаимодействий, *ФТТ* **1**(2), 162–176 (1959).

(*эффект Дрессельхауса* (*Dresselhaus coupling effect*) и *связывание* (*эффект Рашбы* (*Rashba coupling effect*)).

Отсутствие инверсной симметрии потенциала кристаллической решетки, когда $E(\mathbf{k}) \neq E(-\mathbf{k})$, при нулевом внешнем магнитном поле приводит к усиленному спин-орбитальному взаимодействию в полупроводниках с кристаллической структурой типа цинковой обманки и в гетероструктурах на их основе. Когда такая асимметрия связана со структурными особенностями самого полупроводника — эффект Дрессельхауса — гамильтониан спин-орбитального взаимодействия электронов в его объеме представляют в виде

$$\mathbf{H}_{SO} = \hbar \boldsymbol{\sigma} (\Omega_D + \Omega_S)/2, \quad (1.16)$$

где $\boldsymbol{\Omega}$ — вектор прецессии спина электрона, зависящий от волнового вектора \mathbf{k} ; $\boldsymbol{\sigma}$ — спиновая матрица Паули. Первое и второе слагаемое в правой части описывают, соответственно, спин-орбитальное взаимодействие Дрессельхауса (нижний индекс D) и деформационное спин-орбитальное взаимодействие (нижний индекс S). Вдоль направления x , совпадающего с осью кристалла $[100]$, компоненты векторов Ω_D и Ω_S записывают как

$$\Omega_{Dx} = 2\gamma_D k_x (k_y^2 - k_z^2), \quad \Omega_{Sx} = 2C_3(\varepsilon_{xy} k_y - \varepsilon_{xz} k_z) + 2dk_x(\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz}). \quad (1.17)$$

Здесь C_3 и d — коэффициенты, характеризующие деформационный потенциал кристаллической решетки; ε — компоненты тензора механических деформаций. Параметр γ_D называют *коэффициентом Дрессельхауса*:

$$\gamma_D = 2\eta / [3m_{cv} \sqrt{2m_e E_g (1 - \eta/3)}], \quad (1.18)$$

где $\eta = \Delta_{SO}/(E_g + \Delta_{SO})$; E_g и Δ_{SO} — ширина запрещенной зоны полупроводника и спин-орбитальное расщепление его валентной зоны соответственно; m_{cv} — параметр с размерностью массы, связанный с взаимодействием между зоной проводимости и валентной зоной; m_e — эффективная масса электрона. Остальные компоненты частоты прецессии спина электрона — при ориентации y и z вдоль $[010]$ и $[001]$ соответственно — получают из (1.17) с помощью циклической перестановки индексов.

Коэффициент деформационной спин-орбитальной связи

$$C_3 = 2c_2 \eta / [3\sqrt{2m_e E_g (1 - \eta/3)}],$$

где c_2 — межзонная константа деформационного потенциала, как правило, больше по значению, чем d . Спин-орбитальное взаимодействие электронов, индуцированное деформацией кристаллической решетки полупроводника, может быть более значимым, чем спин-орбитальное взаимодействие Дрессельхауса. Значения коэффициентов C_3 и d для GaAs, полученные из первопринципных расчетов, показали хорошее согласие с экспериментальными результатами: $C_3 = 6,8 \text{ эВ} \cdot \text{Å}^3$ и $d = 2,1 \text{ эВ} \cdot \text{Å}^3$.

Коэффициенты γ_D , C_3 и d играют важную роль в описании динамики поведения спинов свободных электронов в полупроводниках.

Инверсная асимметрия потенциала кристаллической решетки может возникать и в полупроводниковых гетероструктурах, в частности в двумерных (2D) структурах с квантовыми колодцами, вызывая усиленное спин-орбитальное взаимодействие электронов — эффект Рашбы. Это приводит к возникновению электрического поля на границах таких структур, которое направлено вдоль нормали к поверхности границ. Индуцированное таким образом внутреннее электрическое поле снимает спин-вырождение двумерных электронных энергетических зон в квантовом колодце посредством связывания спина электрона и его орбитального движения. Спин-орбитальное взаимодействие электронов при этом описывается гамильтонианом:

$$\mathbf{H}_{SO} = \alpha_s (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k}) \cdot \mathbf{z}, \quad (1.19)$$

где α_s — коэффициент спин-орбитального взаимодействия, являющийся мерой силы этого взаимодействия; \mathbf{z} — единичный вектор вдоль направления поверхностного поля; \mathbf{k} — волновой вектор электрона вдоль плоскости квантового колодца. Коэффициент спин-орбитального взаимодействия α_s пропорционален силе встроенного поверхностного электрического поля E_{surf} .

Так как приведенное выражение впервые было выведено Э. Рашбой³⁴, спин-орбитальный гамильтониан \mathbf{H}_{SO} обычно называют *уравнением (гамильтонианом) Рашбы*, а α_s — постоянной Рашбы. Полный эффективный гамильтониан со спин-орбитальным слагаемым имеет вид

$$\mathbf{H} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \alpha_s (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k}) \cdot \mathbf{z}. \quad (1.20)$$

При этом дисперсия энергии электронов, относящаяся к движению вдоль плоскости, определяется как

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \alpha_s k. \quad (1.21)$$

Важная особенность такой дисперсионной зависимости состоит в том, что спиновые состояния вырождаются при $k = 0$, а спин-расщепление электронных состояний линейно увеличивается с k .

В двумерных дырочных системах инверсная асимметрия, приводящая к спин-расщеплению, значительно отличается от случая с электронами в зоне проводимости. В то время как спин-расщепление Рашбы электронных состояний линейно увеличивается с волновым вектором \mathbf{k} в плоскости двумерной структуры, спин-расщепление состояний тяжелых дырок может быть третьего порядка по k . В пределах небольших концентраций дырок спин-расщепление незначительно.

Коэффициенты спин-орбитального взаимодействия, полученные из измерений эффекта Шубникова–де Гааза (Shubnikovde Haas effect)³⁵, приведены в табл. 1.1.

³⁴ Э. И. Рашба, Свойства полупроводников с петлевыми экстремумами, *ФТТ* 2(6), 1224–1238 (1960).

³⁵ L. V. Shubnikov, W. J. de Haas, Resistance changes of bismuth crystals in a magnetic field at the temperature of liquid hydrogen, *Proc. K. Akad. Amsterdam* 33(4), 363–378 (1930).

Таблица 1.1

Коэффициенты спин-орбитального взаимодействия³⁶

Тип носителей заряда	α_s , эВ · см	
	GaAs	InAs
2D-электроны	$2,5 \cdot 10^{-10}$	$9,0 \cdot 10^{-10}$
2D-дырки	$6,0 \cdot 10^{-10}$	—

Большой коэффициент спин-орбитального взаимодействия для InAs-квантовых колодцев в сравнении с GaAs можно отнести к более сильному спин-орбитальному взаимодействию и (или) к увеличению g -фактора электронов за счет суммирования многих эффектов, влияющих на эту величину при измерениях.

При оценке роли квантового ограничения в спин-расщеплении следует помнить, что в двумерной структуре, подобной квантовому колодцу, электроны могут свободно двигаться только вдоль плоскости стенки колодца, и их волновой вектор, перпендикулярный плоскости, квантуется: $k_z \sim \pi/d_z$, где d_z — ширина колодца. Если квантовый колодец достаточно тонкий, так что в плоскости орбиты компонента вектора $k \ll \pi/d_z$, то спин-расщепление, вызванное объемной асимметрией, будет доминирующим благодаря преобладанию члена $\Delta E_{\text{bulk}} \sim (\pi/d_z)^2 k$. Таким образом, спин-расщепление, возникшее в результате объемной инверсной асимметрии, может быть усилено квантовым ограничением. Вклад последнего имеет явную зависимость от ширины колодца.

Спиновое расщепление электронных состояний в отсутствие магнитного поля менее эффективно, чем эффект Зеемана. Однако оно является предметом значительного интереса, поскольку касается деталей зонной структуры, которая важна и для фундаментальных исследований, и для разработки спинтронных приборов. Кроме того, спин-орбитальное взаимодействие электронов оказывает сильное влияние на изменение их спиновой ориентации в процессе переноса в полупроводниковых структурах.

Вопросы для самопроверки

1. Что представляет собой спин-орбитальное взаимодействие свободных электронов в твердом теле?
2. Какие виды спин-орбитального взаимодействия свободных электронов могут реализоваться в твердом теле?
3. В чем заключаются особенности спин-орбитального взаимодействия Дресельхауса?
4. Как проявляется спин-орбитальное взаимодействие Рашбы?
5. Чем характеризуется спин-орбитальное взаимодействие в низкоразмерных системах?

³⁶ J. Luo, H. Munekata, F. Fang, P. J. Stiles, Effects of inversion asymmetry on electron energy band structures in GaSb/InAs:GaSb quantum wells, *Phys. Rev. B* **41**(11), 7685–7693 (1990).