DOI: 10.17725/rensit.2024.16.089

### Анализ внутреннего спинового эффекта Холла в металлах

#### для задач спинтроники

#### Игнатьев В.К., Перченко С.В., Станкевич Д.А.

Волгоградский государственный университет, https://volsu.ru/ Волгоград 400062, Российская Федерация *E-mail: vkignatjev@yandex.ru, perchenko@volsu.ru, stankevich@volsu.ru* Поступила 18.09.2023, рецензирована 25.09.2023, принята 02.10.2023, опубликована 15.03.2024. Представлена действительным членом РАЕН Ю.К. Фетисовым

Аннотация: Предложен метод оценки поперечного спин-холловского сопротивления для поликристаллических образцов чистых металлов. Вычислены коэффициенты спинового эффекта Холла для различных металлов 3 – 6 периодов, включая редкоземельные лантаноиды. Показано, что знак рассчитанного спин-холловского сопротивления всегда совпадает с экспериментальным. Для большинства рассмотренных металлов результат расчета согласуется с экспериментальными данными. Показано, что согласование результатов расчета с экспериментом можно значительно улучшить, если использованные приближения сильной связи и эффективного заряда дополнить предположением, что взаимодействие коллективизированных электронов проводимости при построении самосогласованного поля может быть учтено введением эффективной массы электрона проводимости в гамильтониан спин-орбитального взаимодействия. Обсуждены причины отклонения для алюминия, меди, диспрозия, гольмия и гадолиния.

Ключевые слова: спинтроника, спиновый эффект Холла, спин-орбитальное взаимодействие, приближение сильной связи, приближение ближайших соседей, приближение идеального ферми-газа, самосогласованное поле

#### PACS: 67.57.Lm, 72.25.Ba, 75.76.+j

*Благодарности*: 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.

Для цитирования: Игнатьев В.К., Перченко С.В., Станкевич Д.А. Анализ внутреннего спинового эффекта Холла в металлах для задач спинтроники. *РЭНСИТ: Радиоэлектроника. Наносистемы.* Информационные технологии, 2024, 16(1):89-100. DOI: 10.17725/rensit.2024.16.089.

# Analysis of the intrinsic spin-Hall effect in metals for spintronics problems

#### Vyacheslav K. Ignatjev, Sergey V. Perchenko, Dmitry A. Stankevich

Volgograd State University, https://volsu.ru/

Volgograd 400062, Russian Federation

E-mail: vkignatjev@yandex.ru, perchenko@volsu.ru, stankevich@volsu.ru

Received September 18, 2023, peer-reviewed September 25, 2023, accepted October 02, 2023, published March 15, 2024.

Abstract: A method for estimating the transverse spin-Hall resistance for polycrystalline samples of pure metals has been proposed. The spin Hall effect coefficients for various metals of 3-6 periods, including rare-earth lanthanides, have been calculated. It is shown that the sign of the calculated spin-Hall resistance always coincides with the experimental one. For most of the considered metals the calculation result agrees with the experimental data. It is shown that the agreement of the calculation results with experiment can be significantly improved if the used approximations of strong coupling and effective charge are supplemented by the assumption that the interaction of collectivized conduction electrons in the construction of the self-consistent field can be taken into account by the introduction of the effective mass of the conduction electron in the Hamiltonian

of the spin-orbit interaction. The reasons for the deviation for aluminum, copper, dysprosium, holmium, and gadolinium are discussed.

*Keywords:* spintronics, spin-Hall effect, spin-orbit interaction, strong coupling approximation, nearest-neighbor approximation, ideal Fermi-gas approximation, self-consistent field, effective charge

#### PACS: 67.57.Lm, 72.25.Ba, 75.76.+j

Acknowledgments: The study was carried out with funds from the Russian Science Foundation grant No. 22-22-20035 (https://rscf.ru/project/22-22-20035/) and at the expense of the budget of the Volgograd region.

*For citation:* Vyacheslav K. Ignatjev, Sergey V. Perchenko, Dmitry A. Stankevich. Analysis of the intrinsic spin-Hall effect in metals for spintronics problems. *RENSIT: Radioelectronics. Nanosystems. Information Technologies*, 2024, 16(1):89-100e. DOI: 10.17725/j.rensit.2024.16.089.

#### Содержание

- 1. Введение (90)
- 2. Приближение самосогласованного поля для коллективизированных электронов (91)
- 3. Динамика импульса электрона проводимости в кристалле (92)
- 4. Внутренний спиновый эффект Холла в поликристаллическом металле (93)
- 5. Расчет спин-холловского сопротивления (94)
- 6. Сравнение результатов расчета с экспериментальными значениями (95)
- 7. Заключение (98)

Литература (99)

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

Перспективным направлением для реализации нового поколения устройств информационных и сенсорных технологий [1] является немагнитная спинтроника, основанная на спиновом эффекте Холла (СЭХ). Принято различать внешний (несобственный) и внутренний (собственный) СЭХ. Основную роль во внешнем СЭХ, предсказанном М.И. Дьяконовым и В.И. Перелем в 1971 г. [2], играет спин-зависимое рассеяние электронов проводимости на полях примеси. Такое рассеяние обеспечивают долю спинполяризованного тока порядка долей процента с длиной когерентности порядка десятков нанометров. Этого достаточно для исследований спиновых эффектов в наноструктурах, но не для информационных и биотехнологий. Внутренний СЭХ, предсказанный С. Мураками в 2003 г., Д. Синова в 2004 г. [3] и вскоре обнаруженный экспериментально [4], происходит из-за спинорбитального взаимодействия типа Рашбы

–Дрессельхауса [5]. Такое взаимодействие обусловлено полем атомных ядер и может индуцироваться ненулевым орбитальным моментом электрона проводимости, или непосредственно его импульсом [6].

Внутренний СЭХ заключается в том, что зарядовый ток в чистых немагнитных металлах с сильным спин-орбитальным взаимодействием приводит К возникновению измеряемого поперечного спинового тока [7]. Существует также обратное явление – инверсный спиновый Холла (ИСЭХ), эффект заключающийся в том, что спиновый ток в металле создает поперечный зарядовый ток [8]. Таким образом, внутренний СЭХ может использоваться в устройствах спинтроники как для генерации, так и для детектирования спинового тока. Экспериментально обнаружено, что в некоторых поликристаллических образцах случаях В наблюдается увеличение угла СЭХ, доли спинполяризованного тока и длины когерентности по сравнению с монокристаллическими [9].

В настоящее время доступны достоверные данные по спиновому экспериментальные эффекту Холла в металлах. Поэтому в рамках использованных в работе [10] приближений были рассчитаны коэффициенты спинового эффекта Холла немагнитных металлов 5-го и 6-го периодов [11]. Для платины, тантала, золота, альфа-вольфрама, палладия, молибдена и ниобия расчет поперечного спин-холловского сопротивления дал результаты, согласующиеся с опубликованными экспериментальными в пределах погрешности измерений. Для бетавольфрама расчетные значения примерно в 2 раза больше экспериментальных, отражающих аномально высокий СЭХ. Целенаправленный

перспективных поиск материалов ΛЛЯ устройств спинтроники, обоснование методов их проектирования, расчета и оптимизации сигнальных характеристик предполагает их базы сравнения расчетных расширение значений с экспериментальными. Для этого рассчитаны константы спинового эффекта Холла для металлов 4-го и 3-го периодов, а также лантаноилов.

#### 2. ПРИБЛИЖЕНИЕ **CAMOCOΓΛΑCOBAHHOΓΟ ΠΟΛЯ** ДЛЯ КОЛЛЕКТИВИЗИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

Спин-орбитальная добавка в энергию одиночного электрона, находящегося в заданном электрическом поле с потенциалом  $\Phi(r)$ , имеет вид [12]

$$\hat{V} = -\frac{\hbar e}{2m^2 c^2} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{s}_{\alpha} \frac{\partial \Phi}{\partial r_{\beta}} \hat{p}_{\gamma}.$$
(1)

Здесь т – масса электрона с зарядом –е, ћ – приведенная постоянная Планка, с – скорость света в вакууме,  $\varepsilon_{_{\alpha\beta\gamma}}$  – единичный антисимметричный тензор Леви-Чивитты.

Кристаллит чистого металла можно рассматривать молекулу как гомоядерную В С металлической связью. рамках приближения Хартриодноэлектронного Фока каждый коллективизированный электрон находится в самосогласованном поле, созданным ионными остатками и другими коллективизированными электронами [13]. обычно Самосогласованное поле строится методом последовательных приближений. В приближении начальном волновая функция коллективизированного электрона рассматривается как молекулярная орбиталь и представляется в виде линейной комбинации атомных орбиталей (приближение ЛКАО).

Для любого спинового состояния электрона можно выбрать такое направление оси 2, чтобы проекция его спина на эту ось имела определённое значение 5, то есть  $\psi(\mathbf{r},\sigma) = \psi(\mathbf{r})\delta(\sigma,s_z).$ В приближении сильной связи такой комбинацией ДЛЯ координатной части волновой функции может быть функция Ванье [14]:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^{N} \Psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_n), \qquad (2)$$

где  $\Psi(\mathbf{r})$  – атомарная функция внешнего электрона, **R** – вектор трансляции, N – количество узлов в кристаллите.

B качестве модельного потенциала начального приближения возьмем потенциал кристаллического поля ионных остатков с эффективным зарядом Ze и координатами **R**<sub>ь</sub>

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{eZ}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_k|}.$$
(3)

Здесь  $\varepsilon_0$  – электрическая постоянная.

Если в качестве начального приближения функцию  $\Psi(\mathbf{r})$ атомарную волновую соотношении (2) считать водородоподобной, величину Ζ можно оценить, приравняв координату максимума радиальной  $\rho_{\rm max}$ компоненты этой функции к радиусу атома R.

$$Z = \frac{\rho_{\max} a_B}{R_a}$$

где  $a_{\rm B} = 5.3 \cdot 10^{-10}$  м – боровский радиус. На **Рис. 1** приведен пример для определения величины Z для металла четвертого периода, то есть, когда квадрат модуля радиальной волновой функции *R*<sub>40</sub> имеет четыре максимума.

Приближение эффективного заряда в модельном потенциале (3) совместно с приближением сильной связи (2) означает, построении ЧТО при самосогласованного



Рис. 1. Зависимость квадрата модуля радиальной компоненты волновой функции  $|R_{40}|^2$  от безразмерной координаты  $\rho$ . Здесь главное квантовое число n = 4, орбитальное квантовое число l = 0.

#### ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

поля для коллективизированного электрона учитывается только его взаимодействие с ядрами локализованными электронами ИОННЫХ И остатков. В следующем приближении следует учесть взаимодействие, включая обменное, коллективизированного электрона с другими электронами проводимости. При анализе явлений переноса такое взаимодействие обычно учитывается в рамках метода эффективной массы. Формально можно заменить в формуле (1) массу свободного электрона на эффективную. Однако нет оснований полагать, что это должна эффективная быть масса, определяющая проводимость и теплопроводность металла.

#### 3. ДИНАМИКА ИМПУЛЬСА ЭЛЕКТРОНА ПРОВОДИМОСТИ В КРИСТАЛЛЕ

Рассмотрим мезоскопически однородный и изотропный металл. Отдельные кристаллиты анизотропные свойства проявляют на микроскопическом уровне, но физически малый объем, содержащий большое число случайно ориентированных кристаллитов, не будет иметь какого-либо выделенного направления. Под мезоскопической однородностью И изотропностью подразумевается, ЧТО В образце отсутствует регулярная текстура, то есть кристаллиты ориентированы равномерно Регулярная хаотически. текстура может образоваться при изготовлении образца, например, при механической прокатке или другой деформации образца, но не при напылении. Также будем подразумевать, что все кристаллиты не имеют собственного магнитного момента и доменные стенки отсутствуют, поэтому при транспорте электрона проводимости через границу между кристаллитами не возникает существенного возмущения спина.

Динамика импульса электрона, создаваемая возмущением (1), описывается уравнением для средних [13]

$$\frac{dp_{\delta}}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left\langle \left[ \hat{V}, \hat{p}_{\delta} \right] \right\rangle = 
= \frac{\hbar e \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}}{2m^{2}c^{2}} \left\langle \psi \right| \hat{s}_{\alpha} \frac{\partial^{2} \Phi}{\partial r_{\beta} \partial r_{\delta}} \hat{p}_{\gamma} \left| \psi \right\rangle.$$
(4)

В правой части соотношения (4) подразумевается интегрирование по координатам и суммирование по спиновым переменным электрона проводимости. Для любого спинового состояния электрона можно выбрать такое направление оси z, чтобы проекция его спина на эту ось имела определённое значение  $s_z$ , то есть  $\psi(\mathbf{r},\sigma) = \psi(\mathbf{r})\delta(\sigma,s_z)$ . Тогда после суммирования в (4) по спиновым переменным, положив  $\langle \hat{\mathbf{s}} \rangle = \mathbf{s}$  и выполнив замену переменных  $\mathbf{r} - \mathbf{R}_k \rightarrow \mathbf{r}$ , получаем

$$\frac{dp_{\delta}}{dt} = \frac{\hbar^2 e^2 Z_{S_{\alpha}}}{8\pi\varepsilon_0 m^2 c^2 N} \sum_{n,m,k=1}^{N} \exp\left(i\mathbf{k} \left(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m\right)\right) \times \\
\times \left\langle \Psi\left(\mathbf{r} + \mathbf{R}_k - \mathbf{R}_m\right) \left| 3\frac{r_{\delta}}{r^5} \hat{l}_{\alpha} - \frac{\varepsilon_{\alpha\delta\gamma}}{\hbar r^3} \hat{p}_{\gamma} \right| \Psi\left(\mathbf{r} + \mathbf{R}_k - \mathbf{R}_n\right) \right\rangle.$$
(5)

Оператор  $3 \frac{r_{\delta}}{r^{s}} \hat{l}_{a} - \frac{\varepsilon_{a\delta y}}{\hbar r^{3}} \hat{p}_{y}$ , в правой части соотношения (5) является нечетным. Поэтому при  $\mathbf{R}_{n} - \mathbf{R}_{k} = 0$  и  $\mathbf{R}_{m} - \mathbf{R}_{k} = 0$  его среднее равно нулю. Атомарные функции экспоненциально малы при  $r > R_{a} = na_{\rm B}/Z$ , n - главное квантовое число. При этом расстояние между атомами в кристалле существенно больше, чем  $R_{a}$ . Поэтому в соотношении (5) можно ограничиться приближением ближайших соседей и оставить в правой части только слагаемые, для которых  $\mathbf{R}_{n} - \mathbf{R}_{k} = \mathbf{a}_{y}$ , а  $\mathbf{R}_{m} - \mathbf{R}_{k} = 0$  или  $\mathbf{R}_{n} - \mathbf{R}_{k} = 0$ , а  $\mathbf{R}_{m} - \mathbf{R}_{k} = \mathbf{a}_{y}$ . Тогда с учетом эрмитовости оператора в соотношении (5) получаем

$$\frac{dp_{\delta}}{dt} = -\frac{\hbar^2 e^2 Z s_{\alpha}}{4\pi\varepsilon_0 m^2 c^2} \sin(\mathbf{k} \mathbf{a}_{\nu}) \times \\
\times \operatorname{Im} \left\langle \Psi_{\nu} \left| 3 \frac{r_{\delta}}{r^5} \hat{l}_{\alpha} - \frac{\varepsilon_{\alpha\delta\gamma}}{\hbar r^3} \hat{p}_{\gamma} \right| \Psi \right\rangle.$$
(6)

Здесь  $\Psi_{v}(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_{v}) - \Psi(\mathbf{r} - \mathbf{a}_{v}) - функция$ с четностью противоположной четности $функции <math>\Psi(\mathbf{r})$  и подразумевается суммирование по v по парам симметрично расположенных относительно рассматриваемого атома его ближайших соседей.

Правая часть соотношения (6) равна силе, действующей на электрон. Ее можно представить как результат действия на электрон стороннего электрического поля **E**<sub>SH</sub>. В первом порядке малости по **ka**, получаем:

$$E_{SH\alpha} = \frac{\hbar^2 Zes_{\beta}k_{\mu}}{4\pi\varepsilon_0 m^2 c^2} a_{\nu\mu} \times$$

$$\times \mathrm{Im} \langle \Psi_{\nu} | 3 \frac{r_{\alpha}}{r^5} \hat{l}_{\beta} - \frac{\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}}{\hbar r^3} \hat{p}_{\gamma} | \Psi \rangle.$$
(7)

Отметим, что квантовое среднее в формуле (7) распадается на два слагаемых, первое из которых пропорционально орбитальному моменту электрона проводимости, а второе - его импульсу, что согласуется с моделями [6].

#### 4. ВНУТРЕННИЙ СПИНОВЫЙ ЭΦΦΕΚΤ ΧΟΛΛΑ Β ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ МЕТАЛЛЕ

область Рассмотрим макроскопическую поликристаллического металла. Для любого состояния электрона можно выбрать направление оси квантования (оси z) так, чтобы проекция его орбитального момента на эту ось имела определённое значение  $l_{x} = l$ . Энергия электрона в атоме, находящемся в электрическом поле, зависит от проекции его орбитального момента на направление поля [13]. Поэтому ориентация атомных орбиталей определяется положением кристаллофизических осей кристаллита, И можно считать, что соотношение (7) записано в системе координат, связанной с осями симметрии кристаллита.

Введем лабораторную систему координат, связанную с приборами, которые задают ток проводимости и измеряют компоненты спина. Поэтому волновой вектор и вектор проводимости спина электронов следует считать заданными в лабораторной системе координат. Компоненты векторов и тензоров в лабораторной системе будем обозначать штрихованными индексами, а В системе координат, связанной с кристаллическими осями домена, не штрихованными.

Преобразуем волновой вектор и вектор спина электронов проводимости из лабораторной системы в систему кристаллических осей  $k_{\mu} = p_{\mu\mu} k_{\mu}, s_{\beta} = p_{\beta\beta'} s_{\beta'},$  а вектор холловского электрического поля из системы кристаллических осей в лабораторную  $E_{SH\alpha'} = p_{\alpha'\alpha}^{-1} E_{SH\alpha}$ , где  $p_{\alpha'\alpha}$ - унитарная матрица поворота. Подставив это преобразование в уравнение (7), усредним вектор Е<sub>SH</sub> в макроскопической области по случайным ориентациям кристаллитов. Матрицу поворота удобно выразить через углы Эйлера:



Рис. 2. Преобразование компонент векторов при переходе из лабораторной системы координат (штрихованные индексы) в систему кристаллических осей. Здесь  $a, \beta$  and ү – углы Эйлера.

где  $0 \le \alpha \le 2\pi$  – угол прецессии,  $0 \le \beta \le \pi$  – угол нутации,  $0 \le \gamma \le 2\pi$  – угол собственного вращения (Рис. 2). Тогда для мезоскопически изотропного металла усреднение по случайным ориентациям кристаллита сводится к усреднению по случайным равномерно распределенным углам Эйлера.

$$E_{SH\alpha'} = \frac{\hbar^2 Zes_{\beta'}k_{\mu'} \overline{p_{\alpha'\alpha}^{-1} p_{\beta\beta'} p_{\mu\mu'}}}{4\pi\varepsilon_0 m^2 c^2} a_{\nu\mu} \times$$

$$\times \mathrm{Im} \left\langle \Psi_{\nu} \left| 3\frac{r_{\alpha}}{r^5} \hat{l}_{\beta} - \frac{\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}}{\hbar r^3} \hat{p}_{\gamma\beta} \right| \Psi \right\rangle.$$
(8)

Здесь

$$\overline{p} = \frac{1}{8\pi^2} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{2\pi} \sin(\beta) p(\alpha, \beta, \gamma) d\alpha d\beta d\gamma.$$
(9)

При аналитическом усреднении уравнения (8) интегралы вида (9) вычислялись в координатной форме, а затем результат преобразовывался в инвариантную форму.

Рассматривая СЭХ только В металлах, воспользуемся для электронов проводимости приближением идеального ферми-газа. Применимость этой модели для электронов

$$p_{ij} = \begin{bmatrix} \cos(\alpha)\cos(\gamma) - \sin(\alpha)\cos(\beta)\sin(\gamma) & -\cos(\alpha)\sin(\gamma) - \sin(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma) & \sin(\alpha)\sin(\beta) \\ \sin(\alpha)\cos(\gamma) + \cos(\alpha)\cos(\beta)\sin(\gamma) & -\sin(\alpha)\sin(\gamma) + \cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma) & -\cos(\alpha)\sin(\beta) \\ \sin(\beta)\sin(\gamma) & \sin(\beta)\cos(\gamma) & \cos(\beta) \end{bmatrix},$$

#### ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

проводимости в металлах обоснована тем, что термодинамика ферми-системы определяется ee микроскопической структурой ТОЛЬКО вблизи поверхности Ферми и совершенно не зависит от того, что делается за пределами размытия порядка k<sub>в</sub>T, где k<sub>в</sub> – постоянная Больцмана, Т – температура. В результате, чем плотнее ферми-газ в металле, тем он идеальнее [15]. Экспериментальные исследования температурной зависимости электронной теплоемкости в металлах показывают, что она хорошо соответствует модели идеального фермигаза со скалярной эффективной массой *т*\*. Для многих металлов  $m^* \approx m$ . Однако для галлия  $m^* \approx$ 2.5 m, а для лантана *т*\* ≈ 0.23 *т*. Полагая в рамках метода эффективной массы в (8)  $\mathbf{k} = \mathbf{j}m^*/(\hbar en_{o})$ , где **ј** – плотно**с**ть зарядового тока, *n* – концентрация электронов проводимости, получаем

$$\mathbf{E}_{SH} = R_{S} \left[ \mathbf{j} \times \frac{\mathbf{P}}{n_{e}} \right],$$

$$R_{S} = \frac{\hbar e Z}{48\pi\varepsilon_{0}mc^{2}} \frac{m^{*}/m}{en_{e}} \times$$

$$\times \operatorname{Re} \left\langle \Psi_{\nu} \right| \frac{3\mathbf{r} \left( \mathbf{r} \mathbf{a}_{\nu} \right) - \mathbf{a}_{\nu}r^{2}}{r^{5}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left| \Psi \right\rangle.$$
(10)

 $r^{5} \partial \mathbf{r}^{|\mathbf{r}|}$  глави  $r^{5} \partial \mathbf{r}^{|\mathbf{r}|}$ , где  $\mathbf{P} = 2\mathbf{s}n_{e}$  – вектор плотности спиновой поляризации.

#### 5. РАСЧЕТ СПИН-ХОЛЛОВСКОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ

Первое соотношение (10) совпадает по форме с выражением для электронного эффекта Холла, если заменить вектор  $\mathbf{P}/n_e$  вектором магнитной индукции **В**. Поэтому можно ожидать, что постоянная спинового эффекта Холла  $R_s$  так же зависит от эффективной массы электронов проводимости, включая ее знак, и их концентрации, как и постоянная электронного эффекта Холла  $R_{\rm H} = (m^*/m)/(en_e)$ . Тогда вторую часть формулы (10) можно записать в виде

$$R_{s} = \frac{\hbar e Z R_{H}}{48\pi\varepsilon_{0}mc^{2}} \operatorname{Re}\left\langle\Psi_{v}\right| \frac{3\mathbf{r}\left(\mathbf{r}\mathbf{a}_{v}\right) - \mathbf{a}_{v}r^{2}}{r^{5}} \frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}\left|\Psi\right\rangle. (11)$$

Потенциал кристаллического поля вида (3) не является центрально-симметричным, и орбитальный момент электрона не является для него "хорошим" квантовым числом. Поэтому волновая функция электрона в атоме отличается от волновой функции электрона в изолированном атоме. Соответственно, волновая функция  $\Psi(\mathbf{r})$  в соотношении (2) не является волновой функцией внешнего электрона, например, *s*-электрона, изолированного атома. Но ее всегда можно представить в виде комбинации волновых функций линейной изолированного атома. В результате в металлах зоны проводимости перекрываются, и часть проводимости быть электронов может образована коллективизацией *р*-электронов.

Используем в соотношении (9) приближение водородоподобной атомарной орбитали для внешних (валентных) электронов

$$\Psi_{nlm}(x,\theta,\varphi) = R_{nl}(x)Y_{lm}(\theta,\varphi).$$
(12)

Здесь l — орбитальное квантовое число, m — магнитное квантовое число,  $\theta$  — полярный угол,  $\varphi$  — азимутальный угол,  $R_{\rm nl}(x)$  — радиальная часть волновой функции,  $x = Zr/a_B$ ,  $Y_{\rm lm}(\theta,\varphi)$  — угловая часть волновой функции (сферическая функция). Радиальная часть водородоподобной волновой функции (12) имеет вид [13]

$$R_{nl}(x) = -\frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{\left[(n+l)!\right]^3}} \times \exp\left(-\frac{x}{n}\right) \left(\frac{2x}{n}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2x}{n}\right),$$

где  $L_{n+l}^{2l+1}(t)$  — обобщенный полином Лагерра. Для *s*-электрона нормированная сферическая функция  $Y_{00}(\theta, \varphi) = 1/\sqrt{4\pi}$ . Нормированная сферическая функция *p*-электрона, ориентированная вдоль полярной оси, имеет вид  $Y_{10}(\theta, \varphi) = i\sqrt{3/(4\pi)}\cos(\theta)$ .

Разобьем ближайших соседей рассматриваемого атома на группы с одинаковыми расстояниями от него  $|\mathbf{a}_{v}| = a_{l}$ , где l = 1, 2, ... - номер группы ближайших соседей.

Для *s*-электрона проводимости, направляя полярную ось вдоль вектора **a**, получим в каждой из групп ближайших соседей

$$\left\langle \Psi_{\nu} \middle| \frac{3\mathbf{r}(\mathbf{r}\mathbf{a}_{\nu}) - \mathbf{a}_{\nu}r^{2}}{r^{5}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \middle| \Psi \right\rangle =$$

$$= m_{l} \frac{4b_{l}Z^{3}}{a_{B}^{3}} \int_{0}^{\infty} \frac{dR_{n0}(x)/dx}{x} dx \times$$

$$\times \int_{0}^{1} y \left\{ R_{n0}(x_{1}) - R_{n0}(x_{2}) \right\} dy,$$

$$(13)$$

где  $y = \cos\theta$ ,  $x_1 = \sqrt{x^2 + b_l^2 + 2xb_l y}$ ,  $x_2 = \sqrt{x^2 + b_l^2 - 2xb_l y}$ ,  $b_v = Z |a_l|/a_B$ ,  $m_l$  – число пар симметрично расположенных узлов в *l*-й группе ближайших соседей.

Для *p*-электрона проводимости направим полярную ось вдоль вектора  $\mathbf{a}_{v}$  и будем отсчитывать азимутальный угол  $\varphi$  от плоскости  $\mathbf{a}_{v}\mathbf{r}$ . В сферических координатах  $\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\partial}{\partial r}\mathbf{e}_{r} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\mathbf{e}_{\theta} + \frac{1}{r\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial \varphi}\mathbf{e}_{\varphi}$ , причем орт  $\mathbf{e}_{\varphi}$  ортогонален плоскости  $\mathbf{a}_{v}\mathbf{r}$ , а орт  $\mathbf{e}_{\theta}$ образует с полярной осью угол  $\pi/2 + \theta$ . Тогда

для l-й группы ближайних соседей получим  

$$\left\langle \Psi_{\nu} \middle| \frac{3\mathbf{r}(\mathbf{r}\mathbf{a}_{\nu}) - \mathbf{a}_{\nu}r^{2}}{r^{5}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \middle| \Psi \right\rangle =$$
  
 $= \frac{3b_{l}Z^{3}}{2\pi a_{B}^{3}} m_{l} \int_{0}^{\infty} \left( \frac{2ydR_{n1}(x)/dx}{x} - \frac{1-y^{2}}{x^{2}}R_{n1}(x) \right) dx \times (14)$ 

## $\times \int_{0}^{0} y \{ R_{n1}(x_{1}) - R_{n1}(x_{2}) \} dy.$

#### 6. СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ РАСЧЕТА С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ЗНАЧЕНИЯМИ

В Таблице 1 приведены свойства атомов исследованных металлов, конфигурации их

электронных оболочек, а также параметры их кристаллических решеток.

Наиболее детально спиновый эффект Холла исследован в платине [16]. Для платины радиус атома равен 139 пм, что для 6*s* оболочки соответствует  $Z \approx 22.45$ . Постоянная гранецентрированной решетки периодом *a* = 392 пм, на элементарную ячейку приходится 4 атома, причем каждый атом имеет 6 пар ближайших соседей на расстоянии 277 пм, далее 3 пары на расстоянии 392 пм и 12 пар на расстоянии 480 пм,  $b_1 = 117$ ,  $b_2 =$ 166,  $b_3 = 204$ . При 80 К·R<sub>H</sub> =  $-2.10^{-11}$  м<sup>3</sup>/ (A·c), для *s*-электрона по формулам (11) и (13) получаем  $R_s = 3.48 \cdot 10^{-9}$  Ом·м, для *p*-электрона по формулам (11) и (14) получаем  $R_s = -5.12 \cdot 10^{-10}$  Ом·м.

В **Таблице 2** приведены теоретические, рассчитанные по формулам (11), (13) и (14), и экспериментальные значения спинхолловского сопротивления R<sub>s</sub> для различных металлов. Значения константы Холла R<sub>н</sub> взяты из справочника [17]. Значения проводимости взяты из цитируемых работ, если они там не приведены – то из справочника [17].

Таблица 1

Металл	Ячейка	Конфигурация	r <i>a</i> , пм	Z	а, пм	Пары ближайших соседей					
						а <sub>1</sub> , пм	<i>m</i> <sub>1</sub>	<i>а</i> <sub>2</sub> , пм	<i>m</i> <sub>2</sub>	<i>а</i> <sub>3</sub> , пм	т <sub>3</sub>
Au	ГЦК	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>10</sup> 6s <sup>1</sup>	144	21.7	408	288	6	408	3	500	12
Pt	ГЦК	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>9</sup> 6s <sup>1</sup>	139	22.45	392	277	6	392	3	480	12
α-W	ОЦК	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>4</sup> 6s <sup>2</sup>	141	22.77	316	274	4	316	3	449	6
β-W	A15	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>9</sup> 6s <sup>2</sup>	141	22.77	504	281	6	436	4	454	6
						251	1	281	1	308	4
Та	ОЦК	[Xe]4f <sup>14</sup> 5d <sup>3</sup> 6s <sup>2</sup>	147	21	331	286	4	331	3	468	6
Lu	ГПУ	[Xe]4f <sup>11</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	175	17.84	351	346	6	492	2	557	1
Ho	ГПУ	[Xe]4f <sup>11</sup> 6s <sup>2</sup>	179	17.44	358	350	6	499	2	562	1
Dy	ГПУ	[Xe]4f <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup>	180	17.44	359	353	6	502	2	565	1
Cd	ГПУ	[Xe]4f <sup>7</sup> 5d6s <sup>21</sup>	179	17.44	363	359	6	510	2	579	1
Ag	ГЦК	[Kr]4d105s1	144	14.66	409	289	6	409	3	500	12
Pd	ГЦК	[Kr]4d105s1	137	15.4	389	275	6	389	3	476	12
Мо	ОЦК	[Kr]4d105s1	140	15.22	315	273	4	315	3	445	6
Nb	ОЦК	[Kr]4d105s1	147	14.4	331	287	4	331	3	468	6
Cu	ГЦК	[Ar]3d104s1	128	10.1	362	256	6	361	3	442	12
α-Mn	A12	[Ar]3d104s1	137	10.25	889	277	8	451	12	460	8
Cr	ОЦК	[Ar]3d104s1	129	10	289	250	4	289	3	408	6
V	ОЦК	[Ar]3d104s1	135	9.72	302	262	4	302	3	428	6
Ti	ГПУ	[Ar]3d104s1	147	8.86	295	291	6	412	2	468	1
AI	ГЦК	[Ne]3s23p1	143	4.81	495	286	6	405	3	496	12

Параметры решетки и электронные конфигурации металлов

Таолица	-
Экспериментальные значения констант спинового	0
эффекта Холла $R^e_S$ и рассчитанные значения по формуле (11) совместно с (13) для <i>s</i> -электронов	)

	5	( ) ! !			<u> </u>	
Металл	σ, 10⁵ (Οм⋅м)¹	$\theta_{_{\rm SH}}$ , %	<i>R</i> <sub>н</sub> , 10 <sup>-11</sup> , м³/(А·с)	<i>R</i> <sup><i>e</i></sup> ,10 <sup>-9</sup> ∙Ом∙м	<i>R</i> <sub>S</sub> ,10- <sup>9</sup> ∙Ом∙м	<i>R<sub>S</sub><sup>p</sup></i> ,10 <sup>9</sup> ∙Ом∙м
Au	200	0.25±0.05	-7.3	12±3	7.1	-1.08
Pt	81	2.1±0.5	-2	2.6±0.7	3.48	-0.512
α-W	47.6	≈7	11.1	-14.7	-13.96	2.56
β-W	20.4	-35±4	-162	740±80	1660	-294
Та	3	-0.37±0.1	9.75	-13 <u>+</u> 4	-15.38	-2.15
Lu	12	1.4±0.2	-12	11±2	9.17	-1.28
Ho	11	14±2	-32	122±17	25.6	-3.34
Dy	18	<b>5</b> ±1	-25	28±6	18.0	-2.47
Gd	7	<b>4</b> ±1	-12	56±14	6.98	-1.07
Ag	150	0.7±0.1	-8.98	0.47±0.07	-11.7	1.43
Pd	40	0.64±0.1	-8.45	1.6±0.3	-13.4	1.64
Мо	28	-0.8±0.18	18	-2.8±0.7	25.4	-4.41
Nb	11	-0.87±0.2	8.88	-7.9±2	10.1	-11.9
Cu	160	0.32±0.03	-5.36	0.2 <u>+</u> 0.02	8.32	-1.18
α-Mn	1.42	-0.19±0.01	8.44	-13.3±1	-11.1	1.85
V	55	-1±0.1	7.9	-1.8 <u>±</u> 0.3	-9.73	1.39
Cr	1.2	-5.1±0.5	36.3	-42 <u>+</u> 4	-59	8.12
Ti	3.33	-0.036±0.004	1.0	-1.2±0.1	-1.0	0.134
Al	160	0.02±0.01	-3.3	-0.012±0.006	-1.68	0.19

 $R_{s}^{s}$  и (14) для *р*-электронов  $R_{s}^{p}$ 

В эксперименте обычно определяется спинхолловский угол  $\theta_{\rm SH} = \sigma R_{\rm S}$  [9,18,19]. Здесь  $\sigma$ , обычно обозначаемая как  $\sigma_{\rm xx}$ , – проводимость металла в отсутствии спин-орбитального взаимодействия. Для платины при 10 К  $\sigma$  = 8.1 · 10<sup>6</sup> Om<sup>-1</sup>m<sup>-1</sup>,  $\theta_{\rm SH}$  = 0.021±0.005 [20]. Соответственно,  $R_{\rm S}$  = (2.6±0.7) · 10<sup>-9</sup> Ом·м. Согласие с экспериментом для *s*-электронов получится, если в формуле (1) массу свободного электрона заменить эффективной массой *m*<sup>\*</sup> ≈ (1.15±0.15)*m*.

Золото является вторым представителем 6-го периода и благородным металлом. Спинхолловский угол для золота на порядок меньше, чем для платины [21]. Постоянная гранецентрированной кубической решетки a =407.8 пм, на элементарную ячейку приходится 4 атома, 6 пар ближайших соседей на расстоянии 288 пм, далее 3 пары на расстоянии 408 пм и 12 пар на расстоянии 500 пм. Согласие с экспериментом для *s*-электронов получится при  $m^* \approx (0.77 \pm 0.1)m$ .

Тантал имеет объемноцентрованную кубическую решетку с постоянной *a* = 331 пм. На элементарную ячейку приходится 2 атома, 4

Таблица 2

пары ближайших соседей на расстоянии 286 пм, далее 3 пары на расстоянии 331 пм и 6 пар на расстоянии 468 пм. Согласие с экспериментом для *s*-электронов получится при  $m^* \approx (1.1 \pm 0.1)m$ .

В стабильной Вольфрам альфамодификации имеет объемноцентрированную кубическую решетку с постоянной a = 316 пм. На элементарную ячейку приходится 2 атома, 4 пары ближайших соседей на расстоянии 274 пм, далее 3 пары на расстоянии 316 пм и 6 пар на расстоянии 449 пм. В эксперименте на пленке толщиной 15 нм получено значение  $|\theta_{\rm SH}|$  < 0.07 [22], что соответствует  $|R_{\rm S}|$  < 1.47.10-8 Ом.м. Погрешность экспериментально измеренного спин-холловского угла в [22] не приведена, но расчетное значение согласуется с экспериментальным для *s*-электронов при *m*<sup>\*</sup> ≈  $(1.0\pm0.03)m$ .

метастабильной Вольфрам бета-В модификации имеет решетку вида А15 для соединения  $AB_3$  с постоянной *a* = 503.6 пм, на элементарную ячейку приходится 8 атомов. Для атома А (в центре и на углах) 6 пар ближайших соседей на расстоянии 281 пм, далее 4 пары на расстоянии 436 пм, 6 пар на расстоянии 454 пм, 3 пары на расстоянии 504 пм, 12 пар на расстоянии 577 пм. Для атома В (на грани) 1 пара ближайших соседей на расстоянии 251 пм, далее 1 пара на расстоянии 281 пм, 4 пары на расстоянии 308 пм, 2 пары на расстоянии 454 пм, 8 пар на расстоянии 471 пм. Расчет показывает, что атомы А и В вносят одинаковый вклад в спиновый эффект Холла. Согласие с экспериментом [23,24] для *s*-электронов получится при  $m^* \approx (1.5 \pm 0.1)m$ .

Для редкоземельных металлов отсутствуют достоверные экспериментальные данные по спин-холловскиму углу. В работе [25] приведена величина  $\xi_{\rm SH} = T_{\rm int} \theta_{\rm SH}$ , где  $T_{\rm int} -$ коэффициент передачи спина. Для оценки примем его равным 1.

Для гадолиния постоянные гексагональной плотноупакованной решетки a = 363.4 пм, c = 578.5 пм, на элементарную ячейку приходится 2 атома, 6 пар ближайших соседей на расстоянии 359 пм, далее 2 пары на расстоянии 510 пм и 1 пара на расстоянии 579 пм. Согласие с экспериментом для *s*-электронов получится при  $m^* \approx (0.35 \pm 0.05)m$ .

Для диспрозия постоянные гексагональной плотноупакованной решетки a = 359.3 пм, c = 565.4 пм, на элементарную ячейку приходится 2 атома, 6 пар ближайших соседей на расстоянии 353 пм, далее 2 пары на расстоянии 502 пм и 1 пара на расстоянии 565 пм. Согласие с экспериментом для *s*-электронов получится при  $m^* \approx (0.8 \pm 0.1)m$ .

Для гольмия постоянные гексагональной плотноупакованной решетки a = 357.7 пм, c = 561.6 пм, на элементарную ячейку приходится 2 атома, 6 пар ближайших соседей на расстоянии 350 пм, далее 2 пары на расстоянии 499 пм и 1 пара на расстоянии 562 пм. Согласие с экспериментом для *s*-электронов получится при  $m^* \approx (0.46 \pm 0.04)m$ .

Для лютеция постоянные гексагональной плотноупакованной решетки a = 351 пм, c = 556.7 пм, на элементарную ячейку приходится 2 атома, 6 пар ближайших соседей на расстоянии 346 пм, далее 2 пары на расстоянии 492 пм и 1 пара на расстоянии 557 пм. Согласие с экспериментом для *s*-электронов получится при  $m^* \approx (1.1 \pm 0.1)m$ .

Отметим, что из рассмотренных РЗМ только лютеций является парамагнетиком температурах. При при всех низких диспрозий температурах, И гольмий являются ферромагнетиками. "Магнитное поведение гадолиния является сложным, ...обнаруживаются различные магнитные аномалии" [26]. Можно предположить, что при комнатной температуре в них отсутствует только дальнее спиновое упорядочение, но, в отличие от лютеция, остается ближний порядок. Формула (2) не учитывает обменное взаимодействие коллективизированного проводимости электрона с локализованными электронами намагниченности. Поэтому соотношение (11)применимо только парамагнетикам, таким как лютеций. К В присутствии ближнего спинового упорядочения помимо спин-холловского электрического ПОЛЯ вида (7)может присутствовать холловское электрическое поле, обусловленное аномальным эффектом Холла [27]. Это явление, возможно, имеет место в диспрозии, гольмии и гадолинии.

При анализе элементов 5-го периода расчет по формулам (11) и (13) для *s*-электронов проводимости дает значения, не согласующиеся с экспериментальными. Особенно это актуально, видимо, для палладия, у которого 5*s*-электроны отсутствуют.

Для серебра постоянная гранецентрированной кубической решетки a = 408.6 пм, на элементарную ячейку приходится 4 атома, 6 пар ближайших соседей на расстоянии 289 пм, далее 3 пары на расстоянии 409 пм и 12 пар на расстоянии 500 пм. Согласие с экспериментом [28] для *р*-электронов получится при  $m^* \approx (1.75\pm0.07)m$ .

Для молибдена постоянная объемноцентрированной кубической решетки *а* = 315 пм, на элементарную ячейку приходится 2 атома, 4 пары ближайших соседей на расстоянии 273 пм, далее 3 пары на расстоянии 315 пм и 6 пар на расстоянии 445 пм. Согласие с экспериментом [20] для *р*-электронов получится при  $m^* \approx (1.25\pm0.15)m$ .

Для палладия постоянная гранецентрированной кубической решетки a = 389 пм, на элементарную ячейку приходится 4 атома, 6 пар ближайших соседей на расстоянии 275 пм, далее 3 пары на расстоянии 389 пм и 12 пар на расстоянии 476 пм. Согласие с экспериментом [25] для *р*-электронов получится при  $m^* \approx (1.0\pm0.1)m$ .

Для ниобия постоянная объемноцентрированной кубической решетки *а* = 331 пм на элементарную ячейку приходится 2 атома, 4 пары ближайших соседей на расстоянии 287 пм, далее 3 пары на расстоянии 331 пм и 6 пар на расстоянии 468 пм. Согласие с экспериментом [20] для *р*-электронов получится при  $m^* \approx (1.25\pm0.15)m$ .

Для меди постоянная гранецентрированной кубической решетки a = 361.5 пм, на элементарную ячейку приходится 4 атома, 6 пар ближайших соседей на расстоянии 256 пм, далее 3 пары на расстоянии 362 пм и 12 пар на расстоянии 442 пм. Согласие с экспериментом [29] для *s*-электронов получится при  $m^* \approx (6.4\pm0.4)m$ .

Для титана постоянные гексагональной плотноупакованной решетки a = 295 пм, c = 469.7 пм, на элементарную ячейку приходится 2 атома, 6 пар ближайших соседей на расстоянии 291 пм, далее 2 пары на расстоянии 412 пм и 1 пара на расстоянии 468 пм. Марганец в альфа

модификации имеет структуру A12, постоянная кубической решетки a = 889 пм, на элементарную ячейку приходится 58 атомов, 8 пар ближайших соседей на расстоянии 277 пм, далее 12 пар на расстоянии 451 пм и 8 пар на расстоянии 460 пм. Согласие с экспериментом [30] для *s*-электронов у титана и марганца получится при  $m^* \approx$  $(0.91\pm0.05)m$ .

Для ванадия постоянная кубической объёмноцентрированной решетки a = 302.4 пм, на элементарную ячейку приходится 2 атома, 4 пары ближайших соседей на расстоянии 262 пм, далее 3 пары на расстоянии 302.4 пм и 6 пар на расстоянии 427.7 пм. Согласие с экспериментом [27] для *s*-электронов получится при  $m^* \approx (2.3\pm 0.2)m$ .

Для хрома постоянная кубической объёмноцентрированной решетки a = 288.5 пм, на элементарную ячейку приходится 2 атома, 4 пары ближайших соседей на расстоянии 249.8 пм, далее 3 пары на расстоянии 288.5 пм и 6 пар на расстоянии 408 пм. Согласие с экспериментом [27] для *s*-электронов получится при  $m^* \approx (1.18\pm0.05)m$ .

алюминия постоянная Для гранецентрированной кубической решетки *а* = 405 пм, на элементарную ячейку приходится 4 атома, 6 пар ближайших соседей на расстоянии 286 пм, далее 3 пары на расстоянии 405 пм и 12 пар на расстоянии 496 пм. Согласие с экспериментом [31] для р-электронов получится при  $m^* \approx (3.9 \pm 1)m$ . У алюминия нет *d*- и f-электронов на внутренних оболочках. Эти электроны обладают хорошей экранирующей способностью, поэтому для переходных и редкоземельных металлов использование для электронов проводимости водородоподобной соответствующим орбитали (12)С эффективным зарядом является оправданным приближением. К алюминию такое приближение, видимо, неприменимо. Кроме того, из всех рассмотренных металлов, только у алюминия есть заполненная р-оболочка. В результате вклад в СХЭ от s- и p-электронов почти компенсирует друг друга, и малое значение экспериментальное постоянной спинового эффекта Холла R<sub>s</sub> получается как разность двух относительно больших

величин, а не из-за большой эффективной массы носителей заряда.

Для меди экспериментальное значение постоянной спинового эффекта Холла очень мало, и как в случае с алюминием, возможно, получается как разность двух относительно больших величин. Хорошее согласие с экспериментом для меди получается, если принять, что 90% электронов проводимости являются коллективизированными *р*-электронами, а 10% – *s*-электронами.

Сравнительный анализ данных, приведенных в Таблицах 1 и 2, показывает, что для элементов четных периодов (6-го и 4-го) знак измеренного спин-холловского сопротивления всегда совпадает со знаком рассчитанного для *s*-электрона, а для элементов нечетных периодов (5-го и 3-го) – со знаком, рассчитанного для *p*-электрона.

#### 7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Обоснование методов проектирования систем спинтроники, расчета и оптимтизации их характеристик требует дополнительных Такими предположений 0 системе. представление предположениями являются коллективизированного функции волновой проводимости в виде функции электрона Ванье, приближение эффективного заряда приближение ближайших И соседей гамильтониане (5),а также модель В идеального ферми-газа ДЛЯ электронов проводимости. Применимость этих моделей для конкретной задачи следует обосновывать экспериментально. Рассчитанные в рамках этих моделей коэффициенты внутреннего СЭХ согласуются с измеренными. Вопрос о допустимости введения эффективной массы электрона проводимости в гамильтониан спин-орбитального взаимодействия (1) для учета взаимодействие коллективизированных электронов проводимости при построении потенциала самосогласованного поля (3) в рамках одноэлектронного приближения требует дальнейшего изучения.

Спиновая поляризация по описанному в работе механизму не требует внешних магнитных полей и остаточной намагниченности и поэтому не создает помех при работе в микро- и нано-размерных структурах спинтроники. Несомненный интерес представляет поиск новых перспективных материалов для устройств спинтроники на основе сплавов металлов и интерметаллидов. Проектирование таких систем спинтроники, расчет и оптимизация их характеристик возможны на основе описанных методов и подходов, если рассматривать кристаллит интерметаллида как гетероядерную макромолекулу. Методы построения молекулярных орбиталей для таких структур, в том числе и в виде функций Ванье, хорошо изучены [32,33].

#### ЛИТЕРАТУРА

- Бухараев АА, Звездин АК, Пяток АП, Фетисов ЮК. Стрейнтроника – новое направление микро- и наноэлектроники и науки о материалах. *УФН*, 2018, 188(12):1288-1330; doi: 10.3367/UFNr.2018.01.038279.
- Dyakonov MI, Perel VI. Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors. *Physics Letters A*, 1971, 35(6):459-460; doi: 10.1016/0375-9601(71)90196-4.
- Sinova J, Culcer D, Niu Q, Sinitsyn NA, Jungwirth T, MacDonald AH. Universal Intrinsic Spin Hall Effect. *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 92(12):126603-126606; doi: 10.1103/PhysRevLett.92.
- Wunderlich J, Kaestner B, Sinova J, Jungwirth T. Experimental observation of the spin-Hall effect in a two dimensional spin-orbit coupled semiconductor system. *Phys. Rev. Lett.*, 2005. 94(4):047204-047216; doi: 10.1103/ PhysRevLett. 94.047204.
- Zhang S. Spin torques due to large Rashba fields. In book "Spin Current", Edited by Maekawa S, Valenzuela SO, Saitoh E, Kimura T. Oxford, University Press, 2012, pp. 424-431.
- Sinova J, Valenzuela SO, Wunderlich J, Back CH, Jungwirth T. Spin Hall effects. *Reviews of Modern Physics*, 2015, 87:1213-1259; doi: 10.1103/ RevModPhys.87.1213.
- Hoffmann A. Spin hall effects in metals. *IEEE Transactions on Magnetics*, 2013, 49(10):5172-5193; doi: 10.1109/TMAG.2013.2262947.
- 8. Saitoh E, Ueda M, Miyajima H, Tatara G. Conversion of spin current into charge current at room temperature: Inverse spin-Hall effect.

Applied Physics Letters, 2006, 88:182509; doi: 10.1063/1.2199473.

- Xiao Y, Wang H, Fullerton EE. Crystalline Orientation–Dependent Spin Hall Effect in Epitaxial Platinum. *Frontiers in Physics*, 2022. 9:791736; doi: 10.3389/fphy.2021.791736.
- Игнатьев ВК, Лебедев НГ, Станкевич ДА. Эффект управления спиновой поляризацией электронов проводимости через деформацию ферромагнетика. Письма в ЖТФ, 2022, 48(23):30-33; doi: 10.21883/ PJTF.2022.23.53949.19363.
- 11. Игнатьев ВК, Перченко СВ, Станкевич ДА. Спиновый эффект Холла в поликристаллических образцах немагнитных металлов пятого и шестого периодов. Письма в ЖТФ, 2023, 49(6):25-27; doi: 10.21883/ PJTF.2023.06.54812.19437.
- 12. Берестецкий ВБ, Лифпиц ЕМ, Питаевский ЛП. *Квантовая электродинамика*. М., Физматлит, 1989, 388 с.
- Ландау ЛД, Лифппиц ЕМ. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М., Физматлит, 1974, 752 с.
- 14. Маделунг О. *Теория твердого тела*. М., Наука, 1980, 416 с.
- 15. Квасников ИА. *Теория равновесных систем: Статистическая физика*. М., Едиториал УРСС, 2002, 240 с.
- Sinova J, Valenzuela SO, Wunderlich J, Back CH, Jungwirth T. Spin Hall effects. *Reviews of Modern Physics*, 2015, 87:1213; doi: 10.1103/ RevModPhys.87.1213.
- 17. Cardarelli F. *Materials Handbook*. Springer International Publishing AG, Switzerland, 2018.
- Dyakonov MI, Khaetskii AV. Spin Hall effect. In book "Spin Physics in Semiconductors". Edited by Dyakonov MI. Chapter 8. ser. in Solid-State Sciences. New York, Springer, 2008, 157:211-243; doi: 10.1007/978-3-319-65436-2\_8.
- 19. Dyakonov MI. Magnetoresistance due to edge spin accumulation. *Physical Review Letters*, 2007, 99 (12):126601; doi: 10.1103/ PhysRevLett.99.126601.
- Morota M, Niimi Y, Ohnishi K, Wei DH, Tanaka T, Kontani H, Kimura T, Otani Y. Indication of intrinsic spin Hall effect in 4d and 5d transition metals. *Physical Review B*, 2011, 83:174405; doi: 10.1103/PhysRevB.83.174405.

100 игнатьев в.к., перченко с.в., станкевич д.а.

#### ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

- Vlaminck V, Pearson JE, Bader SD, Hoffmann A. Dependence of spin pumping spin Hall effect measurements on layer thickness and stacking order. *Physical Review B*, 2013, 88(6):064414; doi: 10.1103/PhysRevB.88.064414.
- Pai C-F, Liu L, Tseng HW, Ralph DC, Buhrman RA. Spin transfer torque devices utilizing the giant spin Hall effect of tungsten. *Applied Physics Letters*, 2012, 101(12):122404-122412; doi: 10.1063/1.4753947.
- Hao Q, Chen W, Xiao G. Beta (β) tungsten thin films: Structure, electron transport, and giant spin Hall effect. *Applied Physics Letters*, 2015, 106(18):182403; doi: 10.1063/1.4919867.
- Hao Q, Xiao G. Giant Spin Hall Effect and Switching Induced by Spin-Transfer Torque in a W/Co<sub>40</sub>Fe<sub>40</sub>B<sub>20</sub>/MgO Structure with Perpendicular Magnetic Anisotropy. *Physical Review Applied*, 2015, 3:034009; doi: 10.1103/ PhysRevApplied.3.034009.
- Reynolds N, Jadaun P, Heron JT, Jermain CL, Gibbons J, Collette R, Buhrman RA. Schlom DG, Ralph DC. Spin-Hall Torques Generated by Rare-Earth (Lanthanide) Thin Films. *Physical Review B*, 2017, 95:064412; doi: 10.1103/ PhysRevB.95.064412.
- 26. Белов КП, Белянчикова МА, Левитин РЗ, Никитин СА. Редкоземельные ферромагнетики и антиферромагнетики. М., Наука, 1965, 320 с.
- Smejkal L, MacDonald AH, Sinova J, Nakatsuji S, Jungwirth T. Anomalous Hall antiferromagnets. *Nature Reviews Materials*, 2022, 7:482-496, doi: 10.1038/s41578-022-00430-3.
- Wang HL, Du CH, Pu Y, Adur R, Hammel PC, Yang FY. Scaling of Spin Hall Angle in 3d, 4d, and 5d Metals from Y<sub>3</sub>Fe<sub>5</sub>O<sub>12</sub>. Metal Spin Pumping. *Physical Review Letters*, 2014, 112:197201, doi: 10.1103/PhysRevLett.112.197201.
- 29. Mosendz O, Vlaminck V, Pearson JE, Fradin FY. Bauer GEW, Bader SD, Hoffmann A. Detection and quantification of inverse spin Hall effect from spin pumping in permalloy/normal metal bilayers. *Physical Review B*, 2010, 82(21):214403, doi: 10.1103/PhysRevB.82.214403.
- Du C, Wang H, Yang F, Hammel C. Systematic variation of spin-orbit coupling with d-orbital filling: Large inverse spin hall effect in 3d transition metals. *Physical Review B*, 2014, 90:40407, doi: 10.1103/PhysRevB.90.140407.

- Valenzuela S, Tinkham M. Direct electronic measurement of the spin Hall effect. *Nature*, 2006, 442:176-179, doi: 10.1038/nature04937.
- 32. Базилевский MB. Метод молекулярных орбит и реакционная способность органических молекул. М., Химия, 1969, 304 с.
- Грибов ЛА, Муштакова СП. Квантовая химия. М., Гардарики, 1999, 390 с.

#### Игнатьев Вячеслав Константинович

д.ф.-м.н., профессор

Волгоградский государственный университет

г. Волгоград 400062, Россия

E-mail: vkignatjev@yandex.ru

Перченко Сергей Владимирович к.ф.-м.н.

Волгоградский государственный университет

г. Волгоград 400062, Россия

E-mail: perchenko@volsu.ru

Станкевич Дмитрий Александрович

к.ф.-м.н., доцент Волгоградский государственный университет г. Волгоград 400062, Россия E-mail: stankevich@volsu.ru.