

Spin-dependent electronic transmission coefficient of a nanostructure in the free-electron approximation by transfer matrix method

Zahra Moein¹, Mohammad Mardaani^{*1,2}, Hassan Rabani^{1,2}

¹Department of Physics, Faculty of Science, Shahrekord University, P. O. Box 115, Shahrekord, Iran

²Nanotechnology Research Center, Shahrekord University, 8818634141, Shahrekord, Iran

Received: 26.02.2023 Final revised: 25.06.2023 Accepted: 10.07.2023

Doi: [10.22055/jrmbms.2023.18418](https://doi.org/10.22055/jrmbms.2023.18418)

Abstract

In this paper, based on the transfer matrix method and within the free electron approximation, we study spin-dependent electronic transport through an array of magnetic quantum barriers. For this purpose, we first write the Schrodinger equation for the electron in the presence of barrier potentials and the magnetic field originating from system magnetic moments. Then, by its discretization, we reach a system of linear equations. In the following, by using the transfer matrix method for this system of equations, we obtain the spin-dependent transmission coefficients of the electron. With the help of present formalism, one can calculate the spin-dependent transmission coefficient of a transmitted electron through a magnetic multi-layer as a function of electron energy, magnitude and orientation of the magnetic moment, and the potential shape. Finally, as an example, the numerical results are presented for two cases, the one including two similar alternative magnetic barriers and the other including two alternative barriers and well. The presented method is useful for the study of the spin-dependent electronic conductance behavior of magnetic layers and superlattices.

Keywords: Quantum barrier, transfer matrix, spin-dependent conductance, free-electron approximation

* Corresponding Author: mohammad-m@sku.ac.ir

ضریب عبور الکترونی وابسته به اسپین یک نانو ساختار در تقریب الکترون

آزاد با روش ماتریس انتقال

زهرا معین^۱، محمد مردانی^{۱،۲*}، حسن ربانی^{۱،۲}

^۱گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد، ایران

^۲مرکز پژوهشی فناوری نانو، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد، ایران

دریافت: ۱۴۰۱/۱۲/۰۷ ویرایش نهائی: ۱۴۰۲/۰۴/۰۴ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۴/۱۹

Doi: [10.22055/jrmb.2023.18418](https://doi.org/10.22055/jrmb.2023.18418)

چکیده

در این مقاله، بر اساس روش ماتریس انتقال و در تقریب الکترون آزاد به مطالعه تحلیلی ترابرد الکترونی وابسته به اسپین الکترونی از یک آرایه سدهای کوآنتومی مغناطیسی می‌پردازیم. برای این منظور، ابتدا معادله شرودینگر الکترون را در حضور پتانسیل‌های سدها و میدان مغناطیسی ناشی از ممان‌های مغناطیسی سامانه نوشته و سپس با گسسته‌سازی آن به یک دستگاه معادلات خطی می‌رسیم. در ادامه با استفاده از روش ماتریس انتقال برای این دستگاه معادلات، ضرایب عبور وابسته به اسپین الکترون را به دست می‌آوریم. با فرمول‌بندی حاضر می‌توان ضریب عبور وابسته به اسپین یک الکترون گذرنده از چند لایه مغناطیسی را به صورت تابعی از انرژی الکترون، اندازه و جهت ممان مغناطیسی و شکل پتانسیل محاسبه کرد. در پایان نیز به عنوان مثال نتایج عددی را برای دو مورد یکی شامل دو سد مشابه مغناطیسی متوالی و دیگری شامل یک سد و چاه مغناطیسی متوالی ارائه می‌دهیم. روش ارائه شده برای بررسی رفتار رسانش الکترونی وابسته به اسپین لایه‌ها یا ابرشبکه‌های مغناطیسی مناسب است.

کلیدواژگان: سد کوآنتومی، ماتریس انتقال، رسانش وابسته به اسپین، تقریب الکترون آزاد

مقدمه

و پیش‌بینی پدیده‌های غیر معمول وابسته به اسپین در ابعاد کوچک است [۲]. ترابرد وابسته به اسپین در ابتدا توسط آزمایش‌های تدر و مسروئی کشف شد که با استفاده از لایه‌های ابررسانا به عنوان آشکارساز، قطبش اسپینی جریان تونل‌زنی اندازه‌گیری گردید [۳]. نانوسیم‌های مغناطیسی به عنوان قطعات الکترونیکی بر پایه اسپین الکترون در نظر گرفته می‌شوند و از طرف دیگر پراکندگی وارونی اسپین نیز در آنها رخ می‌دهد. بنابراین کنترل جریان وابسته به اسپین در ادوات اسپینترونیک بسیار مهم است. ترابرد وابسته به اسپین را می‌توان از طریق میدان مغناطیسی ورودی و ولتاژ اعمالی کنترل کرد [۵]. مطالعات نظری بسیاری در رابطه با موضوع ترابرد الکترونی در نانوساختارهایی مانند

ترابرد وابسته به اسپین در نانوساختارها به دلیل اهمیت آن در تحقیقات بنیادی و کاربردهای فراوان توجه زیادی را به خود جلب کرده است. افزایش علاقه به این موضوع از دو عامل عمده ناشی می‌شود. اولین مورد، پیشرفت در تولید و ساخت نانوساختارهای چندگانه با بعد کم است که دارای خواص الکترونیکی جالبی بوده و به اسپین الکترون بسیار حساس هستند. به عنوان مثال خصوصیات فیزیک دستگاه‌های موسوم به اسپین الکترونیک یا به طور مختصر اسپینترونیک را می‌توان با قطبش اسپین الکترون کنترل کرد [۱،۲]. دومین مورد، استفاده از رویکردهای نظری برای توجیه



که در آن $V(x)$ پتانسیل مربوط به ناحیه پراکنده مرکزی است و فرض شده است که در نواحی دیگر (هادی‌ها) مقدار آن صفر است. همچنین I نشان‌دهنده یک ماتریس واحد 2×2 است. در رابطه بالا فرض می‌شود جمله $\vec{h}(x) \cdot \vec{\sigma}$ که از برهم‌کنش اسپین الکترون با میدان مغناطیسی ناشی می‌شود، در همان ناحیه مرکزی وجود دارد. اندازه بردار $\vec{h}(x)$ در دستگاه یکای SI به صورت $h(x) = eg \hbar B(x) / (4m_e)$ است که در آن e و m_e به ترتیب بار و جرم الکترون، g ضریب ژیرومغناطیسی آن و $B(x)$ اندازه میدان مغناطیسی در مکان x هستند [۸]. همچنین $\vec{\sigma}$ یک عملگر برداری با مؤلفه‌های ماتریس‌های پائولی الکترون است. بنابراین داریم:

$$\vec{h}(x) \cdot \vec{\sigma} = h(x) \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}, \quad ۲$$

که در آن θ و φ به ترتیب زاویه‌های قطبی و سمتی بردار ضریب وارونگی اسپینی در ناحیه مرکزی هستند. بدون از دست دادن کلیت مسئله φ را صفر در نظر می‌گیریم. معادله شرودینگر الکترون‌های با اسپین بالا و پایین در این ناحیه، پس از گسسته‌سازی چنینند:

$$\psi_{p+1}^{\uparrow} = -\hbar \sin \theta / \beta \psi_p^{\downarrow} - \psi_{p-1}^{\uparrow} + (2 + (V_p - \hbar \cos \theta - \varepsilon) / \beta) \psi_p^{\uparrow}, \quad ۳\text{الف}$$

$$\psi_{p+1}^{\downarrow} = -\hbar \sin \theta / \beta \psi_p^{\uparrow} - \psi_{p-1}^{\downarrow} + (2 + (V_p + \hbar \cos \theta - \varepsilon) / \beta) \psi_p^{\downarrow}, \quad ۳\text{ب}$$

که در آن $\beta = \hbar^2 / 2ma^2$ و $p = 1, \dots, N$ می‌توان انرژی پرش الکترونی با جرم m ، بین گام‌های p و $p+1$ به فاصله a (طول گام) تصور کرد. در اینجا ε انرژی الکترون و V_p پتانسیل احساس شونده در گام p است. در رهیافت ماتریس انتقال، توابع موج

سیم‌ها و نقطه‌های کوآنتومی مغناطیسی انجام شده است [۶،۷]. به طور مثال مغناطورسانش یک نانوساختار شامل دو مانع مغناطیسی واقعی مورد بررسی نظری قرار گرفته و مقدار قطبش اسپینی برای الکترون گذرنده نسبت به مقدار میدان مغناطیسی بهینه شده است [۲]. همچنین مقاله‌های مروری متعدد به مدل‌های نظری تریبرد وابسته به اسپین ساختارهای شامل لایه‌های مغناطیسی اشاره کرده است [۹].

در مقاله حاضر، در ادامه کارهای گذشته نویسندگان مقاله [۵-۷] به بررسی نظری رسانش الکترونی وابسته به اسپین یک الکترون از یک آرایه از سدهای کوآنتومی مغناطیسی در رژیم پروازی می‌پردازیم. هدف اصلی ما ارائه یک روش سریع و ساده مبتنی بر روش ماتریس انتقال با بهره‌گیری از تقریب الکترون آزاد جهت محاسبه ضریب عبور وابسته به اسپین یک الکترون گذرنده از یک یا چند لایه مغناطیسی است.

فرمول‌بندی

روش ماتریس انتقال، روشی ساده برای محاسبه و بررسی خواص ترابردی یک نانو ساختار است. در این روش می‌توان ضرایب عبور و بازتاب یک الکترون با تابع موج مشخص را پس از عبور از یک ساختار لایه‌ای، به دست آورد [۸]. در این مقاله به کمک این روش قصد داریم یک الگوریتم عددی برای محاسبه سریع ضریب عبور وابسته به اسپین یک الکترون با گسسته‌سازی معادله شرودینگر آن، تحت تأثیر پتانسیل‌هایی که با بار و اسپین الکترون برهم‌کنش دارند، ارائه کنیم. در مدل الکترون آزاد، هامیلتونی الکترون در راستای محور ساختار مغناطیسی، به صورت زیر است

$$\mathbf{H} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) I - \vec{h}(x) \cdot \vec{\sigma}, \quad ۱$$

اسپین الکترون پایین است، محاسبات را انجام داد. برای به‌دست آوردن دامنه‌های ضرایب عبور از دستور ساروس استفاده می‌کنیم. بدین منظور ماتریس ضرایب در رابطه ۵ را با $M = (\bar{M}_1, \bar{M}_2, \bar{M}_3, \bar{M}_4)$ نشان می‌دهیم که \bar{M}_p نشان دهنده بردار شامل درایه‌های ستون p ام است. همچنین با تعریف:

$$B = - \begin{pmatrix} M_{11} + M_{12} + (M_{13} + M_{14})e^{-ika} \\ M_{21} + M_{22} + (M_{23} + M_{24})e^{-ika} \\ M_{31} + M_{32} + (M_{33} + M_{34})e^{-ika} \\ M_{41} + M_{42} + (M_{43} + M_{44})e^{-ika} \end{pmatrix},$$

خواهیم داشت:

$$t_{\uparrow\uparrow} = \frac{\det(B, \bar{M}_2, \bar{M}_3, \bar{M}_4)}{\det(M)}, \quad 7$$

$$t_{\uparrow\downarrow} = \frac{\det(\bar{M}_1, B, \bar{M}_3, \bar{M}_4)}{\det(M)}, \quad 8$$

که در آن عبارت‌های $(B, \bar{M}_2, \bar{M}_3, \bar{M}_4)$ و $(\bar{M}_1, B, \bar{M}_3, \bar{M}_4)$ به این معنا هستند که ماتریس ستونی B به ترتیب جایگزین ستون‌های اول و دوم ماتریس M شود. در پایان ضریب عبور الکترونی که بیانگر احتمال عبور الکترونی است که با اسپین \uparrow وارد ناحیه مرکزی شده و با اسپین σ از آن خارج می‌شود، به صورت $T_{\uparrow\sigma} = |t_{\uparrow\sigma}|^2 = t_{\uparrow\sigma}^* t_{\uparrow\sigma}$ به دست می‌آید.

نتایج محاسبات عددی

در این بخش مطابق شکل ۱ رسانش الکترونی سامانه‌ای را که شامل دو سد مغناطیسی است، محاسبه می‌کنیم. سدها را به عرض‌های b_1 و b_2 ، ارتفاع‌های V_1 و V_2 و پارامتر وارونگی اسپینی h_1 و h_2 با جهات θ_1 و θ_2 که به فاصله d از هم قرار دارند، فرض می‌کنیم. به عنوان مثال دو مورد را بررسی می‌کنیم:

الکترون در طرفین ناحیه مرکزی به صورت زیر به یکدیگر مربوط می‌شوند:

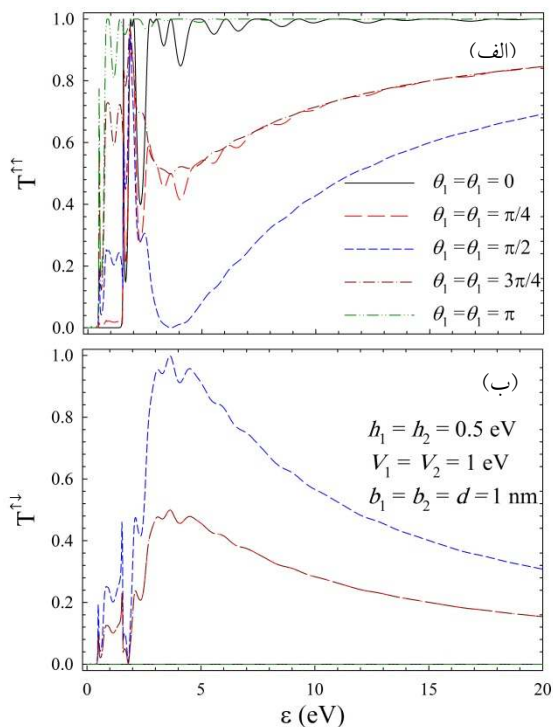
$$\begin{pmatrix} \psi_{N+2}^\uparrow \\ \psi_{N+2}^\downarrow \\ \psi_{N+1}^\uparrow \\ \psi_{N+1}^\downarrow \end{pmatrix} = M_{N+1} \dots M_0 \begin{pmatrix} \psi_0^\uparrow \\ \psi_0^\downarrow \\ \psi_{-1}^\uparrow \\ \psi_{-1}^\downarrow \end{pmatrix}, \quad 4$$

که در آن M_p ها ماتریس‌های 4×4 هستند که ارتباط توابع موج بین گام‌های p و $p+1$ را با توجه به روابط ۳ مشخص می‌کنند. بدیهی است با توجه به فرض آزاد بودن الکترون در هادی‌ها که ψ_0, ψ_{-1} ، ψ_{N+2} ، ψ_{N+1} مقادیر مربوط به توابع موج تخت با ترکیب خطی از $\exp(\pm ikpa)$ برای الکترون آزاد را اختیار می‌کنند که k عدد موج الکترون است. می‌توان عبارت بالا را به شکل زیر نوشت:

$$\begin{pmatrix} t_{\uparrow\uparrow} e^{ika(N+2)} \\ t_{\uparrow\downarrow} e^{ika(N+2)} \\ t_{\uparrow\uparrow} e^{ika(N+1)} \\ t_{\uparrow\downarrow} e^{ika(N+1)} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} 1+r_{\uparrow\uparrow} \\ 1+r_{\uparrow\downarrow} \\ e^{-ika} + r_{\uparrow\uparrow} e^{ika} \\ e^{-ika} + r_{\uparrow\downarrow} e^{ika} \end{pmatrix}, \quad 5$$

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} & M_{14} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} & M_{24} \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} & M_{34} \\ M_{41} & M_{42} & M_{43} & M_{44} \end{pmatrix}$$

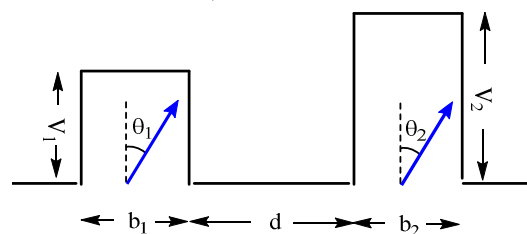
که در آن $t_{\uparrow\sigma}$ دامنه ضریب عبور الکترونی است که با اسپین \uparrow وارد ناحیه مرکزی شده و با اسپین σ از آن خارج می‌شود و $r_{\uparrow\sigma}$ دامنه ضریب بازتاب آن برای برخورد با اسپین \uparrow به ناحیه مرکزی و بازتاب با اسپین σ است. عناصر $M_{p,q}$ ماتریس میانی نیز از حاصل ضرب ماتریسی رابطه ۴ به دست می‌آیند. لازم به ذکر است که در اینجا فرض شده است که اسپین الکترون عبوری در هادی چپ دارای اسپین بالا بوده است. می‌توان به طریق مشابه برای مورد دیگر نیز که



شکل ۲. نمودار ضریب عبور، (الف) $T_{\uparrow\uparrow}$ ، (ب) $T_{\uparrow\downarrow}$ برحسب انرژی الکترون عبوری از دو سد مغناطیسی متوالی برای چند مقدار متفاوت زاویه قطبش مغناطیسی گشاور دو قطبی مغناطیسی داخل سدها. اطلاعات مندرج روی شکل‌ها برای هر دو قسمت الف و ب است.

در شکل ۳ نمودار ضریب عبور الکترونی وابسته به اسپین برحسب انرژی الکترون عبوری برای مورد سد و چاه متوالی در چند مقدار متفاوت زاویه قطبش مغناطیسی، نشان داده شده است. در اینجا نیز مشاهده می‌شود که وقتی $\theta_1 = \theta_2 = 0, \pi$ است، وارونی اسپین اتفاق نمی‌افتد و تنها کانال رسانش الکترونی $T_{\uparrow\uparrow}$ است. برای مقادیر دیگر زوایای قطبش مغناطیسی، رسانش الکترونی از هر دو کانال اسپینی صورت می‌گیرد. با توجه به نتایج به دست آمده سدها یا چاه‌های کوآنتومی را به گونه‌ای کنار هم چید که در یک انرژی فرمی خاص $T_{\uparrow\uparrow}$ بیشترین مقدار را داشته باشد. این بدان معنی است که احتمال رخ دادن فیلتر اسپینی بیشتر می‌شود.

مورد اول دو سد پتانسیل یک الکترون ولتی به پهنای یک نانومتر که به فاصله یک نانومتر از هم قرار دارند و مورد دیگر همانند مورد قبلی با این تفاوت که پتانسیل یکی از سدها را منفی در نظر می‌گیریم. در واقع مورد اول دو سد متوالی و مورد دوم یک سد و یک چاه متوالی هستند. همچنین مقدار پارامتر وارونگی اسپینی در هر سد یا چاه را 0.5 eV انتخاب می‌کنیم و بنابراین ضریب عبور الکترونی وابسته به اسپین را به صورت تابعی از زاویه قطبش مغناطیسی در سدها و انرژی الکترون ورودی مورد بررسی قرار می‌دهیم.



شکل ۱. پتانسیل یک سد دوگانه مغناطیسی. بردارهای داخل سدها نشان‌دهنده بردار وارونگی اسپینی متناسب با میدان مغناطیسی داخل هر سد هستند.

نمودارهای ضرایب عبور الکترونی وابسته به اسپین برحسب انرژی دو سد متوالی مشابه، برای چند مقدار متفاوت زاویه قطبش مغناطیسی، در شکل ۲ نشان داده شده است. در سامانه‌های مغناطیسی، وارونی اسپینی می‌تواند بسته به مقدار زاویه قطبش مغناطیسی رخ دهد. بنابراین ضریب $T_{\uparrow\downarrow}$ هم در ترابرد الکترونی سهمیم است. همان‌طور که در شکل ۲ مشاهده می‌کنیم، زمانی که $\theta_1 = \theta_2 = 0, \pi$ است، وارونی اسپین اتفاق نمی‌افتد و ترابرد الکترونی فقط از طریق کانال $T_{\uparrow\uparrow}$ انجام می‌شود. بدیهی است که در انرژی‌های پایین، ساز و کار عبور الکترون از سدها تونل‌زنی است. در انرژی‌های بالای، $T_{\uparrow\uparrow}$ افزایش و $T_{\uparrow\downarrow}$ کاهش یافته و هر دو تابع، شکل یکنواختی به خود خواهند گرفت.

ماتریس انتقال را در تقریب الکترون آزاد تعمیم داده و ضرایب عبور وابسته به اسپین را برای عبور الکترون از یک آرایه سدهای کوآنتومی مغناطیسی به دست آوردیم. در این مقاله ما به ذکر دو مثال، یکی شامل دو سد کوآنتومی مشابه مغناطیسی متوالی و دیگری شامل یک سد و چاه کوآنتومی مغناطیسی متوالی پرداخته و نتایج عددی را ارائه دادیم. روابط به دست آمده در این مقاله از نظر محاسبات عددی نسبت به روش‌های تابع گرین [۱۰] و معادله بولتزمن [۸] از الگوریتم ساده‌تر و سرعت بسیار بالاتری برخوردار بوده و برای بررسی رسانش الکترونی وابسته به اسپین لایه‌ها و ابرشبکه‌های مغناطیسی کاربرد دارد. لازم به ذکر است که در اکثر متون علمی از روش ماتریس انتقال در غیاب میدان مغناطیسی بهره‌برداری شده در حالی که در اینجا این روش برای موردی که اسپین الکترون گذرنده از سامانه با میدان‌های حاضر در سامانه برهم‌کنش دارد، تعمیم داده شده است.

مرجع‌ها

[1] K. Pasanai, S. Thasitha, P. Saokaew, Theory of charge and spin transport across magnetic tunnel junction with bilayer insulator tunnel barriers, *Physica E* 127 (2021) 114490.

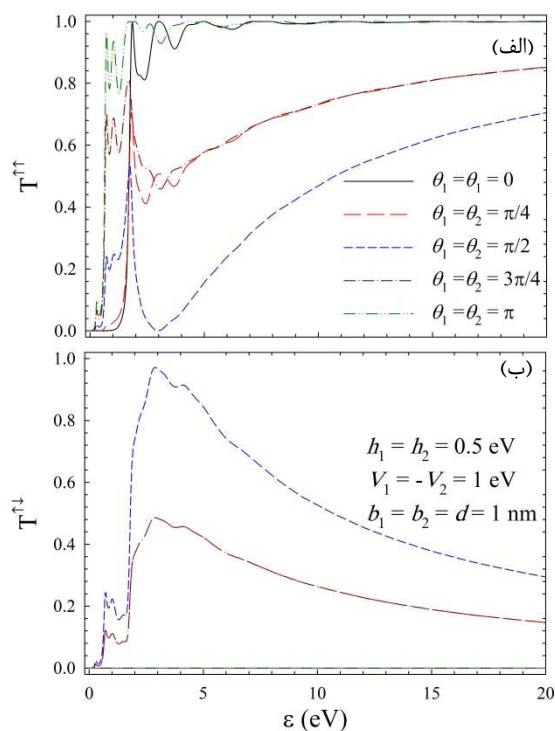
<https://doi.org/10.1016/j.physe.2020.114490>

[2] M. Lu, L. Zhang, Y. Jin, X. Yan, Spin-dependent tunneling in nanostructures consisting of magnetic barriers, *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems* volume 27 (2002) 565-570.

<https://doi.org/10.1140/epjb/e2002-00190-1>

[3] P.M. Tedrow, R. Meservey, Spin-Dependent Tunneling into Ferromagnetic Nickel, *Physical Review Letters* 26 (1971) 192.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.26.192>



شکل ۳. نمودار ضریب عبور، الف: $T_{\uparrow\uparrow}$ ، ب: $T_{\uparrow\downarrow}$ برحسب انرژی الکترون عبوری از یک سد و یک چاه مغناطیسی متوالی برای چند مقدار متفاوت زاویه قطبش مغناطیسی گشتاور دو قطبی مغناطیسی داخل سدها. اطلاعات مندرج روی شکل‌ها برای هر دو قسمت الف و ب است.

اگر بخواهیم مقایسه‌ای بین شکل‌های ۲ و ۳ ارائه دهیم، ذکر این نکته قابل توجه است که هر گاه انرژی الکترون عبوری با پتانسیل مربوط به عمق چاه یا ارتفاع سد، هم مرتبه باشد، رفتار ضریب عبور الکترونی برای این دو سامانه متفاوت است. به خصوص در این محدوده انرژی، نوسان‌های بیشتری در مورد دو سد متوالی (شکل ۲) نسبت به مورد سد و چاه متوالی (شکل ۳) در طیف رسانش مشاهده می‌شود. بدیهی است که در انرژی‌های بالا ضریب عبور الکترون گذرنده تقریباً مستقل از شکل پتانسیل پراکننده است.

نتیجه‌گیری

در این مقاله با گسسته‌سازی معادله شرودینگر شامل میدان مغناطیسی برهم‌کنش کننده با اسپین الکترون و به دست آوردن یک دستگاه معادلات خطی، روش

- [7] M. Mardaani, A.A. Shokri, Theoretical approach on spin-dependent conductance in a magnetic-quantum wire, *Chemical Physics* 324 (2006) 541-546.
<https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2005.11.041>
- [8] G. Grosso, G.P. Parravicini, *Solid State Physics*, second ed., Academic Press, (2013).
- [9] E.Y. Tsybal, O.N. Mryasov, P.R. LeClair, Spin-dependent tunnelling in magnetic tunnel junctions, *Journal of Physics: Condensed Matter* 15 (2003) R109.
[10.1088/0953-8984/15/4/201](https://doi.org/10.1088/0953-8984/15/4/201)
- [10] H. Rabani, M. Mardaani, A solvable model for spin-dependent electronic transmission of ferromagnetic nanowires, *Solid State Commun.* 191 (2014) 35-39.
<https://doi.org/10.1016/j.ssc.2014.04.022>
- [4] M. Mardaani, H. Rabani, Z. Baharloo, The effect of rotation of magnetic moment defects on the spin-dependent conductance of a ferromagnetic nanowire, *Iranian Journal of Physics Research* 13 (2013) 198-202.
https://ijpr.iut.ac.ir/article_1031.html?lang=en
- [5] D. Pullini, D. Busquets, A. Ruotolo, G. Innocenti, V. Amigó, Insights into pulsed electrodeposition of GMR multilayered nanowires, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 316 (2007) 242-245.
<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2007.02.102>
- [6] A.A. Shokri, M. Mardaani, K. Esfarjani, Spin filtering and spin diode devices in quantum wire systems, *Physica E* 27 (2005) 325-331.
<https://doi.org/10.1016/j.physe.2004.12.008>