

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE FÍSICA GLEB WATAGHIN
Departamento de Física da Matéria Condensada

Tunelamento e Transporte Quântico em Sistemas Mesoscópicos: Fundamentos e Aplicações

Autor:

César Augusto Dartora

Orientador:

Prof. Dr. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún

Tese submetida ao Instituto de Física “Gleb Wataghin” da Universidade Estadual de Campinas, como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de **Doutor em Física**.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún - DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Bernardo Laks - DFA/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Daniel Mário Ugarte - DFA/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Antonio José Roque da Silva - IF/USP-São Paulo

Prof. Dr. Renato de Figueiredo Jardim - IF/USP-São Paulo

Campinas, 30 de Março de 2005.

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP**

D256t	Dartora, César Augusto Tunelamento e transporte quântico em sistemas mesoscópicos : fundamentos e aplicações / César Augusto Dartora. -- Campinas, SP : [s.n.], 2005. Orientador: Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzun. Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin". 1. Fenômenos mesoscópicos (Física). 2. Magnetoresistência. 3. Tunelamento (Física). 4. Ferromagnetismo. 5. Nanoestrutura. I. Cabrera Oyarzun, Guillermo Gerardo. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". III. Título.
-------	--

- Palavras-chave em inglês (Keywords):
 - 1. Mesoscopic phenomena (Physics)
 - 2. Magnetoresistance
 - 3. Tunneling (Physics)
 - 4. Ferromagnetism
 - 5. Nanostructures
- Área de concentração: Física da Matéria Condensada
- Titulação: Doutor em física
- Banca examinadora:
 - Prof. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzun
 - Prof. Bernardo Laks
 - Prof. Daniel Mário Ugarte
 - Prof. Antonio José Roque da Silva
 - Prof. Renato de Figueiredo Jardim
- Data da defesa: 30.03.2005



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE CÉSAR AUGUSTO DARTORA – RA 006982, APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN”, DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 30/03/2005.

COMISSÃO JULGADORA:

Guillermo Cabrera

Prof. Dr. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzun (Orientador do Candidato) –
DFMC/IFGW/UNICAMP

Antônio José Roque da Silva

Prof. Dr. Antônio José Roque da Silva – IF/USP/SP

Renato de Figueiredo Jardim

Prof. Dr. Renato de Figueiredo Jardim – IF/USP/SP

Bernardo Laks

Prof. Dr. Bernardo Laks – DFA/IFGW/UNICAMP

Daniel Mário Ugarte

Prof. Dr. Daniel Mário Ugarte – DFA/IFGW/UNICAMP

“Uma boa causa pode se tornar ruim se nós lutamos por ela com meios indiscriminadamente perversos. Uma causa ruim pode se tornar boa se um bom número de pessoas lutam por ela em um espírito de camaradagem e auto-sacrifício. Ao final é como você luta, tanto quanto o porquê você luta, que fazem da sua causa boa ou ruim.”

(Freeman Dyson)

“Ninguém é tão grande que não possa aprender,
nem tão pequeno que não possa ensinar”

“Existir não é viajar do período da infância, com escalas pela juventude, maturidade e velhice até o porto da morte; é sim, participar da criação pelo sentimento e pelo raciocínio, é ser alguém e alguma coisa no concerto do universo.”

(Francisco C. Xavier)

Dedicatória

Aos meus pais, Adroaldo e Pelágia,
aos meus irmãos Alexandre, Henrique e Eduardo,
à minha namorada Suzana.

Agradecimentos

Ao Professor Guillermo Cabrera, pelo apoio, pelos ensinamentos, compreensão, sinceridade e liberdade dada durante toda a orientação deste trabalho de Doutorado. Pelo extraordinário ser humano que é e competente professor.

Aos Professores Carlos A. Caballero Petersen, meu orientador de graduação, pelo apoio e incentivo a fazer o Mestrado e ao Prof. Hugo Hernandez-Figueroa que orientou-me durante o Mestrado.

A todos os professores que de alguma forma contribuíram para que este trabalho fosse realizado e por todo conhecimento que adquiri com vocês. Em especial aos professores do ensino fundamental e médio, tão esquecidos por todos nos dias de hoje.

Aos meus pais Adroaldo e Pelágia, meus irmãos Alexandre, Henrique e Eduardo, minha namorada Suzana, pelo incentivo, apoio e compreensão.

Ao Vinícius F. Montagner, Ricardo L. Kulzer, ao Kléber Z. Nóbrega, Gustavo A. Viana e Myriano, também ao Luis, pela amizade, companheirismo e ótima convivência.

Ao CNPq, pelo suporte financeiro durante os primeiros sete meses de doutorado.

À FAPESP (*Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo*) pelo suporte financeiro, através do projeto # 02/09895 – 6.

Ao IFGW e a todas as pessoas da Secretaria da Pós do IFGW, por terem dado plenas condições para a realização do trabalho.

Finalmente a todos os meus familiares e amigos que não foram citados, por tudo o que representam para mim, pelo apoio, compreensão e pelas lições de vida.

Resumo

O interesse atual e crescente nos sistemas mesoscópicos se deve à miniaturização cada vez maior dos dispositivos eletrônicos e à produção de materiais com possibilidade de armazenar informação em altas densidades (Gbits e Terabits/pol²). A Física Mesoscópica descreve fenômenos que ocorrem em uma escala de tamanhos intermediária entre o macroscópico e o microscópico. Esta região *cinzenta* permite interpolar entre o regime atômico-molecular e o limite macroscópico, dominado este último pelas propriedades de volume (*bulk*), que são objetos usuais de estudo em Física da Matéria Condensada. Na escala de nanômetros e dezenas de nanômetros, os elétrons podem propagar-se sem sofrer espalhamento inelástico (regime balístico) e a fase da função de onda pode manter sua coerência em escala da ordem do tamanho do sistema, dando lugar aos típicos fenômenos de interferência quântica.

Neste trabalho fazemos um estudo detalhado das propriedades de transporte quântico em sistemas mesoscópicos, onde as barreiras de tunelamento fazem parte de diversos dispositivos eletrônicos. Estes sistemas incluem barreiras isolantes entre eletrodos metálicos, nanocontatos metálicos e junções tipo Josephson entre supercondutores. As principais estruturas aqui estudadas são as junções magnéticas de tunelamento e os nanofios e nanocontatos ferromagnéticos. Em ambos o fenômeno da magnetorresistência gigante (GMR) está presente, porém as origens do fenômeno são diferentes. Em junções de tunelamento a GMR tem origem na densidade de estados dos elétrons de condução nos eletrodos ferromagnéticos, entre os quais uma barreira isolante é colocada, bem como no tunelamento inelástico assistido por mágnons que surgem nas interfaces entre eletrodos e região isolante. Em nanocontatos e nanofios o fenômeno deve-se principalmente ao forte espalhamento de elétrons com dependência de spin na presença de paredes de domínio magnéticas.

Abstract

The interest in mesoscopic systems has grown significantly due to the increasing miniaturization of electronic devices and the production of materials which makes possible to store information in higher densities (Gbits and Terabits/in²). The Mesoscopic Physics describes phenomena that happen in an intermediary scale of sizes between the macroscopic and the microscopic world. This *gray* region allows to interpolate between the atomic-molecular regime and the macroscopic limit, the last one dominated by bulk properties which are the usual subject of Condensed Matter Physics. In the nanometer and tens of nanometers scale electrons can propagate without suffering inelastic scattering (ballistic regime) and the phase of the wavefunction maintain its coherence in the scale of system's size, giving place to the typical phenomena of quantum interference.

In this work a detailed study of quantum transport properties in mesoscopic systems, where the tunnelling barriers make part of many electronic devices, is done. These systems include insulating barriers between metallic electrodes, metallic nanocontacts and nanowires, and Josephson junctions between superconductors. The main structures here studied are magnetic tunnelling junctions and ferromagnetic nanowires and nanocontacts. In both cases the giant magnetoresistance phenomenon (GMR) is present, however the origins of it are quite different. In tunneling junctions, where an insulating barrier is placed between two ferromagnetic electrodes, the GMR is due to both, density of states effects at the ferromagnetic electrodes, and inelastic tunneling from magnons at the interface regions. In nanowires and nanocontacts the transport is strongly influenced by spin-dependent scattering in the presence of magnetic domain walls.

Sumário

Introdução	1
1 Física Mesoscópica e Transporte Quântico: Fundamentos	7
1.1 Versão de Interação (de Dirac) e a Regra de Ouro de Fermi	8
1.2 A Matriz Densidade	10
1.3 Hamiltoniano de Transferência	11
1.4 Correntes de Tunelamento	21
1.5 A Teoria de Landauer	22
2 Transporte em Junções Magnéticas de Tunelamento	29
2.1 O Hamiltoniano de Interação H_I para uma MTJ	32
2.1.1 Corrente de tunelamento direto: expressões analíticas	34
2.1.2 Tunelamento inelástico assistido por mágnons	39
2.1.3 Alguns comentários sobre a análise da MTJ	44
2.2 Estudo analítico do tunelamento na MTJ: coeficientes de transmissão dependentes de spin	45
2.2.1 Obtenção dos coeficientes de tunelamento: a dependência com o spin	50
2.2.2 Propriedades de Transporte da MTJ: O efeito da temperatura	55
3 A Junção de Tunelamento Ressonante e a Inversão da MR	61
3.1 Sobre o Hamiltoniano de interação da RMTJ: a fórmula de Breit-Wigner	63
3.2 Característica $I - V$ e a inversão da MR	64
3.3 Comentários gerais sobre a RMTJ	71
4 Transporte Quântico em Nanocontatos	73
4.1 Resultados experimentais para nanocontatos	75

4.2	O Modelo Teórico	79
4.3	Condutância para um nanocontato: eletrodos ferromagnéticos	84
4.4	Condutância para um nanocontato: eletrodos não magnéticos	91
4.5	Conclusões e Comentários Gerais	93
5	Propriedades Gerais de Transporte em Nanofios Ferromagnéticos	97
5.1	Modelo Teórico: Hamiltoniano proposto para um nanofio	98
5.2	Condutância e efeito de MR no contexto do formalismo de Landauer	101
5.3	Equações quânticas para $d\mathbf{p}/dt$ em ferromagneto: fônons e mágnons .	108
5.3.1	Estudo da dinâmica de spin em um nanofio	111
5.4	Conclusões e Comentários Gerais	112
6	Conclusão e Perspectivas	115
6.1	Contribuições e Conclusões Gerais	115
6.2	Perspectivas	118
6.3	Produção Científica	119
	Referências Bibliográficas	121
	Anexos	128

Lista de Figuras

- 2.1 Esquema das Configurações do Campo Magnético $\mathbf{B}$ aplicado para as junções magnéticas de tunelamento. 30
- 2.2 Resistência como função da voltagem aplicada para as configurações AP e P: os resultados experimentais a 4.2 K (linha pontilhada e símbolos) foram tomados da Ref. [50] e os resultados teóricos (linha sólida) foram calculados utilizando (2.13) e (2.14), com os seguintes parâmetros: $d = 1.0 \text{ nm}$, $\Phi_0 = 3.0 \text{ eV}$, $N_m^F = 1.0$ em unidades normalizadas, $r = 2.21$, $\lambda = 0.07$, $\beta = 2.7$, and $\eta = 0.1$. As resistências estão em unidades arbitrárias e normalizadas com respeito ao valor máximo que ocorre em $V = 0$ 38
- 2.3 MR em função da voltagem aplicada. Parâmetros idênticos aos da Fig. 2.2. 40
- 2.4 Resistência, em unidades arbitrárias, como função da voltagem aplicada para as configurações AP e P: resultados experimentais (linhas pontilhadas e símbolos) tomados de [50] e teóricos (linhas sólidas) incluindo tunelamento assistido por mágnons. Parâmetros idênticos aos da Fig. 2.2 com a inclusão de $S = 3/2$ e $T^d/T^J = 37$ 43
- 2.5 MR em função da voltagem aplicada. Parâmetros idênticos aos da Fig. 2.4. 44
- 2.6 MTJ típica e suas regiões de transição ferromagnéticas TR_I e TR_{II} . FM_I e FM_{II} são eletrodos ferromagnéticos e IS é uma barreira isolante. 46

2.7	Resistência como função da voltagem e da temperatura para as configurações P e AP: resultados experimentais são as linhas pontilhadas retiradas das Refs. [46],[47] e [50] e os cálculos teóricos (linha cheia) foram calculados com o seguinte conjunto de parâmetros: $d = 1.0 \text{ nm}$, $V_0 = 3.0 \text{ eV}$, $N_m^F = 1.0$ em unidades normalizadas, $r = 2.21$, $\lambda = 0.1$, $\beta = 2.85$, e $\eta = 0.1$, $\frac{2a\Delta_{\uparrow}}{N \Delta S} = 1/35$, $\omega_0 = 16\text{meV}$, $\omega_c = 4\text{meV}$ e $b = 500 \text{ eV}^{-2}$. Resistência é dada em unidades arbitrárias normalizada com relação ao pico.	59
3.1	Uma junção magnética de tunelamento ressonante simples: FM_I e FM_{II} são eletrodos ferromagnéticos, IS_I e IS_{II} são barreiras de potencial isolantes e M é uma camada metálica, situada entre as duas barreiras.	61
3.2	Negligenciando os processos envolvendo mágnons, mostramos a MR definida como $TMR = (I_P - I_{AP})/I_P$ para os casos: (a) $\epsilon_{0\uparrow} = 35\text{meV}$ e $\epsilon_{0\downarrow} = 47\text{meV}$. (b) $\epsilon_{0\uparrow} = 47\text{meV}$ e $\epsilon_{0\downarrow} = 35\text{meV}$. Os outros parâmetros utilizados são os mesmos para (a) e (b).	67
3.3	Inversão de MR como consequência do tunelamento assistido por mágnons. MR definida pela equação (3.5). Utilizamos $\epsilon_{0d} = 35\text{meV}$ e $\epsilon_{0m} = 87.2\text{meV}$ para as ressonâncias direta e indireta, respectivamente.	70
4.1	Esquema do aparato experimental.	77
4.2	Dados típicos de magnetocondutância para um nanocontato $CrO_2 - CrO_2$ retirados da Ref. [78]. O desligamento do campo AC é indicado pela flecha.	78
4.3	MR em função da condutância do nanocontato, normalizada pela resistividade do material, em relação à resistividade do Ni. O máximo valor de MR acontece em $G_0 = e^2/h$	78
4.4	Esquema de um nanofio ferromagnético colocado entre dois reservatórios ferromagnéticos R_1 e R_2 . Com apenas dois átomos um nanocontato está caracterizado.	79

Introdução

Grande parte da Teoria do Estado Sólido e da Física Estatística foi concebida no âmbito das propriedades dos sistemas macroscópicos, nos quais é válido o limite termodinâmico, ou seja, o volume do sistema (V) e o número de partículas (N) tendem a infinito sendo a densidade de partículas ($n = N/V$) um valor constante e finito [1]. Tal limite é um artifício matemático conveniente para obter propriedades físicas de sistemas em escala macroscópica. Usualmente um sistema aproxima-se do limite macroscópico quando seu tamanho físico é muito maior que algum comprimento de correlação característico do mesmo. Os fenômenos de transporte em sistemas macroscópicos são geralmente analisados no contexto da equação de transporte de Boltzmann [2]. Porém, quando o comprimento de correlação característico do sistema é comparável ao tamanho do sistema a equação de transporte de Boltzmann não é mais rigorosamente satisfeita, sendo necessário apelar aos princípios fundamentais da Mecânica Quântica para explicar as propriedades do sistema. O interesse desse trabalho está no estudo do transporte quântico em sistemas mesoscópicos, onde as barreiras de tunelamento fazem parte de diversos dispositivos eletrônicos [1-4]. Estes sistemas incluem barreiras isolantes entre eletrodos metálicos, nanocontatos metálicos e junções de Josephson entre supercondutores. Concentramos nossos esforços na análise das junções de tunelamento ferromagnéticas, nanocontatos e nanofios ferromagnéticos, devido ao fato de que a Física desses sistemas pode ser explicada a partir de uma mesma função Hamiltoniana que inclui energia cinética e interação de troca para os elétrons de condução. O fenômeno principal contribuindo para o transporte eletrônico nas junções é o tunelamento, enquanto para os nanofios e nanocontatos, em geral, é o fenômeno de hopping dependente de spin.

A palavra *mesoscópico* faz menção ao fato da escala do tamanho ser intermediária, entre macroscópico e microscópico. Esta região *cinzenta* permite interpolar entre o regime atômico-molecular e o limite macroscópico, dominado este

último pelas propriedades de volume (*bulk*) que são objetos usuais de estudo em Física da Matéria Condensada. A Tabela 1 mostra as principais diferenças entre sistemas macroscópicos, mesoscópicos e microscópicos, bem como os fenômenos e propriedades característicos de cada sistema.

	Macroscópico	Mesoscópico	Microscópico
Tamanho	$L \gg L_\varphi$	$L \leq L_\varphi$	$L \ll L_\varphi$
Exemplos	Sólidos e Líquidos	Pontos Quânticos Nanocontatos Nanofios	Átomos Moléculas
Caráter	Estatístico ($N \rightarrow \infty$)	Quântico ($N < \infty$)	Quântico ($N \ll \infty$)
Fenômenos	Transp. Difusivo Propr. de volume	Quantiz. da Condutância Tunelamento. Resson. Nanomagnetismo Efeito Aharanov – Bohm	Mecânica Quântica
Teoria	Eq. de Boltzmann	Eq. Liouville + Tr. Parcial Eq. de Boltzmann Quântica Teoria de Landauer	Eq. de Schroedinger Eq. de Liouville

Tabela 1: Sistemas Físicos e Fenômenos Principais. $L \Rightarrow$ Tamanho do Sistema; $L_\varphi \Rightarrow$ Comprimento de Coerência de Fase, em geral $L_\varphi < 10\mu\text{m}$.

Tendo a Tabela 1 como referência pode-se definir que um Sistema Mesoscópico é aquele cuja escala de tamanho é intermediária entre o microscópico (dominado pelas leis da Mecânica Quântica) e o macroscópico (que pode ser explicado pela Equação de Boltzmann e propriedades de volume). É um sistema em que o livre caminho médio de um elétron é maior do que o tamanho do sistema, e o elétron propaga-se então sem sofrer colisões inelásticas. Muitos fenômenos interessantes ocorrem nessa região intermediária, como por exemplo a quantização da condutância em múltiplos do valor $e^2/(2\pi\hbar)$ e o nanomagnetismo. Em geral o regime mesoscópico caracteriza-se por um sistema de poucos átomos ou moléculas que encontra-se acoplado a um banho térmico (reservatórios ou eletrodos).

O interesse atual e crescente nos sistemas mesoscópicos deve-se à miniaturização cada vez maior dos dispositivos eletrônicos e à produção de materiais com possibilidade de armazenar informação em altas densidades (Gbits e Terabits/pol²) [5-6]. Na escala de nanômetros e dezenas de nanômetros, os elétrons podem propagar-se sem sofrer espalhamento inelástico (regime balístico) e a fase da função de onda

pode manter sua coerência em escala da ordem do tamanho do sistema, dando lugar aos típicos fenômenos de interferência quântica. Nessa situação, a teoria de transporte precisa ser modificada em relação à teoria usual empregada em sistemas macroscópicos, [1,2,7-10]. Por exemplo, as regras usuais em circuitos, para conectar resistências em série ou em paralelo, podem não ser mais válidas no regime quântico. Também, para geometrias em constrições atômicas ou de nanômetros (nanocontatos), a condutância aparece quantizada em unidades de $2(e^2/h)$ ou (e^2/h) , dependendo se a degenerescência de spin é removida ou não, [11-13]. Muitos destes sistemas são candidatos para armazenar bits de um computador quântico (qubits) e apresentam-se como problemas importantes a manipulação dos bits e a leitura da informação de maneira não destrutiva, [14-18].

As junções de tunelamento e nanocontatos entre metais magnéticos apresentam o efeito conhecido com o nome de *Magnetorresistência Gigante* (GMR - do inglês, giant magnetoresistance). A magnetorresistência (MR) tem uma grande variação em função do campo magnético aplicado, tipicamente até 50% em junções de tunelamento,[19-20]. Para nanocontatos, recentemente tem sido observado um efeito que pode ir além de 300%, [21-23]. Este efeito pode ser entendido como devido a correntes que conservam o spin [24]. Esta propriedade é amplamente usada na tecnologia corrente para cabeças de gravação e detecção de pequenos campos magnéticos.

Outro efeito interessante é o bloqueamento de Coulomb (*Coulomb blockade*), que permite controlar a carga em constrições ultra-pequenas (quantum dots, pequenos grãos metálicos ou caixas metálicas fabricadas com litografia eletrônica). A energia de Coulomb associada com um elétron é tipicamente maior que a energia térmica (a baixas temperaturas), de maneira que a repulsão de Coulomb pode bloquear o tunelamento de um novo elétron na constrição [15]. O estudo desse fenômeno conduz naturalmente ao estudo da correlação eletrônica [25-26].

A teoria de Landauer para transporte balístico é amplamente utilizada em sistemas mesoscópicos [1,2,7-9]. O modelo mais simples é unidimensional, onde uma barreira de potencial está conectada a dois fios metálicos. A barreira é caracterizada pelos seus coeficientes de transmissão e reflexão. Este problema pode ser generalizado para a situação de multi-canais, primeiro no caso incoerente e depois para o caso quando os canais apresentam efeitos de interferência entre si [7]. Em junções de tunelamento como as descritas acima, os canais podem representar as diferen-

tes bandas dos elétrons de condução (incluindo também o spin, no caso de metais magnéticos). Para contatos atômicos, os canais podem ser associados aos orbitais atômicos que participam do contato. Um canal está associado ao quantum $2(e^2/h)$ da condutância em metais não magnéticos. O quantum decresce para (e^2/h) em metais magnéticos, onde a degenerescência de spin é removida [11]. Para os metais de transição, é bem conhecido que os elétrons d participam da condução. A superfície de Fermi obtida para o *bulk*, apresenta ramos importantes provenientes das bandas tipo d . Em relação aos orbitais do tipo s e p , os orbitais d são mais localizados e têm maior energia de rotação. Os efeitos de correlação eletrônica são também mais pronunciados, sendo que a polarização de spin das bandas é muito maior que nas bandas de tipo s ou p . Nos problemas de tunelamento convencionais, os elétrons são descritos usualmente por uma onda plana monocromática (ou seja, com momentum $\mathbf{k}$ definido, e incerteza total da posição), o que não é válido no problema acima. Queremos portanto, realizar um cálculo mais realístico utilizando a fórmula de Landauer, tentando incorporar os efeitos mencionados antes. Qualitativamente sabe-se que os elétrons d tunelam com mais dificuldade que os elétrons de orbitais s e p [27], devido ao fato de que um orbital d precisa ser representado por um espectro de ondas planas muito mais complicado que um orbital s , por exemplo, e nesse caso a continuidade das funções de onda nas interfaces faz com que a probabilidade de tunelamento das funções d seja pequena. A análise é complicada pelos efeitos de correlação e hibridização das bandas. O problema da polarização de spin da corrente de tunelamento está ainda em aberto e é de grande importância para melhor entender os dispositivos de tunelamento em junções magnéticas com magnetorresistência gigante. Para contatos atômicos e nanocontatos, onde a condutância aparece quantizada em *plateaus*, a resposta é fortemente dominada por ruído nas regiões entre os plateaus [28-29], mas acreditamos que a física que descreve o fenômeno de tunelamento é basicamente a mesma. Na presença do bloqueamento de Coulomb, os efeitos de correlação podem ser dominantes. Um misterioso plateau na condutância, de tamanho $.7(2e^2/h)$ tem sido recentemente observado em nanocontatos, cujo comportamento com a temperatura é muito diferente dos outros plateaus, e tem sido atribuído ao efeito Kondo [30].

Além das presentes e das potenciais aplicações desses fenômenos, o estudo das propriedades no regime quântico tem interesse fundamental *per se*. Experiências recentes nessa área permitem formular testes rigorosos da Mecânica Quântica, com

montagens muito engenhosas que até pouco tempo atrás eram consideradas apenas como um *gedankenexperiment*. Só para citar, um exemplo desses problemas é o chamado “tempo de tunelamento” [31-34], medido recentemente, com interpretações variadas, algumas delas sugerindo velocidades de tunelamento ultra-relativísticas.

O conteúdo desta tese pode ser descrito da seguinte maneira: No Capítulo 1 apresentamos os conceitos da Física Mesoscópica, juntamente com a versão de Dirac para a Mecânica Quântica, o formalismo de Landauer e o Método do Hamiltoniano de Transferência para a utilização na análise dos fenômenos de transporte nos Capítulos seguintes. O Capítulo 2 apresenta a análise do transporte em junções magnéticas de tunelamento (MTJ). A condutividade e o fenômeno de GMR são estudados para uma MTJ convencional constituída de uma barreira isolante entre dois eletrodos metálicos ferromagnéticos. A inclusão do espalhamento inelástico por mágnons propicia uma teoria bastante completa e concordante com os experimentos. Os coeficientes de tunelamento dependentes de spin também merecem uma análise matemática rigorosa. O Capítulo 3 traz a análise de uma estrutura semelhante à anterior, constituída de dois eletrodos ferromagnéticos, entre os quais uma região isolante-metal-isolante é colocada, permitindo tunelamento ressonante. Essa junção magnética de tunelamento ressonante permite o fenômeno de inversão da magnetorresistência, e os resultados são obtidos de maneira bastante rigorosa. No Capítulo 4 centramos nosso estudo no transporte em nanocontatos, com uma análise detalhada dessa estrutura do ponto de vista quântico, sem apelarmos para as paredes de Bloch na obtenção das propriedades de transporte de um nanocontato ferromagnético. A quantização da condutância para nanocontatos não-magnéticos também é analisada. O Capítulo 5 apresenta a análise geral das propriedades de transporte em nanofios ferromagnéticos. Resultados concordantes com os experimentos são obtidos e demonstrados. Analisamos essencialmente dois casos limites: um fio magnético muito longo e um nanocontato feito por apenas dois átomos. Equações dinâmicas de transporte para ferromagnetos, a dinâmica temporal do transporte e as flutuações da condutância em nanofios são discutidas. Finalmente, no Capítulo 6 são apresentadas as conclusões gerais e perspectivas do trabalho realizado.

Capítulo 1

Física Mesoscópica e Transporte Quântico: Fundamentos

A Física Mesoscópica é uma ciência recente, tendo iniciado à aproximadamente 20 anos atrás e já produziu muitas descobertas instrutivas e estimulantes. Ela consegue uma combinação única que permite responder a questões fundamentais da Física e ao mesmo tempo é relevante para as atuais aplicações tecnológicas. De fato, os experimentos desenvolvidos nesse campo tiveram por objetivo inicial a redução do tamanho dos componentes eletrônicos, permitindo entretanto, um conhecimento muito mais amplo sobre a região intermediária entre o macroscópico e o microscópico. As questões básicas de como as regras da Mecânica Quântica operam e se sobrepõe no regime clássico tem sido respondidas. Espera-se que em breve todas as estruturas construídas pelo homem e também as moléculas que ocorrem na natureza, com suas modificações, sejam compreendidas [1].

O interesse em estudar sistemas em uma escala intermediária de tamanhos entre o microscópico e o macroscópico (por isso dito *mesoscópico*, uma palavra cunhada por Van Kampen em 1981) não está somente no fato de entender o limite macroscópico e como este é encontrado pela construção de “clusters” cada vez maiores para ir da molécula para o volume (bulk regime). Muitos fenômenos novos são intrínsecos aos sistemas mesoscópicos. Um sistema mesoscópico é sempre uma molécula relativamente grande, acoplado a um sistema muito maior, mesmo que fracamente, por meio de fônons, mágnons e outras excitações. Em muitas situações o acoplamento pode ser controlado, em outras não. Nós veremos como a Mecânica Quântica e a Física Estatística aparecem. Muitas das regras usuais da física macroscópica não são válidas nos sistemas mesoscópicos. A adição de resistores em série ou paralelo,

por exemplo, precisa ser modificada. O movimento eletrônico apresenta as propriedades ondulatórias cujos efeitos impõem limites fundamentais na construção de dispositivos eletrônicos [1].

Dentro desse contexto, a utilização da teoria de Landauer faz-se presente. Um dos mais surpreendentes resultados obtidos em sistemas mesoscópicos é a quantização da condutância, que pode ser melhor compreendida com base na fórmula de Landauer [1,2,7-9].

Neste capítulo serão desenvolvidos alguns conceitos importantes para a compreensão da Física Mesoscópica e seus regimes de transporte. Na Secção seguinte, a versão de interação da Mecânica Quântica é apresentada, para possibilitar a utilização do Método do Hamiltoniano de Transferência (ou Hamiltoniano de Barreira) [1, 2], amplamente utilizado para tratar de problemas de tunelamento. Este método baseia-se na Versão de Interação (ou de Dirac) da Mecânica Quântica, em que podemos facilmente decompor o Hamiltoniano em uma parcela não perturbada H_0 para a qual conhecemos os auto-estados do sistema, e uma parcela H_I que é tratada como pequena perturbação ao sistema, fazendo com que os auto-estados do sistema sejam ligeiramente modificados.

1.1 Versão de Interação (de Dirac) e a Regra de Ouro de Fermi

A versão de interação ou de Dirac [35-37] será brevemente descrita a seguir e é muito utilizada na Mecânica Quântica, principalmente quando faz-se uso das séries perturbativas em Teoria Quântica de Campos [38]. Consideremos um Hamiltoniano não perturbado H_0 independente do tempo, cujos auto-estados físicos são conhecidos, e um Hamiltoniano de interação H_I , este último podendo conter dependência temporal, sendo o Hamiltoniano total dado pela soma $H = H_0 + H_I$. Definindo:

$$|\alpha, t_0; t \rangle_I = \exp\left[\frac{i}{\hbar} H_0 t\right] |\alpha, t_0; t \rangle_S \quad (1.1)$$

sendo $|\alpha, t_0; t \rangle_S$ o ket estado na versão de Schroedinger.

Na versão de Dirac os operadores observáveis evoluem com o Hamiltoniano H_0 e os ket-estados evoluem com o Hamiltoniano H_I , de tal maneira que essa versão corresponde a uma versão intermediária entre as versões de Schroedinger (em que

somente os ket-estados evoluem no tempo) e a de Heisenberg (em que somente os operadores evoluem no tempo). Para um observável qualquer A temos:

$$A_I = \exp\left[\frac{i}{\hbar}H_0t\right]A_S\exp\left[-\frac{i}{\hbar}H_0t\right]$$

e em particular

$$H_I = \exp\left[\frac{i}{\hbar}H_0t\right]H_{IS}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}H_0t\right] \quad (1.2)$$

onde H_{IS} é a perturbação na versão de Schroedinger. Fica bastante fácil deduzir, a partir de (1.1) e (1.2) que [35]:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha, t_0; t\rangle_I = H_I|\alpha, t_0, t\rangle_I \quad (1.3)$$

$$\frac{dA_I}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A_I, H_0] \quad (1.4)$$

sendo $[A, B] = AB - BA$, o comutador de A e B . Vemos diretamente de (1.3) que os ket-estados obedecem uma equação de Schroedinger em que o Hamiltoniano corresponde somente à parte de interação H_I , ao passo que observando (1.4) é fácil notar que os operadores de Dirac obedecem uma equação de evolução de Heisenberg, porém evoluindo somente com o Hamiltoniano não perturbado H_0 . A solução formal de (1.3) nos fornece o operador evolução temporal, que é dado pela série de Dyson [35,36,38]

$$U_I(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n N\{H_I(t_1)H_I(t_2)\dots H_I(t_n)\} \quad (1.5)$$

onde N denota o ordenamento normal, e um ket-estado evoluído no tempo será então

$$|\alpha, t\rangle = U_I(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle \quad (1.6)$$

Para fins de análise de espalhamento considera-se $t_0 = -\infty$ e $t = \infty$ e então chamamos $U_I(\infty, -\infty)$ de matriz de espalhamento S (Scattering matrix):

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n N\{H_I(t_1)H_I(t_2)\dots H_I(t_n)\} \quad (1.7)$$

Conhecendo a matriz S torna-se fácil encontrar um estado final $|f\rangle$, se o estado inicial $|i\rangle$ do sistema é conhecido:

$$|f\rangle = S|i\rangle = \sum S_{ij}|j\rangle \quad (1.8)$$

De (1.7) e (1.8) em primeira ordem apenas, pode-se inferir a Regra de Ouro de Fermi [35,37] para a taxa de transição, que será utilizada posteriormente no cálculo das correntes de tunelamento, dada por:

$$w_{i \rightarrow j} = \frac{2\pi}{\hbar} |S_{ij}|^2$$

sendo $i \neq j$ obviamente.

1.2 A Matriz Densidade

Quando desejamos realizar médias de operadores sobre algum ensemble estatístico, é conveniente definir a matriz densidade para os estados físicos $|\Phi_i\rangle$ através da relação:

$$\rho = \sum_i w_i |\Phi_i\rangle \langle \Phi_i| \quad (1.9)$$

sendo que $\sum_i w_i = 1$ e os elementos da matriz densidade em uma dada representação com base $|1\rangle, |2\rangle, \dots |m\rangle \dots$ são convenientemente expressos por:

$$\rho_{nm} = \langle n | \rho | m \rangle = \sum_i w_i \langle n | \Phi_i \rangle \langle \Phi_i | m \rangle \quad (1.10)$$

Dado que na representação de Heisenberg os estados físicos não são dependentes do tempo, e sim os operadores A , a matriz densidade é constante. Entretanto quando vamos para a representação de Dirac os estados físicos evoluem no tempo através do Hamiltoniano de interação, e então é fácil mostrar que a matriz densidade evolui no tempo obedecendo uma equação de Liouville quântica [35,39]:

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = [H_I, \rho] \quad (1.11)$$

ou equivalentemente:

$$\rho(t) = U_I(t, t_0) \rho(t_0) U_I^\dagger(t, t_0) \quad (1.12)$$

sendo o operador evolução U_I dado pela equação (1.5).

Desse modo, para uma quantidade física representada pelo observável A , o seu valor médio é dado simplesmente por:

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A) = \rho_{nm} A_{mn} \quad (1.13)$$

1.3 Hamiltoniano de Transferência

Na construção de um Hamiltoniano geral, porém simples, consideremos os elétrons de condução da banda ‘s’ como partículas quase livres. De fato isto é válido para metais ferromagnéticos, de modo que levaremos em conta apenas a interação de troca (ou exchange) entre os elétrons ‘s’ quase livres, e os elétrons mais localizados da banda ‘d’, além da energia cinética dos elétrons ‘s’. Se o número de sítios é muito grande podemos considerar um vetor densidade de spin para os elétrons ‘d’ sendo uma função contínua contínua, em caso contrário somamos sobre todos os sítios de forma discreta. O Hamiltoniano de um único elétron é mostrado abaixo:

$$H_e = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \int d^3\mathbf{x}' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \mathbf{S}(\mathbf{x}') \cdot \vec{\sigma} \quad (1.14)$$

onde $\mathbf{S}(\mathbf{x}')$ é a densidade de spin da rede (elétrons ‘d’), $J(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ é a integral de troca e $\vec{\sigma}$ é o operador de spin para os elétrons ‘s’, dado pelas matrizes de Pauli.

No contexto de Segunda Quantização [38] definimos os operadores de campo:

$$\Psi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \chi_{\sigma} \quad (1.15)$$

$$\Psi^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varphi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \chi_{\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \quad (1.16)$$

onde $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ e $c_{\mathbf{k}\sigma}$ são os operadores de criação e aniquilação fermiônicos, $\varphi(\mathbf{x})$ a função de ondas orbital e χ_{σ} o spinor de Pauli associado. Sem perder a generalidade, mas sendo bastante útil quando temos uma barreira de potencial, podemos fazer a seguinte separação para os operadores de campo:

$$\Psi(\mathbf{x}) = \Psi_L(\mathbf{x}) + \Psi_R(\mathbf{x}) \quad (1.17)$$

onde $\Psi_L(\mathbf{x})$ é o conjunto de operadores à esquerda de uma barreira de potencial e $\Psi_R(\mathbf{x})$ é o conjunto de operadores que age à direita de uma barreira de potencial, sendo que a barreira pode ser considerada suficientemente estreita para que possamos resolver o problema na interface através de um hamiltoniano de transferência envolvendo os coeficientes de transmissão e reflexão para tunelamento. Os parâmetros efetivos da barreira serão conhecidos através da análise do fenômeno de tunelamento na barreira. A conversão do hamiltoniano eletrônico para as variáveis

de campo é mostrada abaixo

$$H = \int d^3\mathbf{x} \Psi^\dagger(\mathbf{x}) H_e(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}), \quad (1.18)$$

onde H_e é o hamiltoniano eletrônico em consideração, separável em um termo de origem cinética e outro de interação de troca:

$$H_{cin}^e = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$$

$$H_{exch}^e = - \int d^3\mathbf{x}' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \mathbf{S}(\mathbf{x}') \cdot \vec{\sigma}$$

Consideremos cada um dos termos abaixo:

$$H_{cin} = \int d^3\mathbf{x} \Psi^\dagger(\mathbf{x}) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Psi(\mathbf{x}) \quad (1.19)$$

$$H_{exch} = - \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{x}' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \mathbf{S}(\mathbf{x}') \cdot \Psi^\dagger(\mathbf{x}) \vec{\sigma} \Psi(\mathbf{x}) \quad (1.20)$$

fazendo primeiramente a análise de (1.19), utilizando a separação (1.17):

$$H_{cin} = \int d^3\mathbf{x} (\Psi_L^\dagger(\mathbf{x}) + \Psi_R^\dagger(\mathbf{x})) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} (\Psi_L(\mathbf{x}) + \Psi_R(\mathbf{x})). \quad (1.21)$$

Procedendo com a expansão dos termos, obtemos

$$\begin{aligned} H_{cin} = \int d^3\mathbf{x} \Big(& \Psi_L^\dagger(\mathbf{x}) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Psi_L(\mathbf{x}) + \Psi_R^\dagger(\mathbf{x}) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Psi_R(\mathbf{x}) + \\ & + \Psi_L^\dagger(\mathbf{x}) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Psi_R(\mathbf{x}) + \Psi_R^\dagger(\mathbf{x}) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Psi_L(\mathbf{x}) \Big) \end{aligned}$$

O significado de cada termo é bastante claro e não necessita maiores explicações. Tem-se para os operadores campo:

$$\Psi_R(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^R \varphi_{\mathbf{k}}^R(\mathbf{x}) \chi_\sigma \quad (1.22)$$

$$\Psi_R^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varphi_{\mathbf{k}}^{R*}(\mathbf{x}) \chi_\sigma^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}^{R\dagger} \quad (1.23)$$

$$\Psi_L(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^L \varphi_{\mathbf{k}}^L(\mathbf{x}) \chi_\sigma \quad (1.24)$$

$$\Psi_L^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varphi_{\mathbf{k}}^{L*}(\mathbf{x}) \chi_\sigma^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}^{L\dagger} \quad (1.25)$$

Após inserirmos as expressões (1.22)-(1.25) no Hamiltoniano, o resultado para os termos que não envolvem transferência de um lado a outro é o seguinte:

$$\int d^3\mathbf{x} \Psi_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Psi_\alpha(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\alpha \int d^3\mathbf{x} \varphi_{\mathbf{k}}^{\alpha*}(\mathbf{x}) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \varphi_{\mathbf{k}'}^\alpha(\mathbf{x}) \chi_\sigma^\dagger \chi_{\sigma'}$$

onde $\alpha = L, R$ denota o eletrodo esquerdo (L) ou direito (R). Os spinores de Pauli obedecem a seguinte relação

$$\chi_\sigma^\dagger \chi_{\sigma'} = \delta_{\sigma\sigma'}$$

e para funções de ondas planas o operador momentum pode ser dado da forma abaixo

$$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla = -i\hbar\mathbf{k}$$

sendo o resultado final:

$$\int d^3\mathbf{x} \varphi_{\mathbf{k}}^{\alpha*}(\mathbf{x}) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \varphi_{\mathbf{k}'}^\alpha(\mathbf{x}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$$

Considerando-se as relações acima tem-se o seguinte resultado:

$$H_{cin}^R + H_{cin}^L = \sum_{\mathbf{k}\sigma, \alpha} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^\alpha$$

Os termos que realmente interessam na transferência, ou seja, nas propriedades de transporte, que são os termos de tunelamento, são analisados abaixo:

$$\int d^3\mathbf{x} \Psi_L^\dagger(\mathbf{x}) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Psi_R(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^R \int d^3\mathbf{x} \varphi_{\mathbf{k}}^{L*}(\mathbf{x}) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \varphi_{\mathbf{k}'}^R(\mathbf{x}) \chi_\sigma^\dagger \chi_{\sigma'}$$

e

$$\int d^3\mathbf{x} \Psi_R^\dagger(\mathbf{x}) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Psi_L(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^L \int d^3\mathbf{x} \varphi_{\mathbf{k}}^{R*}(\mathbf{x}) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \varphi_{\mathbf{k}'}^L(\mathbf{x}) \chi_\sigma^\dagger \chi_{\sigma'}$$

Vamos analisar apenas uma das integrais, já que a outra resultará em uma expressão semelhante. Novamente as relações entre spinors são válidas e temos portanto:

$$\int d^3\mathbf{x} \Psi_L^\dagger(\mathbf{x}) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Psi_R(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma}^R \int d^3\mathbf{x} \varphi_{\mathbf{k}}^{L*}(\mathbf{x}) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \varphi_{\mathbf{k}'}^R(\mathbf{x})$$

Definimos agora o coeficiente de transmissão de tunelamento direto (sem spin-flip, ou seja sem inversão de spin):

$$t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d = \langle k, L | H_{cin} | k', R \rangle = \int d^3\mathbf{x} \varphi_{\mathbf{k}}^{L*}(\mathbf{x}) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \varphi_{\mathbf{k}'}^R(\mathbf{x}) \quad (1.26)$$

e dessa forma o resultado final para os termos de transferência cinéticos é:

$$H_{cin}^{L \leftrightarrow R} = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d (c_{\mathbf{k}\sigma}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma}^R + c_{\mathbf{k}'\sigma}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^L) \quad (1.27)$$

Somando ambos os termos temos a parte cinética do Hamiltoniano:

$$H_{cin} = \sum_{\mathbf{k}\sigma, \alpha=(L,R)} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d (c_{\mathbf{k}\sigma}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma}^R + c_{\mathbf{k}'\sigma}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^L) \quad (1.28)$$

Os termos seguintes são os termos de troca (1.20), que levam em conta a interação do elétron com mágnons, nos quais pode haver spin-flip no tunelamento. Utilizando (1.17)

$$H_{exch} = - \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{x}' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \mathbf{S}(\mathbf{x}') \cdot (\Psi_L^\dagger(\mathbf{x}) + \Psi_R^\dagger(\mathbf{x})) \vec{\sigma} (\Psi_L(\mathbf{x}) + \Psi_R(\mathbf{x})) \quad (1.29)$$

Novamente haverá 4 termos a serem analisados. Iniciamos pelos termos em que não há interação com a barreira:

$$H_{exch}^{\alpha} = - \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{x}' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \mathbf{S}(\mathbf{x}') \cdot \Psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \vec{\sigma} \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}) \quad (1.30)$$

que são correções à energia do elétron em cada um dos lados da barreira, devido à interação de troca em cada lado.

$$H_{exch}^{\alpha} = - \sum_{\mathbf{k}\sigma, k'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^{\alpha} \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{x}' J_{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}}^{\alpha*} \varphi_{\mathbf{k}'}^{\alpha} \mathbf{S}_{\alpha}(\mathbf{x}') \cdot \chi_{\sigma} \dagger \vec{\sigma} \chi_{\sigma'}$$

Agora utilizamos a seguinte expansão:

$$\vec{\sigma} = \sigma_x \mathbf{e}_x + \sigma_y \mathbf{e}_y + \sigma_z \mathbf{e}_z = \sigma_+ \mathbf{e}_+ + \sigma_- \mathbf{e}_- + \sigma_z \mathbf{e}_z$$

onde temos:

$$\begin{aligned} \sigma_{\pm} &= \sigma_x \pm i\sigma_y \\ \mathbf{e}_{\pm} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{e}_x \mp i\mathbf{e}_y) \end{aligned}$$

e as relações de produto escalar:

$$\mathbf{e}_{\pm} \cdot \mathbf{e}_{\pm} = 0$$

$$\mathbf{e}_\pm \cdot \mathbf{e}_\mp = 1$$

As operações com spinores de Pauli também são conhecidas:

$$\chi_\sigma^\dagger \sigma_z \chi_{\sigma'} = \sigma \delta_{\sigma\sigma'} \quad (1.31)$$

$$\chi_\sigma^\dagger \sigma_+ \chi_{\sigma'} = \delta_{\sigma\uparrow} \delta_{\sigma'\downarrow} \quad (1.32)$$

$$\chi_\sigma^\dagger \sigma_- \chi_{\sigma'} = \delta_{\sigma\downarrow} \delta_{\sigma'\uparrow} \quad (1.33)$$

Podemos finalmente escrever

$$\chi_\sigma^\dagger \vec{\sigma} \chi_{\sigma'} = \delta_{\sigma\uparrow} \delta_{\sigma'\downarrow} \mathbf{e}_+ + \delta_{\sigma\downarrow} \delta_{\sigma'\uparrow} \mathbf{e}_- + \sigma \delta_{\sigma\sigma'} \mathbf{e}_z \quad (1.34)$$

sendo o resultado (1.34) muito importante e será utilizado futuramente. Agora temos

$$H_{exch}^\alpha = - \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\alpha \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{x}' J_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}}^{\alpha*} \varphi_{\mathbf{k}'}^\alpha \mathbf{S}_\alpha(\mathbf{x}') \cdot (\delta_{\sigma\uparrow} \delta_{\sigma'\downarrow} \mathbf{e}_+ + \delta_{\sigma\downarrow} \delta_{\sigma'\uparrow} \mathbf{e}_- + \sigma \delta_{\sigma\sigma'} \mathbf{e}_z)$$

Façamos o spin local estar orientado na direção z longe da interface com a barreira, ou seja:

$$\mathbf{S}_\alpha(\mathbf{x}') \cdot (\delta_{\sigma\uparrow} \delta_{\sigma'\downarrow} \mathbf{e}_+ + \delta_{\sigma\downarrow} \delta_{\sigma'\uparrow} \mathbf{e}_- + \sigma \delta_{\sigma\sigma'} \mathbf{e}_z) = \sigma S_\alpha^z(\mathbf{x}') \delta_{\sigma\sigma'}$$

ficando para o termo de troca a expressão abaixo

$$H_{exch}^\alpha = - \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\alpha \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{x}' J_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}}^{\alpha*} \varphi_{\mathbf{k}'}^\alpha \sigma S_\alpha^z(\mathbf{x}') \delta_{\sigma\sigma'}$$

Somando sobre os spins reduzimos a expressão para

$$H_{exch}^\alpha = - \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sigma c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^\alpha \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{x}' J_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}}^{\alpha*}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}}^\alpha(\mathbf{x}) S_\alpha^z(\mathbf{x}')$$

e definimos a separação de energia devido ao termo de troca, que remove a degenerescência de spin:

$$\Delta_\alpha = \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{x}' J_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}}^{\alpha*}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}}^\alpha(\mathbf{x}) S_\alpha^z(\mathbf{x}') \quad (1.35)$$

então o Hamiltoniano longe da barreira fica corrigido pelo fator abaixo:

$$H_{exch}^\alpha = - \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sigma \Delta_\alpha c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^\alpha \quad (1.36)$$

Prosseguindo com os cálculos, tem-se os termos de tunelamento com spin-flip, dados por:

$$H_{exch}^{R \leftrightarrow L} = - \int d^3 \mathbf{x} \int d^3 \mathbf{x}' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \mathbf{S}(\mathbf{x}') \cdot (\Psi_L^\dagger(\mathbf{x}) \vec{\sigma} \Psi_R(\mathbf{x}) + \Psi_R^\dagger(\mathbf{x}) \vec{\sigma} \Psi_L(\mathbf{x})) \quad (1.37)$$

Substituímos (1.22)-(1.25), e utilizamos (1.31)-(1.33), (1.34) e as relações do produto escalar para obter, agora na região de barreira, com mágnons:

$$\mathbf{S}_\alpha(\mathbf{x}') \cdot (\delta_{\sigma\uparrow} \delta_{\sigma'\downarrow} \mathbf{e}_+ + \delta_{\sigma\downarrow} \delta_{\sigma'\uparrow} \mathbf{e}_- + \sigma \delta_{\sigma\sigma'} \mathbf{e}_z) = \delta_{\sigma\uparrow} \delta_{\sigma'\downarrow} S^-(\mathbf{x}') + \delta_{\sigma\downarrow} \delta_{\sigma'\uparrow} S^+(\mathbf{x}') + \sigma S_\alpha^z(\mathbf{x}') \delta_{\sigma\sigma'}$$

Fazemos aqui também a separação entre os termos de spin local do lado direito e do lado esquerdo e supomos não haver interação de troca no interior da barreira, que é constituída normalmente de material isolante:

$$S^+ = S_L^+ + S_R^+$$

$$S^- = S_L^- + S_R^-$$

$$S^z = S_L^z + S_R^z$$

e após os cálculos obtemos:

$$\begin{aligned} H_{exch}^{L \leftrightarrow R} = & - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \int d^3 \mathbf{x} \int d^3 \mathbf{x}' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \times \\ & \times \left\{ \varphi_{\mathbf{k}}^{L*}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}'}^R \left(c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R (S_L^+(\mathbf{x}') + S_R^+(\mathbf{x}')) + \right. \right. \\ & + c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R (S_L^-(\mathbf{x}') + S_R^-(\mathbf{x}')) + (S_L^z(\mathbf{x}') + S_R^z(\mathbf{x}')) (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R - c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R) \Big) + \\ & \varphi_{\mathbf{k}}^{R*}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}'}^L \left(c_{\mathbf{k}\downarrow}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^L (S_L^+(\mathbf{x}') + S_R^+(\mathbf{x}')) + \right. \\ & + c_{\mathbf{k}\uparrow}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^L (S_L^-(\mathbf{x}') + S_R^-(\mathbf{x}')) + (S_L^z(\mathbf{x}') + S_R^z(\mathbf{x}')) (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^L - c_{\mathbf{k}\downarrow}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^L) \Big) \Big\} \quad (1.38) \end{aligned}$$

Adicionando os dois termos do hamiltoniano, verificamos a existência de termos de cada um dos lados da barreira e os termos de transferência:

$$H = H_L + H_R + H_{L \leftrightarrow R} = H_0 + H_I$$

$$H_0 = H_L + H_R$$

$$H_I = H_{L \leftrightarrow R}$$

Finalmente chegamos a:

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma, \alpha=(L,R)} E_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha} \quad (1.39)$$

onde

$$E_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \sigma \Delta_\alpha$$

e Δ_α já definido na equação (1.35).

Como estamos interessados nos fenômenos de transporte, ou seja, transferência de elétrons de um lado a outro da barreira, apenas o hamiltoniano de interação será necessário na análise:

$$\begin{aligned} H_I = & \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d (c_{\mathbf{k}\sigma}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma}^R + c_{\mathbf{k}'\sigma}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^L) - \\ & - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{x}' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \times \\ & \times \left\{ \varphi_{\mathbf{k}}^{L*}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}'}^R \left(c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R (S_L^+(\mathbf{x}') + S_R^+(\mathbf{x}')) + \right. \right. \\ & + c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R (S_L^-(\mathbf{x}') + S_R^-(\mathbf{x}')) + (S_L^z(\mathbf{x}') + S_R^z(\mathbf{x}')) (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R - c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R) \Big) + \\ & \varphi_{\mathbf{k}}^{R*}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}'}^L \left(c_{\mathbf{k}\downarrow}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^L (S_L^+(\mathbf{x}') + S_R^+(\mathbf{x}')) + \right. \\ & + c_{\mathbf{k}\uparrow}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^L (S_L^-(\mathbf{x}') + S_R^-(\mathbf{x}')) + (S_L^z(\mathbf{x}') + S_R^z(\mathbf{x}')) (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^L - c_{\mathbf{k}\downarrow}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^L) \Big) \Big\} \quad (1.40) \end{aligned}$$

Podemos colocar em uma forma um pouco mais compacta a expressão acima:

$$\begin{aligned} H_I = & \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d (c_{\mathbf{k}\sigma}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma}^R + c_{\mathbf{k}'\sigma}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^L) - \\ & - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{x}' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \times \\ & \times \left\{ \varphi_{\mathbf{k}}^{L*}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}'}^R \left(c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R (S_L^+(\mathbf{x}') + S_R^+(\mathbf{x}')) + \right. \right. \\ & + c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R (S_L^-(\mathbf{x}') + S_R^-(\mathbf{x}')) + (S_L^z(\mathbf{x}') + S_R^z(\mathbf{x}')) (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R - c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R) \Big) + H.c. \Big\} \quad (1.41) \end{aligned}$$

Agora realizaremos uma transformação de Holstein-Primakoff [40] para possibilitar a quantização da magnetização $\mathbf{S}$ em ondas de spin, mais adiante, e levaremos em conta termos em primeira ordem apenas:

$$S_j^+ = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} a_j \approx \sqrt{2S} a_j \quad (1.42)$$

$$S_j^- = \sqrt{2S} a_j^\dagger \left(1 - \frac{a_j^\dagger a_j}{2S}\right)^{1/2} \approx \sqrt{2S} a_j^\dagger \quad (1.43)$$

$$S_j^z = S - a_j^\dagger a_j \quad (1.44)$$

onde a aproximação se faz válida pelo fato de que $a_j^\dagger a_j / (2S) \ll 1$ no caso de baixas temperaturas, e fenômenos de interação em segunda ordem serão desprezíveis.

Nas variáveis de Holstein-Primakoff fica-se com:

$$\begin{aligned} H_I = & \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d (c_{\mathbf{k}\sigma}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma}^R + c_{\mathbf{k}'\sigma}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^L) - \\ & - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{x}' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \times \\ & \times \left\{ \varphi_{\mathbf{k}}^{L*}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}'}^R \left(c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R (\sqrt{2S_L} a_L(\mathbf{x}') + \sqrt{2S_R} a_R(\mathbf{x}')) + \right. \right. \\ & + c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R (\sqrt{2S_L} a_L^\dagger(\mathbf{x}') + \sqrt{2S_R} a_R^\dagger(\mathbf{x}')) + \\ & \left. \left. + (S_L^z(\mathbf{x}') + S_R^z(\mathbf{x}')) (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R - c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R) \right) + H.c. \right\} \quad (1.45) \end{aligned}$$

Uma segunda transformação é possível, para as variáveis de mágnons, que são excitações de ondas de spin interagindo com os elétrons por absorção ou emissão [40-43] (para uma breve descrição da teoria de mágnons ver também [44]):

$$a(\mathbf{x}') = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \exp[-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'] b_{\mathbf{q}}$$

$$a^\dagger(\mathbf{x}') = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \exp[i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'] b_{\mathbf{q}}^\dagger$$

Fazendo a mudança para as variáveis dos mágnons, tem-se:

$$\begin{aligned} H_I = & \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d (c_{\mathbf{k}\sigma}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma}^R + c_{\mathbf{k}'\sigma}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^L) - \\ & - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{x}' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \left\{ \varphi_{\mathbf{k}}^{L*}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}'}^R \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \exp[-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'] c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R (\sqrt{2S_L} b_{\mathbf{q}}^L + \sqrt{2S_R} b_{\mathbf{q}}^R) + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \exp[i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'] c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R (\sqrt{2S_L} b_{\mathbf{q}}^{L\dagger} + \sqrt{2S_R} b_{\mathbf{q}}^{R\dagger}) + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \left(S_L + S_R - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \exp[i(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{x}'] (b_{\mathbf{q}}^{R\dagger} b_{\mathbf{q}'}^R + b_{\mathbf{q}}^{L\dagger} b_{\mathbf{q}'}^L) \right) (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R - c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R) \right) + H.c. \right\}
\end{aligned} \tag{1.46}$$

Os termos acima podem ser reagrupados de forma a colocar a soma nos momentos $\mathbf{q}$ dos mágnons em evidência:

$$\begin{aligned}
H_I &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d (c_{\mathbf{k}\sigma}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma}^R + c_{\mathbf{k}'\sigma}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^L) - \\
& - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{x}' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}}^{L*}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}'}^R(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} \left(c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R (\sqrt{2S_L} b_{\mathbf{q}}^L + \sqrt{2S_R} b_{\mathbf{q}}^R) \right) - \\
& - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{x}' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}}^{L*}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}'}^R(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R (\sqrt{2S_L} b_{\mathbf{q}}^{L\dagger} + \sqrt{2S_R} b_{\mathbf{q}}^{R\dagger}) \right) - \\
& - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{x}' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}}^{L*}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}'}^R(\mathbf{x}) \times \\
& \times \left(S_L + S_R - \sum_{\mathbf{q}'} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \mathbf{x}'} (b_{\mathbf{q}}^{R\dagger} b_{\mathbf{q}'}^R + b_{\mathbf{q}}^{L\dagger} b_{\mathbf{q}'}^L) \right) (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R - c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R) + H.c.
\end{aligned} \tag{1.47}$$

Em (1.47) o significado de cada um dos termos é bastante simples e não necessita maiores comentários. Vemos, entretanto, que o último termo contém interação com mágnons envolvendo criação e aniquilação de mágnons de vetor de onda $\mathbf{q}$ diferentes. A expressão acima é completa, mas uma pequena simplificação pode ser feita, considerando que para o termo $b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}'}$ a contribuição significativa se dá apenas para $\mathbf{q} = \mathbf{q}'$, conservando o número de mágnons. O que fazemos é desprezar termos envolvendo mais de um mágnon, então escrevemos:

$$\begin{aligned}
H_I &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d (c_{\mathbf{k}\sigma}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma}^R + c_{\mathbf{k}'\sigma}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^L) - \\
& - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{x}' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}}^{L*}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}'}^R(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} \left(c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R (\sqrt{2S_L} b_{\mathbf{q}}^L + \sqrt{2S_R} b_{\mathbf{q}}^R) \right) - \\
& - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{x}' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}}^{L*}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}'}^R(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R (\sqrt{2S_L} b_{\mathbf{q}}^{L\dagger} + \sqrt{2S_R} b_{\mathbf{q}}^{R\dagger}) \right) -
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{x}' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}}^{L*}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}'}^R(\mathbf{x}) \times \\
& \times \left(S_L + S_R - (b_{\mathbf{q}}^{R\dagger} b_{\mathbf{q}}^R + b_{\mathbf{q}}^{L\dagger} b_{\mathbf{q}}^L) \right) (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R - c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R) + H.c.
\end{aligned} \tag{1.48}$$

Agora definimos o coeficiente de tunelamento dependente do spin (através da integral de exchange e da interação com os mágnons):

$$t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J = - \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{x}' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}}^{L*}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}'}^R(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'} \tag{1.49}$$

O hamiltoniano finalmente pode ser escrito na forma apresentada na literatura, como por exemplo na Ref. [50], utilizando a definição (1.49):

$$\begin{aligned}
H_I = & \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d (c_{\mathbf{k}\sigma}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma}^R + c_{\mathbf{k}'\sigma}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^L) + \\
& + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J \left(c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R (\sqrt{2S_L} b_{\mathbf{q}}^L + \sqrt{2S_R} b_{\mathbf{q}}^R) \right) + \\
& + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R (\sqrt{2S_L} b_{\mathbf{q}}^{L\dagger} + \sqrt{2S_R} b_{\mathbf{q}}^{R\dagger}) \right) + \\
& + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J \left(S_L + S_R - (b_{\mathbf{q}}^{R\dagger} b_{\mathbf{q}}^R + b_{\mathbf{q}}^{L\dagger} b_{\mathbf{q}}^L) \right) (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R - c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R) + H.c.
\end{aligned} \tag{1.50}$$

ou ainda:

$$\begin{aligned}
H_I = & \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d (c_{\mathbf{k}\sigma}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma}^R + c_{\mathbf{k}'\sigma}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^L) + \\
& + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J (c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R + c_{\mathbf{k}'\uparrow}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow}^L) (\sqrt{2S_L} b_{\mathbf{q}}^L + \sqrt{2S_R} b_{\mathbf{q}}^R) + \\
& + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R + c_{\mathbf{k}'\downarrow}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow}^L) (\sqrt{2S_L} b_{\mathbf{q}}^{L\dagger} + \sqrt{2S_R} b_{\mathbf{q}}^{R\dagger}) + \\
& + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J \left(S_L + S_R - (b_{\mathbf{q}}^{R\dagger} b_{\mathbf{q}}^R + b_{\mathbf{q}}^{L\dagger} b_{\mathbf{q}}^L) \right) (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R - c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R) + H.c.
\end{aligned} \tag{1.51}$$

O passo seguinte é o cálculo das correntes de tunelamento. Isto será feito na próxima seção.

1.4 Correntes de Tunelamento

Existem diversas maneiras de efetuar o cálculo de correntes. Podemos efetuar o seguinte cálculo, utilizando uma expressão não-relativística:

$$\mathbf{j} = \frac{e\hbar}{2im} [\Psi^* \nabla \Psi - (\nabla \Psi^*) \Psi] \quad (1.52)$$

Porém isto implica em resolver o Hamiltoniano e conhecer as autofunções. Utilizaremos o método da Regra de Ouro de Fermi, já que conhecemos o Hamiltoniano de interação. No caso do Hamiltoniano de transferência, a probabilidade de transição por unidade de tempo de um lado para o outro da junção é dado pela Regra de Ouro de Fermi,

$$w_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} | \langle f | H_I | i \rangle |^2 f(E_i) [1 - f(E_f)] \delta(E_i - E_f) \quad (1.53)$$

e a corrente efetiva pode ser calculada da seguinte maneira:

$$j_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma\sigma'}^{L \rightarrow R} = -\frac{2\pi e}{\hbar} | \langle \mathbf{k}', \sigma' | H_I | \mathbf{k}, \sigma \rangle |^2 f(E_{\mathbf{k}\sigma}^L) [1 - f(E_{\mathbf{k}'\sigma'}^R)] \delta(E_L - E_R \pm \hbar\omega) \quad (1.54)$$

onde o sinal negativo aparece devido à carga do elétron, sendo e o módulo da carga eletrônica. O termo $\hbar\omega$ na conservação da energia leva em conta absorção ou emissão de um bóson (no nosso caso, são mágnons). O sinal positivo indica absorção e o sinal negativo, emissão, quando nos referimos ao eletrodo esquerdo como sendo o de energia inicial. A corrente efetiva total é dada pela diferença entre a corrente que vai da esquerda para a direita e a que vai da direita para a esquerda:

$$j_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma\sigma'} = j_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma\sigma'}^{R \rightarrow L} - j_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma\sigma'}^{L \rightarrow R} \quad (1.55)$$

O sinal da corrente é adotado de acordo com o sentido usual das correntes para um potencial aplicado. Se o eletrodo esquerdo encontra sob a ação de um potencial positivo em relação ao eletrodo da direita então tem-se:

$$j_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma\sigma'} = \frac{2\pi e}{\hbar} | \langle \mathbf{k}', \sigma' | H_I | \mathbf{k}, \sigma \rangle |^2 \times \\ \times \{ f(E_{\mathbf{k}\sigma}^L) [1 - f(E_{\mathbf{k}'\sigma'}^R)] - f(E_{\mathbf{k}'\sigma'}^R) [1 - f(E_{\mathbf{k}\sigma}^L)] \} \delta(E_L - E_R \pm \hbar\omega) \quad (1.56)$$

A corrente total é dada pela soma sobre todos os valores de $\mathbf{k}$ e $\mathbf{k}'$ disponíveis bem como os spins:

$$j_{\text{total}} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'} j_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma\sigma'}.$$

O próximo passo é transformar as somatórias em integrais, para fazer uso do recurso da função Delta de Dirac. Tal aproximação é possível quando o número de estados possíveis para o vetor $\mathbf{k}$ é grande e a separação entre estados, $\Delta\mathbf{k}$, pode ser feita muito pequena. Algumas etapas serão omitidas e o resultado final pode ser escrito na forma abaixo:

$$I(V) = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\epsilon \sum_{\sigma\sigma'} \left(T_{\sigma\sigma'}(\epsilon) N_{\sigma}^L(\epsilon - V) N_{\sigma'}^R(\epsilon) f_L(\epsilon - V) [1 - f_R(\epsilon)] - \right. \\ \left. - T_{\sigma'\sigma}(\epsilon) N_{\sigma}^L(\epsilon - V) N_{\sigma'}^R(\epsilon) f_R(\epsilon) [1 - f_L(\epsilon - V)] \right) \quad (1.57)$$

sendo $\epsilon = E - E_F$, E_F a energia de Fermi, $N_{\sigma}^{\alpha}(\epsilon) = k^2/(d\epsilon/dk)$ as densidades de estados para elétrons com spin σ , $\alpha = (R, L)$ denota o eletrodo e

$$f(\epsilon) = (\exp[\frac{\epsilon}{k_B T}] + 1)^{-1}$$

é a distribuição de Fermi-Dirac. É importante observar que na expressão acima foram omitidas as dependências com ω . Essas dependências são levadas em conta através dos coeficientes de transmissão, e devemos somar sobre todos os valores ω possíveis.

1.5 A Teoria de Landauer

As primeiras teorias quânticas para a condução eletrônica tinham um caráter semi-clássico. Os elétrons de condução são acelerados de acordo com o teorema de Bloch, e a aceleração é contra-balançada pelo espalhamento para trás devido a fônons e defeitos da rede. As seções de choque para o espalhamento e a estrutura de bandas eram calculadas através da Mecânica Quântica. Entretanto, o processo de balanço levava em conta apenas as probabilidades de ocupação, não permitindo um processo totalmente coerente [8]. Em muitas situações considerava-se que centros de espalhamento localizados em pontos diferentes do espaço interagem incoerentemente. Teorias totalmente baseadas na Mecânica Quântica começaram a surgir nos anos 50 e tem diferentes origens. A formulação de Kubo tornou-se a mais amplamente aceita desde então. A teoria quântica como descrita pela equação de Schroedinger é uma teoria conservativa e não possibilita dissipação, permite o cálculo de polarização de átomos, moléculas e outros sistemas fechados, mas não permite aos elétrons entrar ou sair do sistema. A teoria linear de Kubo é essencialmente uma teoria estendida

da polarização com algumas hipóteses adicionais para permitir efeitos dissipativos, como é o caso da condutância [39]. Nenhuma teoria que ignore o efeito das interfaces de uma amostra com o restante do circuito permite calcular adequadamente a resistência de uma amostra finita [8]. Atualmente é possível fabricar amostras muito pequenas de forma que os portadores tenham uma história totalmente coerente e quântica através da amostra, permitindo o estudo da condutância nesses casos, sendo essencial levar em conta as interfaces da amostra com o restante do circuito. Quando considerou-se o espalhamento de elétrons por um conjunto de defeitos pontuais randomicamente distribuídos, efetuar médias de ensemble sobre todas as possíveis localizações dos defeitos tornou-se procedimento padrão. O fato de realizar médias remove completamente os efeitos quânticos de espalhamento múltiplo, que dependem da distância entre os pontos de espalhamento, não garantindo que a variação da condutância entre os diversos membros de um mesmo ensemble seja pequena. A formulação de Landauer, que expressa a condutância em função das propriedades de espalhamento de um sistema é especialmente concebida para calcular a condutância de um segmento do sistema (possivelmente desordenado) conectado a dois reservatórios (contatos) apropriadamente [1]. Esta formulação é muito útil no estudo de nanoestruturas, não apenas como ferramenta de cálculos, mas também como uma descrição física simples dos novos fenômenos que ocorrem em sistemas mesoscópicos. A teoria de Landauer é concebida no contexto de um sistema dado e nenhuma média de ensemble se faz necessária. Portanto, os efeitos de flutuações mesoscópicas emergem naturalmente. Em 1957 Landauer introduziu primeiramente a versão unidimensional (1D) da teoria, consistindo de uma barreira de potencial conectada a um par de reservatórios de elétrons situados a potenciais químicos diferentes (fonte externa) através de fios unidimensionais ideais (não há queda de potencial nos fios). A fonte produz uma corrente que flui através do sistema 1D. A barreira é caracterizada pelos coeficientes de transmissão T e reflexão R . A condutância medida entre os dois reservatórios (medida de dois terminais), no caso de haver degenerescência de spin é dada então por:

$$G = \frac{e^2}{\pi\hbar} T$$

ou seja, a condutância é vista como um efeito de transmissão de portadores de um lado para o outro da barreira. Se a transmissão é perfeita $T = 1$ e tem-se o quantum de condutância $e^2/(\pi\hbar)$ no regime de degenerescência de spin. A teoria

de Landauer aplica-se essencialmente ao regime balístico onde o espalhamento é elástico, mas a fórmula de Landauer de dois terminais leva em conta de alguma maneira os efeitos dissipativos nos reservatórios. Há várias maneiras de demonstrar a fórmula de Landauer [1,2,7-9,39]. Aqui seguiremos o procedimento do Hamiltoniano de transferência, colocado na forma a seguir:

$$H_I = \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} t_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'}, \quad (1.58)$$

onde $t_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'}$ é o parâmetro de hopping e $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger (c_{\mathbf{k}\sigma})$ é operador fermiônico de criação (aniquilação) para um elétron com momento $\hbar\mathbf{k}$ e spin σ . A taxa de transição entre dois reservatórios cujo hamiltoniano de transferência é representado por (1.58) é obtida através da Regra de Ouro de Fermi. A ocupação de estados nos reservatórios é dada pelas funções de distribuição de Fermi-Dirac e os dois reservatórios se encontram a uma diferença de potencial V aplicado, resultando então:

$$w_{total} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} |t_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'}|^2 [f(E_{\mathbf{k}\sigma}) - f(E_{\mathbf{k}'\sigma'})] \delta(E_{\mathbf{k}\sigma} - E_{\mathbf{k}'\sigma'} + eV) \quad (1.59)$$

A expressão (1.59) pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$w_{total} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} |t_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'}|^2 [f(E_{\mathbf{k}\sigma}) - f(E_{\mathbf{k}\sigma} + \Delta E)] \delta(E_{\mathbf{k}\sigma} - E_{\mathbf{k}'\sigma'} + eV) \quad (1.60)$$

sendo $\Delta E = E_{\mathbf{k}\sigma} - E_{\mathbf{k}'\sigma'}$ e

$$f(E_{\mathbf{k}\sigma} + \Delta E) = f(E_{\mathbf{k}'\sigma'}) = f(E_{\mathbf{k}\sigma}) + \left. \frac{\partial f}{\partial E_{\mathbf{k}\sigma}} \right|_{E_{\mathbf{k}\sigma}} \Delta E + \dots$$

Iremos levar a expansão em série de Taylor da distribuição de Fermi-Dirac até a primeira ordem apenas e substituir na expressão (1.60) para a taxa de transição:

$$w_{total} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} |t_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'}|^2 \left. \frac{\partial f}{\partial E_{\mathbf{k}\sigma}} \right|_{E_{\mathbf{k}\sigma}} (E_{\mathbf{k}\sigma} - E_{\mathbf{k}'\sigma'}) \delta(E_{\mathbf{k}\sigma} - E_{\mathbf{k}'\sigma'} + eV). \quad (1.61)$$

Na expressão (1.61), apenas separamos as somas para as variáveis de spin e para as variáveis de momento. Considerando-se o caso 1D e tamanho do sistema L podemos converter as somas nas variáveis de momento para integrais, fazendo $\Delta k = 2\pi/L$, e temos então:

$$w_{total} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{L^2}{(2\pi)^2} \sum_{\sigma\sigma'} \int dk \int dk' |t_{k\sigma, k'\sigma'}|^2 \left. \frac{\partial f}{\partial E_{k\sigma}} \right|_{E_{k\sigma}} (E_{k\sigma} - E_{k'\sigma'}) \delta(E_{k\sigma} - E_{k'\sigma'} + eV). \quad (1.62)$$

A equação (1.62) pode ser reescrita nas variáveis de energia, fazendo $\varepsilon = E_{k\sigma}$ e $\varepsilon' = E_{k'\sigma'}$ para simplificar a notação:

$$w_{total} = \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{\sigma\sigma'} \int d\varepsilon \int d\varepsilon' |t_{k\sigma,k'\sigma'}|^2 \left(\frac{L}{d\varepsilon/dk} \right) \left(\frac{L}{d\varepsilon'/dk'} \right) \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon} (\varepsilon - \varepsilon') \delta(\varepsilon - \varepsilon' + eV). \quad (1.63)$$

Agora, fazendo uso das propriedades da função delta de Dirac e tendo em conta que a baixas temperaturas a distribuição de Fermi-Dirac tem a característica de degrau unitário e sua derivada também é uma função delta de Dirac, podemos facilmente integrar a expressão (1.63), sendo o resultado:

$$w_{total} = -\frac{eV}{2\pi\hbar} \sum_{\sigma\sigma'} |t_{k\sigma,k'\sigma'}|^2 \left(\frac{L}{d\varepsilon/dk} \right) \left(\frac{L}{d\varepsilon'/dk'} \right), \quad (1.64)$$

onde os parâmetros acima são calculados em $\varepsilon = eV$. A corrente é simplesmente obtida por $I = -ew_{total}$, sendo e a carga eletrônica:

$$I = \frac{e^2V}{2\pi\hbar} \sum_{\sigma\sigma'} |t_{k\sigma,k'\sigma'}|^2 \left(\frac{L}{d\varepsilon/dk} \right) \left(\frac{L}{d\varepsilon'/dk'} \right) \quad (1.65)$$

Lembrando que a condutância é definida através da relação $G = I/V$, podemos escrever:

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_{\sigma\sigma'} |t_{k\sigma,k'\sigma'}|^2 \left(\frac{L}{d\varepsilon/dk} \right) \left(\frac{L}{d\varepsilon'/dk'} \right) \quad (1.66)$$

As densidades de estados são definidas na forma abaixo:

$$N_{\sigma} = \left(\frac{L}{d\varepsilon_{\sigma}/dk} \right), \quad N_{\sigma'} = \left(\frac{L}{d\varepsilon'_{\sigma'}/dk'} \right) \quad (1.67)$$

e o coeficiente de transmissão do canal pode ser definido da seguinte maneira:

$$T_{\sigma\sigma'} = |t_{k\sigma,k'\sigma'}|^2 N_{\sigma} N_{\sigma'} \quad (1.68)$$

então podemos escrever (1.66) em uma forma compacta para fórmula de Landauer:

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_{\sigma\sigma'} T_{\sigma\sigma'} \quad (1.69)$$

Quando a rotação de spin não é permitida, a condutância de Landauer dada por (1.69) simplifica-se para:

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_{\sigma} T_{\sigma} \quad (1.70)$$

e ainda mais, no caso em que há degenerescência de spin, a transmissão dos dois canais de spin é idêntica, e tem-se a expressão de Landauer que é comumente encontrada nas referências [1,2,7-9]:

$$G = \frac{e^2}{\pi\hbar} T \quad (1.71)$$

Todo o procedimento de cálculo mostrado acima foi realizado para o caso unidimensional em que a degenerescência de spin foi removida, entretanto é necessário levar em conta a contribuição de todos os modos transversais para o momento do elétron. Neste caso diz-se que há vários canais contribuindo para a condutância, e podemos escrever a fórmula de Landauer na forma simples:

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_i T_i \quad (1.72)$$

onde T_i é a transmissividade do i -ésimo canal. Conhecendo-se a matriz de transmissão t , outra forma de escrever a fórmula de Landauer é [1,2,8]:

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \text{Tr}(tt^\dagger) \quad (1.73)$$

onde Tr denota o traço de matriz.

Considerando-se o caso em que a degenerescência de spin foi removida no regime de baixas voltagens (até 100 mV, já que a separação de energias para as bandas de spin em ferromagnetos é da ordem de 0.1 – 0.5 eV) e baixas temperaturas, apenas o canal de spin majoritário irá contribuir para a condução. Se a transmissividade do canal de spin majoritário é unitária ($T_\uparrow = 1$ e $T_\downarrow = 0$ para a temperatura e voltagem aplicada), obtemos o quantum de condutância para um único canal

$$G_0 = \frac{e^2}{2\pi\hbar}$$

Se a situação é de degenerescência de spin, com os dois canais de spin contribuindo igualmente, tem-se $G = 2G_0$.

A fórmula de Landauer tem uma interpretação muito simples: a condutância de uma amostra é diretamente proporcional à soma das contribuições individuais de todos os canais cuja transmissividade é não-nula. Para regime de voltagens muito baixas apenas aquele canal cuja energia encontra-se sobre a superfície de Fermi contribui para a condutância, mas à medida em que aumentamos a voltagem, mais

canais irão se abrir e contribuir para a condução, de maneira que a condutância cresce em degraus. Na medida em que aumentamos a voltagem aplicada entre os dois reservatórios de uma estrutura, mais canais vão se abrindo a condutância será aumentada de $e^2/(2\pi\hbar)$, isto para o caso em que a degenerescência de spin foi removida, ao passo que quando não foi removida, os degraus na condutância tem valor $2e^2/(2\pi\hbar)$. Isto é o que chamamos de quantização da condutância e é consequência imediata da teoria de Landauer. Estudos em pontos quânticos realizados por Van Wees *et al* em 1988 e Wharam *et al*, também em 1988 foram os primeiros a demonstrarem experimentalmente a quantização da condutância [1,8]. A condição ideal para o aparecimento dos degraus na condutância devido à abertura de canais é uma transição gradual de tamanho da região da amostra para o reservatório. Mesmo que a amostra tenha dimensões nanométricas e o reservatório mantenha as propriedades de volume, uma mudança abrupta de tamanho causaria perda de adiabaticidade de movimento para os elétrons de condução. A transição gradual garante uma condição de adiabaticidade para os primeiros estágios do movimento eletrônico, contribuindo para a condução. A reflexão causada pela perda de adiabaticidade nesse caso é pequena e a transmissividade dos canais que se abrem é próxima da unidade. Outra condição necessária para o aparecimento da condutância quantizada é que energia térmica seja menor do que a separação entre os canais, o que em geral ocorre a baixíssimas temperaturas. Na verdade os efeitos de quantização de condutância tem sido observados a temperatura ambiente em contatos de tamanho atômico formados naturalmente (experimentos de Costa-Kramer *et al* em 1995, ver página 99 da Ref. [1]).

Não será mostrado aqui o cálculo, que pode ser verificado em [1,2], porém quando a medida é feita com 4 terminais, dois para medida de corrente, e dois para medida de voltagem, a fórmula para a condutância aparece um pouco modificada:

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \frac{T}{R} \quad (1.74)$$

sendo T a transmissividade total e R a reflexividade total ($T + R = 1$).

A teoria de Landauer tem sido amplamente utilizada para cálculo de condutância e será abordada aqui para a análise da condutância em nanofios e nanocontatos, como será mostrado mais adiante.

Capítulo 2

Transporte em Junções Magnéticas de Tunelamento

O interesse atual no fenômeno de GMR em junções magnéticas de tunelamento (MTJ - Magnetic Tunneling Junction) deve-se basicamente às aplicações em cabeças de leitura magnetorresistivas, sensores de campo magnético, memória de acesso randômico não voláteis e muitas outras [45-49]. O efeito é baseado em um mecanismo de espalhamento dependente de spin proposto inicialmente por Cabrera e Falicov [24], fazendo com que a condutância tenha uma forte dependência com a polarização magnética nas MTJ's [20]. Tipicamente o efeito de GMR em junções é da ordem de 25 – 30% [50,51], e aponta para uma larga razão das densidades de estados de elétrons majoritários (M) e minoritários (m) ao nível de Fermi (E_F)

$$\frac{N_M(E_F)}{N_m(E_F)} \approx 2.0 - 2.5 .$$

Usualmente em experimentos de magnetorresistência (MR), a resistência para o caso em que as magnetizações nos eletrodos são anti-paralelas(AP) é comparada ao caso em que as magnetizações são paralelas(P). A configuração básica do experimento é mostrada na Fig. 2.1, onde ilustramos a configuração dos campos magnéticos aplicados aos eletrodos ferromagnéticos. Na configuração paralela os campos estão igualmente orientados, e a estrutura de bandas nos dois eletrodos é idêntica, sendo que a banda de spin majoritário e minoritário é a mesma em ambos os eletrodos. Ao contrário, na configuração anti-paralela, os campos aplicados tem orientações opostas nos dois eletrodos, produzindo uma mudança na estrutura de bandas de um eletrodo para o outro. Com efeito, a banda de spin majoritário em um eletrodo, será a banda de spin minoritário no outro. Em vários experimentos relatados na

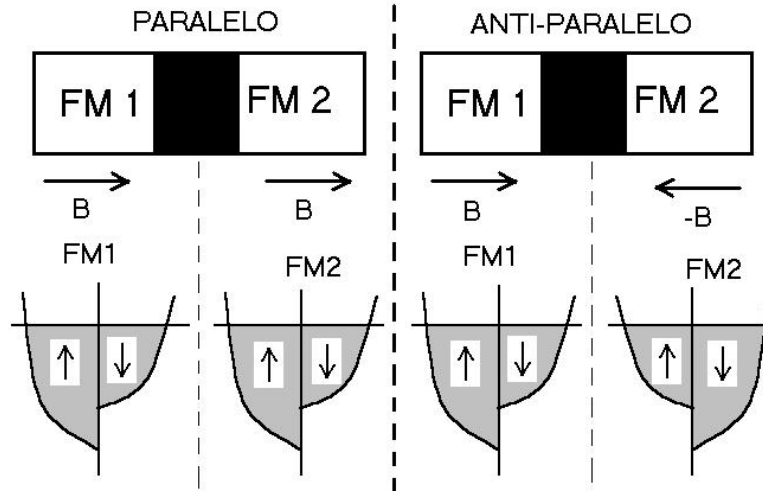


Figura 2.1: Esquema das Configurações do Campo Magnético $\mathbf{B}$ aplicado para as junções magnéticas de tunelamento.

literatura corrente (ver por exemplo Refs. [45],[46],[50] e [51]), a resistência da junção tem uma queda significativa com as voltagens aplicadas, com um pico característico para voltagem nula denominado *anomalia de zero-bias*. Esta dependência mostra uma rápida queda inicial, para voltagens abaixo de $V \sim 100 \text{ mV}$, e então tem uma variação mais amena, embora continue a decrescer com o aumento da voltagem aplicada. Em $V = 500 \text{ mV}$ o valor é de aproximadamente 60% em relação ao pico(que ocorre em $V = 0 \text{ mV}$) em alguns casos [51]. Muitas tentativas de explicar o comportamento descrito acima em uma junção de tunelamento magnética tem sido feitas nos últimos anos [19,45,46,50], mas uma teoria completa, que inclui todos os detalhes observados está ainda faltando.

Na Ref. [50], o espalhamento por mágnons nas interfaces eletrodo-isolante é proposto como um mecanismo para randomizar o processo de tunelamento e abrir os canais de “spin-flip”, reduzindo a MR. Enquanto esse processo pode sim explicar o comportamento da MR para voltagens muito próximas de zero (voltagens menores que $40 - 100 \text{ mV}$), estimativas da seção de choque para espalhamento de elétrons por mágnons mostram que o efeito é muito pequeno para explicar a queda na MR em todo o intervalo de 500 mV . De fato, medidas espectroscópicas de tunelamento inelástico de elétrons (IETS - do inglês Inelastic-Electron Tunneling Spectroscopy) em baixas temperaturas mostram picos que devem ser associados sem ambiguidade com espectros de um mágnon em voltagens próximas de zero (de 12 a 20 mV , com

caudas acima de $40mV$, e energia máxima de mágnons não superior a $100 meV$) [45]. Para ultrapassar esse limite é necessário o espalhamento por mais de um mágnon e processos multi-mágnons são negligenciáveis a baixas temperatura. Desse modo, a constante de acoplamento elétron-mágnon utilizado na Ref. [50] está certamente superestimada.

A explicação acima [50] tem mudado com a Ref. [19], onde mostra-se que os dados experimentais podem ser compreendidos em termos de correntes elásticas de tunelamento que conservam spin, considerando efeitos das densidades de estados não levados em conta na Ref. [50]. Os efeitos incluem a diminuição da altura efetiva da barreira com a voltagem aplicada, como na teoria de Simmons [52], e mais importante ainda, as variações das densidades de estados com a voltagem aplicada em ambos os eletrodos magnéticos. Esta última é uma questão relevante, já que experimentos mostram variações da ordem de $0.5 eV$ a partir da superfície de Fermi. O cálculo simples desenvolvido em [19] modela a estrutura de bandas com densidades de estados para elétrons livres, desde que a corrente de tunelamento seja dominada por contribuições de elétrons s . Este desenvolvimento dá uma anomalia de “zero-bias” que depende da estrutura de bandas, e a variação da MR que está na ordem correta de magnitude para todo o intervalo de $500 meV$. A discussão acima e outros resultados experimentais primeiramente mostram que a dependência da densidade de estados com a voltagem tem um papel muito importante para a compreensão da MR [53,54]. Entretanto, é difícil adequar os detalhes refinados dos dados experimentais em voltagens muito baixas com a teoria. Pode-se adotar um procedimento pragmático, com uma estrutura de bandas mais complicada e um maior número de parâmetros livres para melhorar a interpolação [46].

Motivados pelos resultados de experimentos de IETS [45] fomos encorajados a tomar outro caminho, que mostra que espalhamento inelástico participa do fenômeno em voltagens muito baixas. Também, experimentos de MR [50,51] mostram claramente um comportamento diferente com a voltagem aplicada na região de pequenas voltagens (até $100 mV$). Uma teoria mais completa deveria então incluir:

- i)* efeitos de tunelamento assistido por espalhamento elétron-mágnon, com energia de mágnons máxima da ordem de $\sim 100 meV$. Em baixas temperaturas, elétrons vindos dos eletrodos, acelerados pela voltagem aplicada excitam mágnons nas interfaces. Em baixas temperaturas apenas processos de emissão

de um *mágnon* devem ser considerados;

- ii)* variação com a voltagem aplicada das densidades de estados para as diferentes bandas de spin nos ferromagnetos. Aqui, nós seguimos de forma semelhante ao modelo da Ref. [19], com uma versão simplificada da estrutura de bandas. Isto é motivado pelas discussões dadas nas Refs. [55] e [19] sobre a polarização das correntes de tunelamento. Nós assumimos que a corrente é principalmente de caráter *s*;
- iii)* diminuição da altura efetiva de barreira com a voltagem aplicada. Esses efeitos, conforme mostrados em [52], resultam em uma dependência parabólica da resistência com a voltagem. Não contribui para a anomalia de “zero-bias”, mas está sempre presente e deve dominar o comportamento da MR em voltagens maiores.

O programa acima foi desenvolvido, dando excelente acordo entre teoria e dados experimentais para a junção magnética de tunelamento simples. Um estudo mais aprofundado da interação elétron-*mágnon* leva à demonstração dos coeficientes de tunelamento dependentes de spin, bem como pode-se incluir a dependência da MR com a temperatura. Dois artigos técnicos foram submetidos a revistas especializadas, sendo que um já está publicado (ver o **Anexo 1**):

- 1) C.A. Dartora and G.G. Cabrera, “Ferromagnetic tunneling junctions at low voltages: Elastic versus inelastic scattering at $T = 0^\circ\text{K}$ ”, J. Appl. Phys. **95** (2004), 6058-6064 (**Anexo 1**);
- 2) C.A. Dartora and G.G. Cabrera, “Spin-dependent transmission coefficients for magnetic tunnel junction: transport properties and temperature dependence”, submetido ao Phys. Rev. B, e no momento em que foi redigida esta tese, em discussão com os árbitros.

2.1 O Hamiltoniano de Interação H_I para uma MTJ

Para descrever a MR e a resistência em uma MTJ o método do Hamiltoniano de transferência (desenvolvido no Capítulo anterior) é utilizado [1,2]. A junção é

composta por dois eletrodos ferromagnéticos, separados por um filme óxido fino representando uma barreira de potencial devido ao fato de que os níveis de Fermi das camadas ferromagnéticas situam-se na região de gap do filme óxido. Consideramos os elétrons da banda s como partículas livres (ondas planas), sendo responsáveis pela contribuição dominante no processo de tunelamento. Os elétrons da banda d , sendo mais localizados, entram no processo somente através da interação de troca (exchange) com os elétrons s em cada eletrodo ferromagnético. Mostrou-se no Capítulo 1, no contexto da segunda quantização e negligenciando a energia de magnetização (termo de Zeeman), que o Hamiltoniano não perturbado é dado por

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma, \alpha=(L,R)} E_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha} \quad (2.1)$$

com $L(R)$ referenciando o eletrodo esquerdo(direito), $c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha\dagger}$ ($c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha}$) são os operadores de criação (aniquilação) para férmions (elétrons s) com vetor de onda $\mathbf{k}$ e spin σ , $E_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \sigma \Delta_{\alpha}$ é a energia eletrônica dependente do spin e Δ_{α} é a separação das bandas devido à energia da interação de troca em cada lado da barreira.

A obtenção do Hamiltoniano de Interação, que torna possível a transferência de elétrons de um lado ao outro da barreira isolante foi demonstrado no Capítulo 1, de forma detalhada, e segue a forma proposta na Ref. [50]. Além do termo de transferência direta, proveniente de processos elásticos, incluímos a transferência com excitações magnéticas que se originam da troca s - d entre elétrons de condução e spins localizados nas interfaces. As excitações são descritas por uma transformação de Holstein-Primakoff linearizada [40-42], no espírito de uma teoria de um mágnon:

$$\begin{aligned} H_{int} = & \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d \left(c_{\mathbf{k}\sigma}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma}^R + c_{\mathbf{k}'\sigma}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^L \right) + \\ & + \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J \left(c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R + c_{\mathbf{k}'\downarrow}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow}^L \right) \left(\sqrt{2S_L} b_{\mathbf{q}}^L + \sqrt{2S_R} b_{\mathbf{q}}^R \right) + \\ & + \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R + c_{\mathbf{k}'\uparrow}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow}^L \right) \left(\sqrt{2S_L} b_{\mathbf{q}}^{L\dagger} + \sqrt{2S_R} b_{\mathbf{q}}^{R\dagger} \right) + \\ & + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R - c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R + h.c. \right) (S_L + S_R - (b_{\mathbf{q}}^{R\dagger} b_{\mathbf{q}}^R + b_{\mathbf{q}}^{L\dagger} b_{\mathbf{q}}^L)) , \end{aligned} \quad (2.2)$$

onde $t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d$ é o coeficiente de transmissão direta, $t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J$ é o coeficiente de transmissão inelástica (depende da integral de troca), $S^L(S^R)$ é o spin no lado esquerdo(direito),

N_s é o número total de spins nas interfaces, e $b_{\mathbf{q}}^{\alpha\dagger}$ ($b_{\mathbf{q}}^{\alpha}$) são operadores de criação (aniquilação) para mágnons com vetor de onda $\mathbf{q}$ em cada interface entre barreira e eletrodos. O vetor de onda $\mathbf{q}$ é quase bi-dimensional (a função de onda de mágnons é localizada nas interfaces, mas com comprimento de localização finito).

Em geral, a corrente total obtida através de (2.2) tem contribuições de processos elásticos, resultando em um tunelamento direto que conserva o spin, e também de processos inelásticos que envolvem emissão e absorção de mágnons com a troca do spin eletrônico.

2.1.1 Corrente de tunelamento direto: expressões analíticas

Consideremos inicialmente somente o tunelamento direto, que representa os processos elásticos sem mágnons. A corrente resultante é obtida por (ver Capítulo anterior e as Refs. [19],[46],[47] e [50])

$$I_{(C)} = \frac{2\pi e}{\hbar} \int dE T^d(E, V, d, \Phi_0) W_{(C)}(E, V) [f(E - eV) - f(E)] \quad (2.3)$$

onde

$$W_{(C)} = \sum_{\sigma} N_{\sigma}^R(E) N_{\sigma}^L(E - eV) \quad (2.4)$$

e C denota a configuração, $C = P$ para paralela e $C = AP$ para anti-paralela, $f(E)$ é a função de distribuição de Fermi-Dirac, N_{σ}^R e N_{σ}^L as densidades de estados dos eletrons com maior probabilidade de tunelar no eletrodo direito e esquerdo, respectivamente. $T^d(E, V, d, \Phi_0) = |t_{kk'}^d|^2$ é o coeficiente de tunelamento, sendo função da energia E , da voltagem aplicada V , largura da barreira d e altura efetiva da barreira Φ_0 . De fato, T^d é resultante da integral de superposição entre as funções de onda do eletrodo direito e esquerdo no interior da região de barreira (integral de overlap).

A resistência é prontamente obtida através de $R = G^{-1}$, sendo $G = dI/dV$ a condutância diferencial. No regime de baixas voltagens, nós estamos interessados em voltagens pequenas em comparação com a energia de Fermi, e somente estados próximos ao nível de Fermi contribuem para o transporte, e podemos expandir a densidade de estados em séries de Taylor, como segue:

$$N_{\sigma}^{\alpha}(E) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n N_{\sigma}^{\alpha}(E)}{dE^n} \right|_{E_F} (E - E_F)^n \quad (2.5)$$

Agora, calculamos W_C para as configurações P e AP utilizando (2.5). Na configuração P , como já foi explicado anteriormente, as bandas majoritária e minoritária em cada eletrodos correspondem à mesma orientação de spin, e no caso AP a banda majoritária em um eletrodo é a minoritária no outro:

$$W_{(P)} = \sum_i \sum_j \frac{1}{i!j!} \left[\frac{d^i N_M^R(E)}{dE^i} \frac{d^j N_M^L(E - eV)}{d(E - eV)^j} + \frac{d^i N_m^R(E)}{dE^i} \frac{d^j N_m^L(E - eV)}{d(E - eV)^j} \right] \Big|_{E_F} (E - E_F)^i (E - eV - E_F)^j, \quad (2.6)$$

e

$$W_{(AP)} = \sum_i \sum_j \frac{1}{i!j!} \left[\frac{d^i N_M^R(E)}{dE^i} \frac{d^j N_m^L(E - eV)}{d(E - eV)^j} + \frac{d^i N_m^R(E)}{dE^i} \frac{d^j N_M^L(E - eV)}{d(E - eV)^j} \right] \Big|_{E_F} (E - E_F)^i (E - eV - E_F)^j, \quad (2.7)$$

Levando-se em conta que os eletrodos são idênticos e o regime de baixas voltagens, podemos expandir as expressões até a primeira ordem, com boa precisão. A banda s pode ser representada por uma relação de dispersão parabólica e densidade de estados $N_\sigma \propto \sqrt{E - \Delta_\sigma}$, onde Δ_σ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) dá o fundo da banda para o spin considerado, com $|\Delta_\uparrow - \Delta_\downarrow| = 2\Delta$, como em [19]. Entretanto, consideramos aqui um caso mais geral que a relação de dispersão parabólica, com a estrutura de bandas descrita através do seguinte conjunto de parâmetros:

$$\begin{aligned} r &\equiv \left(\frac{N_M}{N_m} \right)_F, \\ \lambda &\equiv \left(\frac{dN_M/dE}{dN_m/dE} \right)_F, \\ \beta &\equiv \left(\frac{1}{N_m} \frac{dN_m}{dE} \right)_F, \end{aligned} \quad (2.8)$$

sendo todas as quantidades avaliadas no nível de Fermi, m e M significam minoritário e majoritário, respectivamente. Tem-se as seguintes expressões analíticas:

$$W_{(P)} = (N_m^F)^2 \left\{ (1 + r^2) + \beta (1 + r\lambda) (2\varepsilon - V) + \beta^2 (1 + \lambda^2) \varepsilon(\varepsilon - V) \right\}, \quad (2.9)$$

e

$$W_{(AP)} = (N_m^F)^2 \left\{ 2r + \beta (r + \lambda) (2\varepsilon - V) + \beta^2 \lambda \varepsilon(\varepsilon - V) \right\}, \quad (2.10)$$

onde $\varepsilon \equiv E - E_F$, ε e V devem ser dados em unidades de eV .

Muitas possibilidades para incluir o coeficiente de tunelamento T^d na teoria surgem. Mais tarde iremos apresentar uma descrição detalhada dos coeficientes de tunelamento. Entretanto aqui seguimos a abordagem de Simmons [52], onde a barreira é parametrizada por uma altura efetiva Φ_0 e uma largura efetiva d :

$$T^d(E, V, \Phi_0, d) = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}d\sqrt{2m(\Phi_0 - \varepsilon_z)}\right] = \exp\left[-1.024 d\sqrt{\Phi_0}\right] \exp\left[\frac{1}{2}\frac{\eta\varepsilon}{\sqrt{\Phi_0}}\right] \quad (2.11)$$

onde todas as energias são medidas a partir do nível de Fermi, e dadas em eV , a largura da barreira dada em *Angstrom* = 0.1 nm , e η é uma constante relacionando a energia ε com sua componente perpendicular à barreira ε_z . Este último parâmetro aparece devido ao fato de estarmos utilizando uma fórmula unidimensional para explicar o comportamento no caso $3D$.

Como as funções de Fermi-Dirac são do tipo degrau a $0^\circ K$, podemos facilmente obter a condutância diferencial em ambas as configurações.

$$G_{(C)} = \frac{2\pi e^2}{\hbar} \frac{d}{dV} \left\{ \int_0^V d\varepsilon T^d(\varepsilon, V, \Phi_0, d) W_{(C)}(\varepsilon, V) \right\}$$

Com algumas simplificações no processo de integração(levando em conta o comportamento do integrando nos limites de integração), pode-se obter

$$G_{(C)} = \frac{2\pi e^2}{\hbar} \left\{ A_{(C)} T^d(V, \Phi_0, d) + \frac{1}{6} \frac{d}{dV} [B_{(C)} V^2 T^d(V, \Phi_0, d) - C_{(C)} V^3 T^d(3V/5, \Phi_0, d)] \right\}, \quad (2.12)$$

sendo que $A_{(C)}$, $B_{(C)}$ e $C_{(C)}$ são constantes relacionadas ao esquema de configuração e à densidade de estados. As expressões analíticas para a condutância em ambas as configurações utilizando (2.12) e as expansões (2.9) e (2.10) são apresentadas abaixo:

$$G_{(P)} = \frac{2\pi e^2}{\hbar} \exp[-1.024d\sqrt{\Phi_0}][N_m^F]^2 \left\{ (1+r^2) \exp\left[\frac{\eta V d}{2\sqrt{\Phi_0}}\right] + \frac{\beta(1+r\lambda)}{3} \times \right. \\ \times \left[\frac{\eta d V^2}{4\sqrt{\Phi_0}} \exp\left[\frac{\eta V d}{2\sqrt{\Phi_0}}\right] + V \left(\exp\left[\frac{\eta V d}{2\sqrt{\Phi_0}}\right] - 1 \right) \right] - \\ \left. - \frac{\beta^2(1+\lambda^2)}{2} \exp\left[\frac{3\eta V d}{10\sqrt{\Phi_0}}\right] \left(V^2 + \frac{\eta V^3 d}{10\sqrt{\Phi_0}} \right) \right\} \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned}
G_{(AP)} = & \frac{2\pi e^2}{\hbar} \exp[-1.024d\sqrt{\Phi_0}][N_m^F]^2 \left\{ 2r \exp\left[\frac{\eta V d}{2\sqrt{\Phi_0}}\right] + \frac{\beta(r + \lambda)}{3} \times \right. \\
& \times \left[\frac{\eta d V^2}{4\sqrt{\Phi_0}} \exp\left[\frac{\eta V d}{2\sqrt{\Phi_0}}\right] + V \left(\exp\left[\frac{\eta V d}{2\sqrt{\Phi_0}}\right] - 1 \right) \right] - \\
& \left. - \beta^2 \lambda \exp\left[\frac{3\eta V d}{10\sqrt{\Phi_0}}\right] \left(V^2 + \frac{\eta V^3 d}{10\sqrt{\Phi_0}} \right) \right\} .
\end{aligned} \tag{2.14}$$

As expressões acima são facilmente invertidas para obter a resistência, sendo a MR definida por

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{R_{AP} - R_P}{R_{AP}} . \tag{2.15}$$

É importante notar que a definição acima está limitada a 100%, já que $R_{AP} > R_P$. No limite $V \rightarrow 0$ nós temos aproximadamente

$$\begin{aligned}
G_{(P)} &= \frac{2\pi e^2}{\hbar} \exp[-1.024d\sqrt{\Phi_0}][N_m^F]^2 (1 + r^2) \exp\left[\frac{\eta V d}{2\sqrt{\Phi_0}}\right] \\
G_{(AP)} &= \frac{2\pi e^2}{\hbar} \exp[-1.024d\sqrt{\Phi_0}][N_m^F]^2 (2r) \exp\left[\frac{\eta V d}{2\sqrt{\Phi_0}}\right] .
\end{aligned}$$

Com os valores experimentais para $\Delta R/R$ em voltagem nula, nós obtemos facilmente a razão das densidades de estados r ao nível de Fermi através da expressão:

$$r = \frac{1}{1 - \left. \frac{\Delta R}{R} \right|_{V=0}} + \sqrt{\frac{1}{\left(1 - \left. \frac{\Delta R}{R} \right|_{V=0}\right)^2} - 1} , \tag{2.16}$$

que não depende dos parâmetros de barreira. Por sua vez a altura da barreira Φ_0 e a largura d determinam o valor absoluto da resistência. Valores típicos utilizados em nossos exemplos são $d = 1.0 \text{ nm}$ e $\Phi_0 = 3.0 \text{ eV}$. Estimativas da resistência em tais junções dão produtos resistência-área da ordem de $RS \approx 3.3 \times 10^4 \text{ } [\Omega \mu m^2]$, onde S é a área de junção dada em μm^2 . Este valor segue aproximadamente o escalamento do produto resistência-área obtido para diferentes junções em [56], com valores de MR variando de 16% até 22 %. Dados experimentais representativos para a dependência da resistência de tunelamento com a voltagem são dados nas Refs. [46],[47],[50],[51]. Comparamos os resultados teóricos aqui obtidos com os resultados apresentados em [50] a $4.2^\circ K$ para uma junção magnética de tunelamento cuja composição é $Co/Al_2O_3/Co_{80}Fe_{20}$. Na Ref. [50] a MR para valor de voltagem

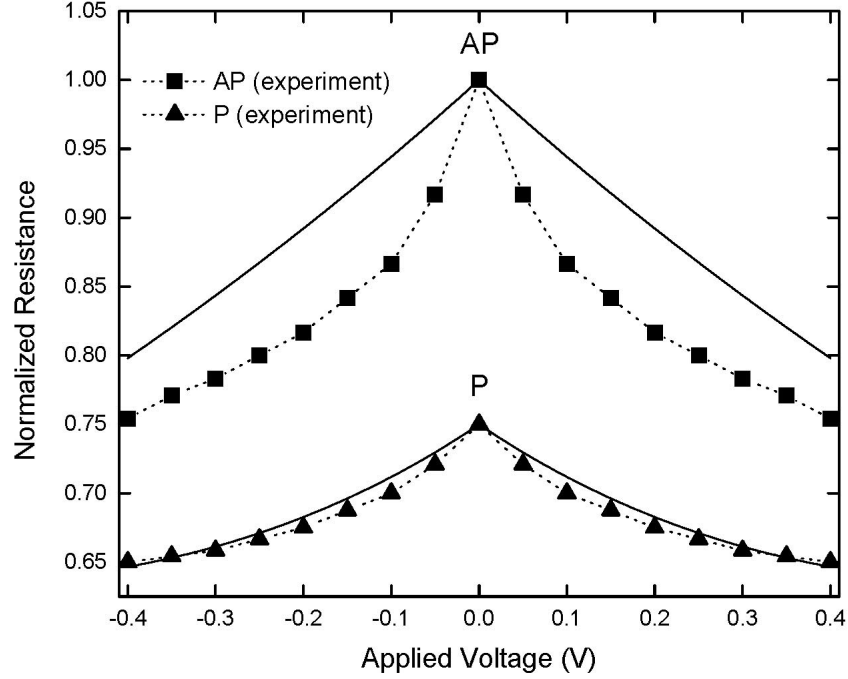


Figura 2.2: Resistência como função da voltagem aplicada para as configurações AP e P: os resultados experimentais a 4.2 K (linha pontilhada e símbolos) foram tomados da Ref. [50] e os resultados teóricos (linha sólida) foram calculados utilizando (2.13) e (2.14), com os seguintes parâmetros: $d = 1.0 \text{ nm}$, $\Phi_0 = 3.0 \text{ eV}$, $N_m^F = 1.0$ em unidades normalizadas, $r = 2.21$, $\lambda = 0.07$, $\beta = 2.7$, and $\eta = 0.1$. As resistências estão em unidades arbitrárias e normalizadas com respeito ao valor máximo que ocorre em $V = 0$.

nula é de aproximadamente 25%, resultando para o parâmetro r das equações (2.8) e (2.16) o valor $r = 2.21$.

Na Fig. 2.2 mostramos nossos resultados teóricos obtidos através das fórmulas (2.13) e (2.14). Os valores para os parâmetros de estrutura de bandas foram tomados como $\lambda = 0.07$ e $\beta = 2.7$, e o parâmetro de tunelamento $\eta = 0.1$. Tais valores referem-se à uma junção de tunelamento do tipo $Co/Al_2O_3/Co_{80}Fe_{20}$, da qual dispomos dos dados experimentais [50] para comparação com o modelo teórico aqui desenvolvido. O pequeno valor de λ mostra a situação em que a banda majoritária está saturada ao nível de Fermi, enquanto para a banda minoritária há uma variação

bastante grande [19]. Todavia, a inclinação da resistência perto de zero somente depende da razão da densidade de estados, na forma

$$\begin{aligned} R_{AP} &\approx R_0 \left(\frac{1}{2r} - \frac{1}{2r}x \right) , \\ R_P &\approx R_0 \left(\frac{1}{1+r^2} - \frac{1}{1+r^2}x \right) , \end{aligned} \tag{2.17}$$

onde $x = \frac{\eta d}{2\sqrt{\Phi_0}} |V|$ e $R_0 = \frac{\exp[1.024d\sqrt{\Phi_0}]}{\left(\frac{2\pi e^2}{\hbar}\right) [N_m^F]^2}$ é um fator de escala relacionado à resistência absoluta. É perceptível que uma anomalia de *zero bias* é obtida, mas um bom ajuste aos dados experimentais só é possível na configuração paralela assim como na Ref. [19]. O modelo teórico pode ser adequado para o melhor ajuste dos dados, utilizando maior número de termos na expansão em séries de Taylor de $W_{(C)}$, ou deixando as densidades de estados como parâmetros livres [46]. Porém, nós interpretamos a falha no ajuste dos dados para a configuração AP como uma pista que aponta para a contribuição de um mecanismo extra que afeta diferentemente as resistências P e AP. Os termos lineares em (2.17) se cancelam quando calculamos a MR, como mostrado na Fig. 2.3 juntamente com os dados experimentais.

Na próxima Seção o nosso argumento é levado adiante incluindo processos de espalhamento inelástico com mágnons no cálculo da MR.

2.1.2 Tunelamento inelástico assistido por mágnons

Agora não consideraremos somente os processos elásticos (preservando spin) mas contribuições inelásticas provenientes do espalhamento com mágnons para a corrente de tunelamento. Esta última é responsável por abrir canais de spin-flip, substancialmente reduzindo a MR próximo a zero. Mágnons são excitações de ondas de spin [40-44] interagindo com os elétrons, sendo emitidos ou absorvidos, produzindo mudança na energia dos elétrons e permitindo espalhamento com rotação de spin. Os elétrons acelerados pelo campo elétrico relaxam sua energia, produzindo excitações coletivas nas interfaces dos eletrodos magnéticos. Em baixa temperatura, apenas a emissão de mágnons é considerável. Nós analisamos o caso geral, descrevendo cada um dos oito processos associados com emissão e absorção de mágnons. Há também um termo extra, relacionando o overlap das funções de onda eletrônicas provenientes dos eletrodos, não envolvendo mudanças no número de mágnons. Este

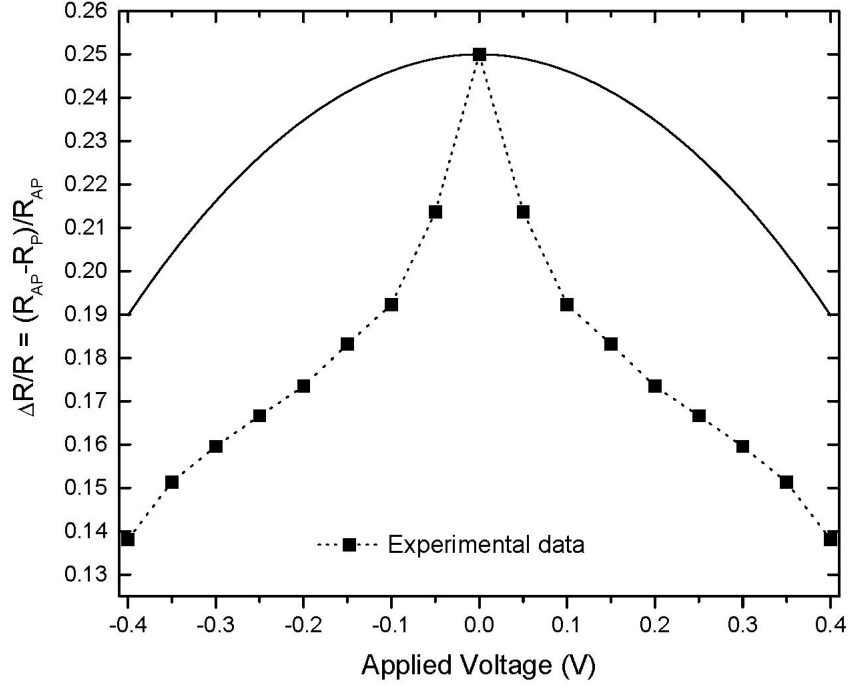


Figura 2.3: MR em função da voltagem aplicada. Parâmetros idênticos aos da Fig. 2.2.

termo é proporcional ao coeficiente de transmissão de troca $T^J = |t_{kk'q}^J|^2$, e o resultado é uma fórmula muito similar àquela encontrada para o tunelamento direto da seção anterior:

$$I_{(C)}^N = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\varepsilon (S_R^2 + S_L^2) T^J(\varepsilon, V, d, \Phi_0) W_{(C)}(\varepsilon, V) [f(\varepsilon - V) - f(\varepsilon)] .$$

Considerando agora o tunelamento eletrônico da esquerda para a direita com emissão de um mágnon na interface direita:

$$I_{(C)}^{E1} = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\omega \int d\varepsilon 2S_R T^J(\varepsilon, V, d, \Phi_0) \times \\ \times N_{\downarrow}^L(\varepsilon - V + \hbar\omega) N_{\uparrow}^R(\varepsilon) \rho_R^{mag}(\omega) [1 + f_{BE}(\omega)] f(\varepsilon - V + \hbar\omega) [1 - f(\varepsilon)] ,$$

sendo $\rho^{mag}(\omega)$ a densidade de mágnons na interface direita e f_{BE} a distribuição de Bose-Einstein:

$$f_{BE} = \frac{1}{\exp[\frac{\hbar\omega}{k_B T}] - 1}$$

Uma expressão idêntica aparece quando consideramos a emissão na interface esquerda, resultando em

$$I_{(C)}^{E1} = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\omega \int d\varepsilon 2(S_R \rho_R^{mag}(\omega) + S_L \rho_L^{mag}(\omega)) T^J(\varepsilon, V, d, \Phi_0) \times \quad (2.18)$$

$$\times N_{\downarrow}^L(\varepsilon - V + \hbar\omega) N_{\uparrow}^R(E) [1 + f_{BE}(\omega)] f(\varepsilon - V + \hbar\omega) [1 - f(\varepsilon)] .$$

Quando o tunelamento ocorre da direita para a esquerda com a emissão de um mágnon nós temos:

$$I_{(C)}^{E2} = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\omega \int d\varepsilon 2(S_R \rho_R^{mag}(\omega) + S_L \rho_L^{mag}(\omega)) T^J(\varepsilon, V, d, \Phi_0) \times \quad (2.19)$$

$$\times N_{\uparrow}^L(\varepsilon - V + \hbar\omega) N_{\downarrow}^R(\varepsilon) [1 + f_{BE}(\omega)] f(\varepsilon) [1 - f(\varepsilon - V + \hbar\omega)] .$$

Para a absorção de mágnons nós temos:

$$I_{(C)}^{A1} = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\omega \int d\varepsilon 2(S_R \rho_R^{mag}(\omega) + S_L \rho_L^{mag}(\omega)) T^J(\varepsilon, V, d, \Phi_0) \times \quad (2.20)$$

$$\times N_{\uparrow}^L(\varepsilon - V - \hbar\omega) N_{\downarrow}^R(\varepsilon) [f_{BE}(\omega)] f(\varepsilon - V - \hbar\omega) [1 - f(\varepsilon)]$$

e

$$I_{(C)}^{A2} = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\omega \int d\varepsilon 2(S_R \rho_R^{mag}(\omega) + S_L \rho_L^{mag}(\omega)) T^J(\varepsilon, V, d, \Phi_0) \times \quad (2.21)$$

$$\times N_{\downarrow}^L(\varepsilon - V - \hbar\omega) N_{\uparrow}^R(\varepsilon) [f_{BE}(\omega)] f(\varepsilon) [1 - f(\varepsilon - V - \hbar\omega)] .$$

A corrente total devida a troca de um mágnon é dada então por:

$$I_{mag} = I_{(C)}^N + I_{(C)}^{E1} - I_{(C)}^{E2} + I_{(C)}^{A1} - I_{(C)}^{A2} \quad (2.22)$$

Experimentos de espectroscopia de tunelamento inelástico resultando no espectro de mágnons são mostrados por Ando e colaboradores na Ref. [45]. Estes experimentos mostram uma amplitude muito pronunciada próximo a $12 - 20 \text{ mV}$ e um rápido decaimento para energias que se distanciam do pico, devido provavelmente a um

corte nas baixas energias, com densidades de estados de mágnons indo a zero para energias extremamente pequenas. Introduzindo este corte nas energias pequenas no espectro de mágnons e tomando o limite de baixas temperaturas $T \rightarrow 0^\circ K$, nós temos $f_{BE} \rightarrow 0$ para a distribuição de Bose-Einstein. Este limite exclui os termos de absorção em (2.22), deixando somente as contribuições de emissão para a corrente total:

$$\begin{aligned}
I_{mag} = & \frac{4\pi e}{\hbar} \int d\omega \int_0^{V-\hbar\omega} d\varepsilon \{ T^J(\varepsilon, V, d, \Phi_0) (S_R \rho_R^{mag}(\omega) + S_L \rho_L^{mag}(\omega)) \times \\
& \times N_{\downarrow}^L(\varepsilon - V - \hbar\omega) N_{\uparrow}^R(\varepsilon) \Theta(V - \hbar\omega) - \\
& - T^J(\varepsilon, V, d, \Phi_0) (S_R \rho_R^{mag}(\omega) + S_L \rho_L^{mag}(\omega)) \times \\
& \times N_{\downarrow}^R(\varepsilon) N_{\uparrow}^L(\varepsilon - V - \hbar\omega) \Theta(\hbar\omega - V) \} + I_{(C)}^N,
\end{aligned} \tag{2.23}$$

sendo $\Theta(x)$ a função de degrau de Heaviside.

Para a relação de dispersão de mágnons uma dependência simples parabólica e isotrópica pode ser utilizada, *i.e.*, $\hbar\omega = E_m(q/q_m)^2$, onde E_m se relaciona com a temperatura de Curie pela aproximação do campo médio $E_m = 3k_B T_C / (S+1)$, e q_m é o raio da primeira zona de Brillouin [50]. Em outras palavras E_m é a máxima energia dos mágnons (é o corte de altas energias)[45]. Considerando essa discussão, assumindo eletrodos idênticos, como de costume, e depois de simplificações matemáticas finalmente tem-se a condutância na forma:

$$G_C = G_C^d + G_C^{mag}$$

onde G_C^d é dado por (2.13) e (2.14), para os alinhamentos P e AP respectivamente e G_C^{mag} é mostrada abaixo:

$$G_P^{mag} = \frac{2\pi e^2}{\hbar} T^J(V) [2S^2 W_{(P)} + \Lambda(V) S W_{(AP)}] , \tag{2.24}$$

e

$$G_{AP}^{mag} = \frac{2\pi e^2}{\hbar} T^J(V) [2S^2 W_{(AP)} + 2\Lambda(V) S W_{(P)}] , \tag{2.25}$$

com $S = (S^R + S^L) / 2$ e

$$\Lambda(V) = \begin{cases} V/E_m & \text{for } V < E_m, \\ 2 - E_m/V & \text{for } V > E_m. \end{cases}$$

As funções $W_{(P)}$ e $W_{(AP)}$ em (2.24) e (2.25) foram calculadas próximo a voltagem nula, utilizando as fórmulas (2.9) e (2.10) respectivamente, substituindo ε por um

valor constante 0.1 eV . Nós acrescentamos que processos de um mágnon contribuem significativamente para a condutância somente para voltagens abaixo de 100 mV , e então consideramos $W_{(P)}$ e $W_{(AP)}$ como quase constantes dentro da integração. O coeficiente de tunelamento T^J , relacionado à troca, geralmente é de uma ou duas ordens de magnitude menores que o coeficiente de tunelamento direto. Excelente concordância entre nossa teoria e dados experimentais foi obtida utilizando o mesmo conjunto de parâmetros da Fig. 2.2 para a estrutura eletrônica e barreira de tunelamento, spin $S = 3/2$ (vale para o Ferro e a Ref. [50] também utilizou este valor) e $T^d/T^J = 37$ para a razão entre os coeficientes de tunelamento direto e indireto. A energia de corte dos mágnons E_m foi considerada 90 meV .

Fig. 3 (Dartora, JAP)

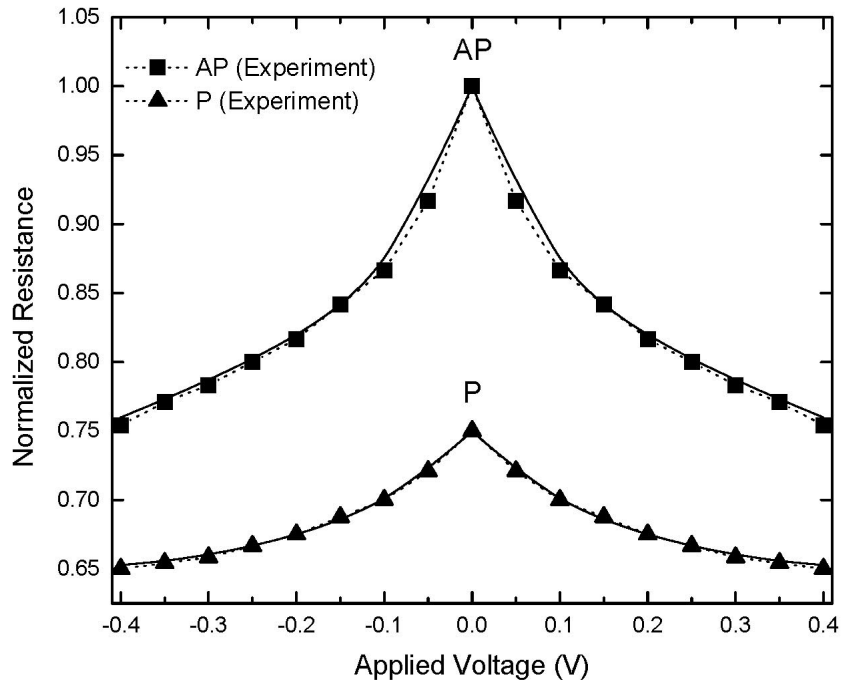


Figura 2.4: Resistência, em unidades arbitrárias, como função da voltagem aplicada para as configurações AP e P: resultados experimentais (linhas pontilhadas e símbolos) tomados de [50] e teóricos (linhas sólidas) incluindo tunelamento assistido por mágnons. Parâmetros idênticos aos da Fig. 2.2 com a inclusão de $S = 3/2$ e $T^d/T^J = 37$.

Os resultados são mostrados na Fig. 2.4 para a resistência normalizada e na

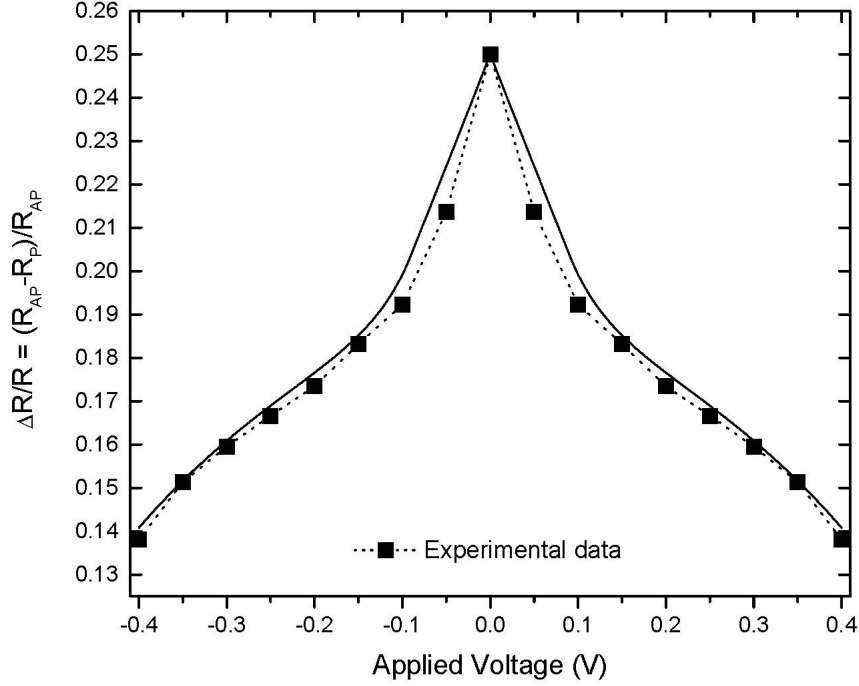


Figura 2.5: MR em função da voltagem aplicada. Parâmetros idênticos aos da Fig. 2.4.

Fig. 2.5 para a MR correspondente. Claramente a configuração AP é mais sensível à contribuição dos mágnons, já que a corrente inelástica para aquela configuração é multiplicada pelo produto $N_M^L N_M^R$, que é muito maior que os fatores $N_m^L N_M^R$ ou $N_M^L N_m^R$ que aparecem na corrente inelástica para a configuração P, com índices m e M referindo-se às bandas de spin *minoritárias* e *majoritárias* (compare a Fig. 2.2 e Fig. 2.4). Certamente, a pequena diferença entre teoria e dados experimentais vem do fato de estarmos utilizando um modelo simplificado para a estrutura de bandas e a relação de dispersão dos mágnons.

2.1.3 Alguns comentários sobre a análise da MTJ

Nós apresentamos acima um estudo consistente da dependência da GMR com a voltagem para junções de tunelamento ferromagnéticas. Incluímos os vários ingredientes necessários para uma explicação aceitável, baseada em primeiros princípios

e excitações coletivas: *a)* efeitos da voltagem na largura e altura da barreira; *b)* variação das densidades de estados com a voltagem, sendo diferente para cada banda de spin; e *c)* tunelamento assistido por espalhamento elétron-mágnon, que é dominante a baixas voltagens. Levar em conta todos esses efeitos é essencial para descrever completamente os resultados experimentais a baixas temperaturas para voltagens entre 0 e 500 *mV*. O papel de cada parâmetro na teoria foi bem esclarecido: alguns (d, Φ_0, η) determinam o valor absoluto da resistência a voltagem nula, ou seja, são fatores de escala; um outro conjunto relacionado à estrutura eletrônica (r, β, λ) regula o comportamento global da MR com a voltagem. Para os dados experimentais que selecionamos fizemos $\beta, \lambda > 0$, mas conforme mostrado em [19], este cenário não é único, e depende da estrutura de bandas; finalmente o comportamento próximo a zero com rápida queda na MR, é creditado ao processo inelástico com mágnons. As estimativas de $T^d/T^J \sim 40$ parecem estar mais de acordo com a realidade dos experimentos do que a estimativa dada na Ref. [50]. A análise detalhada dos coeficientes de transmissão será mostrada na seção seguinte.

Efeitos da temperatura serão discutidos mais adiante ainda neste trabalho. Conforme mencionado anteriormente, para incluir efeitos de temperatura, devemos levar em conta as correntes inelásticas com absorção de mágnons. A suavização térmica da distribuição de Fermi-Dirac para os elétrons tunelantes também é importante [47].

2.2 Estudo analítico do tunelamento na MTJ: coeficientes de transmissão dependentes de spin

Para a análise que segue, uma junção de tunelamento magnética típica é mostrada na Fig. 2.6. FM_I e FM_{II} são dois eletrodos ferromagnéticos onde podemos considerar a magnetização fortemente orientada ao longo da direção z , providenciada pelo alinhamento dos elétrons da banda d devido ao campo magnético externamente aplicado. As regiões TR_I e TR_{II} são também ferromagnéticas, entretanto são regiões de transição onde é permitida a rotação da magnetização. Essa rotação é devida a descontinuidade de meios, de ferromagnético para isolante (IS), possibilitando a existência de mágnons de superfície nas interfaces. As regiões de transição possibilitam a rotação de spin de elétrons de condução. IS é a barreira isolante, onde os elétrons de condução não sofrem qualquer interação de ordem magnética, i.e.,

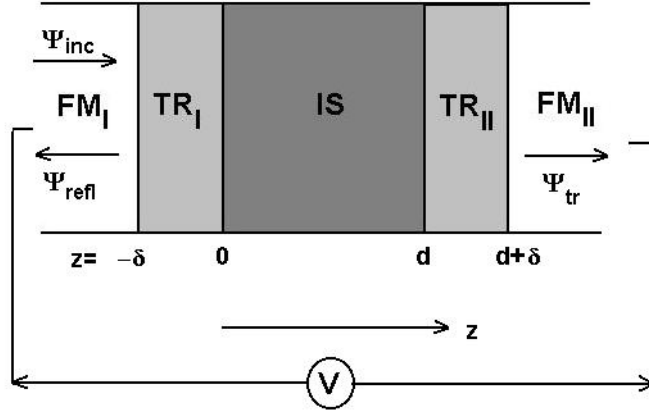


Figura 2.6: MTJ típica e suas regiões de transição ferromagnéticas TR_I e TR_{II} . FM_I e FM_{II} são eletrodos ferromagnéticos e IS é uma barreira isolante.

não há interação de spin dentro da barreira. Neste contexto, o Hamiltoniano total é decomposto em 5 parcelas, conforme mostrado abaixo:

$$H_1 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \Delta_1 \sigma_z \quad (-\infty \leq z \leq -\delta) \quad (2.26)$$

$$H_2 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - g \int d^3x' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \vec{\sigma} \cdot \mathbf{S}_1(\mathbf{x}') \quad (-\delta \leq z \leq 0) \quad (2.27)$$

$$H_3 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_0 \quad (0 \leq z \leq d) \quad (2.28)$$

$$H_4 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - g \int d^3x' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \vec{\sigma} \cdot \mathbf{S}_2(\mathbf{x}') \quad (d \leq z \leq d + \delta) \quad (2.29)$$

$$H_5 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \Delta_2 \sigma_z \quad (d + \delta \leq z \leq +\infty) \quad (2.30)$$

sendo $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ as matrizes spin de Pauli. Δ_1 e Δ_2 se referem à interação do elétron de condução com a magnetização devida aos elétrons d em cada eletrodo ferromagnético. $J(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ é a integral de exchange entre as bandas de elétrons s e d e g é uma constante de acoplamento entre o campo eletrônico e os campos de mágnons $\mathbf{S}_1$ e $\mathbf{S}_2$ nas regiões de transição. δ é a largura efetiva das regiões de transição, i.e., é a profundidade da região de interface, onde é permitida a rotação da magnetização. V_0 é a altura efetiva da barreira e d sua largura. A quantização do campo de mágnons segue novamente a transformação de Holstein-Primakoff [40-41]

e tem-se como resultado

$$\mathbf{S} = \sqrt{2S/N} \sum_{\mathbf{q}} (e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} b_{\mathbf{q}} \hat{e}_+ + e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} b_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{e}_-) + \left(S - 1/N \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\cdot\mathbf{x}} b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}'} \right) \hat{e}_z \quad (2.31)$$

sendo N o número de sítios na região de interface, S o valor de spin, $b_{\mathbf{q}}$ e $b_{\mathbf{q}}^\dagger$ já definidos anteriormente como operadores de aniquilação e destruição de mágnons com vetor de onda $\mathbf{q}$, respectivamente, $\hat{e}_+$ ($\hat{e}_-$) a helicidade positiva (negativa) do mágnon. Negligenciando processos de segunda ordem $N \gg n_{\mathbf{q}} = b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}}$ podemos escrever aproximadamente:

$$\mathbf{S} = \sqrt{2S/N} \sum_{\mathbf{q}} (e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} b_{\mathbf{q}} \hat{e}_+ + e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} b_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{e}_-) + S \hat{e}_z \quad (2.32)$$

O hamiltoniano magnético de mágnons, não perturbado, para as regiões de transição, é dado abaixo

$$H_{0M} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} \quad (2.33)$$

Os hamiltonianos (2.26) e (2.30) tem soluções idênticas em forma, sendo diagonais na base de σ_z . Para a forma geral $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \Delta \sigma_z$ as soluções da equação de Schroedinger $H\Psi = E\Psi$ são:

$$\Psi_{\uparrow} = e^{\pm i k_{\uparrow} z} \chi_{\uparrow} \quad (2.34)$$

$$\Psi_{\downarrow} = e^{\pm i k_{\downarrow} z} \chi_{\downarrow} \quad (2.35)$$

sendo $k_{\uparrow} = \sqrt{2m(E + \Delta)}/\hbar$, $k_{\downarrow} = \sqrt{2m(E - \Delta)}/\hbar$, χ_{σ} os spinores de Pauli

$$\chi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \chi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

e o sinal na exponencial deve ser escolhido adequadamente para um elétron com velocidade positiva ou negativa ao longo do eixo z .

Para os termos (2.27) e (2.29) também temos soluções idênticas, mas nesse caso a forma geral $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - g \int d^3x' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \vec{\sigma} \cdot \mathbf{S}(\mathbf{x}')$ é não diagonal na representação de σ_z . Considerando as matrizes de Pauli na forma $\vec{\sigma} = (\sigma^+, \sigma^-, \sigma^z)$, sendo $\sigma^{\pm} = \sigma^x \pm i\sigma^y$, a ação de $\sigma^{\pm}$ nos spinores de Pauli é bem conhecida, criando ou destruindo spin

$$\sigma^+ \chi_{\sigma} = \delta_{\sigma\downarrow} \chi_{\uparrow} \quad \text{e} \quad \sigma^- \chi_{\sigma} = \delta_{\sigma\uparrow} \chi_{\downarrow}$$

com $\delta_{\sigma\sigma'}$ a função delta de Kronecker. Reescrevendo o hamiltoniano nas regiões de transição em função do campo quantizado de mágnons temos

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - gS\Delta\sigma^z - g\sqrt{2S/N} \sum_{\mathbf{q}} \int d^3x' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \left(e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'} b_{\mathbf{q}}\sigma^- + e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'} b_{\mathbf{q}}^\dagger\sigma^+ \right)$$

Aqui faça-se a aproximação de que $\Delta = \int d^3x' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ é constante e $S^z = S\Delta$. Observando também que o produto dos vetores unitários circulares são $\hat{e}_+ \cdot \hat{e}_- = \hat{e}_- \cdot \hat{e}_+ = 1$, com os outros produtos identicamente nulos. Por esta razão o termo σ^+ do spin do elétron é combinado com o termo de criação de mágnons, significando que um mágnon com momentum angular negativo é criado enquanto o elétron vai do spin para baixo ao spin para cima, conservando o momento angular do sistema como um todo. Fazendo

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{q}) = \int d^3x' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'}$$

tem-se o hamiltoniano em uma forma simplificada:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - gS^z\sigma^z - g\sqrt{2S/N} \sum_{\mathbf{q}} (f(\mathbf{x}, \mathbf{q})b_{\mathbf{q}}\sigma^- + f^*(\mathbf{x}, \mathbf{q})b_{\mathbf{q}}^\dagger\sigma^+) \quad (2.37)$$

Agora calculamos a função de onda do elétron através da teoria de perturbações, sendo a perturbação providenciada pelo campo de mágnons:

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - gS^z\sigma^z \quad (2.38)$$

$$H_I = -g\sqrt{2S/N} \sum_{\mathbf{q}} (f(\mathbf{x}, \mathbf{q})b_{\mathbf{q}}\sigma^- + f^*(\mathbf{x}, \mathbf{q})b_{\mathbf{q}}^\dagger\sigma^+) \quad (2.39)$$

O hamiltoniano de interação (2.39) produz transição entre os estados de mágnons com diferentes números de mágnons no espaço de Fock. A solução completa é um produto tensorial dos estados de mágnons com a função de onda do elétron. Os auto-estados que fazem ambos o hamiltoniano de mágnons (2.33) e (2.38) diagonais são $\{|\mathbf{k}, \sigma > \otimes |n_{\mathbf{q}} >\} = \{|\mathbf{k}, \sigma; n_{\mathbf{q}} >\}$. Entretanto estamos interessados apenas em obter as funções de onda de elétrons e os estados de números de mágnons serão omitidos, i.e., podemos realizar uma média através da matriz densidade de mágnons. A teoria de perturbações em primeira ordem fornece

$$|\Psi^+ > = |\Psi_\uparrow > + \frac{\langle \Psi_\downarrow | H_I | \Psi_\uparrow >}{E_\uparrow - E_\downarrow} |\Psi_\downarrow >$$

$$|\Psi^- \rangle = |\Psi_\downarrow \rangle + \frac{\langle \Psi_\uparrow | H_I | \Psi_\downarrow \rangle}{E_\downarrow - E_\uparrow} |\Psi_\uparrow \rangle$$

sendo $E_\uparrow - E_\downarrow = -2gS^z = -2g\Delta S$. Explicitamente temos:

$$|\Psi^+ \rangle = |\Psi_\uparrow \rangle + \frac{f(\mathbf{q})\sqrt{n_{\mathbf{q}}}}{\sqrt{2S\Delta N}} |\Psi_\downarrow \rangle \quad (2.40)$$

$$|\Psi^- \rangle = |\Psi_\downarrow \rangle - \frac{f^*(\mathbf{q})\sqrt{n_{\mathbf{q}}+1}}{\sqrt{2S\Delta N}} |\Psi_\uparrow \rangle \quad (2.41)$$

As funções (2.40) e (2.41) devem ser renormalizadas e são soluções válidas para (2.27) e (2.29). Para baixas temperaturas $n_{\mathbf{q}} \rightarrow 0$ e temos aproximadamente:

$$|\Psi^+ \rangle = |\Psi_\uparrow \rangle \quad (2.42)$$

$$|\Psi^- \rangle = |\Psi_\downarrow \rangle - \frac{f^*(\mathbf{q})}{\sqrt{2S\Delta N}} |\Psi_\uparrow \rangle \quad (2.43)$$

o que significa que o estado de spin para cima ($|\Psi_\uparrow \rangle$) não interage com o campo de mágnons enquanto o estado de spin para baixo ($|\Psi_\downarrow \rangle$) interage com o campo de mágnons pelo processo de emissão. Notemos portanto uma certa assimetria quanto a temperatura é o zero absoluto. Para temperaturas mais altas um número apreciável de mágnons se faz presente e tanto a emissão quanto a absorção de mágnons é permitida e as funções de onda são reescritas como segue

$$|\Psi^+ \rangle = \sin \alpha |\Psi_\uparrow \rangle + \cos \alpha e^{-i\phi} |\Psi_\downarrow \rangle \quad (2.44)$$

$$|\Psi^- \rangle = \cos \alpha |\Psi_\uparrow \rangle - \sin \alpha e^{-i\phi} |\Psi_\downarrow \rangle \quad (2.45)$$

Este caso tem sido ainda objeto de estudos, e podemos representar uma magnetização efetiva através de um ângulo α . Finalmente, o hamiltoniano de barreira (2.28) não tem interações de spin, sendo diagonal na base de σ_z e a solução mais simples escrita na forma abaixo:

$$\Psi = (A\chi_\uparrow + B\chi_\downarrow)e^{\gamma z} + (C\chi_\uparrow + D\chi_\downarrow)e^{-\gamma z} \quad (2.46)$$

onde $\gamma = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$, $V_0 > E$.

Agora que temos as soluções gerais para os hamiltonianos (2.26) até (2.30), cada um deles representando uma das 5 regiões distintas, FM_I , TR_I , IS , TR_{II} e FM_{II} , necessitamos fazer as soluções Ψ e $d\Psi/dz$ contínuas nas interfaces. Isto será feito a seguir.

2.2.1 Obtenção dos coeficientes de tunelamento: a dependência com o spin

Para determinar os coeficientes de transmissão dependentes do spin para a estrutura *FM-IS-FM* o método das matrizes de transferência é o mais usual, considerando que na região *FM_I* a função de onda de elétron é composta por uma parte incidente e uma parte refletida $\Psi_1 = \Psi_{inc} + \Psi_{refl}$, obedecendo as formas (2.34) e (2.35):

$$\Psi_1 = (I_{\uparrow}e^{ik_{\uparrow}z} + R_{\uparrow}e^{-ik_{\uparrow}z})\chi_{\uparrow} + (I_{\downarrow}e^{ik_{\downarrow}z} + R_{\downarrow}e^{-ik_{\downarrow}z})\chi_{\downarrow} \quad (2.47)$$

$I_{\uparrow}$ ($I_{\downarrow}$) representam as amplitudes de uma onda incidente com spin para cima (para baixo) e $R_{\uparrow}$ ($R_{\downarrow}$), a amplitude das ondas refletidas com spin para cima (para baixo). A função de onda entre os dois ferromagnetos semi-infinitos é facilmente obtida e não será mostrada. A onda transmitida ao eletrodo *FM_{II}*, propagando para frente no eixo *z*-axis é escrita abaixo:

$$\Psi_t = T_{\uparrow}e^{ik'_{\uparrow}z}\chi_{\uparrow} + T_{\downarrow}e^{ik'_{\downarrow}z}\chi_{\downarrow} \quad (2.48)$$

sendo $T_{\uparrow}$ e $T_{\downarrow}$ as amplitudes de transmissão com spin para cima e spin para baixo, respectivamente. A equação de matriz de transferência é obtida fazendo a imposição de continuidade para as funções Ψ e suas derivadas primeiras $d\Psi/dz$ nas interfaces, e este procedimento resulta em

$$\begin{pmatrix} I_{\uparrow} \\ R_{\uparrow} \\ I_{\downarrow} \\ R_{\downarrow} \end{pmatrix} = M_1 M_2 M_3 M_4 M_5 \begin{pmatrix} T_{\uparrow} \\ 0 \\ T_{\downarrow} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.49)$$

sendo as matrizes M_j , $j = 1, 2, \dots, 5$ definidas como segue:

$$M_1 = \begin{pmatrix} M_{1\uparrow}^{-1} & 0 \\ 0 & M_{1\downarrow}^{-1} \end{pmatrix} \quad (2.50)$$

sendo 0 uma matriz nula 2×2 e:

$$M_{1\uparrow} = \begin{pmatrix} e^{-ik_{\uparrow}\delta} & e^{ik_{\uparrow}\delta} \\ ik_{\uparrow}e^{-ik_{\uparrow}\delta} & -ik_{\uparrow}e^{ik_{\uparrow}\delta} \end{pmatrix} \quad M_{1\downarrow} = \begin{pmatrix} e^{-ik_{\downarrow}\delta} & e^{ik_{\downarrow}\delta} \\ ik_{\downarrow}e^{-ik_{\downarrow}\delta} & -ik_{\downarrow}e^{ik_{\downarrow}\delta} \end{pmatrix}$$

$$M_2 = \begin{pmatrix} b_1c_1A + b_2c_3B & b_1c_2A + b_2c_4B \\ b_3c_1A + b_4c_3B & b_3c_2A + b_4c_4B \end{pmatrix} \quad (2.51)$$

com

$$A = \begin{pmatrix} \cos(k_+\delta) & -(k_+)^{-1} \sin(k_+\delta) \\ k_+ \sin(k_+\delta) & \cos(k_+\delta) \end{pmatrix} \text{ and } B = \begin{pmatrix} \cos(k_-\delta) & -(k_-)^{-1} \sin(k_-\delta) \\ k_- \sin(k_-\delta) & \cos(k_-\delta) \end{pmatrix}$$

$$M_3 = \begin{pmatrix} C & 0 \\ 0 & C \end{pmatrix} \text{ sendo } C = \begin{pmatrix} \cosh(\gamma d) & -\gamma^{-1} \sinh(\gamma d) \\ -\gamma \sinh(\gamma d) & \cosh(\gamma d) \end{pmatrix} \quad (2.52)$$

$$M_4 = \begin{pmatrix} b_1 c_1 A' + b_2 c_3 B' & b_1 c_2 A' + b_2 c_4 B' \\ b_3 c_1 A' + b_4 c_3 B' & b_3 c_2 A' + b_4 c_4 B' \end{pmatrix} \quad (2.53)$$

sendo

$$A = \begin{pmatrix} \cos(k'_+\delta) & -(k'_+)^{-1} \sin(k'_+\delta) \\ k'_+ \sin(k'_+\delta) & \cos(k'_+\delta) \end{pmatrix} \text{ e } B = \begin{pmatrix} \cos(k'_-\delta) & -(k'_-)^{-1} \sin(k'_-\delta) \\ k'_- \sin(k'_-\delta) & \cos(k'_-\delta) \end{pmatrix}$$

$$M_5 = \begin{pmatrix} M_{5\uparrow} & 0 \\ 0 & M_{5\downarrow} \end{pmatrix} \quad (2.54)$$

$$M_{5\uparrow} = \begin{pmatrix} e^{ik'_\uparrow(d+\delta)} & 0 \\ ik'_\uparrow e^{ik'_\uparrow(d+\delta)} & 0 \end{pmatrix} \quad M_{5\downarrow} = \begin{pmatrix} e^{ik'_\downarrow(d+\delta)} & 0 \\ ik'_\downarrow e^{ik'_\downarrow(d+\delta)} & 0 \end{pmatrix}$$

Os parâmetros b_i e c_i são coeficientes dependentes dos mágnons:

$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{1}{N^+} & b_2 &= \frac{-f^*(\mathbf{q})\sqrt{n_{\mathbf{q}}+1}}{N^-\sqrt{2N|\Delta|S}} \\ b_3 &= \frac{f(\mathbf{q})\sqrt{n_{\mathbf{q}}}}{N^+\sqrt{2N|\Delta|S}} & b_4 &= \frac{1}{N^-} \end{aligned} \quad (2.55)$$

$$\begin{aligned} c_1 &= N^+ \left(1 + \frac{|f(\mathbf{q})|^2 \sqrt{n_{\mathbf{q}}(n_{\mathbf{q}}+1)}}{2N|\Delta|S} \right)^{-1} & c_2 &= N^+ \left(\frac{\sqrt{2N|\Delta|S}}{f^*(\mathbf{q})\sqrt{n_{\mathbf{q}}+1}} + \frac{f(\mathbf{q})\sqrt{n_{\mathbf{q}}}}{\sqrt{2N|\Delta|S}} \right)^{-1} \\ c_3 &= N^- \left(\frac{f^*(\mathbf{q})\sqrt{n_{\mathbf{q}}+1}}{\sqrt{2N|\Delta|S}} + \frac{\sqrt{2N|\Delta|S}}{f(\mathbf{q})\sqrt{n_{\mathbf{q}}}} \right)^{-1} & c_4 &= N^- \left(1 + \frac{|f(\mathbf{q})|^2 \sqrt{n_{\mathbf{q}}(n_{\mathbf{q}}+1)}}{2N|\Delta|S} \right)^{-1} \end{aligned} \quad (2.56)$$

com $N^+ = \sqrt{1 + n_{\mathbf{q}}|f(\mathbf{q})|^2/(2N|\Delta|S)}$ e $N^- = \sqrt{1 + (n_{\mathbf{q}} + 1)|f(\mathbf{q})|^2/(2N|\Delta|S)}$.

A equação (2.49) permite-nos determinar $T_\uparrow$ e $T_\downarrow$ diretamente em termos das amplitudes incidentes $I_\uparrow$ e $I_\downarrow$ e dos elementos da matriz $M = [M_{ij}]$. É fácil mostrar que

$$T_\uparrow = \frac{M_{33}I_\uparrow - M_{13}I_\downarrow}{M_{11}M_{33} - M_{13}M_{31}} \quad (2.57)$$

$$T_\downarrow = \frac{M_{11}I_\downarrow - M_{31}I_\uparrow}{M_{11}M_{33} - M_{13}M_{31}} \quad (2.58)$$

mas agora nós iremos definir coeficientes mais apropriados considerando que a onda incidente é somente spin para cima ou somente spin para baixo o que significa que $I_{\uparrow} \neq 0$ e $I_{\downarrow} = 0$ no caso de incidência com spin para cima e $I_{\uparrow} = 0$ e $I_{\downarrow} \neq 0$ em caso contrário. Isto define novas amplitudes, conforme segue:

$$T_{\uparrow\uparrow} = \frac{T_{\uparrow}}{I_{\uparrow}} = \frac{M_{33}}{M_{11}M_{33} - M_{13}M_{31}} \quad (2.59)$$

$$T_{\uparrow\downarrow} = \frac{T_{\downarrow}}{I_{\uparrow}} = \frac{-M_{31}}{M_{11}M_{33} - M_{13}M_{31}} \quad (2.60)$$

$$T_{\downarrow\uparrow} = \frac{T_{\uparrow}}{I_{\downarrow}} = \frac{-M_{13}}{M_{11}M_{33} - M_{13}M_{31}} \quad (2.61)$$

$$T_{\downarrow\downarrow} = \frac{T_{\downarrow}}{I_{\downarrow}} = \frac{M_{11}}{M_{11}M_{33} - M_{13}M_{31}} \quad (2.62)$$

O significado dos coeficientes (2.59) até (2.62) é dado da seguinte maneira: $T_{\uparrow\uparrow}$ é a amplitude de probabilidade para um elétron incidente com spin para cima ser transmitido através da barreira sem spin flip, enquanto que $T_{\uparrow\downarrow}$ é amplitude de probabilidade de um elétron com spin para cima seja transmitido para o lado direito rodando o spin. Analogamente segue a explicação para um elétron incidente com spin para baixo sendo as amplitudes dadas por $T_{\downarrow\uparrow}$ para girar o spin e $T_{\downarrow\downarrow}$ conservando o spin. As expressões exatas resultantes do que foi discutido acima são na verdade extremamente complicadas. Ao invés de mostrá-las nós iremos proceder fazendo a consideração de baixas temperaturas, onde $n_{\mathbf{q}} \rightarrow 0$ e simplificações são possíveis. Neste caso $b_3 = c_2 = c_3 = 0$, $b_1c_1 = b_4c_4 = 1$, $b_2c_4 = \alpha = -f^*(\mathbf{q})/\sqrt{2N|\Delta|S}$ e as matrizes M_2 e M_4 simplificam para as formas abaixo:

$$M_2 = \begin{pmatrix} A & \alpha B \\ 0 & B \end{pmatrix} \quad M_4 = \begin{pmatrix} A' & \alpha B' \\ 0 & B' \end{pmatrix} \quad (2.63)$$

Se consideramos mágnons de superfície apenas a dimensão δ deve ser pequena em comparação com a largura efetiva da barreira, e outra aproximação é possível, expandindo as matrizes A , A' , B , B' em $k\delta \rightarrow 0$. Como resultado final de $M = M_1M_2M_3M_4M_5$ temos:

$$M = \begin{pmatrix} M_{1\uparrow}^{-1}CM_{5\uparrow} & 2\alpha M_{1\uparrow}^{-1}CM_{5\downarrow} \\ 0 & M_{1\downarrow}^{-1}CM_{5\downarrow} \end{pmatrix} + \delta \begin{pmatrix} M_AC + CM_{A'} & \alpha(M_A + M_{B'})C + 2\alpha CM_{B'} \\ 0 & M_B CM_{B'} \end{pmatrix} + O(\delta^2) \quad (2.64)$$

sendo M_A , $M_{A'}$, M_B e $M_{B'}$ as matrizes residuais de A , A' , B e B' , respectivamente, devido à aproximação $k\delta \rightarrow 0$, e escritas explicitamente abaixo:

$$M_A = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ (k_+)^2 & 0 \end{pmatrix} \quad M_B = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ (k_-)^2 & 0 \end{pmatrix}$$

$$M_{A'} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ (k'_+)^2 & 0 \end{pmatrix} \quad M_{B'} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ (k'_-)^2 & 0 \end{pmatrix}$$

Tomando os primeiros termos, i.e., negligenciando o termo em δ nos deixa com:

$$M_{11} = \frac{1}{2}e^{ik'_\uparrow} \left[\left(1 + \frac{k'_\uparrow}{k_\uparrow}\right) \cosh(\gamma d) + i \left(\frac{\gamma}{k_\uparrow} - \frac{k'_\uparrow}{\gamma}\right) \sinh(\gamma d) \right]$$

$$M_{13} = \alpha e^{ik'_\downarrow} \left[\left(1 + \frac{k'_\downarrow}{k_\uparrow}\right) \cosh(\gamma d) + i \left(\frac{\gamma}{k_\uparrow} - \frac{k'_\downarrow}{\gamma}\right) \sinh(\gamma d) \right]$$

$$M_{31} = 0$$

$$M_{33} = \frac{1}{2}e^{ik'_\downarrow} \left[\left(1 + \frac{k'_\downarrow}{k_\downarrow}\right) \cosh(\gamma d) + i \left(\frac{\gamma}{k_\downarrow} - \frac{k'_\downarrow}{\gamma}\right) \sinh(\gamma d) \right]$$

As amplitudes de transmissão podem ser agora calculados através das fórmulas (2.59) a (2.62). O resultado para as probabilidades de transmissão são mostrados abaixo:

$$|T_{\uparrow\uparrow}|^2 = \frac{4}{\left(1 + \frac{k'^2_\uparrow}{k^2_\uparrow}\right)^2 + \left(\frac{(k^2_\uparrow + \gamma^2)(k'^2_\uparrow + \gamma^2)}{k^2_\uparrow \gamma^2}\right) \sinh^2(\gamma d)} \quad (2.65)$$

$$|T_{\uparrow\downarrow}|^2 = 0 \quad (2.66)$$

$$|T_{\downarrow\uparrow}|^2 = \frac{|f(\mathbf{q})|^2 |T_{\uparrow\uparrow}|^2 |T_{\downarrow\downarrow}|^2}{2N|\Delta|S} \left(\left(1 + \frac{k'^2_\downarrow}{k^2_\uparrow}\right)^2 + \left(\frac{(k^2_\uparrow + \gamma^2)(k'^2_\downarrow + \gamma^2)}{k^2_\uparrow \gamma^2}\right) \sinh^2(\gamma d) \right) \quad (2.67)$$

$$|T_{\downarrow\downarrow}|^2 = \frac{4}{\left(1 + \frac{k'^2_\downarrow}{k^2_\downarrow}\right)^2 + \left(\frac{(k^2_\downarrow + \gamma^2)(k'^2_\downarrow + \gamma^2)}{k^2_\downarrow \gamma^2}\right) \sinh^2(\gamma d)} \quad (2.68)$$

As equações acima estão em absoluta concordância com o que é esperado intuitivamente. Em baixas temperaturas, somente emissão de mágnons é possível, e por esta razão $|T_{\uparrow\downarrow}|^2 = 0$ é requerido. A probabilidade de tunelamento direto, sem girar o spin, é aquela obtida para uma partícula de spin 0 [2] em uma barreira assimétrica enquanto que para o tunelamento assistido por mágnons, esta é proporcional a uma função dependendo do acoplamento dos mágnons com elétrons $|f(\mathbf{q})|^2/2N|\Delta|S$. Considerando-se os termos de ordem maior em δ a probabilidade de transmissão com

spin-flip será aumentada. Para voltagens baixas, podemos aproximar as expressões acima com $\gamma d \gg 1$ fornecendo:

$$|T_{\uparrow\uparrow}|^2 = \frac{16k_{\uparrow}^2\gamma^2}{(k_{\uparrow}^2 + \gamma^2)(k_{\uparrow}'^2 + \gamma^2)} \exp(-2\gamma d), \quad (2.69)$$

$$|T_{\uparrow\downarrow}|^2 = 0, \quad (2.70)$$

$$|T_{\downarrow\uparrow}|^2 = \frac{64|f(\mathbf{q})|^2}{2N|\Delta|S} \frac{k_{\downarrow}^2\gamma^2}{(k_{\downarrow}^2 + \gamma^2)(k_{\downarrow}'^2 + \gamma^2)} \exp(-2\gamma d), \quad (2.71)$$

$$|T_{\downarrow\downarrow}|^2 = \frac{16k_{\downarrow}^2\gamma^2}{(k_{\downarrow}^2 + \gamma^2)(k_{\downarrow}'^2 + \gamma^2)} \exp(-2\gamma d). \quad (2.72)$$

Facilmente podemos notar que os coeficientes de transmissão acima são produtos do coeficiente de tunelamento para uma partícula de spin zero, com uma função de acoplamento. Os termos corretivos podem ser encontrados resolvendo a matriz M diretamente sem nenhum tipo de aproximação. Podemos intuitivamente construir os coeficientes de transmissão para temperaturas mais altas, em primeira aproximação, onde o número de mágnons não é zero e a absorção pode ocorrer:

$$|T_{\uparrow\uparrow}|^2 = \frac{16k_{\uparrow}^2\gamma^2}{(k_{\uparrow}^2 + \gamma^2)(k_{\uparrow}'^2 + \gamma^2)} \exp(-2\gamma d), \quad (2.73)$$

$$|T_{\uparrow\downarrow}|^2 = \frac{4|f(\mathbf{q})|^2 n_{\mathbf{q}}}{2N|\Delta|S} \frac{16k_{\uparrow}^2\gamma^2}{(k_{\uparrow}^2 + \gamma^2)(k_{\uparrow}'^2 + \gamma^2)} \exp(-2\gamma d), \quad (2.74)$$

$$|T_{\downarrow\uparrow}|^2 = \frac{4|f(\mathbf{q})|^2 (n_{\mathbf{q}} + 1)}{2N|\Delta|S} \frac{16k_{\downarrow}^2\gamma^2}{(k_{\downarrow}^2 + \gamma^2)(k_{\downarrow}'^2 + \gamma^2)} \exp(-2\gamma d), \quad (2.75)$$

$$|T_{\downarrow\downarrow}|^2 = \frac{16k_{\downarrow}^2\gamma^2}{(k_{\downarrow}^2 + \gamma^2)(k_{\downarrow}'^2 + \gamma^2)} \exp(-2\gamma d). \quad (2.76)$$

De fato, com o aumento de temperatura, algumas correções aos coeficientes são necessárias, mas o resultado acima pode explicar as propriedades principais de transporte para uma junção de tunelamento magnética com boa precisão, e aqui justificamos os coeficientes de transmissão já utilizados anteriormente neste trabalho. Nós devemos lembrar que $f(\mathbf{q})$ é também função de $\mathbf{k}$ e $\mathbf{k}'$, pesada pela integral de troca $J(x, x')$, a omissão é apenas por questão de conveniência. Outro modo de entender as fórmulas acima obtidas é escrever diagramas de Feynman para os processos mas estes não serão mostrados aqui. O elétron interage com o campo de mágnons e com a barreira. Em ordem zero em δ , o elétron interage com mágnons de superfície

antes de ser transmitido ou é transmitido diretamente. A interação entre elétrons e o campo de mágnons é representado por uma função de acoplamento, enquanto que para o processo de transmissão direta este acoplamento é unitário. Nos processos envolvendo mágnons o momento total do sistema elétron-mágnon deve ser conservado. A interação com a barreira é sempre a mesma que para uma partícula de spin zero, sendo o acoplamento exatamente igual ao coeficiente de transmissão com o momentum incidente e transmitido apropriados. Outra importante observação tem que ser feita agora: somente a componente z do momentum total do elétron incidente e transmitido deve ser considerado. Devido à quantização do momentum transversal, a energia total do elétron deve ser pesada por alguma constante η fazendo $E_z = \eta E$.

2.2.2 Propriedades de Transporte da MTJ: O efeito da temperatura

Agora que demonstramos a obtenção dos coeficientes de transmissão dependentes de spin para uma MTJ típica, as principais características do transporte, como a condutância serão obtidas tomando em conta o efeito da temperatura. A corrente total que passa através da junção é simplesmente

$$I = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\epsilon \sum_{\sigma\sigma'} \left(T_{\sigma\sigma'}(\epsilon) N_{\sigma}^L(\epsilon - V) N_{\sigma'}^R(\epsilon) f_L(\epsilon - V) [1 - f_R(\epsilon)] - T_{\sigma'\sigma}(\epsilon) N_{\sigma}^L(\epsilon - V) N_{\sigma'}^R(\epsilon) f_R(\epsilon) [1 - f_L(\epsilon - V)] \right), \quad (2.77)$$

sendo $\epsilon = E - E_F$, E_F a energia de Fermi, $N_{\sigma}^{\alpha}(\epsilon)$ as densidades de estados de elétrons com spin σ , $\alpha = (R, L)$ denotam o eletrodo, e $f(\epsilon) = (\exp[\frac{\epsilon}{k_B T}] + 1)^{-1}$ é a distribuição de Fermi-Dirac, k_B a constante de Boltzman e T a temperatura absoluta. Novamente utilizaremos $R = G^{-1}$, onde $G = dI/dV$. A magnetorresistência é simplesmente dada por $\frac{\Delta R}{R} = (R_{AP} - R_P)/R_{AP}$.

No regime de baixas voltagens, utilizamos a mesma expansão das densidades de estados em séries de Taylor próximo ao nível de Fermi, como anteriormente neste Capítulo, e tomamos os parâmetros (2.8) em consideração, sendo mostrados novamente abaixo

$$\begin{aligned} r &\equiv \left(\frac{N_M}{N_m} \right)_F, \\ \lambda &\equiv \left(\frac{dN_M/dE}{dN_m/dE} \right)_F, \\ \beta &\equiv \left(\frac{1}{N_m} \frac{dN_m}{dE} \right)_F, \end{aligned}$$

onde todas as quantidades calculadas ao nível de Fermi. A corrente total (2.77) pode ser decomposta em um termo conservando spin, que é a corrente direta, e outro envolvendo espalhamento por mágnons. A corrente direta, se pudermos aproximar as probabilidades de tunelamento em ambos os sentidos como sendo idênticas, é dada aproximadamente por

$$I = \frac{2\pi e}{\hbar} \int_0^V d\epsilon \left(T_{\uparrow\uparrow}(\epsilon) N_{\uparrow}^L(\epsilon - V) N_{\uparrow}^R(\epsilon) + T_{\downarrow\downarrow}(\epsilon) N_{\downarrow}^L(\epsilon - V) N_{\downarrow}^R(\epsilon) \right). \quad (2.78)$$

O coeficiente de transmissão é escrito como em (2.73) e (2.76). Podemos substituir $k_\sigma = \sqrt{2me(\epsilon - \Delta_\sigma)/\hbar^2}$ e $\gamma = \sqrt{2me(V_0 - \epsilon)/\hbar^2}$ simplificando para o caso $V_0 \gg \Delta_\sigma$:

$$T_{\uparrow\uparrow} = \frac{16(\Delta_{\uparrow} + \eta\epsilon)}{V_0(1 + \frac{\Delta_{\uparrow} + \Delta'_{\uparrow}}{V_0})} \exp[-1.024d\sqrt{V_0}] \exp[\frac{\eta\epsilon d}{\sqrt{V_0}}],$$

$$T_{\downarrow\downarrow} = \frac{16(\Delta_{\downarrow} + \eta\epsilon)}{V_0(1 + \frac{\Delta_{\downarrow} + \Delta'_{\downarrow}}{V_0})} \exp[-1.024d\sqrt{V_0}] \exp[\frac{\eta\epsilon d}{\sqrt{V_0}}],$$

com a largura d em Angstroms e energias em eV . Conforme discutido anteriormente se $T_{\uparrow\uparrow} = T_{\downarrow\downarrow}$, então podemos calcular o parâmetro r através do valor experimental de $\Delta R/R$ a voltagem nula

$$r = \frac{1}{1 - \frac{\Delta R}{R}|_{V=0}} + \sqrt{\frac{1}{(1 - \frac{\Delta R}{R}|_{V=0})^2} - 1}, \quad (2.79)$$

não dependendo dos parâmetros da barreira. Tal expressão precisa ser modificada ligeiramente se $T_{\uparrow\uparrow} \neq T_{\downarrow\downarrow}$ para a expressão mostrada abaixo:

$$r \approx \frac{1 + \Delta_{\downarrow}/\Delta_{\uparrow}}{2(1 - \frac{\Delta R}{R}|_{V=0})} + \sqrt{\frac{(1 + \Delta_{\downarrow}/\Delta_{\uparrow})^2}{(1 - \frac{\Delta R}{R}|_{V=0})^2} - \frac{\Delta_{\downarrow}}{\Delta_{\uparrow}}}. \quad (2.80)$$

Consideremos entretanto que $\Delta_{\downarrow}/\Delta_{\uparrow} \approx 1$ e o resultado final para a condutância direta em $T = 0^\circ$ K serão as expressões (2.13) e (2.14) para a configuração paralela e anti-paralela, respectivamente.

Avaliando agora o tunelamento assistido por mágnons, podemos explicar a anomalia de *zero bias* e o efeito da temperatura. Os coeficientes de tunelamento indireto são dados por:

$$T_{\uparrow\downarrow} = \rho(\omega, \epsilon) \frac{n(\omega)}{N|\Delta|S} \frac{16(\Delta_{\uparrow} + \eta\epsilon)}{V_0(1 + \frac{\Delta_{\uparrow} + \Delta'_{\downarrow}}{V_0})} \exp[-1.024d\sqrt{V_0}] \exp[\frac{\eta\epsilon d}{\sqrt{V_0}}],$$

$$T_{\downarrow\uparrow} = \rho(\omega, \epsilon) \frac{n(\omega) + 1}{N|\Delta|S} \frac{16(\Delta_{\downarrow} + \eta\epsilon)}{V_0(1 + \frac{\Delta_{\downarrow} + \Delta'_{\downarrow}}{V_0})} \exp[-1.024d\sqrt{V_0}] \exp[\frac{\eta\epsilon d}{\sqrt{V_0}}],$$

sendo $\rho(\omega, \epsilon) = 2|f(\omega, \epsilon)|^2 g(\omega)$ a densidade de estados de mágnons, $g(\omega)$ vem da Jacobiana da transformação na integral da variável $\mathbf{q}$ para a variável ω , $n(\omega) = (\exp[\frac{\omega}{k_B T}] - 1)^{-1}$ é o número de mágnons, dado pela distribuição de Bose-Einstein, incluindo aí efeito de temperatura. As correntes de emissão e absorção de mágnons são escritas como segue:

$$I_{em} = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\epsilon \int d\omega \left(T_{\downarrow\uparrow'}(\epsilon) N_{\downarrow}^L(\epsilon - V + \omega) N_{\uparrow}^R(\epsilon) f_L(\epsilon - V + \omega) [1 - f_R(\epsilon)] - \right. \\ \left. - T_{\downarrow'\uparrow}(\epsilon) N_{\uparrow}^L(\epsilon - V + \omega) N_{\downarrow}^R(\epsilon) f_R(\epsilon + V - \omega) [1 - f_L(\epsilon)] \right), \quad (2.81)$$

$$I_{abs} = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\epsilon \int d\omega \left(T_{\uparrow\downarrow'}(\epsilon) N_{\uparrow}^L(\epsilon - V + \omega) N_{\downarrow}^R(\epsilon) f_L(\epsilon - V + \omega) [1 - f_R(\epsilon)] - \right. \\ \left. - T_{\uparrow'\downarrow}(\epsilon) N_{\downarrow}^L(\epsilon - V + \omega) N_{\uparrow}^R(\epsilon) f_R(\epsilon + V - \omega) [1 - f_L(\epsilon)] \right). \quad (2.82)$$

É bastante simples obter a condutância se considerarmos a distribuição de Fermi-Dirac ainda em forma de degrau, considerando a densidade de estados e coeficientes de tunelamento constantes no intervalo de integração, tomando a derivada da expressão com respeito a V . Considerando a densidade de estados de mágnons na forma $\rho(\omega) = a\omega^n \exp[-b(\omega - \omega_0)^m]$ nós obtemos em forma aproximada

$$G_{em} = \frac{32\pi e^2 a \Delta_{\downarrow}}{N|\Delta|S V_0} \exp[-1.024d\sqrt{V_0}] \left(N_{\downarrow}^L(0) N_{\uparrow}^R(0) + \right. \\ \left. + \frac{\Delta'_{\downarrow}}{\Delta_{\downarrow}} N_{\uparrow}^L(0) N_{\downarrow}^R(0) \right) \int_{\omega_c}^{V+k_B T} d\omega \omega^n \exp[-b(\omega - \omega_0)^m] \left(1 + \frac{1}{\exp[\frac{\omega}{k_B T}] - 1} \right), \quad (2.83)$$

$$G_{abs} = \frac{32\pi e^2 a \Delta_{\uparrow}}{N|\Delta|S V_0} \exp[-1.024d\sqrt{V_0}] \left(N_{\downarrow}^L(0) N_{\uparrow}^R(0) + \right. \\ \left. + \frac{\Delta'_{\uparrow}}{\Delta_{\uparrow}} N_{\uparrow}^L(0) N_{\downarrow}^R(0) \right) \int_{\omega_c}^{V+k_B T} d\omega \omega^n \exp[-b(\omega - \omega_0)^m] \frac{1}{\exp[\frac{\omega}{k_B T}] - 1}. \quad (2.84)$$

Desse modo, a condutância total é dada pela soma $G = G_d + G_{em} + G_{abs}$ e a resistência diferencial é prontamente obtida ($R = G^{-1}$). Considerando por simplicidade que $n = 1$ e $m = 2$ na densidade de estados de mágnons, e esse procedimento naturalmente inclui um corte no espectro de mágnons. Fazendo as definições abaixo

$$\Lambda_1(V) = \int_{\omega_c}^{V+k_B T} d\omega \omega \exp[-b(\omega - \omega_0)^2]$$

$$\Lambda_2(V) = \int_{\omega_c}^{V+k_BT} d\omega \, \omega \exp[-b(\omega - \omega_0)^2] \frac{1}{\exp[\frac{\omega}{k_BT}] - 1}$$

obtém-se

$$\begin{aligned} \Lambda_1(V) = & \frac{1}{2b} \left(e^{-b(\omega_0 - \omega_c)^2} - e^{-b(V+k_BT - \omega_0)^2} \right. \\ & \left. + \sqrt{\pi b} \omega_0 \text{Erf}[\sqrt{b}(V + k_BT - \omega_0)] + \text{Erf}[\sqrt{b}(\omega_0 - \omega_c)] \right) \end{aligned} \quad (2.85)$$

e

$$\begin{aligned} \Lambda_2(V) = & \frac{k_BT\sqrt{b\pi}}{2b} \exp\left[\frac{1}{4b(k_BT)^2} - \frac{\omega_0}{k_BT}\right] \times \\ & \times \left(\text{Erf}\left[\frac{1 + 2\sqrt{b}k_BT(V + k_BT - \omega_0)}{2\sqrt{b}k_BT}\right] - \text{Erf}\left[\frac{1 + 2\sqrt{b}k_BT(\omega_c - \omega_0)}{2\sqrt{b}k_BT}\right] \right) \end{aligned} \quad (2.86)$$

onde $\text{Erf}(x)$ é a função erro, definida como segue:

$$\text{Erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp[-t^2/2] dt$$

$\Lambda_2(V)$ é zero para $T = 0^\circ\text{K}$. Os produtos das densidades de estados são dados abaixo

$$W_P^1 \approx |N_m^F|^2 \left(\frac{\Delta_\downarrow}{\Delta_\uparrow} + \frac{\Delta'_\downarrow}{\Delta_\uparrow} \right) r \quad (2.87)$$

$$W_P^2 \approx |N_m^F|^2 \left(1 + \frac{\Delta_\downarrow + \Delta'_\uparrow + \Delta'_\downarrow}{\Delta_\uparrow} \right) r \quad (2.88)$$

$$W_{AP}^1 \approx |N_m^F|^2 \left(\frac{\Delta_\downarrow}{\Delta_\uparrow} + \frac{\Delta'_\downarrow}{\Delta_\uparrow} r^2 \right) \quad (2.89)$$

$$W_{AP}^2 \approx |N_m^F|^2 \left(1 + \frac{\Delta_\downarrow}{\Delta_\uparrow} + \frac{\Delta'_\uparrow + \Delta'_\downarrow}{\Delta_\uparrow} r^2 \right) \quad (2.90)$$

e então o resultado desejado é encontrado finalmente

$$G_{em}^P + G_{abs}^P = \frac{32\pi ea\Delta_\uparrow}{N|\Delta|SV_0} \exp[-1.024d\sqrt{V_0}] \left(W_P^1 \Lambda_1(V) + W_P^2 \Lambda_2(V) \right) \quad (2.91)$$

$$G_{em}^{AP} + G_{abs}^{AP} = \frac{32\pi ea\Delta_\uparrow}{N|\Delta|SV_0} \exp[-1.024d\sqrt{V_0}] \left(W_{AP}^1 \Lambda_1(V) + W_{AP}^2 \Lambda_2(V) \right) \quad (2.92)$$

Na Fig. 2.7 nós mostramos a resistência obtida com as fórmulas acima para $T = 4.2^\circ\text{K}$ e para $T = 300^\circ\text{K}$. Os dados experimentais são para uma junção $Co/Al_2O_3/Co_{80}Fe_{20}$, conforme a Ref. [50]. Os seguintes parâmetros foram utilizados: $d = 1.0 \text{ nm}$, $V_0 = 3.0 \text{ eV}$, $N_m^F = 1.0$ em unidades normalizadas, $r = 2.21$, $\lambda = 0.1$, $\beta = 2.85$, e $\eta = 0.1$. O parâmetro $\frac{2a\Delta_\uparrow}{N|\Delta|S}$ atua como sendo a razão T^J/T^d

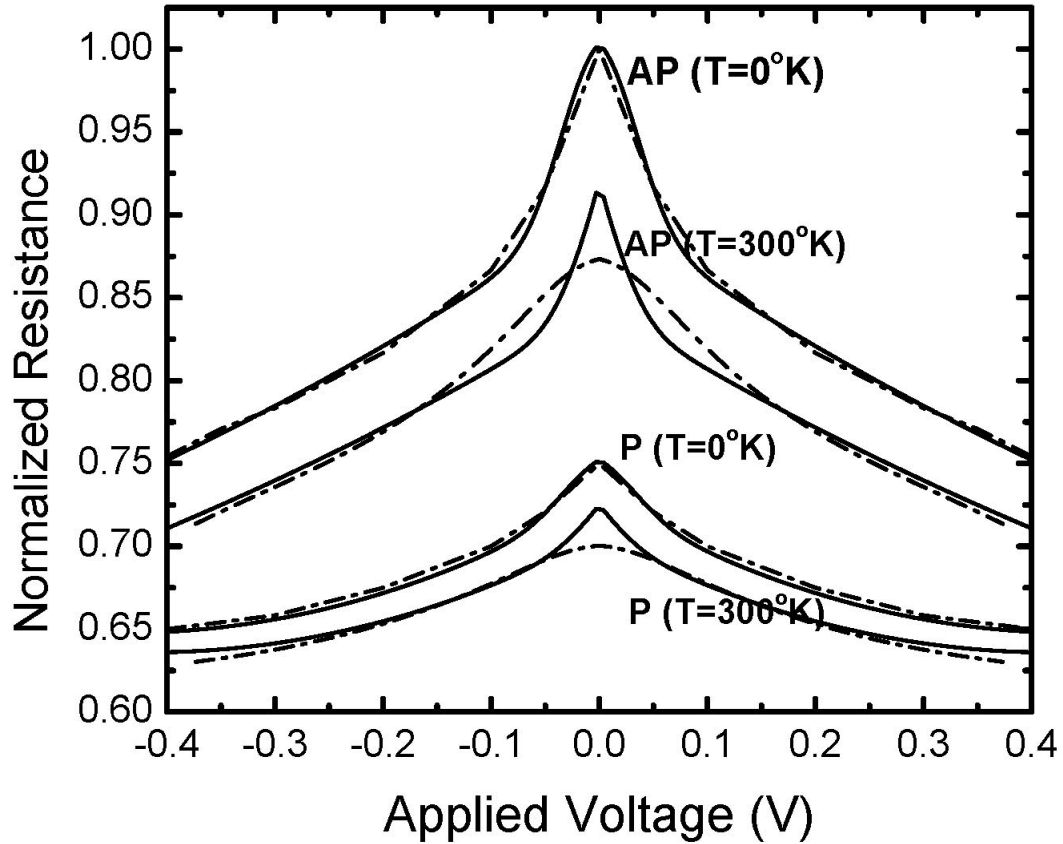


Figura 2.7: Resistência como função da voltagem e da temperatura para as configurações P e AP: resultados experimentais são as linhas pontilhadas retiradas das Refs. [46],[47] e [50] e os cálculos teóricos (linha cheia) foram calculados com o seguinte conjunto de parâmetros: $d = 1.0 \text{ nm}$, $V_0 = 3.0 \text{ eV}$, $N_m^F = 1.0$ em unidades normalizadas, $r = 2.21$, $\lambda = 0.1$, $\beta = 2.85$, e $\eta = 0.1$, $\frac{2a\Delta_\uparrow}{N|\Delta|S} = 1/35$, $\omega_0 = 16\text{meV}$, $\omega_c = 4\text{meV}$ e $b = 500 \text{ eV}^{-2}$. Resistência é dada em unidades arbitrárias normalizada com relação ao pico.

na análise das secções anteriores, que tomamos como parâmetro de ajuste e nós utilizamos aqui $\frac{2a\Delta_\uparrow}{N|\Delta|S} = 1/35$. Os parâmetros da densidade de estados de mágnons são: $\omega_0 = 16\text{meV}$, $\omega_c = 4\text{meV}$ e $b = 500 \text{ eV}^{-2}$. A densidade de estados de mágnons não é da forma $\sqrt{\omega}$ como se poderia esperar para mágnons de superfície, entretanto, a densidade espectral dependente em ω elimina a divergência em $\omega = 0$ e poderíamos ter escolhido $\omega_c = 0$ para o corte inferior. O valor de ω_0 utilizado, que representa o pico,

está em acordo com o valor experimental da Ref. [45]. As funções W^i são definidas como $W_P^1 = W_P^2/2 = 1.5|N_m^F|^2 r$ e $W_{AP}^1 = W_{AP}^2/2 = |N_m^F|^2(1.2 + 1.7r^2)$. A corrente direta para $T = 300^\circ\text{K}$ foi considerada idêntica àquela para $T = 0^\circ\text{K}$, apenas com um offset de voltagem equivalente ao potencial térmico ($V \approx V + k_B T$), o que significa que negligenciamos os efeitos de temperatura nas distribuições de Fermi-Dirac, como já mencionado anteriormente e os efeitos térmicos entraram sobretudo através dos processos com mágnons. É importante notar que a MR decresce com o aumento da temperatura ($\Delta R/R = 25\%$ a $T = 0^\circ\text{K}$ e $\Delta R/R = 20\%$ a $T = 300^\circ\text{K}$), conforme esperado, devido ao fato que, para o alinhamento AP a resistência decresce mais rapidamente que para o alinhamento P . Isto é uma consequência dos processos inelásticos envolvendo mágnons, que dependem do produto das bandas de spin majoritárias $N_M^F N_M^F$ para a configuração AP e do produto $N_m^F N_M^F$ para a configuração P . O comportamento global está bem explicado e a anomalia de *zero bias* tende a desaparecer com o acréscimo da temperatura. Isto seria muito mais evidente se tivéssemos incluído o efeito térmico na função de Fermi-Dirac, conforme foi mostrado em [47].

Capítulo 3

A Junção de Tunelamento Ressonante e a Inversão da MR

Com a excelente concordância entre os nossos cálculos teóricos e os resultados experimentais conhecidos, fomos encorajados a ampliar o estudo para uma estrutura muito similar à junção magnética de tunelamento simples. A estrutura estudada no presente Capítulo é uma junção magnética de tunelamento ressonante (RMTJ - do inglês, resonant magnetic tunnel junction), constituída de dois eletrodos ferromagnéticos entre os quais uma estrutura isolante-metal-isolante é colocada. Tal estrutura é ilustrada na Fig. 3.1.

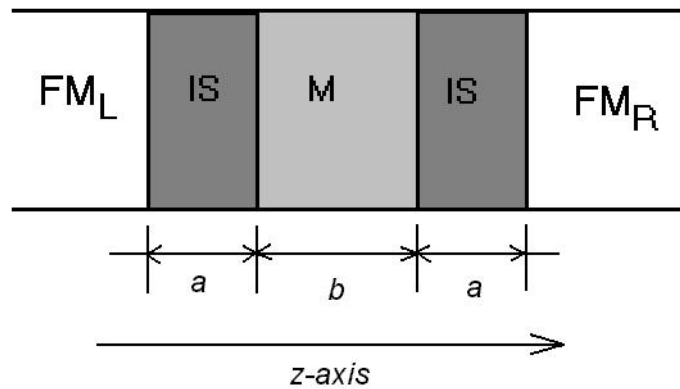


Figura 3.1: Uma junção magnética de tunelamento ressonante simples: FM_I e FM_{II} são eletrodos ferromagnéticos, IS_I e IS_{II} são barreiras de potencial isolantes e M é uma camada metálica, situada entre as duas barreiras.

As camadas FM_I e FM_{II} são dois eletrodos ferromagnéticos, IS são duas ca-

madras isolantes constituídas de filme fino de óxido, que representa uma barreira de potencial. A região designada por M é uma camada metálica, que pode ou não ser ferromagnética, colocada entre as duas regiões isolantes, e possuindo nível de Fermi semelhante ao dos eletrodos FM_I e FM_{II} .

Zhang *et al.* já haviam sugerido a utilização de uma estrutura com barreira dupla para incrementar o valor da MR e diminuir a resistência absoluta devido à ocorrência de ressonância [57]. Os níveis de ressonância podem ser providenciados por uma impureza que constitui centro de espalhamento, colocado no interior da barreira isolante [58-60]. Experimentalmente tem sido encontrado que impurezas na barreira [61] e a estrutura das interfaces fortemente afeta a MR [54]. Um efeito marcante do tunelamento ressonante em estruturas magnéticas é a inversão da polarização de spin no tunelamento, com consequente inversão da MR. A Ref. [62] apresenta o fenômeno de inversão para uma junção do tipo $Co/SrTiO_3/La_{0.7}Sr_{0.3}MnO_3$. Aqui nós analisamos uma estrutura RMTJ genérica e suas propriedades de transporte incluindo o espalhamento por mágnons como um mecanismo capaz de produzir a inversão da MR. A teoria aqui apresentada para descrever a junção magnética de tunelamento ressonante inclui:

- i)* efeitos de tunelamento assistido por mágnons, com energias de corte da ordem de ~ 100 meV. Em baixas temperaturas elétrons acelerados pela voltagem aplicada excitam mágnons nas interfaces e girando o spin;
- ii)* variação das densidades de estados para as diferentes bandas de spin nos ferromagnetos. O procedimento é análogo àquele apresentado nas Refs. [19] e [63], com um modelo simples da estrutura de bandas;
- iii)* considerando o coeficiente de transmissão ressonante de forma *lorentziana* próximo à ressonância e dependência do nível de ressonância com a voltagem. As ressonâncias para processos elásticos e assistidos por mágnons são diferentes permitindo inversão de MR.

Como resultado dos estudos realizados temos um artigo técnico já publicado:

- C.A. Dartora, G.G. Cabrera, “Resonant Magnetic Tunnel Junction at 0°K: I-V Characteristics and Magnetoresistance”, J. Appl. Phys. **97** (2005), 033708 (**Anexo 2**).

3.1 Sobre o Hamiltoniano de interação da RMTJ: a fórmula de Breit-Wigner

Para dar uma descrição da condutância e da MR em uma RMTJ, utilizamos o método do hamiltoniano de transferência (já descrito no Capítulo 1 e utilizado no Capítulo 2) , sendo que o Hamiltoniano não perturbado H_0 correspondente aos eletrodos ferromagnéticos é definido pela expressão (2.1) enquanto a interação é descrita pelo hamiltoniano de interação H_I da expressão (2.2), onde já explicamos o significado dos termos naquelas expressões anteriormente.

Estamos interessados no fenômeno de tunelamento ressonante e os coeficientes de transmissão devem conter informação a respeito da barreira, que é constituída por dupla camada isolante, separada por um metal, cujo nível de Fermi é semelhante ao dos reservatórios ferromagnéticos. Neste caso os coeficientes de transmissão $T = |t_{kk'}|^2$ (as amplitudes de transmissão $t_{kk'}$ estão contidas no hamiltoniano de interação H_I) próximos a uma energia de ressonância podem ser ajustados com muita precisão por uma função *lorentziana* [2] (ou também chamada fórmula de Breit-Wigner [2,35], por estar associado aos processos de decaimento nuclear, descritos por Breit e Wigner):

$$T(\epsilon) = \frac{\Gamma^2(\epsilon)}{\Gamma^2(\epsilon) + (\epsilon - \epsilon_r(V))^2} \quad (3.1)$$

onde

$$\Gamma(\epsilon) = \left[\frac{\hbar^2(\epsilon_0 + |\epsilon_r(V)|)}{4meb^2} T_1^2(\epsilon) \right]^{1/2} \quad (3.2)$$

é a metade da largura da ressonância, medida do valor máximo de T até o ponto em que T cai à metade, m é a massa eletrônica, b é a largura da camada metálica, $T_1(\epsilon)$ é o coeficiente de transmissão de uma barreira de potencial simples (aqui utilizando a aproximação de WKB):

$$T_1(\epsilon) \approx A \exp[-2a\sqrt{2me(V_0 - \eta\epsilon)/\hbar^2}] = A \exp\left[-1.024 d\sqrt{V_0}\right] \exp\left[\frac{1}{2} \frac{\eta\epsilon a}{\sqrt{V_0}}\right],$$

com A um valor constante, $\eta = \epsilon_z/\epsilon$, a é a largura da barreira isolante em Angstroms e $\epsilon_r(V)$ é a energia de ressonância, sendo função da voltagem aplicada V :

$$\epsilon_r = \epsilon_0 - \frac{V}{2}. \quad (3.3)$$

Todas as energias são dadas em eV .

Acima descrevemos brevemente o coeficiente de transmissão ressonante, já que o hamiltoniano de interação já havia sido descrito para a junção MTJ simples, envolvendo tunelamento elástico e inelástico. Na sequência descreveremos as propriedades de transporte para uma junção de tunelamento ressonante.

3.2 Característica $I - V$ e a inversão da MR

Considerando (2.2) no contexto da teoria de Landauer, obtemos a corrente total fluindo na junção através da equação abaixo:

$$I(V) = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\epsilon \sum_{\sigma\sigma'} \left(T_{\sigma\sigma'}(\epsilon) N_{\sigma}^L(\epsilon - V) N_{\sigma'}^R(\epsilon) f_L(\epsilon - V) [1 - f_R(\epsilon)] - \right. \\ \left. - T_{\sigma'\sigma}(\epsilon) N_{\sigma}^L(\epsilon - V) N_{\sigma'}^R(\epsilon) f_R(\epsilon) [1 - f_L(\epsilon - V)] \right) \quad (3.4)$$

sendo $\epsilon = E - E_F$, E_F a energia de Fermi, $N_{\sigma}^{\alpha}(\epsilon)$ as densidades de estados para elétrons com spin σ , $\alpha = (R, L)$ denota o eletrodo e $f(\epsilon) = (\exp[\frac{\epsilon}{k_B T}] + 1)^{-1}$ é a distribuição de Fermi-Dirac. A resistência diferencial é obtida como anteriormente por $R = G^{-1}$ e $G = dI/dV$. A MR é dada em geral por $\frac{\Delta R}{R} = (R_{AP} - R_P)/R_{AP}$, entretanto utilizaremos a definição seguinte para a magnetoresistência de tunelamento (TMR) ao longo do que segue

$$TMR = \frac{I^{(P)} - I^{(AP)}}{I^{(P)}} \quad (3.5)$$

A expressão (3.5) é mais apropriada devido ao fato de que quando tratamos do tunelamento ressonante, há regiões onde a resistência diferencial é negativa, i.e., a região da chamada resistência diferencial negativa (NDR- do inglês negative differential resistance) dos diodos de tunelamento ressonante [2,39], e a utilização da resistência diferencial para definir a MR criaria problemas na interpretação dos dados. As definições das configurações P e AP seguem as mesmas utilizadas para a MTJ simples, para o caso P ambos eletrodos FM_I e FM_{II} tem a mesma magnetização ao longo do eixo z e no caso AP a magnetização gira 180° de um eletrodo ao outro. Novamente o nosso interesse está no regime de baixas voltagens aplicadas, voltagens bem menores que a energia de Fermi, e apenas estados próximos ao nível de Fermi contribuem para o transporte, então é plausível expandir as densidades de estados em séries de Taylor, o que é feito rigorosamente da mesma maneira que no caso anterior, para a junção de tunelamento simples. Os parâmetros (2.8) descrevem

então a estrutura de bandas dos eletrodos ferromagnéticos com boa precisão. Separamos a corrente total (3.4) em duas parcelas, como de praxe: uma envolvendo tunelamento elástico conservando spin e outra para a interação com o campo de mágnons, que é inelástico e permite spin-flip. A corrente direta conservando spin no caso mais simples, com probabilidades iguais de ir da direita para a esquerda quanto no sentido contrário, é dada simplesmente por

$$I_d = \frac{2\pi e}{\hbar} \int_0^V d\epsilon \left(T_{\uparrow\uparrow}(\epsilon) N_{\uparrow}^L(\epsilon - V) N_{\uparrow}^R(\epsilon) + T_{\downarrow\downarrow}(\epsilon) N_{\downarrow}^L(\epsilon - V) N_{\downarrow}^R(\epsilon) \right). \quad (3.6)$$

Os coeficientes de transmissão tem a mesma forma da expressão (3.1) e são explicitados abaixo:

$$T_{\uparrow\uparrow} = \frac{\Gamma_{\uparrow\uparrow}^2(\epsilon)}{\Gamma_{\uparrow\uparrow}^2(\epsilon) + (\epsilon - \epsilon_{r\uparrow\uparrow}(V))^2}$$

$$T_{\downarrow\downarrow} = \frac{\Gamma_{\downarrow\downarrow}^2(\epsilon)}{\Gamma_{\downarrow\downarrow}^2(\epsilon) + (\epsilon - \epsilon_{r\downarrow\downarrow}(V))^2}$$

com $\epsilon_{r\uparrow\uparrow} \neq \epsilon_{r\downarrow\downarrow}$, em geral. O parâmetro r que dá a razão entre as densidades de estados majoritária e minoritária a voltagem nula pode ser calculada utilizando (2.16), como o valor experimental da MR a voltagem nula, conforme explicado anteriormente [60], e podendo considerar $T_{\uparrow\uparrow} \approx T_{\downarrow\downarrow}$ a voltagem nula. A expressão (3.6) não é integrada tão facilmente. Definindo, por conveniência, as quantidades dependentes das densidades de estados:

$$W_1(V) = N_M^L(\epsilon - V) N_M^R(\epsilon) \Big|_{\epsilon=V/2} = (N_m^F)^2 \left(r^2 - \frac{\beta^2 \lambda^2}{4} V^2 \right) \quad (3.7)$$

$$W_2(V) = N_m^L(\epsilon - V) N_m^R(\epsilon) \Big|_{\epsilon=V/2} = (N_m^F)^2 \left(1 - \frac{\beta^2}{4} V^2 \right) \quad (3.8)$$

$$W_3(V) = N_M^L(\epsilon - V) N_m^R(\epsilon) \Big|_{\epsilon=V/2} = (N_m^F)^2 \left(r + \frac{\beta(r - \lambda)}{2} V - \frac{\beta^2 \lambda}{4} V^2 \right) \quad (3.9)$$

$$W_4(V) = N_m^L(\epsilon - V) N_M^R(\epsilon) \Big|_{\epsilon=V/2} = (N_m^F)^2 \left(r - \frac{\beta(r - \lambda)}{2} V - \frac{\beta^2 \lambda}{4} V^2 \right) \quad (3.10)$$

e a expressão a seguir

$$\Sigma_{\sigma\sigma'}(V) = \int_0^V d\epsilon T_{\sigma\sigma'}(\epsilon) = \int_0^V d\epsilon \frac{\Gamma_{\sigma\sigma'}^2(\epsilon)}{\Gamma_{\sigma\sigma'}^2(\epsilon) + (\epsilon - \epsilon_{r\sigma\sigma'}(V))^2} =$$

$$= \Gamma_{\sigma\sigma'}(V) \left[\arctan \left(\frac{V - \epsilon_{r\sigma\sigma'}(V)}{\Gamma_{\sigma\sigma'}(V)} \right) + \arctan \left(\frac{\epsilon_{r\sigma\sigma'}(V)}{\Gamma_{\sigma\sigma'}(V)} \right) \right] \quad (3.11)$$

nos dá, para a corrente direta, em ambas as configurações P e AP as expressões a seguir:

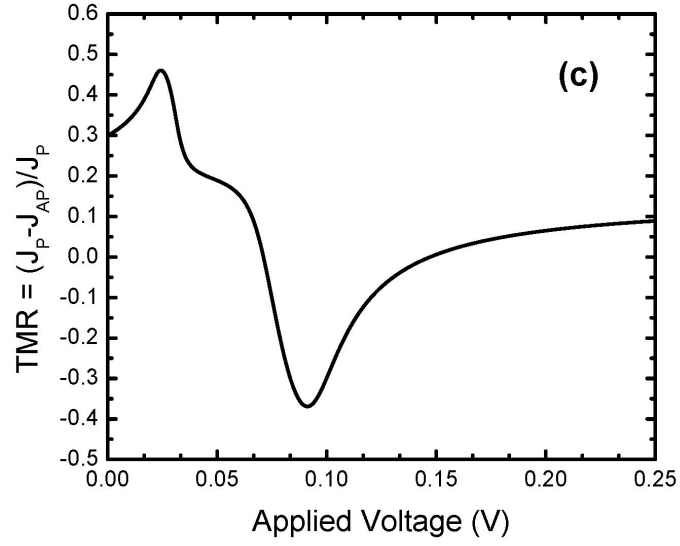
$$I_d^{(P)} = \frac{2\pi e}{\hbar} [W_1(V)\Sigma_{\uparrow\uparrow}(V) + W_2(V)\Sigma_{\downarrow\downarrow}(V)] \quad (3.12)$$

$$I_d^{(AP)} = \frac{2\pi e}{\hbar} [W_3(V)\Sigma_{\uparrow\uparrow}(V) + W_4(V)\Sigma_{\downarrow\downarrow}(V)] \quad (3.13)$$

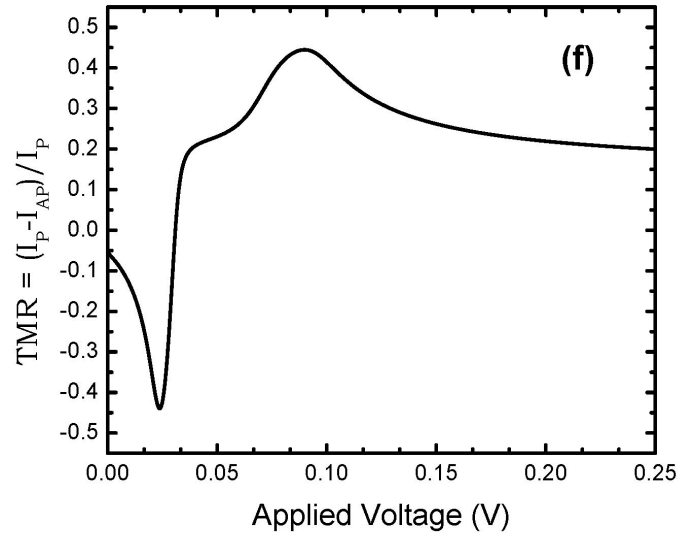
As funções $W_i(V)$ são calculadas para $\epsilon = V/2$, i.e., metade da voltagem aplicada, mas melhores estimativas de $W_i(V)$ podem ser feitas se necessário. Considerando que os processos envolvendo mágnons possam ser negligenciados a inversão da MR pode ocorrer para um conjunto de valores de voltagem aplicada, se e somente se $I_d^{(P)}(V) < I_d^{(AP)}(V)$, ou, em outros termos, obedecendo a condição abaixo

$$\frac{\Sigma_{\downarrow\downarrow}(V)}{\Sigma_{\uparrow\uparrow}(V)} > \frac{W_1(V) - W_3(V)}{W_4(V) - W_2(V)} \quad (3.14)$$

O caso acima é mostrado na Fig. 3.2 levando em conta os seguintes parâmetros: $r = 2.21$, que significa um valor de MR de 25% à voltagem nula, $\lambda = 2.9$, $\beta = 0.08$, $a = 0.5$ nm, $b = 0.1$ nm, $V_0 = 3.0$ eV, todos valores próximos daqueles obtidos para uma junção simples. Na realidade utilizamos parâmetros similares àqueles que se referem à junção simples $Co/Al_2O_3/Co_{80}Fe_{20}$, cujos dados experimentais encontram-se na Ref. [50]. Entretanto os dados da estrutura de bandas devem ser próximos daqueles que se referem ao Cobalto. Na Fig. 3.2-(a) utilizamos a energia de ressonância para spin para cima como $\epsilon_{0\uparrow\uparrow} = 35$ meV e para spin para baixo $\epsilon_{0\downarrow\downarrow} = 47$ meV. A MR cresce até uma determinada voltagem, depois decresce até atingir valores negativos. Neste caso o valor de MR de voltagem nula tende a 25%. Para a Fig. 3.2-(b) nós utilizamos $\epsilon_{0\uparrow\uparrow} = 47$ meV e $\epsilon_{0\downarrow\downarrow} = 35$ meV. O comportamento é um tanto diferente. A MR é negativa próxima de zero, crescendo até um valor máximo e depois decresce novamente. O comportamento em ambas as situações é facilmente explicado em termos dos coeficientes de transmissão. Na primeira situação a ressonância de spin para cima ocorre primeiro proporcionando um acréscimo de MR até que a ressonância de spin para baixo é atingida, e a MR decresce para valores negativos devido ao fato da ressonância de spin para cima começar a desaparecer enquanto a de spin para baixo ainda está ocorrendo. Na segunda situação a ressonância de spin para baixo é atingida primeiro, e o comportamento é óbvio. É importante notar aqui que a condutância diferencial é negativa para um intervalo



(a)



(b)

Figura 3.2: Negligenciando os processos envolvendo mágnons, mostramos a MR definida como $TMR = (I_P - I_{AP})/I_P$ para os casos: (a) $\epsilon_{0\uparrow} = 35\text{meV}$ e $\epsilon_{0\downarrow} = 47\text{meV}$. (b) $\epsilon_{0\uparrow} = 47\text{meV}$ e $\epsilon_{0\downarrow} = 35\text{meV}$. Os outros parâmetros utilizados são os mesmos para (a) e (b).

de voltagens, dando origem ao fenômeno de NDR, já citado anteriormente. Não mostramos aqui a condutância diferencial, pois esta não é importante para o que estamos analisando, mas as características $I-V$ podem ser encontradas no trabalho já publicado:

- C.A. Dartora, G.G. Cabrera, “Resonant Magnetic Tunnel Junction at 0°K: I-V Characteristics and Magnetoresistance”, J. Appl. Phys. **97** (2005), 033708.

Para $\Sigma_{\downarrow\downarrow}(V) = \Sigma_{\uparrow\uparrow}(V) = \Sigma(V)$, ou seja, $\epsilon_{0\uparrow\uparrow} = \epsilon_{0\downarrow\downarrow}$, e uma estrutura de bandas bem comportada, a inversão da MR nunca ocorrerá(a menos que $r < 1$, mas por definição $r > 1$ sempre). A corrente direta nesse caso é dada por:

$$I_d^{(P)} = \frac{2\pi e}{\hbar} [W_1(V) + W_2(V)] \Sigma(V) \quad (3.15)$$

$$I_d^{(AP)} = \frac{2\pi e}{\hbar} [W_3(V) + W_4(V)] \Sigma(V) \quad (3.16)$$

Entretanto, mesmo que $\Sigma_{\downarrow\downarrow}(V) = \Sigma_{\uparrow\uparrow}(V) = \Sigma(V)$ a inversão da MR é permitida por outro mecanismo, o tunelamento assistido por mágnons. Vamos agora considerar o tunelamento assistido por mágnons para investigar a inversão da MR como consequência de processos inelásticos. Neste caso é necessário integrar sobre todos os estados de mágnons permitidos. Os coeficientes de tunelamento são descritos por:

$$T_{\uparrow\downarrow}(\epsilon, \omega) = \rho(\omega) \frac{n(\omega)}{N|\Delta|S} \frac{\Gamma_{\uparrow\downarrow}^2(\epsilon)}{\Gamma_{\uparrow\downarrow}^2(\epsilon) + (\epsilon - \epsilon_{r\uparrow\downarrow}(V))^2}$$

$$T_{\downarrow\uparrow}(\epsilon, \omega) = \rho(\omega) \frac{n(\omega) + 1}{N|\Delta|S} \frac{\Gamma_{\downarrow\uparrow}^2(\epsilon)}{\Gamma_{\downarrow\uparrow}^2(\epsilon) + (\epsilon - \epsilon_{r\downarrow\uparrow}(V))^2}$$

sendo $\rho(\omega)$ a densidade de estados de mágnons, $n(\omega) = (\exp[\frac{\omega}{k_B T}] - 1)^{-1}$ é o número de mágnons, distribuídos termicamente. Escrevemos para as correntes de emissão e absorção as seguintes expressões:

$$I_{em} = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\epsilon \int d\omega \left(T_{\downarrow\uparrow'}(\epsilon, \omega) N_{\downarrow}^L(\epsilon - V + \omega) N_{\uparrow}^R(\epsilon) f_L(\epsilon - V + \omega) [1 - f_R(\epsilon)] - \right. \\ \left. - T_{\uparrow'\downarrow}(\epsilon, \omega) N_{\uparrow}^L(\epsilon - V + \omega) N_{\downarrow}^R(\epsilon) f_R(\epsilon + V - \omega) [1 - f_L(\epsilon)] \right) \quad (3.17)$$

$$I_{abs} = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\epsilon \int d\omega \left(T_{\uparrow\downarrow'}(\epsilon, \omega) N_{\uparrow}^L(\epsilon - V + \omega) N_{\downarrow}^R(\epsilon) f_L(\epsilon - V + \omega) [1 - f_R(\epsilon)] - \right. \\ \left. - T_{\downarrow'\downarrow}(\epsilon, \omega) N_{\downarrow}^L(\epsilon - V + \omega) N_{\uparrow}^R(\epsilon) f_R(\epsilon + V - \omega) [1 - f_L(\epsilon)] \right) \quad (3.18)$$

Para $T = 0^\circ\text{K}$, a corrente de absorção é identicamente nula devido a $n(\omega) \rightarrow 0$ e temos apenas processos de emissão, conforme mostrado abaixo:

$$I_{em}^{(P)} = \frac{2\pi e}{N|\Delta|S\hbar} (W_3(V) + W_4(V)) \Sigma^1(V) \quad (3.19)$$

$$I_{em}^{(AP)} = \frac{2\pi e}{N|\Delta|S\hbar} (W_1(V) + W_2(V)) \Sigma^1(V) \quad (3.20)$$

sendo

$$\begin{aligned} \Sigma^1(V) &= \int d\omega \int_0^{V-\omega} d\epsilon \rho(\omega) \frac{\Gamma_{\downarrow\uparrow}^2(V)}{\Gamma_{\downarrow\uparrow}^2(V) + (\epsilon - \epsilon_{r\downarrow\uparrow}(V))^2} = \\ &= \Gamma_{\downarrow\uparrow}(V) \int d\omega \rho(\omega) \left[\arctan \left(\frac{V - \omega - \epsilon_{r\downarrow\uparrow}(V)}{\Gamma_{\downarrow\uparrow}(V)} \right) + \arctan \left(\frac{\epsilon_{r\downarrow\uparrow}(V)}{\Gamma_{\downarrow\uparrow}(V)} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.21)$$

e desde que $\Gamma(V) \rightarrow 0$ o resultado simplifica-se para

$$\Sigma^1(V) = \begin{cases} \pi \Gamma_{\downarrow\uparrow}(V) \int_0^{3V/2 - \epsilon_{0m}} d\omega \rho(\omega) & \text{para } \frac{2\epsilon_{0m}}{3} < V < 2\epsilon_{0m} \\ 0 & \text{em outro caso} \end{cases} \quad (3.22)$$

A densidade de estados de mágnons tem a forma geral

$$\rho(\omega) = c_1 \omega^n \exp[-c_2(\omega - \omega_0)^m].$$

A condutância diferencial com mágnons é obtida através de $G_{em} = dI_{em}/dV$ e a condutancia diferencial total por $G = G_d + G_{em}$. As correntes totais para ambas configurações são expressas abaixo:

$$I^{(P)} = \frac{2\pi e}{\hbar} \left\{ [W_1(V) + W_2(V)] \Sigma(V) + \frac{1}{N|\Delta|S} [W_3(V) + W_4(V)] \Sigma^1(V) \right\} \quad (3.23)$$

$$I^{(AP)} = \frac{2\pi e}{\hbar} \left\{ [W_3(V) + W_4(V)] \Sigma(V) + \frac{1}{N|\Delta|S} [W_1(V) + W_2(V)] \Sigma^1(V) \right\} \quad (3.24)$$

Para haver a inversão da MR a condição $I^{(P)}(V) < I^{(AP)}(V)$ deve ser satisfeita, ou equivalentemente:

$$\Sigma(V) < \frac{1}{N|\Delta|S} \Sigma^1(V) \quad (3.25)$$

Para um intervalo de voltagens $V_1 < V < V_2$ a inversão de MR é então observada, desde que as ressonâncias para o tunelamento direto e o tunelamento assistido por mágnons ocorram em diferentes valores de energia, proporcionando que a condição (3.25) seja satisfeita.

A Fig. 3.3 mostra a MR obtida através de (3.5) para uma RMTJ incluindo o efeito dos mágnons. Os seguintes parâmetros foram utilizados: $a = 0.5 \text{ nm}$, $V_0 =$

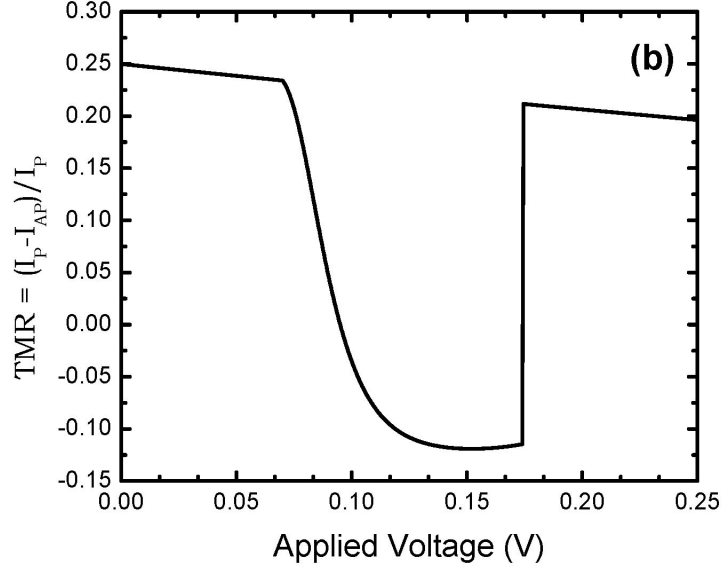


Figura 3.3: Inversão de MR como consequência do tunelamento assistido por mágnons. MR definida pela equação (3.5). Utilizamos $\epsilon_{0d} = 35\text{meV}$ e $\epsilon_{0m} = 87.2\text{meV}$ para as ressonâncias direta e indireta, respectivamente.

3.0 eV , $N_m^F = 1.0$ em unidades normalizadas, $r = 2.21$, $\lambda = 0.08$, $\beta = 2.9$, e $\eta = 0.1$. O parâmetro $N|\Delta|S = 3/2$ devido ao fato do produto da energia de troca $|\Delta|$ ($\sim 10 - 20\text{meV}$) e o número de átomos na interface N ($\sim 20 - 100$ atoms) é da ordem da unidade, bem como o spin é da ordem de 1, no caso utilizamos $S = 3/2$. Escolhemos a densidade de estados de mágnons da forma $\rho(\omega) = \omega \exp[-c_2(\omega - \omega_0)^2]$ sendo $\omega_0 = 16\text{meV}$ e $c_2 = 500\text{ eV}^{-2}$. O valor de ω_0 está de acordo com resultados experimentais da Ref. [45]. A energia de ressonância para o tunelamento direto foi escolhida para ser $\epsilon_{0d} = 35\text{meV}$ enquanto que para o tunelamento inelástico fizemos $\epsilon_{0m} = 87.2\text{meV}$. Os valores são diferentes para o tunelamento direto e indireto devido ao fato de que o tunelamento inelástico produz redução ou aumento na energia do elétron que tunela interagindo com mágnons. Quando a ressonância nos processos inelásticos é atingida a corrente direta já está decrescendo, dando origem à inversão da MR. O cenário aqui explicado pode ser modificado introduzindo outros ingredientes como excitações de fônons em temperaturas mais altas e dopagem dos eletrodos por impurezas. Se os níveis de ressonância são providenciados por alguma impureza localizada dentro do isolante, assumir que a amplitude de tunelamento é a mesma indo da direita para

esquerda quanto no caso contrário não é mais uma hipótese válida. A amplitude torna-se dependente da posição do centro de espalhamento no interior da barreira. Observando ainda a figura, a transição abrupta próxima ao valor $V = 170\text{mV}$ deve-se ao fato de termos aproximado as expressões para tunelamento assistido, muito embora a transição pode realmente ser abrupta.

3.3 Comentários gerais sobre a RMTJ

Esperamos ter conseguido explicar o fenômeno da inversão da MR em uma junção de tunelamento ressonante, de forma simples incluindo um coeficiente de tunelamento ressonante com forma de *lorentziana*, dependência das densidades de estados com a voltagem e tunelamento assistido por mágnons, possibilitando spin-flip.

O fenômeno da inversão da MR é muito interessante podendo ser providenciado por coeficientes de transmissão diferentes para os canais de spin para cima e spin para baixo, com ressonâncias ocorrendo em pontos diferente de energia ou através do processo inelástico, que entra através da excitação de mágnons. Neste último caso a ressonância do processo inelástico é diferente daquela que ocorre no processo elástico permitindo a inversão da TMR. Efeitos de temperatura podem ser incluídos simplesmente permitindo processos de absorção para temperaturas mais altas, podendo acentuar o efeito da inversão da MR, ou fazendo com que o efeito desapareça.

Capítulo 4

Transporte Quântico em Nanocontatos

O estudo das propriedades eletrônicas em estruturas magnéticas mesoscópicas tem aplicações potenciais em microeletrônica e tecnologia da informação devido à redução drástica no tamanho dos dispositivos [64-68]. No presente Capítulo será abordado o fenômeno da MR em nanocontatos ferromagnéticos [69-72]. O efeito de MR em nanocontatos é maior do que aquele verificado em junções magnéticas de tunelamento, por ordens de magnitude, com valores de MR em nanocontatos na faixa de 300% – 3000% , conforme reportado na literatura corrente [71,72], contrastando com os valores máximos de até 30% em MTJ's [73]. O comportamento distinto dos sistemas mencionados acima é devido aos diferentes mecanismos de espalhamento que dominam suas propriedades de transporte. Para MTJ's, conforme demonstrado no Capítulo 2, as densidades de estados das bandas de spin majoritária e minoritária em ambos os lados da junção de tunelamento se modificam devido ao campo magnético aplicado, sendo o transporte governado por tunelamento e efeito da densidade de estados (ver também as Refs. [19],[45],[46],[50],[63]). Em nanocontatos, o efeito de MR é atribuído ao forte espalhamento de elétrons em estreitas paredes de domínio (DW - Domain Walls) que são formadas na região do contato [64-68],[71]. Devido à geometria de constrição e à rápida variação da magnetização através do DW, o spin do elétron não pode seguir adiabaticamente a magnetização local [65], como no caso de ferromagnetos de volume [24]. Aqui discutiremos contatos pontuais de tamanho atômico, uma situação que tem sido realizada na prática em alguns experimentos [69,70,74]. Quando o tamanho da região do contato é reduzida a dimensões atômicas, a Física envolvida é governada por

fenômenos puramente quânticos. Se dois eletrodos ferromagnéticos são conectados por um nanofio ferromagnético, o transporte de elétrons de condução será afetado pela distribuição magnética ao longo do fio. Quando a magnetização dos eletrodos é orientada de maneira anti-paralela, uma parede quântica ou *kink* se formará na região central do nanofio. A largura dessa parede atômica depende da magnitude das flutuações quânticas, que por sua vez espalham elétrons de condução através de acoplamento magnético spin-spin. A interação acima remove a degenerescência de spin dos canais de condução, reduzindo o quantum de condução para $(e^2/2\pi\hbar)$ para cada canal. Diferentemente dos fenômenos discutidos acima, onde o efeito de MR tem sido associado a estreitas paredes de domínio na região do nanocontato, para paredes quânticas o momento magnético varia significativamente em uma escala atômica e a implementação prática do aparato acima idealizado ainda é um desafio para os experimentais [69]. Até mesmo os resultados experimentais para a MR e a quantização da condutância em nanocontatos são controversas e não encontram aceitação de parte da comunidade científica, devido às condições em que são realizados alguns dos experimentos, como aquele realizado por Garcia *et al.*, [78], no ar e à temperatura ambiente. O aparato experimental proposto em [78] e alguns resultados experimentais serão discutidos na Seção seguinte.

Muitas abordagens teóricas para esse problema tem sido apresentadas [69,75,76]. Aqui propomos um modelo simples para descrever a condutância de um contato de tamanho atômico, relacionando o acima exposto a parâmetros microscópicos da teoria de maneira bastante intuitiva. Em particular, concebendo o efeito de MR, nós enfatizamos o importante papel das flutuações quânticas. Para um entendimento qualitativo da física envolvida nós resolvemos um exemplo que pode ser trabalhado analiticamente, *i.e.* o caso de um contato atômico constituído de dois átomos, com dois canais de spin. Os átomos são conectados a eletrodos ferromagnéticos, que por simplicidade assumimos que sejam idênticos. Também os átomos são da mesma espécie que os eletrodos (nós discutimos metais de transição ferromagnéticos). Esta é uma simplificação crua, mas não trivial do caso discutido acima. O problema pode ser prontamente ampliado para fios atômicos de N sítios, mas em geral, tem-se que apelar para soluções numéricas.

Para os átomos no contato, os orbitais d serão muito mais localizados do que no volume devido a efeitos de baixa dimensionalidade. Consequentemente, eles serão fontes de momentos magnéticos locais, e sua contribuição para a condutância pode

ser negligenciada em relação aos portadores de caráter s [76]. Em outras palavras, estamos separando o hamiltoniano total em uma parte magnética e outra parte referente à condução. Os momentos locais acoplam-se entre si e com os eletrodos magnéticos através de uma interação de Heisenberg-Ising. Os acoplamentos dos spins locais entre si serão tratadas de forma exata (para considerar as fortes flutuações quânticas no contato) e os acoplamentos das extremidades com os reservatórios serão incluídos através de uma teoria de campo efetivo que modela os eletrodos como reservatórios de spin. Os portadores passando através do contato interagem com os momentos magnéticos locais via interação de troca $s - d$ [77]

$$\mathcal{H}_{sd} = - \sum_i J_{sd}(i) \vec{S}_i \cdot \vec{\sigma} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) , \quad (4.1)$$

que depende da configuração magnética do contato e origina o efeito de MR. Na relação (4.1), $\vec{S}_i$ e $\vec{\sigma}$ são o momento magnético local e o spin dos portadores, respectivamente. Para uma nanoestrutura, o regime de interesse é o balístico, e a condutância do nanocontato é calculada utilizando o formalismo de Landauer[1,2,7-9]. Neste Capítulo nós também discutimos nanocontatos feitos de metais de transição não magnéticos (Pd e Pt), onde medidas da condutância, na ausência de campos magnéticos aplicados, mostram o desaparecimento da degenerescência de spin, de maneira similar ao que ocorre em contatos magnéticos [74].

O resultado deste Capítulo, na forma de um artigo técnico, foi submetido ao Phys. Rev. B, estando no presente momento em discussão com os árbitros do referido jornal: C.A. Dartora, G.G. Cabrera, “Quantum transport properties of a two channel atomic-sized magnetic contact”.

Na Seção seguinte apresentamos alguns resultados experimentais bem como generalidades sobre experimentos realizados com nanocontatos.

4.1 Resultados experimentais para nanocontatos

Nesta seção queremos apresentar um breve resumo acerca dos valores experimentais que tem sido observados atualmente referente à magnetorresistência de nanocontatos, bem como falar da forma construtiva de nanocontatos feitos mecanicamente e da configuração experimental utilizada. Para uma revisão recente acerca das técnicas e resultados mencionamos a referência [79]. A magnetorresistência balística exibe um

escalonamento universal em contatos atômicos ou nanométricos. Considerando-se os dados experimentais para a condutância, encontra-se que, normalizando o valor da magnetocondutância com relação ao seu valor máximo, escalonando a condutância com relação à condutividade do material de volume, e fazendo o gráfico de MR em função da condutância escalonada, os dados seguem uma curva única que independe dos materiais que constituem o nanocontato [78]. Os resultados experimentais de Garcia concordam com a teoria que leva em conta espalhamento dependente de spin através de uma parede de domínio magnética. Valores grandes de magnetoresistência balística (BMR - do inglês, ballistic magnetoresistance) tem sido observados em nanocontatos ferromagneto-metal e semi-metais-óxidos. Muitos nanocontatos exibem a condutância quantizada, indicando que os nanocontatos menores consistem de apenas poucos átomos. O efeito magnetorresistivo em nanocontatos excede a GMR e a TMR a temperatura ambiente e tem aplicações potenciais em memórias não voláteis e cabeças de leitura de discos rígidos [80]. García *et al.* tem observado valores de BMR acima de 300% e nanocontatos construídos mecanicamente, de vários metais ferromagnéticos e acima 700% em nanocontatos de Ni-Ni eletrodepositado [71]. Verhulst *et al.* [81] observaram valores de BMR de 540% em nanocontatos mecanicamente construídos de ferromagneto meio-metálico Fe_3O_4 , e mais recentemente valores de 3000% tem sido observados em nanocontatos Ni-Ni eletrodepositado [72]. Apesar dos valores de pico da MR serem muito similares em todos os sistemas acima citados, o regime em que o máximo é atingido é muito diferente. Em nanocontatos mecanicamente formados entre metais, a máxima MR é encontrada para o quantum de condutância $G_0 = e^2/h$ (ou $R_0 = 12.9k\Omega$), sugerindo que o mecanismo dominante de transporte na nanoconstrução é balístico enquanto que para o nanocontato Fe_3O_4 o máximo é encontrado em altas resistências acima de $100k\Omega$ sugerindo que o tunelamento está envolvido.

A Ref. [78], de Garcia *et al.* apresenta observações de MR em vários tipos de nanocontatos como $CrO_2 - CrO_2$ e heterojunções $CrO_2 - Ni$. CrO_2 é um ferromagneto meio-metálico [82]. Combinando todos os dados existentes na literatura mostrou-se que o valor de $\Delta G/G$ versus G (onde G é a condutância) colapsa em uma curva única, após escalamento apropriado da condutância. Portanto o mesmo mecanismo, i.e., transporte balístico através do nanocontato parece ser responsável pela BMR em diversos regimes de condutância, dos metais normais (Ni, Co, Fe) aos semi-metais (CrO_2), até um isolante (Fe_3O_4). Isto implica em uma universa-

lidade do mecanismo de BMR indicando que o efeito pode ser observado em uma classe muito ampla de sistemas ferromagnéticos. Na Fig. 4.1 mostra-se o esquema experimental, com um nanocontato formado mecanicamente.

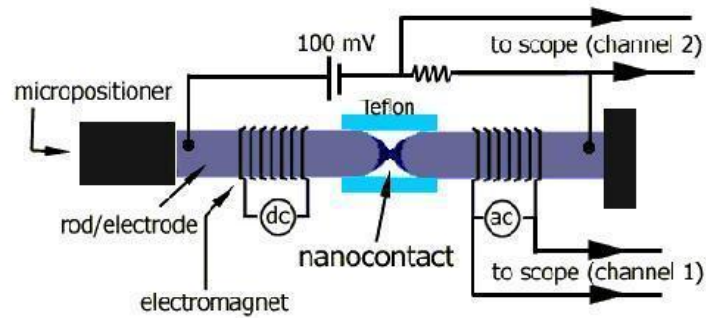


Figura 4.1: Esquema do aparato experimental.

Nanocontatos podem ser formados mecanicamente utilizando um microposicionador para fazer o contato entre dois eletrodos de Ni com 2mm de diâmetro e extremidades adequadamente arredondadas e polidas. Para rigidez mecânica e minimizar efeitos térmicos e magnetoestritivos, os eletrodos de Ni são colocados em um orifício perfurado através de um bloco de Teflon. A estabilidade mecânica deste sistema é um ponto crítico para os experimentais. Quanto ao problema da temperatura, o efeito de quantização da condutância pode ser observado à temperatura ambiente, de acordo com a literatura corrente [1,21-23]. Campos magnéticos acima de 150 Oe são aplicados separadamente aos eletrodos de Ni e governados por correntes AC ou DC. O campo magnético AC e a resistência são monitorados simultaneamente através de um osciloscópio digital com todas as medidas tomadas a temperatura ambiente e no ar. Experimentos em amostras magnéticas e não magnéticas são realizadas através do aparato da Fig. 4.1.

Os dados de magnetocondutância típicos gravados em um osciloscópio digital são mostrados na Fig. 4.2. A linha fina indica o campo magnético aplicado a um dos eletrodos de Niquel. A linha grossa mostra a corrente através do nanocontato a uma voltagem de 100mV. Como podemos perceber, como um dos campos magnéticos é DC e o outro é AC, quando ambos estão em fase, ou seja, são paralelos, a corrente é maior, indicando que a resistência configuração paralela é menor (maior condutância), ao passo que quando os campos estão defasados de 180°, ou

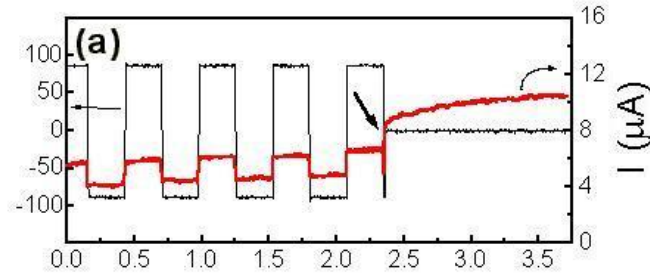


Figura 4.2: Dados típicos de magnetocondutância para um nanocontato $CrO_2 - CrO_2$ retirados da Ref. [78]. O desligamento do campo AC é indicado pela flecha.

seja, na configuração anti-paralela, a corrente é menor indicando maior resistência (menor condutância). Observa-se que quando o campo AC é desligado o fenômeno desaparece, indicando que o espalhamento dependente do spin está presente.

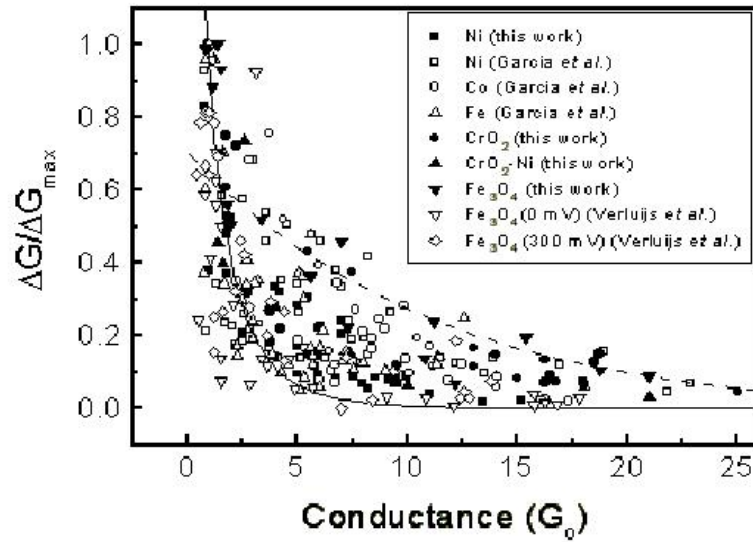


Figura 4.3: MR em função da condutância do nanocontato, normalizada pela resistividade do material, em relação à resistividade do Ni. O máximo valor de MR acontece em $G_0 = e^2/h$.

Na Fig. 4.3 a MR normalizada como função da condutância do nanocontato normalizada pela resistividade do material é mostrada. Tal figura foi retirada do tra-

balho de Garcia, apenas para ilustrar o escalamento das propriedades de MR, ou seja, independente do material, todos seguem uma curva idêntica de MR em função da condutância, desde que adequadamente escalados. O pico da MR acontece quando apenas um canal contribui no transporte, ou seja, no quantum de condutância. Nas próximas secções nós analisamos o fenômeno da MR em um nanocontato através do formalismo de Landauer, para o transporte balístico.

4.2 O Modelo Teórico

A nanoestrutura a ser estudada é mostrada esquematicamente na Fig. 4.4, onde R_1 e R_2 são dois reservatórios ferromagnéticos (eletrodos) entre os quais é colocado um nanofio. Um nanofio pode ser construído por tracionamento de um volume ferromagnético cilíndrico [69].

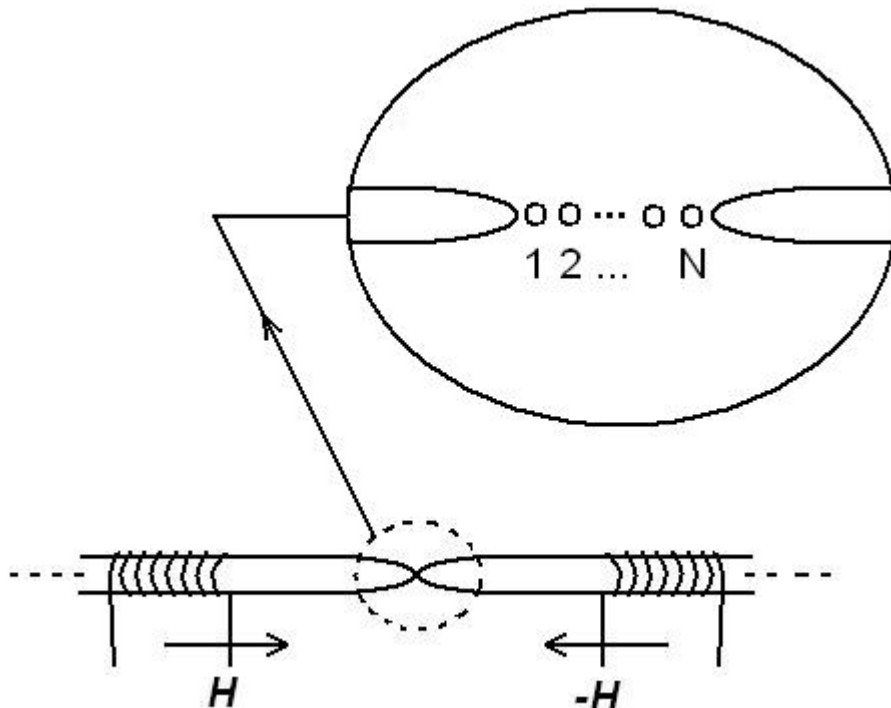


Figura 4.4: Esquema de um nanofio ferromagnético colocado entre dois reservatórios ferromagnéticos R_1 e R_2 . Com apenas dois átomos um nanocontato está caracterizado.

Consideremos, por simplicidade, que apenas dois canais de spin de orbitais s próximos ao nível de Fermi dos reservatórios são alocados para o transporte. A medição é feita na configuração de dois terminais, onde mede-se a queda de potencial através do contato e dos fios. Com pequenos campos magnéticos aplicados pode-se monitorar o estado magnético do fio e chavear entre configurações paralela (P) e anti-paralela (AP), onde a magnetização dos eletrodos são paralelas ou anti-paralelas, respectivamente. A configuração magnética dos reservatórios, impondo condições de contorno diferentes, afeta toda a distribuição de spin ao longo do nanofio.

Adotamos o seguinte Hamiltoniano magnético para o nanofio, que modelamos como uma cadeia de spin com interações ferromagnéticas J do tipo Ising e campo transversal h :

$$\mathcal{H}_M = -J \sum_{i=1}^{N-1} S_i^z S_{i+1}^z - g(H_1^z S_1^z + H_N^z S_N^z) - gh \sum_{i=1}^N S_i^x. \quad (4.2)$$

Os campos (H_1^z, H_N^z) dão o acoplamento com os eletrodos ferromagnéticos, e a direção z é tomada ao longo do fio. Flutuações quânticas são possibilitadas através da introdução do campo transversal h . Sendo que as componentes de spin (S_i^z, S_i^x) não comutam, este é um modelo quântico verdadeiro [83]. O campo transversal pode representar tanto o acoplamento das componentes transversais do spin ou um campo magnético transversal externo confinado à região do nanofio. Para o alinhamento AP dos eletrodos, *i.e.* $H_1 = -H_N$, uma parede quântica ou *kink* é formada na parte central do fio, cuja localização depende da importância relativa das flutuações quânticas induzidas por h . O mesmo campo transversal é responsável pela mistura dos estados de spin $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ na região da parede.

Considerando agora o Hamiltoniano (uma partícula) de um elétron de condução movendo-se ao longo do fio:

$$\mathcal{H}_e = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mathcal{H}_{sd}, \quad (4.3)$$

sendo $\mathbf{p}^2/2m$ a energia cinética, e $\mathcal{H}_{sd}$ o termo de troca $s-d$ dado em (4.1). Como é feito usualmente, negligenciamos o termo de Zeeman e a interação de acoplamento spin-órbita em (4.3). Em princípio, o hamiltoniano acima inclui também os eletrodos como espaço disponível para elétrons de condução. Entretanto, iremos expandir as variáveis de campo (veja abaixo) apenas em termos dos graus de liberdade do fio. O parâmetro de transporte de portadores de e para os eletrodos serão levados em conta na fórmula de Landauer (próxima Secção). Portanto, em termos das variáveis

de Segunda Quantização, os operadores de campo de férmions são escritos conforme segue:

$$\Psi(\vec{x}) = \sum_{i\sigma} \phi_i \chi_\sigma c_{i\sigma} \quad \text{and} \quad \Psi^\dagger(\vec{x}) = \sum_{i\sigma} \phi_i^* \chi_\sigma^\dagger c_{i\sigma}^\dagger ,$$

onde ϕ_i são funções de orbital centradas no i -ésimo sítio do fio atômico, χ_σ o spinor de Pauli correspondente, e $c_{i\sigma}$ o operador fermiônico de aniquilação. Por simplicidade assumimos apenas um orbital s por sítio.

O Hamiltoniano eletrônico truncado em segunda quantização é dado por:

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{ij} \left[\Lambda_{ij}^+ c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow} + \Lambda_{ij}^- c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} + \Lambda_{ij}^z (c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) \right] \quad (4.4)$$

com as definições

$$t_{ij} = \int d^3\vec{x} \phi_i^*(\vec{x}) \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right) \phi_j(\vec{x}) \quad (4.5)$$

o termo de hopping usual,

$$\Lambda_{ij}^+ = - \sum_{k=1}^N J_{sd}(k) \phi_i^*(\vec{x}_k) \phi_j(\vec{x}_k) < S_k^+ > \quad (4.6)$$

e

$$\Lambda_{ij}^- = - \sum_{k=1}^N J_{sd}(k) \phi_i^*(\vec{x}_k) \phi_j(\vec{x}_k) < S_k^- > \quad (4.7)$$

constantes de transferência com giro de spin induzido pelo termo de troca $s-d$ transversa, e

$$\Lambda_{ij}^z = - \sum_{k=1}^N J_{sd}(k) \phi_i^*(\vec{x}_k) \phi_j(\vec{x}_k) < S_k^z > \quad (4.8)$$

é a componente longitudinal da troca $s-d$ (sem spin-flip). Note que em (4.6)-(4.8), nós substituímos os operadores de momento magnético locais por seus valores médios obtidos do Hamiltoniano (4.2) para N sítios. Uma vez que a distribuição ($< S_k^x >$, $< S_k^y >$, $< S_k^z >$) é conhecida (dependendo fortemente das condições de contorno), as propriedades de transporte são determinadas por (4.4). Este último problema pode ser tratado via teoria de perturbações, separando (4.4) em duas partes

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_o + \mathcal{H}_I ,$$

onde assumimos um Hamiltoniano não-perturbado $\mathcal{H}_0$, que inclui apenas termos locais:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{i\sigma} \varepsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sum_i \left[\Lambda_{ii}^+ c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} + \Lambda_{ii}^- c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + \Lambda_{ii}^z (c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}) \right] , \quad (4.9)$$

onde $\varepsilon_i \equiv t_{ii}$. Se a condição $|t_{ii}| > |t_{ij}|$, com $i \neq j$, é preenchida, esta é uma escolha razoável. Este Hamiltoniano não perturbado tem solução exata que pode ser facilmente obtida. Uma base adequada para esta diagonalização é a base de S^z para o n -ésimo sítio $\{|n\sigma\rangle\}$. Para escrever o Hamiltoniano perturbado, consideramos que a superposição entre funções de onda é significativa apenas entre os primeiros vizinhos e negligenciamos outros termos de hopping:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_I = & \sum_{i\sigma} t_{i,i+1} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \\ & + \sum_i \left[\Lambda_{i,i+1}^+ c_{i\downarrow}^\dagger c_{i+1,\uparrow} + \Lambda_{i,i+1}^- c_{i\uparrow}^\dagger c_{i+1,\downarrow} + \Lambda_{i,i+1}^z (c_{i\uparrow}^\dagger c_{i+1,\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i+1,\downarrow}) \right] + h.c. . \end{aligned} \quad (4.10)$$

O primeiro termo em (4.10) é o hopping usual da aproximação de tight-binding, termos com $\Lambda_{i,i+1}^\pm$ provém da interação $s-d$ e dão um hopping com spin flip, e o último termo com $\Lambda_{i,i+1}^z$ é um hopping dependente de spin, sem spin flip. Para calcular os coeficientes Λ , algumas simplificações nas funções de onda são assumidas: *i*) todos os sítios no fio são equivalentes, *i.e.*, as funções de onda são equivalentes em formato, diferindo apenas por uma translação; *ii*) se cada função de onda é bem localizada ao redor de seu sítio correspondente, a superposição entre funções de onda será significativa apenas para primeiros vizinhos. Se a amplitude da i -ésima função de onda no centro do orbital é $\phi_i(\vec{x}_i)$, a amplitude da mesma função de onda calculada em sítios vizinhos $i \pm 1$ é atenuada por um fator η , com $|\eta| < 1$. Em geral η pode ser um número complexo, mas assumimos aqui que seja real:

$$\phi_i(\vec{x}_{i+1}) \approx \phi_i(\vec{x}_{i-1}) \approx \eta \phi_i(\vec{x}_i) .$$

Superposição com vizinhos mais distantes é negligenciada, *i.e.*

$$\phi_i(\vec{x}_k) \phi_{i+1}(\vec{x}_k) \approx 0$$

para $\vec{x}_k \neq \vec{x}_i$ e $\vec{x}_k \neq \vec{x}_{i+1}$. O valor $|\phi_i(\vec{x}_i)|^2 \equiv |\phi|^2$, que pensamos ser o máximo da probabilidade de distribuição, não depende do rótulo do sítio. Assumindo que a

integral de troca J_{sd} é também uniforme ao longo do fio, definimos um acoplamento independente do sítio

$$K_1 = J_{sd} |\phi|^2 . \quad (4.11)$$

Isto nos dá

$$\Lambda_{ii}^\mu = -K_1 [\langle S_i^\mu \rangle + \eta^2 (\langle S_{i-1}^\mu \rangle + \langle S_{i+1}^\mu \rangle)] \quad (4.12)$$

e

$$\Lambda_{i,i+1}^\mu = -K_1 \eta [\langle S_i^\mu \rangle + \langle S_{i+1}^\mu \rangle] \quad (4.13)$$

sendo $\mu = (+, -, z)$. Por simetria nós temos $\langle S_i^y \rangle = 0$ para os autovetores de (4.2). Então $\langle S_i^+ \rangle = \langle S_i^- \rangle$ são números reais. Por conveniência as seguintes quantidades são definidas:

$$\alpha_i = \langle S_i^+ \rangle + \eta^2 (\langle S_{i-1}^+ \rangle + \langle S_{i+1}^+ \rangle) = \langle S_i^- \rangle + \eta^2 (\langle S_{i-1}^- \rangle + \langle S_{i+1}^- \rangle) \quad (4.14)$$

$$\beta_i = \langle S_i^z \rangle + \eta^2 (\langle S_{i-1}^z \rangle + \langle S_{i+1}^z \rangle) \quad (4.15)$$

$$\delta_{i,i+1} = \langle S_i^+ \rangle + \langle S_{i+1}^+ \rangle = \langle S_i^- \rangle + \langle S_{i+1}^- \rangle \quad (4.16)$$

$$\gamma_{i,i+1} = \langle S_i^z \rangle + \langle S_{i+1}^z \rangle \quad (4.17)$$

Usando (4.14)-(4.17), $\mathcal{H}_0$ e $\mathcal{H}_I$ são reescritas conforme segue:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 &= \sum_{i\sigma} \varepsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - K_1 \sum_i \left[\alpha_i (c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}) + \beta_i (c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}) \right] = \\ &= \sum_{i\sigma} (\varepsilon_i - \sigma K_1 \beta_i) c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - K_1 \sum_i \alpha_i (c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}) , \end{aligned} \quad (4.18)$$

e

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_I &= \sum_{i\sigma} t_{i,i+1} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} - K_1 \eta \sum_i \left[\delta_{i,i+1} (c_{i\downarrow}^\dagger c_{i+1,\uparrow} + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i+1,\downarrow}) + \right. \\ &\quad \left. + \gamma_{i,i+1} (c_{i\uparrow}^\dagger c_{i+1,\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i+1,\downarrow}) \right] + h.c. = \\ &= \sum_{i\sigma} t_{i,i+1}^\sigma c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} - K_1 \eta \sum_i \left[\delta_{i,i+1} (c_{i\downarrow}^\dagger c_{i+1,\uparrow} + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i+1,\downarrow}) \right] + h.c. , \end{aligned} \quad (4.19)$$

onde $t_{i,i+1}^\sigma$ é um parâmetro de hopping que depende do spin

$$t_{i,i+1}^\sigma \equiv t_{i,i+1} - \sigma \eta K_1 \gamma_{i,i+1} , \quad (4.20)$$

com $\sigma = \pm$. Notando que $\mathcal{H}_0$ é diagonal no índice de sítios mas não nas variáveis de spin, sua diagonalização é prontamente obtida, com orbitais hibridizados na forma

$$|\Psi_{i,-}\rangle = \cos \theta_i |i \uparrow\rangle + \sin \theta_i |i \downarrow\rangle, \quad (4.21)$$

$$|\Psi_{i,+}\rangle = \sin \theta_i |i \uparrow\rangle - \cos \theta_i |i \downarrow\rangle \quad (4.22)$$

com energias $E_i^\mp = \varepsilon_i \mp K_1 \Delta_i$, respectivamente, sendo $\Delta_i = \sqrt{\alpha_i^2 + \beta_i^2}$. Se ε_i não é um valor muito diferente do volume (bulk), a troca $s-d$ produz uma separação dos dois estados $\pm$ ao redor do nível de Fermi dos eletrodos, deixando apenas um canal disponível para a condução a baixas temperaturas. O ângulo θ_i da rotação do spin local de (4.21) e (4.22) é dado por

$$\tan \theta_i = \frac{\alpha_i}{\beta_i + \Delta_i} = \frac{\Delta_i - \beta_i}{\alpha_i}. \quad (4.23)$$

No contexto da teoria de perturbação, através da Regra de Ouro de Fermi, a probabilidade $|\langle \Psi_{i+1,\sigma} | \mathcal{H}_I | \Psi_{i,\sigma'} \rangle|^2$ é diretamente relacionada à transmissão ao longo do fio. Numa situação multi-canal, a condutância para uma configuração de dois terminais é prontamente encontrada através da fórmula de Landauer [16],[17],[18],[19]:

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_j T_j, \quad (4.24)$$

onde T_j é o coeficiente de transmissão do j -ésimo canal de condução.

É importante observar que para um nanofio curto, devido à repulsão eletrônica e ao tempo muito pequeno para atravessar o canal, o processo de hopping de um único elétron contribui para a corrente. Na Secção seguinte nós iremos descrever o caso mais simples do que foi descrito acima, em baixas voltagens e temperaturas: a condutância para um nanocontato constituído de dois átomos.

4.3 Condutância para um nanocontato: eletrodos ferromagnéticos

Assumindo que a energia de perturbação média e as voltagens aplicadas são menores que a separação entre os estados fundamental e excitado (4.21) e (4.22), pode-se seguramente assumir que apenas o estado fundamental irá estar ocupado por elétrons de condução. Se o campo de troca é estimado na faixa de $2\hbar J_{sd} \approx 0.1 - 0.5$

eV , este valor coloca os limites do regime de baixa temperatura e baixas voltagens aplicadas. Agora aplicamos os conceitos desenvolvidos na Secção anterior para o caso particular de um contato de dois átomos. A teoria de Landauer permite-nos determinar a condutância no caso de um único canal, como segue:

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} T, \quad (4.25)$$

onde o coeficiente de transmissão T é calculado a partir do Hamiltoniano de transferência (4.19) para dois sítios. Dentro de nosso modelo simplificado, assumindo que o termo de troca $s - d$ tem caráter ferromagnético ($K_1 > 0$), a transmissão será proporcional à probabilidade de transição $|\langle \Psi_{2-} | \mathcal{H}_I | \Psi_{1-} \rangle|^2$ do elétron de pular do sítio 1 para o sítio 2 (condução da esquerda para a direita induzida pelo potencial aplicado), ocupando o estado de menor energia disponível em cada sítio do contato. A probabilidade de transição acima dará uma modificação da probabilidade de hopping devido ao espalhamento de origem magnética no contato. Para obter o coeficiente de transmissão, a probabilidade de transição deverá ser normalizada com relação à integral de hopping do volume t_0 que descreve os eletrodos [84]

$$T \sim \frac{|\langle \Psi_{2-} | \mathcal{H}_I | \Psi_{1-} \rangle|^2}{|t_0|^2}. \quad (4.26)$$

Ainda, precisamos incluir a polarização magnética dos eletrodos na relação (4.26). Um elétron, vindo de um eletrodo com um spin definido, irá escolher um dos canais disponíveis no contato (onde os estados de spin encontram-se misturados), e então será transferido para o outro eletrodo com spin definido outra vez. É imediato que o processo acima será proporcional ao produto das correspondentes densidades de estados das bandas de spin em ambos os eletrodos. Escrevendo como $D_\sigma^{(S)}(E_F)$ as densidades de estados ao nível de Fermi, com $\sigma = (\uparrow, \downarrow)$ sendo a banda de spin e $S = (L, R)$ rotulando esquerda e direita, tem-se um fator de correção

$$\begin{aligned} f_C^{(-)}(\theta_1, \theta_2) \equiv & D_\uparrow^{(L)}(E_F) D_\uparrow^{(R)}(E_F) \cos^2 \theta_1 \cos^2 \theta_2 + D_\uparrow^{(L)}(E_F) D_\downarrow^{(R)}(E_F) \cos^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2 + \\ & + D_\downarrow^{(L)}(E_F) D_\uparrow^{(R)}(E_F) \sin^2 \theta_1 \cos^2 \theta_2 + \\ & + D_\downarrow^{(L)}(E_F) D_\downarrow^{(R)}(E_F) \sin^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2, \end{aligned} \quad (4.27)$$

com índice $C = (P, AP)$ descrevendo a configuração magnética dos eletrodos com super-índice $(-)$ referido aos estados $\{|\Psi_{i-}\rangle\}$. Para escrever (4.27), nós assumimos que a voltagem aplicada é muito pequena em relação à energia de Fermi e que as

densidades de estados variam muito pouco na vizinhança do nível de Fermi. Isto é uma descrição apropriada da banda de condução do tipo s . O fator de polarização $f_C^{(-)}$ é facilmente calculado para as duas configurações magnéticas que queremos comparar. Nós assumimos que a magnetização do eletrodo esquerdo é fixa, e que o eletrodo direito varia do paralelo para o anti-paralelo (em todos os outros aspectos, os eletrodos são idênticos). A polarização dos ferromagnetos ao nível de Fermi é definida como

$$\varsigma_F \equiv \frac{D_M(E_F) - D_m(E_F)}{D_M(E_F) + D_m(E_F)} , \quad (4.28)$$

onde M (m) denota a banda de spin majoritária (minoritária). Para o esquema AP as bandas majoritária e minoritária no eletrodo direito é trocada em relação ao esquerdo. Normalização apropriada, então nos dá a fórmula

$$G_C = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \left(\frac{1 + \varsigma_F \cos 2\theta_C}{1 + \varsigma_F} \right)^2 \frac{|\langle \Psi_{2-} | \mathcal{H}_I | \Psi_{1-} \rangle|^2}{|t_0|^2} \Big|_C ,$$

onde $C = P, AP$. A expressão acima resulta no quantum de condutância correto para um canal de spin no caso ideal. Se dois canais de condução contribuem para a condutância e negligenciando processos inelásticos, a condutância total é dada por

$$G_C = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \left(f_C^{(-)}(\theta_1, \theta_2; \varsigma_F) \frac{|\langle \Psi_{2-} | \mathcal{H}_I | \Psi_{1-} \rangle|^2}{|t_0|^2} + f_C^{(+)}(\theta_1, \theta_2; \varsigma_F) \frac{|\langle \Psi_{2+} | \mathcal{H}_I | \Psi_{1+} \rangle|^2}{|t_0|^2} \right) . \quad (4.29)$$

As amplitudes de transição cruzadas, representadas por $\langle \Psi_{2-} | \mathcal{H}_I | \Psi_{1+} \rangle$ and $\langle \Psi_{2+} | \mathcal{H}_I | \Psi_{1-} \rangle$, são proibidas a menos que consideremos processos inelásticos. Para medir a MR, adotamos a definição usual [71] dada por:

$$\frac{\Delta G}{G} = \frac{G_P - G_{AP}}{G_{AP}} . \quad (4.30)$$

Notamos que a MR não depende da constante t_0 .

Para $N = 2$ pode-se diagonalizar o Hamiltoniano magnético (4.2) na base de S_i^z , dada pro $\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$, utilizando uma notação óbvia. Na configuração paralela dos campos ($H_1 = H_2 = H$), se o parâmetro transverso h é apenas uma perturbação fraca em comparação com H (um caso com forte anisotropia), esperamos que o ket $|\uparrow\uparrow\rangle$ seja dominante. Em contraste, $|\downarrow\downarrow\rangle$ dará uma contribuição negligenciável para o estado fundamental da distribuição de spin ao longo do fio. Baseado em simetria, podemos escrever o estado fundamental na forma abaixo:

$$|P\rangle = A|\uparrow\uparrow\rangle + B(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) + C|\downarrow\downarrow\rangle . \quad (4.31)$$

Tomando as médias de spin para a mesma configuração nos dá:

$$\langle S_1^+ \rangle_P = \langle S_2^+ \rangle_P = \langle S_1^- \rangle_P = \langle S_2^- \rangle_P = \hbar B(A + C) , \quad (4.32)$$

$$\langle S_1^z \rangle_P = \langle S_2^z \rangle_P = \frac{\hbar}{2}(A^2 - C^2) . \quad (4.33)$$

Para a configuração anti-paralela ($H_1 = -H_2 = H$), o estado $|\uparrow\downarrow\rangle$ é suposto como o mais importante no estado fundamental se a magnetização dos eletrodos fortemente impõem as condições de contorno, sendo $|\downarrow\uparrow\rangle$ um termo menos significativo. Outra vez a simetria nos leva a :

$$|AP\rangle = \bar{A}|\uparrow\downarrow\rangle + \bar{B}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle) + \bar{C}|\downarrow\uparrow\rangle , \quad (4.34)$$

sendo as médias facilmente calculáveis:

$$\langle S_1^+ \rangle_{AP} = \langle S_2^+ \rangle_{AP} = \langle S_1^- \rangle_{AP} = \langle S_2^- \rangle_{AP} = \hbar \bar{B}(\bar{A} + \bar{C}) , \quad (4.35)$$

$$\langle S_1^z \rangle_{AP} = - \langle S_2^z \rangle_{AP} = \frac{\hbar}{2}(\bar{A}^2 - \bar{C}^2) . \quad (4.36)$$

Conhecendo as médias do spin, os parâmetros α_i , β_i , $\gamma_{i,i+1}$ e $\delta_{i,i+1}$ nas relações (4.14) a (4.17) são determinados. Agora iremos obter $A(\bar{A})$, $B(\bar{B})$, $C(\bar{C})$ do Hamiltoniano magnético utilizando a teoria de perturbações que é mais conveniente para trabalhar com expressões analíticas. Primeiro reescrevemos o Hamiltoniano do nanocontato na seguinte forma:

$$\mathcal{H}_M^{(P)} = -\frac{\hbar^2 J}{4} \left[(\sigma_1^z \sigma_2^z + \frac{\mu}{2} (\sigma_1^z + \sigma_2^z) + \frac{\lambda}{2} (\sigma_1^x + \sigma_2^x) \right] \quad (4.37)$$

$$\mathcal{H}_M^{(AP)} = -\frac{\hbar^2 J}{4} \left[(\sigma_1^z \sigma_2^z + \frac{\mu}{2} (\sigma_1^z - \sigma_2^z) + \frac{\lambda}{2} (\sigma_1^x + \sigma_2^x) \right] \quad (4.38)$$

com as definições

$$\mu \equiv \frac{4gH}{\hbar J}, \quad \lambda \equiv \frac{4gh}{\hbar J} , \quad (4.39)$$

e rótulo $P(AP)$ denotando a configuração. Se os termos não-diagonais de (4.37) e (4.38) podem ser considerados perturbações, i.e., $\lambda/2 < 1$, podemos obter $A(\bar{A})$, $B(\bar{B})$ e $C(\bar{C})$ nas relações (4.31) e (4.34) até primeira ordem da teoria de perturbações, resultando em:

$$|P\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\lambda}{2\mu+4}\right)^2}} \left[|\uparrow\uparrow\rangle + \frac{\lambda}{2\mu+4} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \right] , \quad (4.40)$$

$$|AP\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\lambda}{2\mu-4}\right)^2}} \left[|\uparrow\downarrow\rangle + \frac{\lambda}{2\mu-4} (|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle) \right]. \quad (4.41)$$

Observamos que o parâmetro $C(\bar{C}) \approx 0$ é de segunda ordem em λ . Os estados (4.40) e (4.41) são normalizados com respeito à aproximação de primeira ordem. Notamos também que para $\mu = \pm 2$, nós temos que aplicar a teoria de perturbações degeneradas e as fórmulas (4.40)-(4.41) não são mais válidas. Sendo aqueles valores peculiares ao problema de dois sítios, nós iremos ignorá-los. Com base física e considerando a definição (4.39), podemos assumir com segurança que $|\mu| > 2$ e $|\lambda| < 1$.

Utilizando os resultados acima, nós temos para o nanocontato na configuração P :

$$\begin{aligned} \alpha_1 = \alpha_2 = \alpha &= \hbar B(A + C) (1 + \eta^2) = \frac{\hbar \lambda (1 + \eta^2)}{(2\mu + 4) \left[1 + \left(\frac{\lambda}{2\mu+4}\right)^2 \right]}, \\ \beta_1 = \beta_2 = \beta &= \frac{1 + \eta^2}{2} \hbar (A^2 - C^2) = \frac{\hbar (1 + \eta^2)}{2 \left[1 + \left(\frac{\lambda}{2\mu+4}\right)^2 \right]}, \\ \gamma_{12} = \gamma &= \hbar (A^2 - C^2) = \frac{\hbar}{1 + \left(\frac{\lambda}{2\mu+4}\right)^2}, \\ \delta_{12} = \delta &= 2\hbar B(A - C) \approx \frac{2\hbar \lambda}{(2\mu + 4) \left[1 + \left(\frac{\lambda}{2\mu+4}\right)^2 \right]}, \end{aligned}$$

e no caso AP :

$$\begin{aligned} \alpha_1 = \alpha_2 = \bar{\alpha} &= \hbar \bar{B} (\bar{A} + \bar{C}) (1 + \eta^2) = \frac{\hbar \lambda (1 + \eta^2)}{(2\mu - 4) \left[1 + \left(\frac{\lambda}{2\mu-4}\right)^2 \right]}, \\ \beta_1 = -\beta_2 = \bar{\beta} &= \frac{1 - \eta^2}{2} \hbar (\bar{A}^2 - \bar{C}^2) = \frac{\hbar (1 - \eta^2)}{2 \left[1 + \left(\frac{\lambda}{2\mu-4}\right)^2 \right]}, \\ \gamma_{12} = \bar{\gamma} &= 0, \\ \delta_{12} = \bar{\delta} &= 2\hbar \bar{B} (\bar{A} - \bar{C}) \approx \frac{2\hbar \lambda}{(2\mu - 4) \left[1 + \left(\frac{\lambda}{2\mu-4}\right)^2 \right]}. \end{aligned}$$

Os estados de energia mais baixa de $\mathcal{H}_0$ são dados por (4.21). Utilizando os valores para a configuração P temos:

$$|\Psi_{1-}\rangle = \cos \theta_P |1\uparrow\rangle + \sin \theta_P |1\downarrow\rangle, \quad (4.42)$$

$$|\Psi_{2-}\rangle = \cos \theta_P |2 \uparrow\rangle + \sin \theta_P |2 \downarrow\rangle , \quad (4.43)$$

com $\theta_1 = \theta_2 = \theta_P$ determinado por (4.23), que para pequeno valor de λ resulta em:

$$\theta_P \approx \frac{\alpha/\beta}{2 + \frac{1}{2}(\alpha/\beta)^2} , \quad (4.44)$$

onde

$$\alpha/\beta = \frac{\lambda}{\mu + 2} .$$

A condutância, determinada utilizando (4.25) será

$$G_P = \frac{e^2}{2\pi\hbar |t_0|^2} \left(\frac{1 + \varsigma_F \cos 2\theta_P}{1 + \varsigma_F} \right)^2 |t - K_1\eta [\delta \sin(2\theta_P) + \gamma \cos(2\theta_P)]|^2 , \quad (4.45)$$

com $t = t_{12}$ sendo o parâmetro de hopping.

No caso da configuração AP as mesmas fórmulas levam a:

$$|\Psi_{1-}\rangle = \cos \theta_{AP} |1 \uparrow\rangle + \sin \theta_{AP} |1 \downarrow\rangle , \quad (4.46)$$

$$|\Psi_{2-}\rangle = \sin \theta_{AP} |2 \uparrow\rangle + \cos \theta_{AP} |2 \downarrow\rangle , \quad (4.47)$$

entretanto, agora $\sin \theta_1 = \cos \theta_2 = \sin \theta_{AP}$, onde

$$\theta_{AP} \approx \frac{\bar{\alpha}/\bar{\beta}}{2 + \frac{1}{2}(\bar{\alpha}/\bar{\beta})^2} , \quad (4.48)$$

dentro da mesma aproximação, com relação

$$\bar{\alpha}/\bar{\beta} = \frac{\lambda(1 + \eta^2)}{(1 - \eta^2)(\mu - 2)} .$$

A expressão analítica para a condutância AP é:

$$G_{AP} = \frac{e^2}{2\pi\hbar |t_0|^2} \left(\frac{1 + \varsigma_F \cos 2\theta_{AP}}{1 + \varsigma_F} \right)^2 |t \sin(2\theta_{AP}) - K_1\eta\bar{\delta}|^2 . \quad (4.49)$$

Definindo a quantidade adimensional

$$\Gamma \equiv \frac{\hbar K_1}{t} , \quad (4.50)$$

e fazendo uso do fato de que o parâmetro θ em ambas as configurações P e AP é pequeno, que significa uma forte anisotropia ao longo de z ou em outras palavras $\lambda \ll \mu$, obtemos aproximadamente:

$$G_P \approx \frac{e^2}{2\pi\hbar} \left(\frac{|t|}{|t_0|} \right)^2 \left(1 - \frac{2\varsigma_F}{1 + \varsigma_F} \theta_P^2 \right)^2 \left| 1 - \Gamma\eta \frac{2\delta \theta_P + \gamma(1 - 2\theta_P^2)}{\hbar} \right|^2 , \quad (4.51)$$

$$G_{AP} \approx \frac{e^2}{2\pi\hbar} \left(\frac{|t|}{|t_0|} \right)^2 \left(1 - \frac{2\varsigma_F}{1 + \varsigma_F} \theta_{AP}^2 \right)^2 |2\theta_{AP} - \Gamma\eta \ (\bar{\delta}/\hbar)|^2, \quad (4.52)$$

que pode ser escrita diretamente em termos de μ e λ através da definição

$$\xi_{\pm} = \frac{\lambda}{2\mu \pm 4},$$

que é essencialmente a razão entre o campo transversal para o longitudinal. As fórmulas acima podem ser rearranjadas na forma abaixo:

$$\begin{aligned} G_P = & \frac{e^2}{2\pi\hbar} \left(\frac{|t|}{|t_0|} \right)^2 \left(1 - \frac{2\varsigma_F}{1 + \varsigma_F} \times \frac{\xi_+^2}{1 + 2\xi_+^2} \right)^2 \times \\ & \times \left| 1 - \Gamma\eta \frac{1}{1 + \xi_+^2} \left(1 + \frac{4\xi_+^2}{1 + \xi_+^2} - \frac{2\xi_+^2}{1 + 2\xi_+^2} \right) \right|^2, \end{aligned} \quad (4.53)$$

e

$$\begin{aligned} G_{AP} = & \frac{e^2}{2\pi\hbar} \left(\frac{|t|}{|t_0|} \right)^2 \left(1 - \frac{2\varsigma_F}{1 + \varsigma_F} \times \frac{(1 - \eta^4)^2 \xi_-^2}{(1 - \eta^2)^4 + 2(1 - \eta^4)^2 \xi_-^2} \right)^2 \times \\ & \times \left| \frac{2(1 - \eta^4) \xi_-}{(1 - \eta^2)^2 + (1 + \eta^2)^2 \xi_-^2} - \Gamma\eta \frac{2\xi_-}{1 + \xi_-^2} \right|^2. \end{aligned} \quad (4.54)$$

Alguns comentários seguem agora:

- i)* as equações (4.51) e (4.52) contém efeitos de interferência na forma de contribuições cinéticas e magnéticas misturadas. Em geral, t, η, γ, δ e $\bar{\delta}$ podem ser complexos, levando a uma condutância dependente da fase;
- ii)* o limite não magnético ($K_1 = 0, \varsigma_F = 0$) é muito sutil, e não pode ser obtido diretamente das fórmulas acima. Quando $K_1 = 0$, os dois estados $|\Psi_{i,-} >$ e $|\Psi_{i,+} >$ são degenerados e temos que incluir os dois canais e as transições cruzadas também. Isto resulta em $(e^2/\pi\hbar)$ para ambas as configurações P e AP na situação ideal $t = t_0$;
- iii)* quando $t = 0$, o regime de tunelamento é encontrado. Como $t \neq 0$, a MR continua dada pela equação (4.30), não depende de t , exceto através do parâmetro Γ , que mede a troca $s - d$ em unidades da constante de hopping. O parâmetro restante, η leva informação da distância entre dois átomos e $\xi_{\pm}$ mede a força do campo transversal λ relativo ao campo longitudinal μ ;
- iv)* se a troca $s - d$ é do tipo antiferromagnético os papéis de $|\Psi_{i,-} >$ e $|\Psi_{i,+} >$ devem ser intercambiados;

- v) o limite altamente anisotrópico, $\lambda \rightarrow 0$, dá MR infinita. Neste limite, a probabilidade de transição com spin flip no contato se anula, fechando o canal no esquema AP ;
- vi) a polarização introduz uma pequena redução de ambas as condutâncias, mas um fortalecimento do efeito de MR, já que $\theta_{AP} > \theta_P$;
- vii) dentro do regime anisotrópico estudado, G_{AP} é sempre menor que G_P , resultando em um efeito de MR grande.

Agora nós estimamos o efeito de MR em casos típicos. Adotando, como um exemplo prático, os valores $\eta^2 = 0.1$, $\Gamma = 0.3$, $\mu = 4$ e $\lambda = 0.8$, e um ferromagneto fracamente polarizado com $\varsigma_F = 0.2$, obtemos $G_P \approx 0.80 (|t|^2/|t_0|^2) e^2/(2\pi\hbar)$, $G_{AP} \approx 0.17 (|t|^2/|t_0|^2) e^2/(2\pi\hbar)$ e $\Delta G/G \approx 370\%$, que está em acordo qualitativo com alguns resultados experimentais para nanocontatos [72,78]. Notamos que atualmente o controle dos arranjos experimentais está no limite da escala atômica [70,74,85], como proposto na nossa teoria idealizada.

4.4 Condutância para um nanocontato: eletrodos não magnéticos

Para eletrodos ferromagnéticos, como mostrado na Seção anterior, a configuração magnética (P ou AP) modifica profundamente a condutância. Em um aparato experimental ideal, a configuração é monitorada aplicando pequenos campos magnéticos locais nos eletrodos. Na Ref. [74], medidas de condutância são reportados para contatos atômicos obtidos através da técnica de "break junction", para metais de transição ferromagnéticos (Co) e não magnéticos (Pd and Pt) a temperatura ambiente sem nenhum campo magnético externo aplicado. Em todos os casos, histogramas da condutância mostram picos bem definidos a aproximadamente $(e^2/2\pi\hbar)$, o quantum de condutância para um canal. Para o ferromagnético Co , o comportamento acima corresponde aproximadamente ao que foi calculado na Seção anterior para o esquema P , onde as magnetizações dos eletrodos (R_1 e R_2) são paralelas. A troca $s-d$ separa os canais de condução no contato, a separação sendo maior que a ordem de energia térmica da temperatura ambiente, e a condutância resulta próxima do valor $(e^2/2\pi\hbar)$. Pequenas correções desta última para valores menores

são devidas a efeitos de polarização, amplitude de hopping diferentes e espalhamento magnético das flutuações quânticas no contato [veja Eq.(4.51) por exemplo]. De fato, o valor de pico da condutância reportado em [74] é ligeiramente menor do que o valor de $(e^2/2\pi\hbar)$.

Fica a questão dos metais de transição não magnéticos. É bem sabido que o Paládio (*Pd*) desenvolve um *momento gigante* quando hospedando impurezas magnéticas. Realmente, *Pd* está logo abaixo do *Ni* na tabela periódica e tem propriedades eletrônicas similares, exceto que o *Ni* é ferromagnético e o *Pd* não, mas próximo. Então, é razoável assumir que efeitos de localização e anisotropia em orbitais *d* podem induzir momento magnético no contato. O mesmo será verdadeiro para a *Pt*, que está abaixo do *Pd*, mas com uma polarização muito menor. Para tais sistemas, a condutância pode ser calculada seguindo um procedimento similar ao das Secções anteriores com a consideração adicional de que os eletrodos são não magnéticos. Para o contato de dois átomos, resolvemos tanto (4.37) ou (4.38) com $\mu = 0$ (condições de contorno de extremos livres - Free Ends (*FE*)). Isto pode ser feito de maneira exata em forma fechada, com o estado fundamental $|FE\rangle$ que tem a forma geral (4.31), fazendo $A = C$

$$|FE\rangle = A(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle) + B(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) , \quad (4.55)$$

onde os coeficientes são dados por:

$$A = C = \frac{(1 + \sqrt{1 + \lambda^2})^{1/2}}{2(1 + \lambda^2)^{1/4}} , \quad (4.56)$$

$$B = \frac{\lambda}{2(1 + \lambda^2)^{1/4}(1 + \sqrt{1 + \lambda^2})^{1/2}} .$$

Para valores pequenos de λ , $\lambda \approx 0$, o estado dominante tem contribuições dos estados $|\uparrow\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\downarrow\rangle$. Para valores muito grandes de λ , todos os coeficientes vão assintoticamente para o mesmo valor, $A, B, C \rightarrow 1/2$, com misturas iguais para todos os estados da base (este é o regime de grandes flutuações quânticas). Mas o que é importante para a condutância é que $A = C$ para qualquer λ . Vamos trabalhar nisso abaixo. Uma vez que o estado fundamental magnético é conhecido, calculamos os parâmetros dos hamiltonianos eletrônicos (4.18) e (4.19), utilizando a mesma aproximação que substitui os operadores de spin por seus valores médios

no estado magnético fundamental. Estes cálculos fornecem os seguintes resultados

$$\alpha = \hbar (1 + \eta^2) \frac{\lambda}{2\sqrt{1 + \lambda^2}} , \quad (4.57)$$

$$\beta = \gamma = \delta = 0 .$$

Então, obtemos uma separação de energia dos canais $|\Psi_{i-}\rangle$ e $|\Psi_{i+}\rangle$ dada por $2K_1\alpha = \hbar K_1 (1 + \eta^2) \lambda / \sqrt{1 + \lambda^2}$, com os estados

$$|\Psi_{i-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |i \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |i \downarrow\rangle ,$$

$$|\Psi_{i+}\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}} |i \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |i \downarrow\rangle ,$$

com índice de sítio $i = 1, 2$, *i.e.* para condições de contorno FE , a probabilidade de encontrar o spin no estado para cima ou para baixo é a mesma para ambos, $|\Psi_{i-}\rangle$ e $|\Psi_{i+}\rangle$. Uma vez que (γ, δ) identicamente se anulam (devido à simetria $A = C$), o termo de spin-flip se cancela no Hamiltoniano de transferência (4.19), resultando numa fórmula simples para a condutância

$$G_{FE} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \left(\frac{|t|}{|t_0|} \right)^2 . \quad (4.58)$$

Assumindo que os elétrons de condução são do tipo s , o hopping $|t|$ não é muito diferente do hopping do volume $|t_0|$, e a condutância é próxima ao valor $(e^2/2\pi\hbar)$ do quantum para um canal. Comparando com o caso ferromagnético G_P discutido acima, o valor para G_{FE} deve ser mais próximo do valor do quantum. A física para o último caso é simples: a interação de troca $s - d$ no contato produz a separação dos dois canais, mas a condutância é livre de efeitos de espalhamento magnético devido às condições de contorno de extremos livres FE . Notamos que nosso resultado concorda com aqueles encontrados na Ref. [74].

4.5 Conclusões e Comentários Gerais

Aqui, fazemos um sumário do que foi feito neste Capítulo. Nós mostramos a possibilidade de obter efeito de MR grande em contatos atômicos ferromagnéticos, quando é possível manipular a configuração magnética dos eletrodos. Na configuração AP , uma parede de domínio quântica é produzida na região do contato, que para o caso

de dois átomos é ilustrada pelo estado (4.41). Esta configuração conduz, dado que o spin do elétron entrando no contato pode girar. Esta possibilidade é permitida pelas flutuações quânticas no contato, que se desenvolvem como uma manifestação da dimensionalidade reduzida do dispositivo. Em nosso modelo simplificado, as flutuações são levadas em conta através de um campo magnético transversal λ , que pode também incorporar, de um modo efetivo efeitos de acoplamento spin-órbita. A MR, como definida por (4.30), pode ser feita tão grande quanto se queira, se pudermos suprimir as flutuações quânticas, *i.e.* quando $\lambda \rightarrow 0$. Certamente, sabemos que este processo tem limites fundamentais (princípio da incerteza). A interação de troca $s - d$ separa os canais de condução no contato. De fato, se o eixo de quantização é escolhido ao longo da polarização dos eletrodos, os estados no contato são hibridizados em spin e separam-se em energia (ao redor do nível de Fermi dos eletrodos) pela energia de troca. Nós assumimos que a condutância ocorre por orbitais do tipo s e que orbitais d são mais localizados no contato e responsáveis pelos momentos magnéticos locais. As mesmas hipóteses gerais foram assumidas para analisar o caso de metais de transição não magnéticos. Flutuações quânticas para o último caso são entretanto muito fortes na ausência de condições de contorno que fixem uma direção privilegiada do espaço. Como resultado líquido, o termo de espalhamento por spin-flip se cancela no Hamiltoniano de transferência. Falaremos mais sobre isso mais adiante.

Nós também assumimos que apenas dois canais são disponíveis para a condução. Mesmo no caso mais simples, o ruído quântico deve ser esperado em temperaturas finitas, devido às flutuações entre estados permitidos para a condução eletrônica em cada sítio. Em um dispositivo de junção quebrada (break junction), pode-se também ter flutuações induzidas mecanicamente na distância entre átomos, quem em nosso modelo teórico é levado em conta com os parâmetros (η, t) . Uma possibilidade interessante para aplicações poderia ser a excitação ressonante do segundo canal por radiação de microondas, chaveando o outro quantum de condutância.

A análise dos diferentes parâmetros que entram na teoria deve ser colocada agora. Nós já discutimos a importância de η , *i.e.* leva informação a respeito da distância entre os átomos. O parâmetro de hopping t é uma função do formato dos orbitais de condução bem como da proximidade entre eles. Para elétrons do tipo s assumimos que t não difere muito dos valores encontrados no volume (bulk) t_0 . Γ é uma medida da energia de troca, em unidades do parâmetro de hopping t , e é relacionada

com a energia de separação entre os canais. Finalmente, $\xi_{\pm}$ descreve a importância relativa das flutuações quânticas magnéticas no contato, e é proporcional ao campo magnético transversal λ . Nossa abordagem mostra que λ é um parâmetro relevante para o fenômeno de MR. A redução da dimensionalidade e coordenação do contato localiza os estados $3d$ e fortalece seus momentos magnéticos, para ambos, a contribuição do spin e do orbital [85]. Portanto o campo transversal efetivo λ deve ter uma componente de acoplamento spin-órbita muito importante. Mesmo para o *Pd* e a *Pt*, resultados experimentais provam que contatos atômicos desenvolvem magnetismo [74]. Nós utilizamos o fato acima em nossos cálculos de condutância em tais sistemas.

A baixa dimensionalidade do contato também reduz efeitos de screening. O fenômeno do bloqueamento de Coulomb tem duas consequências: supressão das correntes dissipativas e condução por processos de um único elétron. Um único elétron, passando através do contato, sente as rápidas flutuações dos momentos magnéticos pelo seu valor médio. Este cenário é suportado pelos resultados experimentais reportados na Ref. [74].

Um importante ponto a ser investigado à temperaturas finitas é a densidade espectral do ruído de corrente para o modelo de dois canais aqui apresentado. O ruído espectral é discutido em [86]. Estendendo o que foi apresentado aqui, no próximo Capítulo estudamos a condutância de um nanofio, constituído por mais de dois átomos.

Como último ponto, foi sugerido em [70] que o mecanismo de acoplamento spin-órbita fortemente afeta a MR quando elétrons d tem contribuição significativa para a condução. Os canais do tipo d irão estar abertos quando os átomos que formam o nanocontato estão próximos o bastante para fazer a superposição de orbitais d não negligenciáveis. Neste caso é necessário adicionar ao hamiltoniano do elétron itinerante um termo representando um acoplamento spin-órbita local conforme segue:

$$H_{LS} = \sum_i \frac{\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{\sigma} \cdot \vec{l}_i \delta(\vec{x} - \vec{x}_i)$$

A solução exata é muito mais complicada e desnecessária. Entretanto esse termo abre outros canais para inversão de spin, aumentando consideravelmente os estados possíveis no espaço de Hilbert, devido ao produto tensorial entre estados de momento angular orbital e espaços de spin. Se é possível considerar superposição de

orbitais vizinhos com diferentes números quânticos magnéticos desprezível, o spin-flip é pequeno e podemos introduzir, fenomenologicamente um novo parâmetro de hopping, dado por uma média do acoplamento spin-órbita:

$$t'_{ij} = t_{ij} + \left\langle \sum_k \frac{\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \phi_i^*(\vec{x}_k) \sigma_z l_z \phi_j(\vec{x}_k) \right\rangle_{ij} \quad (4.59)$$

A média $\langle \sigma_z \rangle$ no alinhamento paralelo tende à unidade ao passo que no alinhamento anti-paralelo é identicamente nula. Os orbitais tendem a se re-alinharem com o campo magnético efetivo pelo mecanismo de acoplamento spin-órbita. O sinal do termo $\langle \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \phi_i^*(\vec{x}_k) l_z \phi_j(\vec{x}_k) \rangle$ é importante para determinar se esta contribuição é positiva ou negativa para o hopping efetivo. Considerando estados fundamentais para elétrons de condução nós temos, na configuração paralela

$$t'_P = t + m\sqrt{\eta} \left\langle \frac{\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \phi^* \phi \right\rangle (\cos^2 \theta_P - \sin^2 \theta_P) \quad (4.60)$$

sendo m o número quântico magnético (deve ser um valor médio) e para o alinhamento anti-paralelo

$$t'_{AP} \approx t \quad (4.61)$$

Se o termo corretivo soma-se positivamente ao hopping inicial t a condutância paralela cresce, bem como a MR enquanto o contrário também pode ocorrer, decrescendo a MR por meio do acoplamento spin-órbita. À primeira vista parece um fenômeno estranho que o acoplamento spin-órbita afete de maneira mais pronunciável a configuração paralela do que a anti-paralela, entretanto, aqui estamos negligenciando os canais de spin-flip providenciados pelo mecanismo de spin-órbita, e este efeito é mais significativo para a configuração anti-paralela, aumentando a condutância anti-paralela, com efetivo decréscimo da MR. De fato, apesar da possibilidade de considerar o acoplamento spin-órbita através de um hopping efetivo, uma análise mais rigorosa é necessária. Acreditamos, todavia, que somente o acoplamento spin-órbita (como foi sugerido na literatura) não é suficiente para explicar o fenômeno de MR gigante em nanocontatos, devido a sua ordem de magnitude quando comparada à interação spin-spin.

Capítulo 5

Propriedades Gerais de Transporte em Nanofios Ferromagnéticos

Aqui neste Capítulo nós discutimos as características gerais do transporte quântico em nanofios ferromagnéticos baseando-nos em um modelo teórico simples: a distribuição de spin local é providenciada por elétrons do tipo d localizados e governado por um hamiltoniano ferromagnético de Heisenberg-Ising, ao passo que para os elétrons de condução o modelo de Anderson para o transporte pode ser considerado. Devemos apontar que os elétrons d não são cruciais na descrição do fenômeno da condução, sendo os elétrons de condução do tipo s em caráter. A interação entre spin local e os elétrons itinerantes é dada por $H_I = -\Delta \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{\sigma} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$. A partir disso, a condutância e a magnetorresistência gigante para um nanofio entre dois eletrodos ferromagnéticos são obtidas e explicadas, com base na teoria de Landauer.

O modelo teórico que utilizamos neste Capítulo é, na essência, o mesmo que utilizado no Capítulo 4, entretanto fazemos aqui algumas aproximações que nos permite a obtenção de resultados analíticos para a condutância e a MR tanto no limite de um nanofio infinito quanto de um nanocontato. O assunto discutido neste capítulo resultou na publicação de um artigo:

- C.A. Dartora, G.G. Cabrera, “Quantum transport in a ferromagnetic nanowire: conductance and MR effect”, Phys. Lett. A **334** (2005), 46-54 (**Anexo 3**);

5.1 Modelo Teórico: Hamiltoniano proposto para um nanofio

A estrutura a ser estudada é mostrada esquematicamente na Fig. 4.4. R_1 e R_2 são dois reservatórios ferromagnéticos (eletrodos) entre os quais um nanofio é colocado (pode ser construído por tração de um *bulk* cilíndrico ferromagnético). Campos magnéticos externos são aplicados a cada eletrodo ao longo da direção z (que nós escolhemos para ser a mesma da orientação do nanofio modificam a estrutura de bandas dos reservatórios e determinam a distribuição de spin ao longo do nanofio impondo condições de contorno nas extremidades do nanofio, que interagem com os reservatórios R_1 e R_2 . O sistema constituído pelos dois reservatórios e o nanofio estará em uma configuração paralela (P) se o campo magnético aplicado tem o mesmo sentido em ambos os eletrodos e estará em uma configuração anti-paralela (AP) se o campo magnético aplicado a R_2 tem sentido oposto em relação ao do campo aplicado a R_1 . No esquema P as bandas de spin majoritárias e minoritárias são as mesmas em ambos os reservatórios. Em contrapartida, para o alinhamento AP a banda de spin majoritária em R_1 será a minoritária em R_2 . Por simplicidade consideramos que os elétrons d não participam da condução sendo responsáveis, principalmente, pelo hamiltoniano magnético do tipo Heisenberg-Ision para uma cadeia de spins com N sítios, conforme segue:

$$H_M = -J \sum_{i=1}^{N-1} S_i^z S_{i+1}^z - g \sum_{i=1}^N H_i^z S_i^z - h \sum_{i=1}^N (S_i^+ + S_i^-) \quad (5.1)$$

onde J é a energia de troca entre sítios vizinhos e g uma constante de acoplamento relativa ao campo magnético efetivo H_i^z e o spin local no nanofio. O campo magnético efetivo é proveniente da interação entre o nanofio e os reservatórios e pode ser muito maior em magnitude do que o campo aplicado externamente aos reservatórios. O campo externo é responsável pela magnetização dos eletrodos. Em termos clássicos, pode-se pensar em um campo externo H^z aplicado aos reservatórios orientando os domínios magnéticos do volume, sendo a magnetização resultante dada por $M^z = \chi H^z$, com χ da ordem de centenas ou milhares em eletrodos ferromagnéticos. Uma vez que a magnetização está estabelecida, o nanofio interage principalmente com a magnetização. O caso mais simples é considera que $H_i = 0$ exceto nos extremos do nanofio, com $|H_1| = |H_N| = M$ impondo as condições de contorno para

o hamiltoniano magnético. O hamiltoniano (5.1) permite desse modo o cálculo da distribuição de spin ao longo do nanofio, na ausência dos elétrons de condução.

Percebe-se facilmente que este hamiltoniano é não-diagonal na base de S^z devido ao termo h . Este termo não diagonal representa tanto o acoplamento entre as componentes transversais do spin, um campo magnético efetivo transversal proveniente do acoplamento spin-órbita para os orbitais d ou ainda um campo magnético transversal externamente aplicado (microondas por exemplo) que pode ser confinado à região do nanofio. A configuração P favorece o alinhamento de todos os spins enquanto que no esquema AP a existência de paredes de domínio é permitida ao longo do nanofio. Consideremos agora o hamiltoniano de elétrons de condução

$$H_e = \int d^3\mathbf{x} \Psi^\dagger(\mathbf{x}) \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \gamma \vec{H} \cdot \vec{\sigma} + V(z) \right) \Psi(\mathbf{x}) \quad (5.2)$$

sendo $\Psi(\mathbf{x})$ o campo fermiônico (destrói um elétron no ponto $\mathbf{x}$), $\mathbf{p}^2/2m$ o termo de energia cinética, $\gamma \vec{H} \cdot \vec{\sigma}$ o termo de Zeeman (o qual pode ser desprezado, em geral) e $V(z)$ a energia potencial devido ao potencial de rede superposto a uma voltagem aplicada. A interação entre spin eletrônico e a magnetização local é simplesmente a troca entre elétrons d e elétrons de condução

$$H_I = -\Delta \sum_i \int d^3\mathbf{x} \Psi^\dagger(\mathbf{x}) \vec{S}_i \cdot \vec{\sigma} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \Psi(\mathbf{x}) \quad (5.3)$$

onde Δ é a energia de troca entre elétrons tipo s e d localizados, $\vec{\sigma}$ são as matrizes spin de Pauli e $\delta(\cdot)$ a função delta de Dirac. Expandimos agora $\Psi(\mathbf{x})$ em orbitais atômicos, considerando em cada átomo do nanofio apenas dois orbitais do tipo s , um para spin para cima ($\uparrow$) e outro para spin para baixo ($\downarrow$), como segue

$$\Psi(\mathbf{x}) = \sum_{i\sigma} \phi_{i\sigma}(\mathbf{x}) \xi_\sigma$$

sendo ξ_σ os spinores de Pauli e $\phi_{i\sigma}$ os orbitais atômicos do i -ésimo sítio com spin σ , e o resultado final é

$$H_e = \sum_{i\sigma} \epsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \quad (5.4)$$

$$H_I = -\Delta \sum_{ijn} \zeta_{ijn} \left\{ c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow} S_n^+ + c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} S_n^- + \left(c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \right) S_n^z \right\} \quad (5.5)$$

sendo ϵ_i a energia intra-sítio, t_{ij} o parâmetro de hopping, $c_{i\sigma}^\dagger(c_{i\sigma})$ o operador de criação(aniquilação) de um elétron de condução com spin σ no i -ésimo sítio, ζ_{ijn} uma

função determinada por orbitais atômicos e a superposição dos orbitais localizados em diferentes sítios. O modelo apresentado é simplesmente o modelo de Anderson para o transporte por hopping levando em conta o spin eletrônico em uma rede ferromagnética [1,2]. Observando o hamiltoniano total, que é composto por (5.1), (5.4) e (5.5) pode-se facilmente concluir que a dinâmica do sistema é muito complicada devido à influência mútua entre magnetização e elétrons de condução, que são constantemente injetados no nanofio pelo potencial acelerador da voltagem aplicada externamente aos eletrodos. Os elétrons de condução carregam spin e interagem com a magnetização local. O hopping direto de um elétron com spin σ faz com que a carga líquida no i -ésimo sítio mude com o tempo, dando origem a um campo magnético efetivo dependente do tempo ao longo da direção z enquanto o hopping com spin-flip dá origem a um campo magnético transversal também dependente do tempo. Dessa maneira o hamiltoniano magnético (5.1) pode ser pensado como um hamiltoniano efetivo incluindo os campos magnéticos médios no tempo devido aos elétrons de condução e sua interação com os spins locais. Em um grande número de materiais e estruturas são os elétrons de condução mesmos os responsáveis pela interação de troca da forma (5.1), sendo a troca entre sítios diferentes dada por uma integral de troca indireta providenciada pelos elétrons de condução. O parâmetro de troca J nesses casos é uma função periódica como no modelo RKKY [40-43].

O hamiltoniano total do sistema é $H = H_M + H_e + H_I$, entretanto o modelo acima é muito difícil de resolver de maneira analítica mesmo considerando $S = 1/2$ para o spin local, devido as interações entre elétrons localizados e de condução. Neste ponto nós iremos simplificar o modelo mencionado, considerando uma aproximação de *tight-binding* com parâmetro de hopping constante t . Fazemos também com que o spin-flip para elétrons de condução seja possível somente intra-sítio, considerando para isso $\zeta_{ijn} = 1$ para $i = j = n$ e sendo nulo caso contrário:

$$H_e = \sum_{i\sigma} \varepsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + t \sum_{i,\sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + c_{i+1,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \right) \quad (5.6)$$

$$H_I = -\Delta \sum_i \left\{ c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} S_i^+ + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} S_i^- + \left(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \right) S_i^z \right\} \quad (5.7)$$

De maneira auto-consistente podemos considerar campos efetivos atuando na magnetização local devido a influência de elétrons de condução enquanto que uma magnetização local efetiva age sobre os elétrons de condução. De fato, podemos

decompor a base total $\{|\sigma_1, \sigma_2 \dots \sigma_N; n\sigma\rangle\}$ em uma base que diagonaliza o hamiltoniano magnético $\{|\sigma_1, \sigma_2 \dots \sigma_N\rangle\}$ e uma base para elétrons de condução $\{|n\sigma\rangle\}$ e a dimensionalidade e complexidade do problema se reduz. Se condições de contorno podem ser consideradas tais que fortemente determinam a magnetização local e que apenas um elétron por vez passa pelo fio a cada vez devido à forte repulsão de Coulomb tem-se:

$$H_M = -J \sum_{i=1}^{N-1} S_i^z S_{i+1}^z - g \sum_i (H_i^z + \langle n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow} \rangle / 2) S_i^z - \sum_{i=1}^N \left[(h + \Delta/2 \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle) S_i^+ + (h + \Delta/2 \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle) S_i^- \right] \quad (5.8)$$

$$H_0 = \sum_{i\sigma} (\varepsilon_i - \sigma \Delta \langle S_i^z \rangle / 2) c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \quad (5.9)$$

$$H_1 = t \sum_{i,\sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + c_{i+1,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \right) - \frac{\Delta}{2} \sum_i \left\{ c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \langle S_i^+ \rangle + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} \langle S_i^- \rangle \right\} \quad (5.10)$$

$\langle . \rangle$ denotando a média com respeito à matriz densidade $\rho = \exp[-\beta H]/Z$ sendo Z a função de partição, $\beta = 1/k_B T$ e T a temperatura absoluta.

As médias dos operadores de elétrons tende a zero para voltagens próximas de zero e o problema simplifica para $T \rightarrow 0$ quando somente estados fundamentais são populados.

Na próxima Secção utilizaremos as expressões (5.8) até (5.10) para obter as propriedades de transporte principais de um nanofio no contexto da teoria de Landauer [1,2,7-9]:

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_i T_i$$

onde G é a condutância e T_i as probabilidades de transmissão do i -ésimo canal de condução.

5.2 Condutância e efeito de MR no contexto do formalismo de Landauer

Para a análise da condutância através do formalismo de Landauer precisamos inicialmente calcular a matriz de transição S , obtida por meio de uma equação de Dyson:

$$S = H_1 + H_1 G_0 S ,$$

onde $G_0 = 1/(\epsilon - \epsilon_0 + i\eta)$ é a função de Green de partícula livre, com $\eta \rightarrow 0$. As energias ϵ_0 são auto-valores de H_0 , H_1 é representado pela expressão (5.10) e os coeficientes de transmissão são $T_{ij} = |S_{ij}|^2 n_i n_j$ (n_i e n_j são as densidades de estados). A condutância de um eletrodo para outro é dada pela probabilidade de um elétron inicialmente no reservatório R_1 ser levado ao R_2 após o espalhamento no nanofio. Em outras palavras, o estado inicial do elétron de condução é $|1\sigma\rangle$ e nós esperamos que o estado final seja $|N\sigma'\rangle$. Dessa forma precisamos calcular a probabilidade de transição $|\langle N\sigma'|S|1\sigma\rangle|^2$ para obter a condutância, como segue:

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_{\sigma, \sigma'} |\langle N\sigma'|S|1\sigma\rangle|^2 n_\sigma n'_\sigma, \quad (5.10)$$

sendo a expressão acima a fórmula de Landauer de dois terminais com $T_{\sigma, \sigma'} = |\langle N\sigma'|S|1\sigma\rangle|^2 n_\sigma^1 n_{\sigma'}^2$. O termo n_σ^p é a densidade de estados para spin σ no reservatório p . Consideramos que a transmissão do reservatório para o nanofio é unitária. Para um nanofio constituído de N átomos o coeficiente de transmissão direta (sem spin-flip) é:

$$T_{\sigma, \sigma} = |t|^{2N-2} \left| \prod_{n=2}^{N-1} \frac{1}{\epsilon_\sigma - \epsilon_{n\sigma} + i\eta} \right|^2 n_\sigma^1 n_\sigma^2, \quad (5.11)$$

enquanto que a transmissão com inversão de spin será

$$T_{-\sigma, \sigma} = |t|^{2N-2} |\Delta|^2 \left| \sum_{m=1}^N \prod_{n=2}^m \frac{1}{\epsilon_\sigma - \epsilon_{n\sigma} + i\eta} \left\langle \frac{1}{2} S_m^+ \right\rangle \prod_{q=m}^{N-1} \frac{1}{\epsilon_\sigma - \epsilon_{q, -\sigma} + i\eta} \right|^2 n_\sigma^1 n_{-\sigma}^2. \quad (5.12)$$

O valor de $\epsilon_{n\sigma}$ depende da configuração. De (5.9) podemos concluir que a média do spin local influencia a energia local dos elétrons de condução, sendo o spin local dependente da configuração (o spin local é determinado pelas condições de contorno). Ainda, consideramos a banda de spin minoritário em R_1 dada por $n_\downarrow = n$ e a razão entre a banda majoritária e minoritária $n_\uparrow^1/n_\downarrow^1 = r$ constante para pequenas voltagens. Apresentamos abaixo as fórmulas gerais para a condutância em ambos os esquemas P e AP :

$$G_P = \frac{e^2}{2\pi\hbar} |t|^{2N-2} n^2 \left[(r^2 + 1) A_P(\epsilon_\sigma) + 2r |\Delta|^2 B_P(\epsilon_\sigma) \right] \quad (5.13)$$

$$G_{AP} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} |t|^{2N-2} n^2 \left[(2r) A_{AP}(\epsilon_\sigma) + (r^2 + 1) |\Delta|^2 B_{AP}(\epsilon_\sigma) \right] \quad (5.14)$$

sendo as funções A_c e B_c definidas abaixo

$$A_c(\epsilon_\sigma) = \left| \prod_{n=2}^{N-1} \frac{1}{\sigma \Delta (1 - 2 \langle S_n^z \rangle_c) / 4 + i\eta} \right|^2 \quad (5.15)$$

$$B_c(\epsilon_\sigma) = \frac{1}{4} \left| \sum_{m=1}^N \prod_{n=2}^m \frac{1}{\sigma \Delta (1 - 2 \langle S_n^z \rangle_c) / 4 + i\eta} \langle S_m^+ \rangle_c \prod_{q=m}^{N-1} \frac{1}{\sigma \Delta (1 + 2 \langle S_n^z \rangle_c) / 4 + i\eta} \right|^2 \quad (5.16)$$

c denotando a configuração, $c = P(AP)$ para paralela(anti-paralela). Nas definições acima as energias intra-sítio são $\epsilon_{n\sigma} = \epsilon_n - \sigma \Delta \langle S_n^z(c) \rangle / 2$ e a média dos operadores como S_n^z e S_m^+ são funções da configuração. As funções A_c e B_c se referem às transições virtuais que não conservam energia, entre estados intermediários entre os estados inicial e final.

Com (5.13)-(5.16) em mãos podemos obter o comportamento da condutância e da MR fazendo algumas considerações simples. Para medir a MR adotamos a definição utilizada por Garcia *et al.* [71],

$$\frac{\Delta G}{G} = \frac{G_P - G_{AP}}{G_{AP}}, \quad (5.17)$$

sendo G_P a condutância quando os campos magnéticos aplicados a R_1 e R_2 são paralelos, G_{AP} a condutância para o alinhamento anti-paralelo. Há dois casos admitindo uma análise bastante simples:

- 1- o nanofio longo, com $N \rightarrow \infty$, dimensão $2L$ e parâmetro de rede $a = 2L/N$. A magnetização é determinada por (5.8) e possibilita a existência de paredes de domínio de Bloch da forma $S_z = \frac{1}{2} \tanh(z/\lambda)$ no esquema AP [24,68], sendo λ a largura efetiva da parede;
- 2- o nanocontato realizado com $N = 2$ apenas. Neste caso a magnetização é facilmente obténível através de (5.8).

Para o primeiro caso, um nanofio de dimensão $2L$ e grande número de átomos N , temos as seguintes expressões:

$$B_P \approx 0,$$

$$A_{AP} \approx \left| \prod_{n=2}^{N-1} \frac{1}{\sigma \Delta (1 - \tanh(z_n/\lambda)) / 4 + i\eta} \right|^2,$$

$$B_{AP} \approx \frac{\kappa A_{AP}}{4|\Delta|^2 a^2} \left| \int_{-L}^L \operatorname{sech} \left(\frac{z}{\lambda} \right) dz \right|^2,$$

onde $a = 2L/N$ é a constante de rede, λ é a largura da parede de domínio formada no esquema AP e κ é um fator constante. Fazendo uso das expressões acima, a condutância nas configurações P e AP é mostrada abaixo:

$$G_P \approx \frac{e^2}{2\pi\hbar} (r^2 + 1) T_P \quad (5.18)$$

e

$$G_{AP} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} T_{AP} \left[(2r) + (r^2 + 1) |\Delta|^2 \frac{B_{AP}}{A_{AP}} \right], \quad (5.19)$$

com coeficiente de transmissão T_c definido como $T_c = |t|^{2N-2} n^2 A_c$, $c = (P, AP)$. A MR é escrita da seguinte maneira:

$$\frac{\Delta G}{G} \approx \frac{r^2 + 1}{2r} \frac{T_P}{T_{AP}} \left(1 - \frac{r^2 + 1}{2r} |\Delta|^2 \frac{B_{AP}}{A_{AP}} \right) - 1 \quad (5.20)$$

Definindo a relação $T_P/T_{AP} = \gamma \geq 1$ e avaliando expressão para B_{AP} encontramos

$$\frac{\Delta G}{G} \approx \frac{r^2 + 1}{2r} \gamma \left(1 - \frac{r^2 + 1}{2r} \kappa \frac{4\lambda^2}{a^2} \left| \operatorname{ArcTan} \left[\operatorname{Tanh} \left(\frac{L}{2\lambda} \right) \right] \right|^2 \right) - 1. \quad (5.21)$$

Considerando a situação física, onde a MR é, em geral, positiva, aproximamos o parâmetro κ pela expressão abaixo:

$$\kappa \approx \frac{2r}{r^2 + 1} \left(1 - \frac{2r}{r^2 + 1} \right) \frac{13a^2}{\pi^2 L^2}$$

e a MR é portanto dada por

$$\frac{\Delta G}{G} \approx \frac{r^2 + 1}{2r} \gamma \left[1 - \left(1 - \frac{2r}{r^2 + 1} \right) \frac{52\lambda^2}{\pi^2 L^2} \left| \operatorname{ArcTan} \left[\operatorname{Tanh} \left(\frac{L}{2\lambda} \right) \right] \right|^2 \right] - 1. \quad (5.22)$$

Das expressões acima para a MR podemos concluir o seguinte:

- i) a MR obtida através de (5.22) é sempre positiva, mesmo para $r \approx 1$. Nesta situação os reservatórios são não-magnéticos e $r \rightarrow 1$, então temos $\Delta G/G \approx \gamma - 1$, que é um valor negligenciável pois $\gamma \approx 1$ para reservatórios não magnéticos. Portanto, para obtenção de valores de magnetorresistência consideráveis é necessário que os reservatórios apresentem grande polarização de spin, isto é, $r > 1$;

- ii) a largura da parede de domínio λ tem valor máximo da ordem de L . Entretanto uma importante condição para obtenção de valores apreciáveis de MR é que $\lambda \ll L$, o que signifiva que λ não pode ser maior do que umas poucas constantes de rede. Quando $\lambda \rightarrow L$ a magnitude da MR torna-se desprezível, e outra vez é da ordem de $\gamma - 1$.

Para obter valores significativos de MR é necessário que $L \gg \lambda$, correspondendo portanto ao regime balístico de transporte discutido nas Refs. [65,68]. Quando $\lambda \approx L$ o elétron de condução pode seguir adiabaticamente a magnetização local, sendo o efeito de MR negligenciável. Também os reservatórios devem ser magnéticos, permitindo alta polarização das bandas de spin, o que corresponde a $r \gg 1$. O fator γ relaciona a transmissão direta na configuração paralela com a transmissão direta da configuração anti-paralela e sempre é maior que a unidade. Considerando que $\lambda \ll L$ na expressão (5.22) nós obtemos

$$\frac{\Delta G}{G} \approx \frac{r^2 + 1}{2r} \gamma \left[1 - \left(1 - \frac{2r}{r^2 + 1} \right) \frac{\pi \lambda^2}{L^2} \right] - 1, \quad (5.23)$$

e podemos claramente ver que na expressão acima quanto menor a largura da parede de domínio λ , maior é o valor da MR.

O outro limite a ser discutido é quando $N = 2$, caracterizando um nanocontato simples. A solução de (5.8) é determinada através da teoria de perturbação, sendo que o resultado final está escrito abaixo:

$$|P\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\mu\nu}{2\mu+4}\right)^2}} \left(|\uparrow\uparrow\rangle + \frac{\mu\nu}{2\mu+4} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \right), \quad (5.24)$$

$$|AP\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\mu\nu}{2\mu-4}\right)^2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle + \frac{\mu\nu}{2\mu-4} (|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle) \right), \quad (5.25)$$

com

$$\mu = \frac{4gM}{\hbar J} \quad \text{e} \quad \nu = \frac{\hbar}{M}. \quad (5.26)$$

O auto-estado $|P\rangle$ ($|AP\rangle$) representa a magnetização no nanocontato para o estado fundamental na configuração $P(AP)$. O parâmetro μ é a razão entre a interação do nanocontato com os eletrodos (gM) e a interação de troca entre os sítios vizinhos ($\hbar J$), enquanto ν é a razão entre o campo magnético transversal efetivo $\hbar$

e o módulo da magnetização efetiva dos eletrodos M . A média do operador S^+ é dependente do esquema de alinhamento,

$$\langle S^+ \rangle_c = \frac{x_c}{1 + x_c^2} \quad (5.27)$$

com

$$x_P = \frac{\mu\nu}{2\mu + 4} \quad (5.28)$$

e

$$x_{AP} = \frac{\mu\nu}{2\mu - 4}. \quad (5.29)$$

Para o nanocontato, $N = 2$, nós temos $A_P = A_{AP} = 1$ e a separação de energia de elétrons de condução com spin para cima e spin para baixo da ordem de Δ . Então, nós encontraremos:

$$G_P \approx \frac{e^2}{2\pi\hbar} |t|^2 n^2 (r^2 + 1 + 2r|\Delta|^2 B_P), \quad (5.30)$$

$$G_{AP} \approx \frac{e^2}{2\pi\hbar} |t|^2 n^2 (2r + (r^2 + 1)|\Delta|^2 B_{AP}), \quad (5.31)$$

sendo B_P e B_{AP} dados por

$$B_P = \frac{1}{4} |\langle S^+ \rangle_P|^2 \left| \frac{2i\eta - \Delta/2}{i\eta(-\Delta/2 + i\eta)} \right|^2 \quad (5.32)$$

e

$$B_{AP} = \frac{1}{4} |\langle S^+ \rangle_{AP}|^2 \left| \frac{2}{-\Delta/2 + i\eta} \right|^2. \quad (5.33)$$

De fato, o parâmetro $\eta = \hbar/\tau$ está relacionado ao tempo de decaimento τ e podemos considerar que $\eta \approx \Delta$ para obter:

$$G_P \approx \frac{e^2}{2\pi\hbar} |t|^2 n^2 \left(r^2 + 1 + \frac{17}{10} r \frac{x_P^2}{(1 + x_P^2)^2} \right), \quad (5.34)$$

$$G_{AP} \approx \frac{e^2}{2\pi\hbar} |t|^2 n^2 \left(2r + \frac{4}{5} (r^2 + 1) \frac{x_{AP}^2}{(1 + x_{AP}^2)^2} \right), \quad (5.35)$$

Para a MR temos o seguinte:

$$\frac{\Delta G}{G}(N = 2) = \frac{r^2 + 1 + \frac{17}{10} r \frac{x_P^2}{(1 + x_P^2)^2}}{2r + \frac{4}{5} (r^2 + 1) \frac{x_{AP}^2}{(1 + x_{AP}^2)^2}} - 1. \quad (5.36)$$

A razão entre as densidades de estados, r , é relacionada com a polarização de spin $\Gamma = (r - 1)/(r + 1)$. Uma polarização de 81% corresponde a $r = 10$ (Cobalto

por exemplo). Utilizando as expressões acima, nosso modelo teórico utiliza poucos parâmetros livres, r , μ e ν , para determinar o valor de MR, sendo o parâmetro de hopping t responsável apenas pela escala da condutância. Adotando, como exemplo prático, $r = 10$, $\mu = 4$ e $\nu = 0.33$ obtemos $\Delta G/G \approx 260\%$, que é um valor compatível com os dados experimentais de Garcia ($\sim 225\%$) para um contato Co-Co. De fato, a interação entre átomos constituintes do nanocontato e o reservatório tem origem em um acoplamento de troca entre os átomos do nanocontato e átomos vizinhos localizados nos reservatórios, por isso podemos considerar que gM e $\hbar J$ são da mesma ordem de magnitude ($gM \sim \hbar J \longleftrightarrow \mu \sim 4$). O parâmetro ν relaciona o campo magnético transversal efetivo (providenciado por acoplamento spin-órbita e interação de troca transversais) e módulo da magnetização longitudinal M , sendo o último forte o bastante para forçar condições de contorno de spin ao nanocontato. Então podemos considerar que $\nu < 1$ (escolhemos $\nu = 0.33$). Obviamente ν depende do formato dos orbitais, e por isso do material que constitui o nanocontato. Com algumas aproximações, a expressão (5.36) corresponde ao caso de MR balística discutido na Ref. [23]. Os parâmetros r , μ e ν são dependentes do material do nanocontato e então nós podemos explicar os dados experimentais mostrados em [23] variando aqueles parâmetros adequadamente.

Para um contato nanométrico, entretanto, a energia de separação entre os canais de spin pode ser maior do que a voltagem externa aplicada (em metais a energia de troca pode ser da ordem de $0.2 - 0.3$ eV e o regime de baixas voltagens corresponde a $|V| < 0.1$ V) e é possível que a banda de spin minoritário esteja fechada no processo de condução. Neste caso o nanocontato comporta-se como se $r \rightarrow \infty$ e $n \rightarrow 0$, sendo o produto rn um valor finito, mesmo que a polarização de spin dos reservatórios Γ tenha um valor moderado (podemos considerar que r refira-se apenas à região do contato, não aos reservatórios). A condutância do nanocontato em ambas as configurações se reduz a

$$G_P \approx \frac{e^2}{2\pi\hbar} |t_0|^2, \quad (5.37)$$

$$G_{AP} \approx \frac{4}{5} \frac{e^2}{2\pi\hbar} |t_0|^2 \frac{x_{AP}^2}{(1 + x_{AP}^2)^2}, \quad (5.38)$$

com $|t_0|^2 = r^2 n^2 |t|^2$. A MR simplifica-se, resultando em:

$$\frac{\Delta G}{G}(N=2) = \frac{5}{4} \frac{(1 + x_{AP}^2)^2}{x_{AP}^2} - 1. \quad (5.39)$$

Observando a expressão acima podemos concluir que se o processo de spin-flip não é permitido o valor de MR diverge, ou seja, tende a infinito. De fato temos $MR \gg 1$ mas permanecendo um valor finito devido ao princípio de incerteza de Heisenberg, que sempre permite processos de spin-flip. Utilizando (5.39), $\mu = 4$ e $\nu = 0.2$ encontramos $\Delta G/G = 3280\%$. O parâmetro ν mede a interação efetiva entre as componentes transversais de spin, permitindo o spin-flip, e quando este vai para zero, a MR vai para infinito como consequência do fechamento do canal de spin-flip na configuração AP , no caso em que $r \rightarrow \infty$. Em experimentos muito recentes valores de MR na faixa de $3000 - 4000\%$ tem sido observadas em contatos de Ni e nossos resultados concordam com aqueles obtidos em [87]. Entretanto o modelo teórico aqui construído é baseado num Hamiltoniano de spin de Heisenberg-Ising e no transporte de Anderson, enquanto a teoria descrita na Ref. [87] baseia-se na equação de Schroedinger na presença do potencial de parede de domínio do tipo Bloch, que é um modelo quase-clássico. A maior vantagem de utilizar nosso modelo é que permite o estudo de flutuações quânticas da condutância. Aqui consideramos os valores médios dos operadores S^z e S^+ para explicar as médias das propriedades de transporte. Entretanto, como dito anteriormente, o elétron de condução interagindo com a magnetização local pode excitar paredes quânticas ou fazê-las se mover, modificando as propriedades de transporte do canal de condução para outro elétron. A interação entre a magnetização e elétrons de condução produzindo flutuações quânticas da MR e da condutância pode ser estudada através do nosso modelo. A dinâmica temporal de um nanofio é a possível responsável pelas flutuações quânticas em estruturas ferromagnéticas.

5.3 Equações quânticas para $d\mathbf{p}/dt$ em ferromagneto: fônons e mágnons

A obtenção da equação para $d\mathbf{p}/dt$ em ferromagneto na presença de fônons e mágnons passa pela definição de relação de anti-comutação ou fermiônica (para elétrons):

$$\{\psi_\alpha(\mathbf{x}), \psi_\beta^\dagger(\mathbf{x}')\} = \delta_{\alpha\beta} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

e comutação ou bosônica (para fônons e mágnons):

$$[a_{\mathbf{q}}, a_{\mathbf{q}'}^\dagger] = \delta^3(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$$

sendo $\{A, B\} = AB + BA$, $[A, B] = AB - BA$, $\psi_\alpha(\mathbf{x})$ o operador que destrói um elétron de spin α na localização $\mathbf{x}$, a_q o operador que destrói um bóson de momentum $\mathbf{q}$. Os spinores que utilizamos são spinores de Pauli (dois componentes apenas), e todas as outras relações de anti-comutação para férmions e de comutação para bósons são nulas. Algumas relações mostradas abaixo são importantes nas deduções:

$$[AB, CD] = A\{B, C\}D + CA\{B, D\} - \{A, C\}BD - C\{A, D\}B \quad (5.40)$$

$$[A, BC] = \{A, B\}C - B\{A, C\} = [A, B]C + B[A, C] \quad (5.41)$$

A densidade de lagrangeana de Pauli-Schroedinger segue abaixo:

$$\mathcal{L} = i\hbar\psi^\dagger \frac{\partial\psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^\dagger \cdot \nabla\psi - \psi^\dagger V(\mathbf{x})\psi + \Delta\psi^\dagger \vec{\sigma} \cdot \vec{S}\psi \quad (5.42)$$

e da equação de Euler-Lagrange para um campo ϕ^r

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi^r} - \partial_\mu \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi^r)} \right) = 0$$

obtemos a equação de Schroedinger-Pauli, para um elétron interagindo com uma magnetização efetiva $\vec{S}$. O modelo total que propomos, cujas densidades hamiltonianas são obtidas de (5.42), expandindo o potencial $V(\mathbf{x})$ em uma soma de potencial aplicado externo, potencial de rede e mais campo de fônons e tem-se:

$$\mathcal{H}_e = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^\dagger \cdot \nabla\psi \quad (5.43)$$

$$\mathcal{H}_F = \psi^\dagger V_{ext}(\mathbf{x})\psi \quad (5.44)$$

$$\mathcal{H}_{ph} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}}^{ph} a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} \quad (5.45)$$

$$\mathcal{H}_m = \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}}^m b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} \quad (5.46)$$

$$\mathcal{H}_{el-ph} = \sum_{\mathbf{q}} \psi^\dagger (V_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} + V_{\mathbf{q}}^* a_{\mathbf{q}}^\dagger) \psi \quad (5.47)$$

$$\mathcal{H}_{el-mag} = -\Delta\psi^\dagger \vec{\sigma} \cdot \vec{S}\psi \quad (5.48)$$

sendo $a_{\mathbf{q}}$ o operador que aniquila um fônon, $b_{\mathbf{q}}$ aniquila um mágnon, $\vec{S}$ o campo de mágnons para ser quantizado, conforme [40-43]. A densidade de momentum, densidade de partículas e Hamiltoniana é dada por

$$\vec{P} = -i\hbar\psi^\dagger \nabla\psi \quad (5.49)$$

$$N = \psi^\dagger \psi \quad (5.50)$$

$$H = \int d^3 \vec{x} \mathcal{H} \quad (5.51)$$

A equação de Heisenberg para a densidade de momentum é:

$$\frac{d\vec{P}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, \vec{P}] \quad (5.52)$$

Alguns resultados importantes são mostrados a seguir:

$$\begin{aligned} [\psi_\alpha^\dagger(\mathbf{x}') \psi_\beta(\mathbf{x}'), \psi_\delta^\dagger(\mathbf{x}) \nabla \psi_\gamma(\mathbf{x})] &= \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{x}') \nabla \psi_\gamma(\mathbf{x}) \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta_{\beta\delta} - \\ &\quad - \psi_\delta^\dagger(\mathbf{x}) [\nabla \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] \psi_\beta(\mathbf{x}') \delta_{\alpha\gamma} \end{aligned}$$

e ainda a parte de interação elétron-mágnon tem a forma:

$$\frac{i}{\hbar} [H_{el-mag}, \vec{P}] = \Delta \sum_{\sigma} \sigma \psi_{\sigma}^\dagger \psi_{\sigma} \nabla S^z(\mathbf{x}) + \frac{\Delta}{2} \left(\psi_{\uparrow}^\dagger \psi_{\downarrow} \nabla S^-(\mathbf{x}) + \psi_{\downarrow}^\dagger \psi_{\uparrow} \nabla S^+(\mathbf{x}) \right)$$

que pode ainda ser escrita da seguinte maneira:

$$\frac{i}{\hbar} [H_{el-mag}, \vec{P}] = \Delta \psi^\dagger \nabla (\vec{\sigma} \cdot \vec{S}(\mathbf{x})) \psi \quad (5.53)$$

e isto corresponde à força exercida pela interação com a magnetização sobre os elétrons de condução. Temos de forma sintética a seguinte expressão:

$$\frac{d\vec{P}}{dt} = \Delta \psi^\dagger \nabla (\vec{\sigma} \cdot \vec{S}(\mathbf{x})) \psi - \Delta_{ph} \psi^\dagger [\nabla \phi_{ph}(\mathbf{x})] \psi - \psi^\dagger [\nabla V_{ext}(\mathbf{x})] \psi \quad (5.54)$$

onde $\vec{S}(\mathbf{x})$ é o campo de mágnons e $\phi_{ph}(\mathbf{x})$ é o campo de fônons. V_{ext} corresponde a um potencial externo, por exemplo um campo elétrico aplicado.

Para um nanofio ferromagnético quase unidimensional, onde temos as situações magnéticas de alinhamento Paralelo e Anti-Paralelo, o que ocorre efetivamente é uma mudança no número de mágnons presentes, bem como a relação de dispersão destes. De forma muito aproximada, quando o alinhamento é paralelo podemos pensar na inexistência de mágnons e sim somente fônons, que resultam em uma condutividade do tipo:

$$G_P = \sigma_0 = \frac{ne\tau}{m}$$

onde n é a densidade de elétrons e o tempo de meia vida do elétron τ está associado à taxa de colisões que é proporcional à transição assistida por fônons, nesse caso

$\tau = \tau_{ph}$. Se no caso anti-paralelo o número de fônons é o mesmo e agora junta-se a tudo isso a interação com mágnons presentes no ferromagneto. O tempo total de meia-vida diminui devido a colisões com mágnons, além de fônons, e será nessa nova configuração dado por $\tau' = (1/\tau_{ph} + 1/\tau_{mag})^{-1}$, ou seja,

$$G_{AP} = \frac{ne\tau'}{m}$$

$\tau_{mag} = (2\pi(n_{mag} + 1)|\Delta|^2/\hbar)^{-1}$, $MR \approx \tau'/\tau - 1$ Para haver uma magnetorresistência significativa espera-se que $\tau' \ll \tau$. A excitação de mágnons pode estar associada à presença de paredes de domínio. Os estudos aqui devem prosseguir para obtermos um maior aprofundamento e expressões mais precisas.

5.3.1 Estudo da dinâmica de spin em um nanofio

O estudo da dinâmica de spin associada ao transporte e a um campo magnético externo aplicado, dado uma condição inicial do sistema está em fase inicial. Podemos supor o hamiltoniano $H = H_M + H_e + H_I$ da forma:

$$H_M = -J \sum_{i=1}^{N-1} S_i^z S_{i+1}^z - g \sum_{i=1}^N H_i^z S_i^z - h \sum_{i=1}^N (S_i^+ + S_i^-) \quad (5.55)$$

$$H_e = \sum_{i\sigma} \varepsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + t \sum_{i,\sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + c_{i+1,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \right) \quad (5.56)$$

$$H_I = -\Delta \sum_i \left\{ c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} S_i^+ + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} S_i^- + \left(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \right) S_i^z \right\} \quad (5.57)$$

onde notamos que o transporte e a magnetização local se influenciam mutuamente. A base para diagonalização do sistema é $\{|\sigma_1, \sigma_2 \dots \sigma_N; n\sigma \rangle\}$ com apenas um elétron de condução no nanofio. Utilizando a versão de interação obtém-se um conjunto de equações diferenciais para os coeficientes que dão a dinâmica do sistema (ver Capítulo 5 da Ref. [35], Teoria das aproximações). Obviamente as expressões (5.55)-(5.57) são casos particulares que só permitem spin-flip intrasítio, sendo os casos mais gerais podendo permitir mudança de spin no hopping de um átomo para outro. Entretanto, a influência mútua de magnetização e transporte pode ser vista no termo $c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} S_i^-$, por exemplo, em que o elétron em um sítio i com spin para baixo é destruído, sendo criado um outro elétron no mesmo sítio, com spin para cima, com diminuição para a magnetização local, haja vista o termo S_i^- que decrementa o spin

local. Esse elétron que tem a influência da magnetização no sítio i , ao ir para o sítio j por “hopping” poderá mudar a magnetização local deste último, bem como será influenciado pela magnetização. A dinâmica temporal do sistema pode ser a origem das flutuações quânticas da condutância em nanocontatos e nanofios, pela criação, destruição e movimento de paredes de domínio sob influência da corrente de transporte.

5.4 Conclusões e Comentários Gerais

Neste capítulo nós explicamos as propriedades de transporte principais de um nanofio utilizando as regras da mecânica quântica e o formalismo de Landauer através da aproximação de fazer a média dos operadores de magnetização local. Este procedimento permitiu a obtenção de fórmulas analíticas gerais para a condutância de um nanofio constituído de N átomos. A dinâmica completa de nosso modelo é muito complicada, como se esperava, mas fazendo algumas considerações de ordem física e aproximações levam-nos a estimar os valores de condutância e MR em dois casos limite: 1) nanofio longo de dimensão $2L$ com N grande e 2) nanocontato com $N = 2$. Para um nanofio longo, de modo a obter MR significativa é preciso que $L \gg \lambda$, correspondendo ao regime balístico explicado em [65,68,23]. Quando $\lambda \approx L$ o elétron de condução segue a magnetização local adiabaticamente, sendo o efeito de MR desprezível. Outra condição é de que os reservatórios devem ser magnéticos permitindo altas polarizações das bandas de spin, o que corresponde a $r \gg 1$. Para um nanocontato ($N = 2$) o valor da MR é determinado por poucos parâmetros, ao menos r , μ e ν , sendo o hopping t responsável pela escala da condutância. O parâmetro μ relaciona a interação entre o nanocontato e os reservatórios e a troca entre os átomos do nanocontato, enquanto ν é um parâmetro de anisotropia relacionando o campo transversal efetivo h com a magnetização efetiva M . Baseado em considerações físicas, adotamos $\mu = 4$ e $\nu = 0.33$ para obter $\Delta G/G \approx 260\%$, que é compatível com os valores experimentais de Garcia para um contato Co-Co ($\sim 225\%$). Os parâmetros r , μ e ν são dependentes do material do nanocontato e podemos explicar todos os dados experimentais mostrados em [23] variando esses parâmetros. Ainda em contatos nanométricos com $r \rightarrow \infty$ no contato atômico (mesmo que a polarização de spin dos eletrodos seja apenas moderada) nós mostramos que a MR depende apenas da probabilidade de spin-flip quando os

reservatórios estão no alinhamento AP . Se essa probabilidade é nula, a MR tende a infinito, sendo de fato um valor grande, porém finito, devido ao princípio de incerteza de Heisenberg. Finalmente, associamos as flutuações quânticas de MR e condutância, à dinâmica temporal do transporte em nosso modelo, que faz com que a magnetização se modifique por efeito da condução, produzindo a criação ou aniquilamento de paredes de domínio, bem como seu movimento.

Capítulo 6

Conclusão e Perspectivas

Neste Capítulo iremos sumarizar as conclusões e contribuições desta tese para o estágio atual da Física Mesoscópica concebendo junções de tunelamento magnéticas e nanocontatos e nanofios ferromagnéticos, bem como apontar perspectivas para a continuidade do trabalho. A lista de artigos publicados em revistas especializadas e submetidos para publicação será apresentada no final do Capítulo.

6.1 Contribuições e Conclusões Gerais

Esta tese de doutorado abordou assuntos relevantes tanto do ponto de vista teórico para a compreensão da Física Mesoscópica quanto para as atuais aplicações tecnológicas. Pontos que estavam obscuros para a compreensão do transporte quântico em junções de tunelamento e nanocontatos foram estudados e esperamos ter esclarecido em parte as dúvidas acerca dos fenômenos envolvidos. A seguir apresentaremos as contribuições deste trabalho nas diferentes áreas que foram estudadas:

- **Junções de Tunelamento Magnéticas:** até o início desta tese os dados experimentais para a variação da MR com a voltagem aplicada, incluindo a anomalia de “zero-bias” em uma MTJ não eram descritos adequadamente pelas teorias propostas. Além da Ref. [50], que superestimava a constante de acoplamento de elétrons com mágnons, os outros trabalhos apresentavam apenas modelos de interpolação dos dados experimentais, complicando desnecessariamente a estrutura de bandas. Os estudos aqui apresentados permitiram clarificar alguns dos pontos obscuros na questão das MTJs. Consideramos um modelo muito simples para a estrutura de bandas, a variação da transmissão com

a voltagem e estimamos valores para o acoplamento com mágnons que está mais próximo da realidade física, permitindo uma precisão bastante alta entre os dados experimentais apresentados em [50] e os cálculos teóricos para a dependência da MR com a voltagem aplicada. Acreditamos portanto, ter quantificado de maneira correta a contribuição de cada um dos efeitos para a física das junções. São eles a estrutura de bandas, a dependência do coeficiente de transmissão com a voltagem, e o tunelamento inelástico assistido por mágnons. Muito embora o modelo considerado foi bastante simples e os valores adotados para os parâmetros tiveram o intuito de responder às questões teóricas levantadas pelos dados experimentais apresentados em [50], o cenário apresentado não é único. As expressões obtidas no Capítulo 2 para uma junção magnética de tunelamento simétrica podem ser modificadas para incorporar efeitos de assimetria. Por exemplo, termos em r^2 podem ser substituídos por $r_1 r_2$, e assim por diante. Além disso, no caso aqui apresentado a densidade de estados de ambas as bandas de spin tem derivada positiva ($\lambda > 0$ e $\beta > 0$), ou seja, a densidade cresce conforme aumenta a energia. Mas essa não é a única situação possível, e poderíamos ter uma densidade de estados para uma ou as duas bandas de spin que decresce com a voltagem aplicada. Portanto as expressões obtidas tem validade para uma classe de dispositivos mais ampla do que simplesmente a junção simétrica, em que ambas as densidades de estados, majoritária e minoritária, crescem com a energia. Seguindo na mesma linha de pesquisa, os estudos foram estendidos para as junções de tunelamento ressonante. O modelo apresentado permite prever o efeito de inversão da MR, que ocorre na prática em junções de tunelamento magnéticas e ressonantes. Embora os cálculos efetuados sejam para a situação simétrica, as principais idéias podem ser prontamente utilizadas para o caso da junção assimétrica.

- Nanocontatos e nanofios ferromagnéticos: estas estruturas surgem de forma muito promissora para as futuras aplicações tecnológicas, principalmente devido ao fenômeno de GMR, que apresenta valores muito elevados, de até 300 – 3000% em alguns casos [70-72]. A literatura corrente apresenta um modelo semi-clássico baseado no espalhamento de elétrons por paredes de domínio de Bloch para explicar o fenômeno observado [63-67]. Em alguns trabalhos, como aquele da Ref. [70], sugere-se que o efeito spin-órbita possa estar en-

volvido no espalhamento. Um experimento importante apresentado na Ref. [74] mostra o surgimento de efeitos magnéticos em um nanocontato formado por materiais cujas propriedades de volume não são magnéticas (como é o caso da Platina e do Paládio). Os modelos semi-clássicos, apesar de alguns resultados concordantes para nanocontatos, não incluem a natureza quântica do fenômeno, que produz flutuações da condutância, bem como pode possibilitar o surgimento do magnetismo de contato. Já o efeito spin-órbita, é sabido, tem uma ordem de magnitude pequena para poder produzir um efeito tão pronunciado. O trabalho desenvolvido nesta tese para estudar o transporte quântico nos nanofios e nanocontatos baseia-se inteiramente nas regras da Mecânica Quântica. Além disso, buscamos um modelo que fosse simples, de tal maneira que incluísse todos os ingredientes necessários para explicar a Física do fenômeno envolvido sem complicações desnecessárias, permitindo a obtenção de expressões analíticas. Uma vez construído o modelo teórico, o formalismo adotado para o cálculo de condutância é a teoria de Landauer, que como visto no Capítulo 1 aplica-se nesse caso. Os ingredientes do nosso modelo são um Hamiltoniano de Ising, no qual incluímos efeitos de flutuações quânticas sobre o spin local, um Hamiltoniano para elétron de condução que inclui a energia cinética, e uma interação de troca entre o spin local e o elétron de condução. Através desse modelo obtivemos resultados concordantes com os valores experimentais reportados na literatura corrente. Além de concordar com valores experimentais, o modelo prediz que o efeito de GMR deve-se principalmente ao espalhamento de elétrons dependente de spin em uma parede quântica. Muito embora na configuração anti-paralela a condutância seja muito menor, ainda assim o efeito de flutuações quânticas e o princípio de incerteza permitem que uma pequena corrente possa fluir pelo canal. No caso paralelo o modelo prediz um valor de condutância ligeiramente menor que o quantum devido a fenômenos de interferência quântica entre o transporte direto e efeitos de espalhamento magnético. Tem sido demonstrado experimentalmente que esse é o caso. Explicamos também os efeitos de nanomagnetismo que ocorrem em materiais não magnéticos [74]. Devido à baixa dimensionalidade, efeitos magnéticos produzem a separação dos dois canais de spin em um nanocontato de Platina ou Paládio. O resultado é que mede-se o quantum de condutância para um canal, e o valor é mais próximo de $e^2/(2\pi\hbar)$ do que no

caso ferromagnético, devido ao efeito de espalhamento ser bastante reduzido. Apenas para enfatizar, através de um modelo simples pudemos descrever o fenômeno físico envolvido em nanocontatos e nanofios com boa concordância com os dados experimentais apresentados na literatura corrente.

6.2 Perspectivas

O escopo da Física Mesoscópica é muito amplo, além do fato de as realizações experimentais serem recentes. Ficam como perspectivas para futuros estudos:

- 1) Estudo das junções magnéticas de tunelamento nos casos em que os dois eletrodos ferromagnéticos sejam diferentes, caracterizando uma junção assimétrica. Além da assimetria, que geralmente é o caso, devido às dificuldades experimentais para a construção de uma estrutura perfeitamente simétrica, podemos também considerar materiais com diferentes dependências da estrutura de bandas com a energia. O mesmo vale para a análise das junções ressonantes. A interação com grupos experimentais pode trazer novos dados e ingredientes a serem acrescentados no modelo teórico;
- 2) Para o caso dos nanofios é importante o estudo da dinâmica de cadeias de spin na presença de elétrons de condução. Possivelmente aqui o trabalho deve ser feito de forma numérica, dada a complexidade do problema, para avaliar a decoerência quântica, importante para a computação quântica. Elétrons de condução além de serem afetados pela magnetização local, agem sobre ela. A mútua interação é um problema complicado, mas que certamente está associado às flutuações quânticas da condutância, que pode ter dependência temporal;
- 3) Avaliar o ruído espectral da condutância, que está intimamente ligado à dinâmica temporal do transporte em nanocontatos e nanofios. As flutuações na condutância podem ser melhor avaliadas através de funções de correlação de corrente em tempos distintos, mas para isso é necessário estudar de forma completa a dinâmica do transporte e magnetização local influenciando-se mutuamente;

- 4) Voltando ao caso das junções de tunelamento, o estudo dos tempos de tunelamento nas junções é um assunto ainda em aberto na literatura atual. Requer definições rigorosas e compatíveis com a Teoria da Relatividade, pois experimentos atuais sugerem velocidades ultra-relativísticas;
- 5) Um problema interessante é o estudo das propriedades do transporte, tanto em junções quanto nos nanocontatos e nanofios, na presença de radiação eletromagnética. Só para citar um exemplo, possivelmente a presença de radiação eletromagnética em um nanocontato pode abrir um canal de condução que antes estava fechado através da absorção de fótons.

Existem muitas outras perspectivas para o trabalho futuro, e citamos acima apenas algumas delas.

6.3 Produção Científica

A realização de uma tese está de certa maneira associada à produção de trabalhos científicos para a publicação. As publicações científicas dão suporte ao trabalho realizado. Como produto deste trabalho concretizamos pelo menos cinco artigos técnicos, que foram submetidos a revistas especializadas, sendo que três foram publicados e outros dois estão na fase de discussão com os árbitros, no momento da redação deste manuscrito.

Concebendo as junções de tunelamento, produzimos três artigos técnicos, dos quais dois estão publicados listados abaixo:

- 1) C.A. Dartora, G.G. Cabrera, “Ferromagnetic tunneling junctions at low voltages: Elastic versus inelastic scattering at $T = 0^\circ\text{K}$ ”, J. Appl. Phys. **95** (2004), 6058-6064. Recebeu destaque no Virtual Journal of Nanoscale Science and Technology, June 07 (2004);
- 2) C.A. Dartora, G.G. Cabrera, “Resonant Magnetic Tunnel Junction at 0°K : I-V Characteristics and Magnetoresistance”, J. Appl. Phys. **97** (2005), 033708. Recebeu destaque no Virtual Journal of Nanoscale Science and Technology, January 24 (2005);
- 3) C.A. Dartora, G.G. Cabrera, “Spin-dependent transmission coefficients for magnetic tunnel junction: transport properties and temperature dependence”,

submetido ao Phys. Rev. B, e no momento em que foi redigida esta tese, em discussão com os árbitros.

O estudo de nanocontatos e nanofios deu origem a outros dois trabalhos, dos quais um já está publicado:

- 1) C.A. Dartora, G.G. Cabrera, “Quantum transport in a ferromagnetic nanowire: conductance and MR effect”, Phys. Lett. A **334** (2005), 46-54;
- 2) C.A. Dartora, G.G. Cabrera, “Quantum transport properties of a two channel atomic-sized magnetic contact”, submetido ao Phys. Rev. B, em discussão com os árbitros da revista.

Referências Bibliográficas

- [1] Yoseph Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics*, Oxford University Press (1997).
- [2] Ferry and Goodnick, *Transport in Nanostructures*, Cambridge University Press (1997).
- [3] Hermann Grabert and Michel H. Devoret, *Single Charge Tunneling: Coulomb Blockade Phenomena in Nanostructures*, Plenum Press (1992).
- [4] Supriyo Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press (1995).
- [5] Glenn Zorpete, IEEE Spectrum, pp. 35-40, December 2001.
- [6] Scott A. Chambers, Materials Today, pp. 34-39, April 2002.
- [7] R. Landauer, IBM J. Res. Dev. **1** (1957) 223; Ver ainda R. Landauer, Philos. Mag. **21** (1970) 863; R. Landauer, Physica A **168** (1990) 75; R. Landauer, Phys. Rev. **47** (1993) 16427.
- [8] R. Landauer and M. Buttiker, Phys. Rev. Lett. **54** (1985) 2049; Y. Imry and R. Landauer, Rev. of Modern Phys. **71** (1999) S306-S312.
- [9] M. Buttiker, Phys. Rev. Lett. **57** (1986) 1761-1764; Ver ainda M. Buttiker, Phys. Rev. B **33** (1986) 3020 e M. Buttiker, J. Phys. Cond. Matter. **5** (1993), 9361.
- [10] A. D. Stone, *Mesoscopic Quantum Physics* (1995) pp. 325-372.
- [11] T. Ono et. al., Appl. Phys. Lett. **75** (1999) 1622.

- [12] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenkker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. Van der Marel and C. T. Foxon, Phys. Rev. Lett. **60** (1988) 848-850.
- [13] D. A. Wharam, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J. E. F. Frost, D. G. Hasko, D. C. Peacock, D. A. Ritchie and G. A. C. Jones, J. Phys. C **21** (1988) 209-214.
- [14] Y. Nakamura, Yu A. Pashkin and J. S. Tsai, ArXiv: condmat/9904003 v1, April 1999.
- [15] D. Vion, A. Aassime, A. Cottet, P. Joyez, H. Pothier, C. Urbina, D. Esteve, M. H. Devoret, Science **296** (2002) 280.
- [16] John M. Martinis, Michel H. Devoret and John Clarke, Phys. Rev. Lett. **55** (1985) 1543-1546.
- [17] Howard E. Brandt, Progress in Quantum Electronics **22** (1998) 257-370.
- [18] Yuiry Makhlin, Gerd Schon, Alexander Shnirman, Reviews of Modern Physics **73** (2001) 357-400.
- [19] G. G. Cabrera and N. García, Appl. Phys. Lett. **80**, 1782 (2002).
- [20] M. Jullière, Phys. Lett. A **54** (1975), 225.
- [21] M. Muñoz, N. Garcia and Y-W Zhao, Appl. Phys. Lett. **76** (2000), 2586.
- [22] M. Muñoz, N. Garcia and Y-W Zhao, Phys. Rev. Lett. **82** (1999), 2923.
- [23] G. Tatara, Y-W Zhao, M. Muñoz and N. Garcia, J. Mag. Magn. Mat. **223** (2001), 169.
- [24] G. G. Cabrera and L. M. Falicov, Phys. Status Solidi B **61**, 539 (1974); Phys. Rev. B **11**, 2651 (1975).
- [25] Osamu Sakai, Shunya Suzuki, Wataru Izumida and Akira Oguri, J. Phys. Soc. Jpn. **68** (1999), 1640-1650.
- [26] P. Nordlander, M. Pustilnik, Y. Meir, N. S. Wingreen and D. C. Langreth, Phys. Rev. Lett. **83** (1999), 808-811.

- [27] J.A. Hertz and K. Aoi, Phys. Rev. B **8** (1973), 3252.
- [28] R. Landauer in: *Localization, Interaction and Transport Phenomena*, (1984) Springer-Verlag.
- [29] G. B. Lesovik, JEPT Lett. **49** (1989), 592-594.
- [30] R. Fitzgerald, Physics Today, pp. 21, May 2002.
- [31] M. Buttiker and R. Landauer, Phys. Rev. Lett. **49** (1982) 1739.
- [32] Kohichiro Hara and Ichiro Ohba, Phys. Rev. A **62** (2000) 032104.
- [33] J. Ruseckas, Phys. Rev. A **63** (2001) 052107.
- [34] S. A. Ramakrishna and A. M. Jayannavar, International Journal of Modern Physics B **16** (2002) 615-619.
- [35] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Revised Edition, Addison Wesley (1994).
- [36] J. J. Sakurai, *Advanced Quantum Mechanics*, Revised Edition, Addison Wesley (1994).
- [37] L. Schiff, *Quantum Mechanics*, Third Edition, McGraw-Hill (1955).
- [38] W. Greiner and J. Reinhardt, *Field Quantization*, Springer-Verlag (1996).
- [39] David K. Ferry and Carlo Jacoboni, *Quantum Transport in Semiconductors*, Physics of Solids and Liquids, Plenum Press, New York (1992).
- [40] C. Kittel, *Quantum Theory of Solids*, John Wiley (1963).
- [41] D. C. Mattis, *The Theory of Magnetism*, Harper and Row Publishers (1965).
- [42] O. Madelung, *Introduction to Solid-State Theory*, Springer-Verlag (1978).
- [43] R. M. White, *Quantum Theory of Magnetism*, McGraw-Hill (1970).
- [44] Sílvia R. A. Salinas, “Introdução à Física Estatística”, Ed. USP (1997).
- [45] Y. Ando, J. Murai, H. Kubota and T. Miyazaki, J. Appl. Phys. **87**, 5209 (2000).

- [46] X. H. Xiang, T. Zhu, J. Du, G. Landry and J. Q. Xiao, Phys. Rev. B **66**, 174407 (2002).
- [47] J. J. Akerman, I. V. Roushchin, J. M. Slaughter, R. W. Dave and I. K. Schuller, Europhys. Lett. **63**, 104 (2003).
- [48] F. Montaigne, J. Nassar, A. Vaurès, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, A. Schuhl and A. Fert, Appl. Phys. Lett. **73**, 2829 (1998).
- [49] T. Miyazaki and N. Tezuka, J. Magn. Magn. Mater. **139**, L231 (1995).
- [50] S. Zhang, P. M. Levy, A. C. Marley and S. S. P. Parkin, Phys. Rev. Lett. **79**, 3744 (1997).
- [51] J. S. Moodera, J. Nowak, R. J. M. van de Veerdonk, Phys. Rev. Lett. **80**, 2941 (1998).
- [52] J. G. Simmons, J. Appl. Phys. **34**, 1793 (1963).
- [53] M. Sharma, S. W. Wang, and J. H. Nickel, Phys. Rev. Lett. **82**, 616 (1999).
- [54] P. LeClair, J. T. Kohlhepp, H. J. M. Swagten and W. J. M. de Jonge, Phys. Rev. Lett. **86**, 1066 (2001).
- [55] N. García, Appl. Phys. Lett. **77**, 1351 (2000).
- [56] W. J. Gallagher, S. S. P. Parkin, Yu Lu, X. P. Bian, A. Marley, K. P. Roche, R. A. Altman, S. A. Rishton, C. Jahnes, T. M. Shaw, and Gang Xiao, J. Appl. Phys. **81**, 3741 (1997).
- [57] X. Zhang, B. Z. Li, G. Sun and F. C. Pu, Phys. Rev. B **56** (1997) 5484, N. Ryzhanova, G. Reiss, F. Kanjouri and A. Vedyayev “Resonance magnetoresistance in double barrier structure with spin-valve”, arxiv:cond-mat/0401006 v2, 12 Jan 2004.
- [58] S. Zhang and P. M. Levy, Eur. Phys. J. B **10** (1999), 599.
- [59] E. Y. Tsymbal, A. Sokolov, I. F. Sabirianov and B. Doudin, “Resonant Inversion of Tunneling Magnetoresistance”, Phys. Rev. Lett. **90** (2003), 186602.

- [60] E. Y. Tsymbal and D. G. Pettifor, “Local impurity-assisted conductance in magnetic tunnel junctions”, Phys. Rev. B **64**, (2001) 212401.
- [61] R. Jansen and J.S. Moodera, Appl. Phys. Lett. **75** (1999) 400.
- [62] J. M. De Teresa et al, Phys. Rev. Lett **82** (1999), 4288.
- [63] C. A. Dartora and G. G. Cabrera, J. Appl. Phys. **95** (2004), 6058-6064.
- [64] A. Nakamura and S. Nonoyama, Phys. Lett. A **280** , 227 (2001).
- [65] G. Tatara and H. Fukuyama, Phys. Rev. Lett. **78** , 3773 (1997); G. Tatara, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, 2969 (2000).
- [66] J. B. A. N. van Hoof, K. M. Schep, A. Brataas, G.E.W. Bauer and P. J. Kelly, Phys. Rev. B **59** ,138 (1999).
- [67] V. K. Dugaev, J. Barnas, A. Lusakowski and L. A. Turski, Phys. Rev. B **65**, 224419 (2002).
- [68] M. Yamanaka and T. Koma, J. Magn. Soc. Japan **23**, 141 (1999).
- [69] N. Agraït, A. L. Yeyati, and J. M. Ruitenbeek, Phys. Rep. **377**, 81 (2003).
Veja también J. C. Cuevas, A. Levy Yeyati, A. Martín-Rodero, G. Rubio Bollinger, C. Untiedt, and N. Agraït, Phys. Rev. B **81**, 2990-2993 (1998).
- [70] M. Viret, S. Berger, M. Gabureac, F. Ott, D. Olligs, I. Petej, J. F. Gregg, C. Fermon, G. Francinet, and G. Le Goff, Phys. Rev. B **66**, 220401 (2002).
- [71] M. Muñoz, N. Garcia and Y-W Zhao, Phys. Rev. Lett. **82**, 2923 (1999);
G. Tatara, Y-W Zhao, M. Muñoz and N. Garcia, *ibid.* **83**, 2030 (1999); N. Garcia, M. Muñoz, G.G. Qian, H. Rohrer, L. G. Saveliev, and Y-W Zhao, Appl. Phys. Lett. **79**, 4550 (2001).
- [72] H. D. Chopra and S. Z. Hua, Phys. Rev. B **66**, 020403 (2002).
- [73] W. J. Gallagher, S. S. P. Parkin, Yu Lu, X. P. Bian, A. Marley, K. P. Roche, R. A. Altman, S. A. Rishton, C. Jahnes, T. M. Shaw, and Gang Xiao, J. Appl. Phys. **81**, 3741 (1997); J. S. Moodera, L. R. Kinder, T. M. Wong, and R. Meservey, Phys. Rev. Lett. **74**, 3273 (1995); J. S. Moodera and L. R. Kinder,

- J. Appl. Phys. **79**, 4724 (1996); T. Miyazaki and N. Tezuka, J. Magn. Magn. Mater. **139**, L231 (1995).
- [74] V. Rodrigues, J. Bettini, P. C. Silva, and D. Ugarte, Phys. Rev. Lett. **91**, 096801 (2003).
- [75] H. Imamura, N. Kobayashi, S. Takahashi, and S. Maekawa, Phys. Rev. Lett. **84**, 1003 (2000).
- [76] A. Bagrets, N. Papanikolaou, and I. Mertig, Phys. Rev. B **70**, 064410 (2004).
- [77] C. Zener, Phys. Rev. **81**, 440 (1951).
- [78] S.H. Chung, M. Munoz, N. Garcia, W. F. Egelhoff, R. D. Gomez, Phys. Rev. Lett. **89** (2002), 287203.
- [79] J.M. van Ruitenbeek, *Mesoscopic Electron Transport*, Kluwer Academic Publishers, Holanda (1997).
- [80] G. Prinz, Science **282** (1998), 1660-1663; E.Y. Tsybal and D. G. Pettifor, Solid State Physics **56** (2001), 113.
- [81] J. J. Verluijs, M. A. Bari and J. M. D. Coey, Phys. Rev. Lett. **87** (2001), 026601.
- [82] S. Chikazumi, *Physics of Ferromagnetism*, Clarendon Press, Oxford Science publications, Oxford, ed. 2, 1997, p. 205; K. Schwarz, J. Phys. F **16**, L 211 (1986); R. A. de Groot and F. M. Mueller, Phys. Rev. Lett. **50** (1983), 2024; M.A. Korotin, V. I. Anisimov, D. I. Khomskii and G. A. Sawatzky, Phys. Rev. Lett. **80** (1998), 4305; R. J. Soulen Jr., J. M. Byers, M. S. Osofsky, B. Nadgorny, T. Ambrose, S. F. Cheng, P. R. Broussard, C. T. Tanaka, J. Nowak, J. S. Moodera, A. Barry, and J. M. D. Coey, Science **282** (1998), 85.
- [83] B. K. Chakrabarti, A. Dutta and P. Sen, *Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Models*, Lectures Notes in Physics, Vol. m41 (Springer - Verlag, Berlin, 1996).
- [84] O coeficiente de transmissão de uma cadeia de átomos fracamente ligados (aproximação de tight-binding) com hopping t_0 e um defeito com hopping t

(sendo $|t| < |t_0|$), pode ser calculado de maneira exata utilizando o formalismo da matriz de transferência como mostrado em J. B. Pendry, J. Phys. C: Solid State Phys. **15**, 5773 (1982), e em P. D. Kirkman and J. B. Pendry, *ibid.* **17**, 4327 (1984). No centro da banda (valor máximo), o coeficiente de transmissão é dado aproximadamente por

$$T = \frac{4 (|t| / |t_0|)^2}{(1 + |t| / |t_0|)^2} .$$

Neste caso, no contexto da fórmula de Landauer, os eletrodos são modelados por cadeias ordenadas e semi-infinitas de átomos e o defeito representa o contato.

- [85] P. Gambardella, A. Dallmeyer, K. Maiti, M. C. Malagoli, W. Eberhardt, K. Kern, and C. Carbone, Nature **416**, 301 (2002).
- [86] G. B. Lesovik, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **49**, 513 (1989) [english translation: JEPT Lett. **49**, 592 (1989)]; Y. Tokura, Physica E **22**, 284 (2004).
- [87] L.R. Tagirov, B.P. Vodopyanov and K.B. Efetov, Phys. Rev. B **65** (2002), 214419; L.R. Tagirov, B.P. Vodopyanov and B.M. Garipov, J. Mag. Magn. Mat. **258-259** (2003), 61-66.

Anexos

Anexo 1

”Ferromagnetic tunneling junctions at low voltages:
Elastic *versus* inelastic scattering at $T = 0^\circ\text{K}$ ”

J. Appl. Phys. **95** (2004), p. 6058-6064

Ferromagnetic tunneling junctions at low voltages: Elastic *versus* inelastic scattering at $T=0$ °K

C. A. Dartora and G. G. Cabrera^{a)}

Instituto de Física 'Gleb Wataghin,' Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), C.P. 6165, Campinas 13083-970 SP, Brazil

(Received 5 January 2004; accepted 18 February 2004)

In this article we analyze different contributions to the magnetoresistance of magnetic tunneling junctions at low voltages. A substantial fraction of the resistance drop with voltage can be ascribed to variations of the density of states and the barrier transmission with the bias. However, we found that the *anomaly* observed at zero bias and the magnetoresistance behavior at very small voltages, point to the contribution of inelastic magnon-assisted tunneling. The latter is described by a transfer parameter T^J , which is one or two orders of magnitude smaller than T^d , the direct transmission for elastic currents. Our theory is in excellent agreement with experimental data, yielding estimated values of T^J which are of the order of $T^d/T^J \sim 40$. © 2004 American Institute of Physics. [DOI: 10.1063/1.1703825]

I. INTRODUCTION

Recently, the interest in the phenomena of giant magnetoresistance (GMR) in magnetic tunnel junctions (MTJ) has grown significantly due to potential applications in magnetoresistive reading heads, magnetic field sensors, nonvolatile magnetic random access memories, and many others.^{1–5} The effect is based on the spin dependent scattering mechanisms proposed in the early papers by Cabrera and Falicov,⁶ which lead in MTJ's, to a strong dependence of the conductance on the magnetic polarization.⁷ Typically, the GMR effect found in MTJ's is of the order of 25%–30%,^{8,9} and points to a large ratio of the densities of states for majority (M) and minority (m) electrons at the Fermi level (E_F)

$$\frac{N_M(E_F)}{N_m(E_F)} \approx 2.0 - 2.5.$$

As usual in MR experiments, one compares the resistances for the cases where the magnetizations at the electrodes are antiparallel (AP) and parallel (P). In several experiments reported in the literature (see for example Refs. 1, 2, 8, and 9), the junction resistance drops significantly with the applied voltages, with a sharp peak at zero bias (*zero-bias anomaly*). This bias dependence shows a rapid initial decrease up to voltages of the order of $V \sim 100$ mV, then slows down but continues decreasing with voltages, up to 60% of the peak value at 500 mV in some cases.⁹ Many attempts to explain the above behavior have been done over the last years,^{1,2,8,10} but a complete theory which includes all the observed features is still lacking.

In Ref. 8, scattering from magnons at the electrode-insulator interface has been proposed as the mechanism for randomizing the tunneling process and opening the spin-flip channels that reduce the MR. While this process may explain the MR behavior in the vicinity of zero-bias (voltages smaller than 40–100 mV), estimations of magnon scattering

cross sections show that the effect is too small to account for the sharp drop in resistance observed in the whole range of 500 mV. In fact, inelastic-electron tunneling spectroscopy (IETS) measurements at low temperature showed peaks which can unambiguously be associated with one-magnon spectra at very small voltages (from 12 to 20 mV, with tails up to 40 mV, and maximum magnon energy not larger than 100 meV).¹ To go beyond this limit will imply multimagnon processes, which are negligible at low temperature. This way, the electron-magnon coupling constant coming from Ref. 8 is by sure considerable overestimated.

The above explanation⁸ has been challenged in Ref. 10, where it is shown that the experimental data can be understood in terms of elastic tunneling currents which conserve spin, by considering effects not taken into account in Ref. 8. Those include the lowering of the effective barrier height with the applied voltage, as in the classical Simmons' theory,¹¹ and most important, variations of the densities of states with the bias at both magnetic electrodes. The latter is a relevant question, since experiments probe depths of the order of 0.5 eV from the Fermi surface. The simple calculation developed in Ref. 10 models the band structure with free electron-like densities of states, since the tunneling current is dominated by the s -electron contribution. This approach yields a *zero bias* anomaly which depends on the band structure, and a variation of the MR which has the right order of magnitude for the whole range of 500 meV. The above discussion and other experimental results primarily exhibit that the density of states dependence on the applied voltage plays an important role.^{12,13} However, fine details of experiments at very small voltages are difficult to fit. One may adopt here a pragmatic procedure, with a more intricate band structure and more free parameters to improve the fitting.²

In this article we take a different stand, motivated by results from IETS experiments,¹ which show that inelastic scattering do participate in the phenomenon at very small voltages. Also, MR experiments^{8,9} show clearly a different behavior with applied voltage in the same small bias region

^{a)}Electronic mail: cabrera@ifi.unicamp.br

(up to 100 mV). A complete theory then should include:

- (i) Magnon assisted tunneling effects, with maximum magnon energies of the order of ~ 100 meV. At low temperature, electrons from the electrodes, accelerated by the applied voltage, excite magnons at the interface. At low temperature, only magnon-emission processes should be considered;
- (ii) Variation with voltages of the densities of states for the different spin bands in the ferromagnets. Here, we will follow closely the approach of Ref. 10, with a simple picture of the band structure. This is motivated by the discussions given in Refs. 14 and 10 over the polarization of the tunneling current. We assume here that the latter is mainly of s -character;
- (iii) Lowering of the effective barrier height with the applied voltage. This effects, as shown in Ref. 11, yields to a parabolic dependence of the resistance with the bias. It does not contribute to the *zero-bias* anomaly, but it is always present and should dominate the behavior at large voltages.

The above program will be developed in the present contribution. The content of this paper can be described as follows: In the next section, we formulate the theoretical basis for analyzing tunneling currents, discussing the transfer Hamiltonian which includes all the above mentioned ingredients. In Sec. III, we solely analyze density of states effects, considering elastic tunneling processes. Some analytical expressions are shown. In Sec. IV, we include contributions from inelastic magnon-assisted processes to the tunneling current, and finally, in the last section, a few conclusions and remarks are added.

II. THEORETICAL PRELIMINARIES

To give a description of the MR and the resistance in the MTJ, we will use the transfer Hamiltonian method.¹⁵ The junction is composed by two ferromagnetic electrodes separated by a thin oxide film which represents a potential barrier due to the fact that the Fermi levels of the ferromagnetic layers are situated in the gap region of the oxide film. We have considered the s -band electrons as free particles (plane-waves), being responsible for the dominant contribution to the tunneling process. The d electrons, which are more localized, enter in the process only via the exchange interaction with s electrons on each ferromagnetic electrode. In the context of second quantization and neglecting the magnetization energy (Zeeman term), the unperturbed Hamiltonian is given by

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma, \alpha=(L,R)} E_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha} \quad (1)$$

with $L(R)$ referring to the left (right) ferromagnetic electrode, $c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha\dagger}$ ($c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha}$) are the creation (annihilation) fermionic operators for wave vector $\mathbf{k}$ and spin σ , $E_{\mathbf{k}\sigma} = \hbar^2 k^2 / 2m - \sigma \Delta_{\alpha}$ is the Hartree–Fock energy, and Δ_{α} is the shift in energy due to exchange interaction in each side of the barrier.

In writing the interaction part of the total Hamiltonian, which makes possible the transfer of electrons from one side

of the insulating barrier to the other, we follow Ref. 8. Apart from the direct transfer which comes from elastic processes, we include transfer with magnetic excitations that originates from the s - d exchange between conduction electrons and localized spins at the interfaces. The excitations are described by a linearized Holstein–Primakoff transformation,¹⁶ in the spirit of a one-magnon theory. We use the following Hamiltonian:

$$\begin{aligned} H_{\text{int}} = & \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d (c_{\mathbf{k}\sigma}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma}^R + c_{\mathbf{k}'\sigma}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^L) \\ & + \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J (c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R + c_{\mathbf{k}'\downarrow}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow}^L) (\sqrt{2S_L} b_{\mathbf{q}}^L \\ & + \sqrt{2S_R} b_{\mathbf{q}}^R) + \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R + c_{\mathbf{k}'\uparrow}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow}^L) \\ & \times (\sqrt{2S_L} b_{\mathbf{q}}^{L\dagger} + \sqrt{2S_R} b_{\mathbf{q}}^{R\dagger}) + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J (c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R \\ & - c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R + h.c.) [S_L + S_R - (b_{\mathbf{q}}^{R\dagger} b_{\mathbf{q}}^R + b_{\mathbf{q}}^{L\dagger} b_{\mathbf{q}}^L)], \end{aligned} \quad (2)$$

where $t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d$ is the direct transmission coefficient, $t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J$ is the inelastic transmission coefficient (depends on the exchange integral), S^L (S^R) is the spin value at the left (right) side, N_s is the total number of spins at the interface, and $b_{\mathbf{q}}^{\alpha\dagger}$ ($b_{\mathbf{q}}^{\alpha}$) are the creation (annihilation) operators for magnons with wave-vector $\mathbf{q}$ at each interface between the barrier and the electrodes. The wave-vector $\mathbf{q}$ is quasi-two-dimensional (the magnon wave function is localized at the interfaces, but with finite localization length).

In general, the total current obtained with Eq. (2) has contributions from elastic processes, resulting in a direct tunneling which conserves spin, and from the inelastic ones, which involve emission and absorption of magnons with electronic spin flip. In the following we describe the direct term.

III. DIRECT TUNNELING CURRENT: ANALYTICAL EXPRESSIONS

Considering only the direct part of the tunneling process, which means elastic processes, without involving magnon excitations, the current is easily obtained by^{2,3,8,10}

$$\begin{aligned} I_{(C)} = & \frac{2\pi e}{\hbar} \int dE T^d(E, V, d, \Phi_0) W_{(C)}(E, V) \\ & \times [f(E - eV) - f(E)] \end{aligned} \quad (3)$$

where

$$W_{(C)} = \sum_{\sigma} N_{\sigma}^R(E) N_{\sigma}^L(E - eV) \quad (4)$$

and C denotes the configuration scheme, $C = P$ for parallel and $C = AP$ for antiparallel, $f(E)$ is the Fermi–Dirac distribution, and N_{σ}^R and N_{σ}^L the density of states at the right and left electrodes, respectively. $T^d(E, V, d, \Phi_0) = |t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d|^2$ is the tunneling coefficient, being a function of the energy E , the

applied voltage V , the thickness of the barrier d , and the barrier height Φ_0 . In fact, T^d is a function of the overlap integral between the left and right wave functions inside the barrier region.

The resistance is readily obtained by $R=G^{-1}$, where $G=dI/dV$ is the differential conductance. In the low bias regime, we are interested in voltages smaller than the Fermi energy and only the states near the Fermi level will contribute to the transport, so we can expand the density of states in a Taylor series as follows:

$$N_\sigma^\alpha(E) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n N_\sigma^\alpha(E)}{dE^n} \right|_{E_F} (E - E_F)^n. \quad (5)$$

Now, let us calculate W_C for the P and AP configurations, using Eq. (5). In the P configuration the majority and minority bands in each electrode corresponds to the same spin orientation, and in AP configuration the majority band of one electrode is the minority on the other

$$W_{(P)} = \sum_i \sum_j \frac{1}{i!j!} \left[\frac{d^i N_M^R(E)}{dE^i} \frac{d^j N_M^L(E - eV)}{d(E - eV)^j} + \frac{d^i N_m^R(E)}{dE^i} \frac{d^j N_m^L(E - eV)}{d(E - eV)^j} \right] \Big|_{E_F} \times (E - E_F)^i (E - eV - E_F)^j, \quad (6)$$

and

$$W_{(AP)} = \sum_i \sum_j \frac{1}{i!j!} \left[\frac{d^i N_M^R(E)}{dE^i} \frac{d^j N_m^L(E - eV)}{d(E - eV)^j} + \frac{d^i N_m^R(E)}{dE^i} \frac{d^j N_M^L(E - eV)}{d(E - eV)^j} \right] \Big|_{E_F} \times (E - E_F)^i (E - eV - E_F)^j. \quad (7)$$

Taking into account identical electrodes and the low bias regime, we can expand these expressions to first order with good accuracy. The s -band can be represented by a parabolic dispersion relation and density of states $N_\sigma \propto \sqrt{E - \Delta_\sigma}$, where Δ_σ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) gives the bottom of the spin band, with $|\Delta_\uparrow - \Delta_\downarrow| = 2\Delta$, as in Ref. 10. However, we consider here cases more general than the parabolic dispersion, with the band structure described through the following set of parameters:

$$\begin{aligned} r &\equiv \left(\frac{N_M}{N_m} \right)_F, \\ \lambda &\equiv \left(\frac{dN_M/dE}{dN_m/dE} \right)_F, \\ \beta &\equiv \left(\frac{1}{N_m} \frac{dN_m}{dE} \right)_F, \end{aligned} \quad (8)$$

with all quantities evaluated at the Fermi level, and m and M stand for minority and majority spin bands, respectively. We get the analytical expressions

$$W_{(P)} = (N_m^F)^2 \{ (1 + r^2) + \beta(1 + r\lambda)(2\varepsilon - V) + \beta^2(1 + \lambda^2)\varepsilon(\varepsilon - V) \}, \quad (9)$$

and

$$W_{(AP)} = (N_m^F)^2 \{ 2r + \beta(r + \lambda)(2\varepsilon - V) + \beta^2\lambda\varepsilon(\varepsilon - V) \}, \quad (10)$$

where $\varepsilon \equiv E - E_F$ and ε and V must be given in eV.

There are several possibilities for including the tunneling transmission coefficient T^d in the theory. One is the approach followed by Simmons,¹¹ where the barrier is parametrized by an effective height Φ_0 and an effective thickness d

$$T^d(E, V, \Phi_0, d) = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} d \sqrt{2m(\Phi_0 - \varepsilon_z)} \right] = \exp[-1.024d\sqrt{\Phi_0}] \exp \left[\frac{1}{2} d \frac{\eta\varepsilon}{\sqrt{\Phi_0}} \right], \quad (11)$$

where all energies are measured from the Fermi level and given in eV, the barrier width given in angstrom=0.1 nm, and η is some constant relating the energy ε with its component ε_z perpendicular to the barrier. This latter parameter appears due to the fact that we are using a one-dimensional (1D) formula to explain the behavior in the 3D case.

Since the Fermi-Dirac functions are step-like at 0°K, we can easily obtain the conductance for both configurations.

$$G_{(C)} = \frac{2\pi e^2}{\hbar} \frac{d}{dV} \left\{ \int_0^V d\varepsilon T^d(\varepsilon, V, \Phi_0, d) W_{(C)}(\varepsilon, V) \right\}.$$

With some simplifications in the integration process (taking into account the behavior of the integrand in the range of integration, and making use of some geometric arguments), one obtains

$$\begin{aligned} G_{(C)} &= \frac{2\pi e^2}{\hbar} \left\{ A_{(C)} T^d(V, \Phi_0, d) + \frac{1}{6} \frac{d}{dV} [B_{(C)} V^2 T^d(V, \Phi_0, d) - C_{(C)} V^3 T^d(3V/5, \Phi_0, d)] \right\}, \end{aligned} \quad (12)$$

where $A_{(C)}$, $B_{(C)}$, and $C_{(C)}$ are constants related to the configuration scheme and the density of states. Following, the analytical expressions for the conductance in both parallel and antiparallel configurations are presented, using Eq. (12) and considering the expansions (9) and (10)

$$\begin{aligned}
G_{(P)} = & \frac{2\pi e^2}{\hbar} \exp[-1.024d\sqrt{\Phi_0}][N_m^F]^2 \\
& \times \left\{ (1+r^2) \exp\left[\frac{\eta Vd}{2\sqrt{\Phi_0}}\right] + \frac{\beta(1+r\lambda)}{3} \right. \\
& \times \left[\frac{\eta d V^2}{4\sqrt{\Phi_0}} \exp\left[\frac{\eta Vd}{2\sqrt{\Phi_0}}\right] + V \left(\exp\left[\frac{\eta Vd}{2\sqrt{\Phi_0}}\right] - 1 \right) \right. \\
& \left. \left. - \frac{\beta^2(1+\lambda^2)}{2} \exp\left[\frac{3\eta Vd}{10\sqrt{\Phi_0}}\right] \left(V^2 + \frac{\eta V^3 d}{10\sqrt{\Phi_0}} \right) \right] \right\}
\end{aligned} \quad (13)$$

and

$$\begin{aligned}
G_{(AP)} = & \frac{2\pi e^2}{\hbar} \exp[-1.024d\sqrt{\Phi_0}] \\
& \times [N_m^F]^2 \left\{ 2r \exp\left[\frac{\eta Vd}{2\sqrt{\Phi_0}}\right] + \frac{\beta(r+\lambda)}{3} \right. \\
& \times \left[\frac{\eta d V^2}{4\sqrt{\Phi_0}} \exp\left[\frac{\eta Vd}{2\sqrt{\Phi_0}}\right] + V \left(\exp\left[\frac{\eta Vd}{2\sqrt{\Phi_0}}\right] - 1 \right) \right. \\
& \left. \left. - \beta^2 \lambda \exp\left[\frac{3\eta Vd}{10\sqrt{\Phi_0}}\right] \left(V^2 + \frac{\eta V^3 d}{10\sqrt{\Phi_0}} \right) \right] \right\}.
\end{aligned} \quad (14)$$

The expressions above can be easily inverted to obtain the resistance, with the MR defined as

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{R_{AP} - R_P}{R_{AP}}. \quad (15)$$

Note that the above definition is limited to 100%, since $R_{AP} > R_P$. In the limit $V \rightarrow 0$ we have approximately

$$\begin{aligned}
G_{(P)} = & \frac{2\pi e^2}{\hbar} \exp[-1.024d\sqrt{\Phi_0}][N_m^F]^2 (1+r^2) \\
& \times \exp\left[\frac{\eta Vd}{2\sqrt{\Phi_0}}\right]
\end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned}
G_{(AP)} = & \frac{2\pi e^2}{\hbar} \exp[-1.024d\sqrt{\Phi_0}] \\
& \times [N_m^F]^2 (2r) \exp\left[\frac{\eta Vd}{2\sqrt{\Phi_0}}\right].
\end{aligned}$$

With the experimental value of $\Delta R/R$ at zero bias, we can easily obtain the ratio of the densities of states r at the Fermi level by

$$r = \frac{1}{1 - \frac{\Delta R}{R}\bigg|_{V=0}} + \sqrt{\frac{1}{\left(1 - \frac{\Delta R}{R}\bigg|_{V=0}\right)^2} - 1}, \quad (16)$$

which does not depend on the barrier parameters. In turn, the barrier height Φ_0 and thickness d determine the absolute value of the resistance. Typical values used in our examples

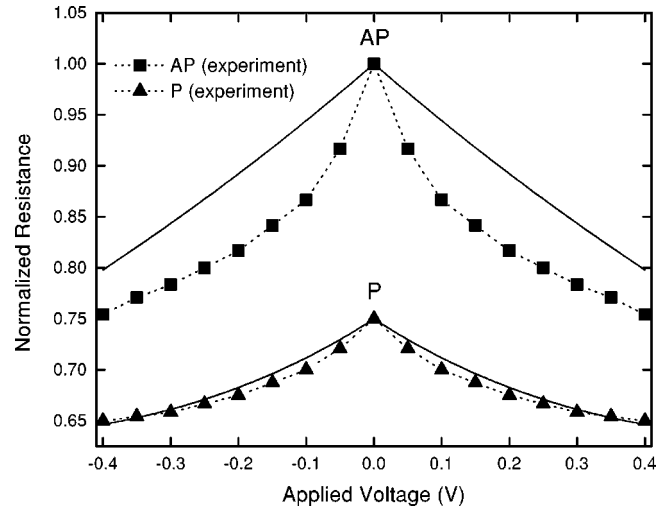


FIG. 1. Resistance as a function of the voltage bias for the AP and P configurations: the experimental results (dotted line and symbols) are taken from Ref. 8 and the theoretical ones (solid lines) are calculated with formulas (13) and (14), using the following parameters: $d=1.0$ nm, $\Phi_0=3.0$ eV, $N_m^F=1.0$ in normalized units, $r=2.21$, $\lambda=0.07$, $\beta=2.7$, and $\eta=0.1$. The resistances are given in arbitrary units, normalized to the peak value at zero bias.

are $d=1.0$ nm and $\Phi_0=3.0$ eV. Estimation of the resistance of such a junction yields resistance-area products of the order of $RS \approx 3.3 \times 10^4 [\Omega \mu m^2]$, where S is the junction area given in μm^2 . This value follows closely the resistance-area scaling obtained for different junctions in Ref. 17, with values of the MR ranging from 16% to 22%. Representative experimental data of the tunneling resistance dependence on bias are given in Refs. 2, 3, 8, and 9. We compare our theoretical calculation with results presented in Ref. 8 at 4.2 °K. There, the *zero-bias* MR is approximately of the order of 25%, which yields for the r parameter of Eqs. (8) and (16) the value $r=2.21$. In Fig. 1 we show our theoretical results for the resistance calculated with formulas (13) and (14). The band structure parameters were taken with the values $\lambda=0.07$ and $\beta=2.7$, and the tunneling parameter as $\eta=0.1$. The small value of λ depicts a situation where the majority spin band is saturated at the Fermi level, while the minority one has a large variation.¹⁰ However, the slope of the resistance near zero bias only depends on the ratio of the densities of states, in the form

$$\begin{aligned}
R_{AP} & \approx R_0 \left(\frac{1}{2r} - \frac{1}{2r} x \right), \\
R_P & \approx R_0 \left(\frac{1}{1+r^2} - \frac{1}{1+r^2} x \right),
\end{aligned} \quad (17)$$

where $x = \eta d |V| / (2\sqrt{\Phi_0})$ and $R_0 = \exp[1.024d\sqrt{\Phi_0}] / (2\pi e^2 / \hbar) [N_m^F]^2$ is a scale factor related to the absolute resistance. Note that we get a *zero bias anomaly*, but a good fit with the experiment is only obtained for the parallel configuration, as in Ref. 10. One can adequate the theoretical model to a better fit with the data, using more terms in the Taylor expansion of $W_{(C)}$, or leaving the densities of states as free parameters.² However, we interpret the failure of fitting the data for the AP configuration as a hint that points to the

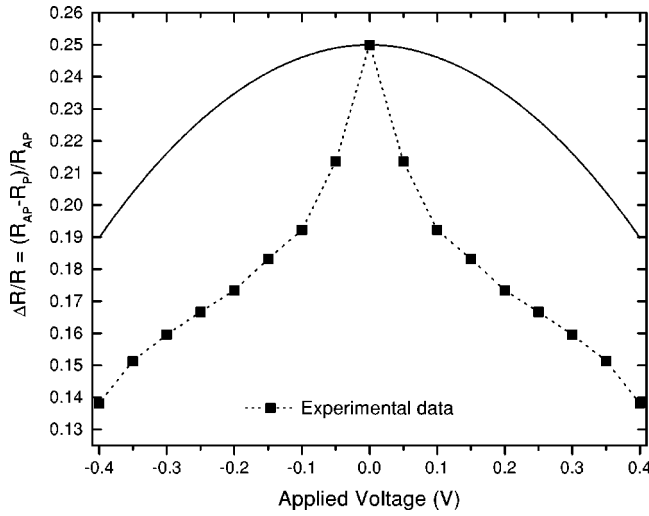


FIG. 2. Magnetoresistance as a function of voltage. Parameters are kept the same as in Fig. 1.

contribution of an extra mechanism, which affects differently the P and AP resistances. The linear terms in Eq. (17) cancel out when one gets the MR, as shown in Fig. 2, along with the experimental data. We pursue our argument further in the next section, with the inclusion of magnon inelastic scattering processes in the calculation of the MR.

IV. MAGNON-ASSISTED INELASTIC TUNNELING

In this section we consider not only the elastic (spin conserving) processes but inelastic magnon-assisted contributions to the tunneling current. The latter are responsible for opening the spin-flip channels, substantially reducing the MR near zero bias. Magnons are spin-wave excitations¹⁶ which interact with electrons, being emitted or absorbed, thus producing changes in their energy and allowing for spin-flip scattering. Electrons accelerated by the electric field relax their energy, producing those collective excitations at the magnetic electrode interfaces. At low temperature, only magnon emission processes give a significant contribution to the resistance. However we analyze in the following the general case, describing each one of the eight processes associated with emission and absorption of magnons. There is one extra term related to the overlap between wave functions of the electrodes, not involving changes in the number of magnons. This term is proportional to the exchange transmission coefficient $T^J = |t_{kk'q}^J|^2$, resulting in a very similar formula to the one found for the direct tunneling in the previous section:

$$I_{(C)}^N = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\varepsilon (S_R^2 + S_L^2) T^J(\varepsilon, V, d, \Phi_0) W_{(C)}(\varepsilon, V) \times [f(\varepsilon - V) - f(\varepsilon)].$$

Let us consider now the electron tunneling from the left to the right electrode with the emission of one magnon at the right side interface

$$I_{(C)}^{E1} = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\omega \int d\varepsilon 2S_R T^J(\varepsilon, V, d, \Phi_0) \times N_{\downarrow}^L(\varepsilon - V + \hbar\omega) N_{\uparrow}^R(\varepsilon) \rho_R^{\text{mag}}(\omega) [1 + f_{\text{BE}}(\omega)] \times f(\varepsilon - V + \hbar\omega) [1 - f(\varepsilon)],$$

where $\rho^{\text{mag}}(\omega)$ is the density of magnons at the right side interface and f_{BE} the Bose–Einstein distribution

$$f_{\text{BE}} = \frac{1}{\exp\left[\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right] - 1}$$

An identical expression appears when considering the magnon emission at the left side interface yielding

$$I_{(C)}^{E1} = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\omega \int d\varepsilon 2[S_R \rho_R^{\text{mag}}(\omega) + S_L \rho_L^{\text{mag}}(\omega)] \times T^J(\varepsilon, V, d, \Phi_0) N_{\downarrow}^L(\varepsilon - V + \hbar\omega) \times N_{\uparrow}^R(\varepsilon) [1 + f_{\text{BE}}(\omega)] f(\varepsilon - V + \hbar\omega) [1 - f(\varepsilon)]. \quad (18)$$

When the tunneling occurs from right to left with one magnon emission, we have

$$I_{(C)}^{E2} = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\omega \int d\varepsilon 2[S_R \rho_R^{\text{mag}}(\omega) + S_L \rho_L^{\text{mag}}(\omega)] \times T^J(\varepsilon, V, d, \Phi_0) N_{\uparrow}^L(\varepsilon - V + \hbar\omega) N_{\downarrow}^R(\varepsilon) \times [1 + f_{\text{BE}}(\omega)] f(\varepsilon) [1 - f(\varepsilon - V + \hbar\omega)]. \quad (19)$$

In turn, for magnon absorption we get

$$I_{(C)}^{A1} = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\omega \int d\varepsilon 2[S_R \rho_R^{\text{mag}}(\omega) + S_L \rho_L^{\text{mag}}(\omega)] \times T^J(\varepsilon, V, d, \Phi_0) N_{\uparrow}^L(\varepsilon - V - \hbar\omega) N_{\downarrow}^R(\varepsilon) \times [f_{\text{BE}}(\omega)] f(\varepsilon - V - \hbar\omega) [1 - f(\varepsilon)] \quad (20)$$

and

$$I_{(C)}^{A2} = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\omega \int d\varepsilon 2[S_R \rho_R^{\text{mag}}(\omega) + S_L \rho_L^{\text{mag}}(\omega)] \times T^J(\varepsilon, V, d, \Phi_0) N_{\downarrow}^L(\varepsilon - V - \hbar\omega) N_{\uparrow}^R(\varepsilon) \times [f_{\text{BE}}(\omega)] f(\varepsilon) [1 - f(\varepsilon - V - \hbar\omega)]. \quad (21)$$

The total current due to one magnon exchange is then

$$I_{\text{mag}} = I_{(C)}^N + I_{(C)}^{E1} - I_{(C)}^{E2} + I_{(C)}^{A1} - I_{(C)}^{A2}. \quad (22)$$

Typical IET magnon spectra are shown by Ando and coworkers in Ref. 1. They display a strong peak around 12–20 mV and a rapid decrease for energies below the peak, due probably to a low energy cutoff, with a vanishing magnon density of states at very small energies. Introducing this low energy cutoff in the magnon spectrum, and taking the low temperature limit $T \rightarrow 0^\circ\text{K}$, we get $f_{\text{BE}} \rightarrow 0$ for the Bose–Einstein distribution. This limit excludes the absorption terms in Eq. (22), leaving only the emission contributions to the total current

$$\begin{aligned}
I_{\text{mag}} = & \frac{4\pi e}{\hbar} \int d\omega \int_0^{V-\hbar\omega} d\varepsilon \{ T^J(\varepsilon, V, d, \Phi_0) [S_R \rho_R^{\text{mag}}(\omega) \\
& + S_L \rho_L^{\text{mag}}(\omega)] N_{\downarrow}^L(\varepsilon - V - \hbar\omega) N_{\uparrow}^R(\varepsilon) \Theta(V - \hbar\omega) \\
& - T^J(\varepsilon, V, d, \Phi_0) [S_R \rho_R^{\text{mag}}(\omega) + S_L \rho_L^{\text{mag}}(\omega)] \\
& \times N_{\downarrow}^R(\varepsilon) N_{\uparrow}^L(\varepsilon - V - \hbar\omega) \Theta(\hbar\omega - V) \} + I_{(C)}^N, \quad (23)
\end{aligned}$$

where $\Theta(x)$ is the step function.

One can use as the magnon dispersion relation a simple isotropic parabolic dependence, i.e., $\hbar\omega = E_m(q/q_m)^2$, where E_m is related to the Curie temperature by the mean field approximation $E_m = 3k_B T_C / (S+1)$, and q_m is the radius of the first Brillouin zone.⁸ In other words E_m is the maximum magnon energy (high energy cutoff).¹ Considering the above discussion, assuming identical ferromagnetic electrodes, and after some mathematical simplifications, one finally gets the conductance in the form

$$G_C = G_C^d + G_C^{\text{mag}},$$

where G_C^d is given by Eqs. (13) and (14), for P and AP alignment, respectively, and G_C^{mag} is shown below

$$G_P^{\text{mag}} = \frac{2\pi e^2}{\hbar} T^J(V) [2S^2 W_{(P)} + \Lambda(V) S W_{(AP)}], \quad (24)$$

and

$$G_{AP}^{\text{mag}} = \frac{2\pi e^2}{\hbar} T^J(V) [2S^2 W_{(AP)} + 2\Lambda(V) S W_{(P)}], \quad (25)$$

with $S = (S^R + S^L)/2$ and

$$\Lambda(V) = \begin{cases} V/E_m & \text{for } V < E_m, \\ 2 - E_m/V & \text{for } V > E_m. \end{cases}$$

The functions $W_{(P)}$ and $W_{(AP)}$ in Eqs. (24) and (25) have been evaluated near zero bias, using formulas (9) and (10), respectively, substituting ε by the constant value 0.1 eV. We point out that magnon processes significantly contribute to the conductance only for voltages below 100 mV, and so we can consider $W_{(P)}$ and $W_{(AP)}$ as almost constant under the integration sign. The exchange tunneling coefficient T^J generally is one or two orders of magnitude smaller than the direct coefficient. We found excellent agreement between our theory and the experimental data using the same set of parameters of Fig. 1 for the tunneling barrier and the electronic structure, spin $S = 3/2$ and $T^d/T^J = 37$ for the ratio of the direct tunneling to the exchange tunneling coefficient. The magnon cutoff E_m was taken to be 90 meV. The results are shown in Fig. 3 for the resistances and in Fig. 4 for the corresponding MR. Clearly, the AP configuration is more sensible to the magnon contribution, since the current for that configuration is weighted by the product $N_M^L N_M^R$, which is much bigger than the factors $N_m^L N_M^R$ or $N_M^L N_m^R$ which appear in the P current, with the indices m and M referring to *minority* and *majority* spin bands (compare Figs. 1 and 3). Obviously, minor differences between theory and experimental data come from the fact that we are using a very simplified model for the band structure and the magnon dispersion relation. We comment on these results in the next section.

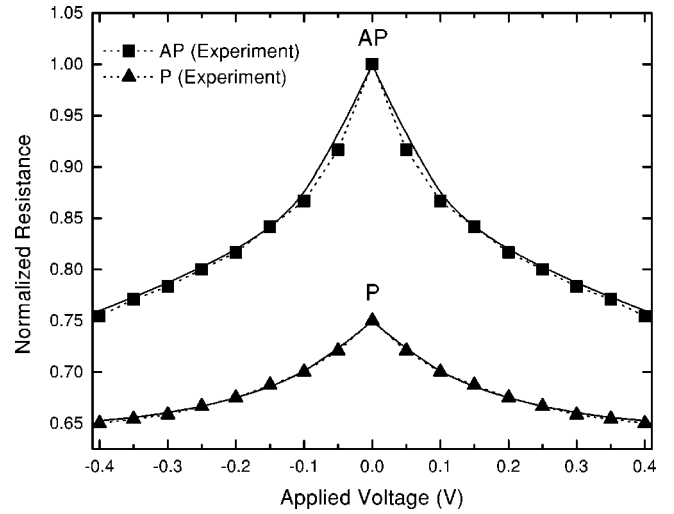


FIG. 3. Resistance, in arbitrary units, as a function of the voltage bias for the AP and P configurations: the experimental results (dotted line and symbols) are taken from Ref. 8 and the theoretical ones (solid lines) include magnon-assisted tunneling. Parameters are kept the same as in Fig. 1, with the addition of $T^d/T^J = 37$.

V. CONCLUSIONS

We have presented a consistent study of the voltage dependence of the “giant” magnetoresistance in ferromagnetic tunneling junctions. Our approach includes: (a) lowering of the effective barrier height with the applied voltage; (b) different variations of the density of states for each spin band with voltage; and (c) magnon assisted inelastic tunneling near zero bias. We found that taking into account all those effects is essential to fully explain experimental results at low temperature for the voltage range between 0 and 500 mV. We have also clarified the role of the different parameters used in the theory: Some of them (d, Φ_0, η) determine the absolute value of the resistance at zero bias, which in turn is a scale factor in the theory; a different set, related to the band structure (r, β, λ), mainly monitors the global behavior with voltage and the value of the junction MR. To adjust our

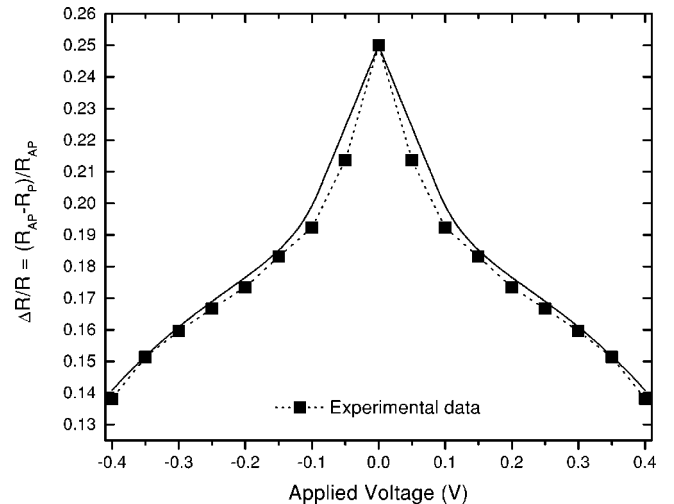


FIG. 4. Magnetoresistance as a function of voltage. Parameters are kept the same as in Fig. 3.

results with selected experimental data, we have taken β , $\lambda > 0$, but as shown in Ref. 10, this scenario is not unique and depends on the topology of the bands that contribute to the current; and finally, the behavior near zero bias (*zero bias anomaly*), with a rapid decrease of the resistance for the AP configuration up to 100 mV, is ascribed to magnon-assisted tunneling. Our estimation of $T^d/T^J \sim 40$ seems to be more realistic than previous estimations.⁸ We note that the latter is the only adjustable parameter to fit the voltage dependence below 100 mV (for both P and AP configurations). Our calculation is in excellent agreement with the experimental data (see Figs. 3 and 4).

Temperature effects are not discussed in this article. As shown in Sec. IV, only magnon emission processes are included at low temperature ($T \rightarrow 0$). At finite temperature, we expect a decrease of the resistance near zero bias, due to one-magnon-absorption assisted tunneling.¹⁸ The above should be superimposed to the thermal smearing in the Fermi–Dirac distribution of tunneling electrons.³

ACKNOWLEDGMENT

The authors would like to acknowledge partial financial support from *Fundação do Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo* (FAPESP, SP, Brazil), through Project No. 2002/09895-6.

- ¹Y. Ando, J. Murai, H. Kubota, and T. Miyazaki, J. Appl. Phys. **87**, 5209 (2000).
- ²X. H. Xiang, T. Zhu, J. Du, G. Landry, and J. Q. Xiao, Phys. Rev. B **66**, 174407 (2002).
- ³J. J. Akerman, I. V. Roushchin, J. M. Slaughter, R. W. Dave, and I. K. Schuller, Europhys. Lett. **63**, 104 (2003).
- ⁴F. Montaigne, J. Nassar, A. Vaurès, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, A. Schuhl, and A. Fert, Appl. Phys. Lett. **73**, 2829 (1998).
- ⁵T. Miyazaki and N. Tezuka, J. Magn. Magn. Mater. **139**, L231 (1995).
- ⁶G. G. Cabrera and L. M. Falicov, Phys. Status Solidi B **61**, 539 (1974); Phys. Rev. B **11**, 2651 (1975).
- ⁷M. Jullière, Phys. Lett. A **54**, 225 (1975).
- ⁸S. Zhang, P. M. Levy, A. C. Marley, and S. S. P. Parkin, Phys. Rev. Lett. **79**, 3744 (1997).
- ⁹J. S. Moodera, J. Nowak, and R. J. M. van de Veerdonk, Phys. Rev. Lett. **80**, 2941 (1998).
- ¹⁰G. G. Cabrera and N. García, Appl. Phys. Lett. **80**, 1782 (2002).
- ¹¹J. G. Simmons, J. Appl. Phys. **34**, 1793 (1963).
- ¹²M. Sharma, S. W. Wang, and J. H. Nickel, Phys. Rev. Lett. **82**, 616 (1999).
- ¹³P. LeClair, J. T. Kohlhepp, H. J. M. Swagten, and W. J. M. de Jonge, Phys. Rev. Lett. **86**, 1066 (2001).
- ¹⁴N. García, Appl. Phys. Lett. **77**, 1351 (2000).
- ¹⁵D. K. Ferry and S. M. Goodnick, *Transport in Nanostructures* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997); Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics* (Oxford University Press, Oxford, 1997).
- ¹⁶D. C. Mattis, *The Theory of Magnetism* (Harper and Row Publishers, New York, 1965); C. Kittel, *Quantum Theory of Solids* (Wiley, New York, 1963).
- ¹⁷W. J. Gallagher, S. S. P. Parkin, Yu Lu, X. P. Bian, A. Marley, K. P. Roche, R. A. Altman, S. A. Rishton, C. Jahnes, T. M. Shaw, and Gang Xiao, J. Appl. Phys. **81**, 3741 (1997).
- ¹⁸C. A. Dartora and G. G. Cabrera (unpublished).

Anexo 2

”Resonant Magnetic Tunnel Junction at 0°K:
I-V Characteristics and Magnetoresistance”

J. Appl. Phys. **97** (2005), 033708

Resonant magnetic tunnel junction at 0° K: I-V characteristics and magnetoresistance

C. A. Dartora^{a)} and G. G. Cabrera^{b)}

Instituto de Física "Gleb Wataghin," Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), C. P. 6165, Campinas 13083-970 SP, Brazil

(Received 12 July 2004; accepted 11 November 2004; published online 14 January 2005)

In this paper we analyze the main transport properties of a simple resonant magnetic tunnel junction (FM-IS-METAL-IS-FM structure) taking into account both elastic and magnon-assisted tunneling processes at low voltages and temperatures near 0° K. We show the possibility of magnetoresistance inversion as a consequence of inelastic processes and spin-dependent transmission coefficients. Resonant tunneling can also explain the effect of scattering by impurities located inside an insulating barrier.

© 2005 American Institute of Physics. [DOI: 10.1063/1.1846948]

I. INTRODUCTION

Recently, the interest on the phenomena of Giant Magnetoresistance (GMR) in magnetic tunnel junctions (MTJ), made up of two ferromagnetic electrodes separated by an insulating barrier, has grown significantly due to potential applications in magnetoresistive reading heads, magnetic field sensors, nonvolatile magnetic random access memories, and many others.^{1–5} The GMR effect is based on the spin-dependent scattering mechanisms proposed in the early papers by Cabrera and Falicov,⁶ which lead in MTJ's, to a strong dependence of the conductance on the magnetic polarization.⁷ Typically, the GMR effect found in MTJ's is of the order of 25%–30%,^{8–10} and points to a large ratio of the densities of states for majority (M) and minority (m) electrons at the Fermi level (E_F),^{8,11,12}

$$\frac{N_M(E_F)}{N_m(E_F)} \approx 2.0 - 2.5.$$

As usual in MR experiments, one compares the resistances for the cases where the magnetizations at the electrodes are antiparallel (AP) and parallel (P).¹³

The subject of this paper is a quite similar ferromagnetic structure, the resonant magnetic tunnel junction (RMTJ), made up of two ferromagnetic electrodes with a layered insulator-metal-insulator structure between them. The resonance energy levels also can be provided by impurity scattering centers placed inside a single insulating barrier.^{14–16} Experimentally, it was found that impurities in the barrier¹⁷ and electronic structure of the interfaces strongly affect the MR.¹⁸ A remarkable effect of resonant tunneling in magnetic structures is the inversion of spin-polarization,¹⁹ with a consequent inversion of the MR.

In Ref. 8, scattering from magnons at the electrode-insulator interface has been proposed as the mechanism for randomizing the tunneling process and opening the spin-flip channels that reduce the MR in single barrier MTJs. This process may explain the MR behavior in the vicinity of zero

bias (voltages smaller than 40–100 mV). In fact, inelastic-electron tunneling spectroscopy (IETS) measurements at low temperature showed peaks that can unambiguously be associated with one-magnon spectra at very small voltages (from 12 to 20 mV, with tails up to 40 mV, and maximum magnon energy not larger than 100 meV¹). In the present work the resonant MTJ constituted of a double barrier structure will be analyzed, and the inelastic magnon scattering will be proposed as a mechanism capable to produce the inversion of MR. A complete theory of the transport properties of a RMTJ should include the following:

- (i) magnon assisted tunneling effects, with maximum magnon energies of the order of ~ 100 meV. At low temperature, electrons from the electrodes, accelerated by the applied voltage, excite magnons at the interface. At low temperature, only magnon-emission processes should be considered;
- (ii) variation with voltages of the densities of states for the different spin bands in the ferromagnets. Here, we will follow closely the approach of Refs. 11 and 12, with a simple picture of the band structure. This is motivated by the discussions given in Ref. 11 over the polarization of the tunneling current. We assume here that the latter is mainly of s character;
- (iii) consideration of a resonant tunneling transmission coefficient with *Lorentzian* shape near the resonance, and voltage dependence of the resonant energy level. The resonances for elastic and magnon-assisted processes are different, allowing the inversion of MR.

The above program will be developed in the present contribution. The content of this paper can be described as follows: In the next section, we formulate the theoretical basis for analyzing tunneling currents, discussing the transfer Hamiltonian that includes all the above-mentioned ingredients. In Sec. III, we analyze the I-V characteristics and the MR inversion considering resonant transmission coefficients and the effects of density of states in both elastic and magnon-assisted tunneling processes. Finally, in the last section, a few conclusions and remarks are added.

^{a)}Electronic mail: dartora@ifi.unicamp.br

^{b)}Electronic mail: cabrera@ifi.unicamp.br

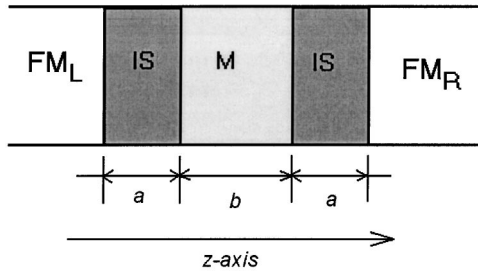


FIG. 1. A simple double barrier resonant magnetic tunnel junction: FM_L and FM_R are two ferromagnetic electrodes, IS_L and IS_R are two potential barriers while M is a metallic layer (ferromagnetic or not) placed between the two barriers.

II. THEORETICAL FRAMEWORK

To give a description of the MR and the resistance in a RMTJ, we will use the transfer Hamiltonian method.^{20–22} The resonant junction is shown schematically in Fig. 1. FM_L and FM_R are two ferromagnetic electrodes. The regions designated by IS are two insulators (thin oxide films) representing a potential barrier for conduction electrons due to the fact that the Fermi levels of the ferromagnetic layers are situated in the gap region of the oxide films. The region designated by M is a metallic layer (which can be ferromagnetic or not) located between the two insulating regions and having the Fermi level similar to that of the ferromagnetic electrodes FM_L and FM_R . We have considered the s -band electrons as free particles (plane waves), being responsible for the dominant contribution to the tunneling process. The d electrons, which are more localized, enter in the process only via the exchange interaction with s electrons on each ferromagnetic electrode. In the context of second quantization and neglecting the magnetization energy (Zeeman term), the unperturbed Hamiltonian, representing the ferromagnetic reservoirs FM_L and FM_R , is given by

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma, \alpha=(L,R)} E_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha} \quad (1)$$

with $L(R)$ referring to the left(right) ferromagnetic electrode, $c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha\dagger}$ ($c_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha}$) are the creation (annihilation) fermionic operators for wave vector $\mathbf{k}$ and spin σ , $E_{\mathbf{k}\sigma} = \hbar^2 k^2 / 2m - \sigma \Delta_{\alpha}$ is the Hartree–Fock energy, and Δ_{α} is the shift in energy due to the exchange interaction on each side of the double barrier.

The double barrier structure (IS-M-IS) can be treated as a perturbation, being responsible for the interaction between the two ferromagnetic electrodes. In writing the interaction part of the total Hamiltonian, which makes possible the transfer of electrons from one side ferromagnetic electrode to the other, we follow Ref. 8. Apart from the direct transfer that comes from elastic processes, we include transfer with magnetic excitations that originates from the s - d exchange between conduction electrons and localized spins at the two interfaces FM_L -IS and IS- FM_R . The excitations are described by a linearized Holstein–Primakoff transformation,²² in the spirit of a one-magnon theory. We use the following interaction Hamiltonian:

$$\begin{aligned} H_I = & \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d (c_{\mathbf{k}\sigma}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma}^R + c_{\mathbf{k}'\sigma}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^L) + \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{s}\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J (c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R \\ & + c_{\mathbf{k}'\downarrow}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow}^L) (\sqrt{2S_L} b_{\mathbf{q}}^L + \sqrt{2S_R} b_{\mathbf{q}}^R) \\ & + \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{s}\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R + c_{\mathbf{k}'\uparrow}^{R\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow}^L) (\sqrt{2S_L} b_{\mathbf{q}}^{L\dagger} \\ & + \sqrt{2S_R} b_{\mathbf{q}}^{R\dagger}) + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{s}\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^R - c_{\mathbf{k}\downarrow}^{L\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^R + \text{h.c.}) \\ & \times (S_L + S_R - (b_{\mathbf{q}}^{R\dagger} b_{\mathbf{q}}^R + b_{\mathbf{q}}^{L\dagger} b_{\mathbf{q}}^L)), \end{aligned} \quad (2)$$

where $t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d$ is the direct transmission amplitude, $t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J$ is the inelastic transmission amplitude (depends on the exchange integral), $S^L(S^R)$ is the spin value at the left (right) ferromagnetic electrode, N_s is the total number of spins at the interfaces FM_L -IS and IS- FM_R , and $b_{\mathbf{q}}^{\alpha\dagger}$ ($b_{\mathbf{q}}^{\alpha}$) are the creation (annihilation) operators for magnons with wave vector $\mathbf{q}$ at each interface between the double barrier IS-M-IS and the electrodes FM_L and FM_R . The wave vector $\mathbf{q}$ is quasi-two-dimensional (the magnon wave function is localized at the interfaces, but with finite localization length). The origin of the direct and inelastic transmission amplitudes, $t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d$ and $t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J$, respectively, is the overlap between the left and right electrode wave functions inside the double barrier region, defined simply as follows:

$$t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d = \int d^3\mathbf{x} \varphi_{\mathbf{k}}^{L*}(\mathbf{x}) \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \right) \varphi_{\mathbf{k}'}^R(\mathbf{x})$$

and

$$t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J = - \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{x}' J(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}}^{L*}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}'}^R(\mathbf{x}) \exp[i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'],$$

$\varphi_{\mathbf{k}}^{\alpha}(\mathbf{x})$ being the α -electrode wave function, $V(\mathbf{x})$ the applied voltage superimposed to the lattice potential, and $J(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ the position-dependent exchange factor. The transmission coefficients will be proportional to the above quantities, $T_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d = |t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^d|^2$ and $T_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J = |t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^J|^2$. As one can clearly see from (2), the direct tunneling is responsible for a conserving spin current while the inelastic tunneling provides a spin-flipping magnon-assisted current flowing through the RMTJ. A rigorous analysis of the transmission coefficients for a double barrier structure placed between two metallic ferromagnetic electrodes is given in Ref. 20, showing that the transmission coefficients, $T^d = |t^d|^2$ and $T^J = |t^J|^2$, close to the resonance levels, are very well fitted through the use of a *Lorentzian* function, defined as follows:

$$T(\epsilon) = \frac{\Gamma^2(\epsilon)}{\Gamma^2(\epsilon) + (\epsilon - \epsilon_r(V))^2}, \quad (3)$$

where

$$\Gamma(\epsilon) = \left[\frac{\hbar^2(\epsilon_0 + |\epsilon_r(V)|)}{4meb^2} T_1^2(\epsilon) \right]^{1/2} \quad (4)$$

is the half-width at the half-maximum of the resonance in the potential well formed by the structure IS-M-IS, m is the electron mass, b is the metallic layer thickness, $T_1(\epsilon)$ is the trans-

mission coefficient for a single barrier, which is given below, in the WKB approximation:

$$T_1(\epsilon) \approx A \exp[-2a\sqrt{2me(V_0 - \eta\epsilon)/\hbar^2}] \\ = A \exp[-1.024d\sqrt{V_0}]\exp\left[\frac{1}{2}\frac{\eta\epsilon a}{\sqrt{V_0}}\right],$$

with A constant, $\eta = \epsilon_z/\epsilon$, relating the energy ϵ with its component ϵ_z perpendicular to the double barrier, a is the insulating barrier thickness in Angstroms, ϵ_0 and $\epsilon_r(V)$ are related to the resonant energy, $\epsilon_r(V)$ being a function of the applied voltage V ,

$$\epsilon_r = \epsilon_0 - \frac{V}{2} \quad (5)$$

and all energies given in eV. The above formulas, shown in energy variables, for the sake of convenience, will be used later on in this paper.

In general, the total current obtained with (2) has contributions from elastic processes, resulting in a direct tunneling that conserves spin, and from the inelastic ones, which involve the emission and absorption of magnons with electronic spin flip. In the following we describe the transport properties of the RMTJ.

III. TRANSPORT PROPERTIES: I-V CHARACTERISTICS AND MR INVERSION

The interaction Hamiltonian (2) and the Fermi Golden Rule,

$$w_{\mathbf{k}\sigma - \mathbf{k}'\sigma'} = \frac{2\pi e}{\hbar} |\langle \mathbf{k}'\sigma' | H_I | \mathbf{k}\sigma \rangle|^2 \delta(E_{\mathbf{k}\sigma} - E_{\mathbf{k}'\sigma'} \pm \hbar\omega), \quad (6)$$

allow us to express the tunneling current as follows:

$$I = \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma\sigma'} |\langle \mathbf{k}'\sigma' | H_I | \mathbf{k}\sigma \rangle|^2 \times (f(E_{\mathbf{k}\sigma}^L)[1 - f(E_{\mathbf{k}'\sigma'}^R)] \\ - f(E_{\mathbf{k}'\sigma'}^R)[1 - f(E_{\mathbf{k}\sigma}^L)]) \delta(E_L - E_R). \quad (7)$$

Now we replace the sums over the wave vectors $\mathbf{k}$ and $\mathbf{k}'$ by energy integrals, which is a well-known procedure, integrate the Dirac delta functions ($\delta(E_L - E_R)$), and obtain the total current flowing through the junction

$$I(V) = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\epsilon \sum_{\sigma\sigma'} (T_{\sigma\sigma'}(\epsilon) N_{\sigma}^L(\epsilon - V) N_{\sigma'}^R(\epsilon) f_L(\epsilon - V) \\ \times [1 - f_R(\epsilon)] - T_{\sigma'\sigma}(\epsilon) N_{\sigma'}^L(\epsilon - V) N_{\sigma}^R(\epsilon) f_R(\epsilon) \\ \times [1 - f_L(\epsilon - V)]), \quad (8)$$

being $\epsilon = E - E_F$, E_F the Fermi energy, $N_{\sigma}^{\alpha}(\epsilon)$ the density of states for electrons with spin σ at the electrode FM_{α} , $\alpha = (R, L)$ denote the electrode, and $f(\epsilon) = (\exp[\epsilon/k_B T] + 1)^{-1}$ is the Fermi-Dirac distribution, k_B is the Boltzmann constant, and T the absolute temperature. The tunneling coefficients are obtained from (2) through $T_{\sigma\sigma'}(\epsilon) = |\langle \mathbf{k}\sigma | H_I | \mathbf{k}'\sigma' \rangle|^2$, being related to the direct and inelastic transmission coefficients by $T_{\sigma\sigma} = T^d$ and $T_{\sigma, -\sigma} = T^I$, respectively. These quanti-

ties are functions of energy, applied voltage, and double barrier parameters.

We are interested now in the basic transport properties such as the I-V characteristic, the differential conductance $G = dI/dV$ and the MR. The tunneling magnetoresistance (TMR) is defined as

$$\text{TMR} = \frac{I^{(P)} - I^{(AP)}}{I^{(P)}}, \quad (9)$$

where P(AP) stand for the parallel(antiparallel) configuration scheme. In the P configuration the magnetization (imposed by external applied magnetic fields) of both electrodes FM_L and FM_R has the same orientation along the z axis, the majority and minority spin bands corresponding to the same spin orientation for both electrodes, while in the AP configuration the magnetization is rotated by 180° from one electrode to another, and in this case, the majority spin band in FM_L is the minority spin band in FM_R and *vice versa*. In the low bias regime, we are interested in voltages smaller than the Fermi energy and only the states near the Fermi level will contribute to the transport, so we can expand the density of states in a Taylor series as follows:

$$N_{\sigma}^{\alpha}(\epsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n N_{\sigma}^{\alpha}(\epsilon)}{d\epsilon^n} \right|_{\epsilon=0} \epsilon^n. \quad (10)$$

Taking into account identical electrodes and the low bias regime, we can expand these expressions to first order with good accuracy. The s band can be represented by a parabolic dispersion relation and density of states $N_{\sigma} \propto \sqrt{E - \Delta_{\sigma}}$, where $\Delta_{\sigma}(\sigma = \uparrow, \downarrow)$ gives the bottom of the spin band, with $|\Delta_{\uparrow} - \Delta_{\downarrow}| = 2\Delta$, as in Ref. 15. However, we consider here cases more general than the parabolic dispersion, with the band structure described through the following set of parameters:

$$r \equiv \left(\frac{N_M}{N_m} \right)_F, \\ \lambda \equiv \left(\frac{dN_M/dE}{dN_m/dE} \right)_F, \\ \beta \equiv \left(\frac{1}{N_m} \frac{dN_m}{dE} \right)_F, \quad (11)$$

with all quantities evaluated at the Fermi level. The labels m and M stand for minority and majority spin bands, respectively. It was shown in a previous work¹⁶ that the ratio of the densities of states r at the Fermi level can be calculated using the experimental value of $\Delta R/R$ at zero bias (only if $T_{\sigma\sigma'}$ is almost independent of σ and σ' close to the voltage $V=0$):

$$r = \frac{1}{1 - \left. \frac{\Delta R}{R} \right|_{V=0}} + \sqrt{\frac{1}{\left(1 - \left. \frac{\Delta R}{R} \right|_{V=0} \right)^2} - 1}, \quad (12)$$

which does not depend on the barrier parameters.

The total current given by (8) can be decomposed into a conserving spin direct current and a spin-flipping inelastic current involving magnon scattering. Considering symmetric

transmission coefficients (equal probabilities for tunneling from the left to the right electrode as in the opposite sense), the direct current is written below:

$$I_d = \frac{2\pi e}{\hbar} \int_0^V d\epsilon (T_{\uparrow\uparrow}(\epsilon) N_{\uparrow}^L(\epsilon - V) N_{\uparrow}^R(\epsilon) + T_{\downarrow\downarrow}(\epsilon) N_{\downarrow}^L(\epsilon - V) N_{\downarrow}^R(\epsilon)). \quad (13)$$

The transmission coefficients ($T_{\sigma\sigma'}^d$) are modeled according to the expression (3), as follows:

$$T_{\uparrow\uparrow} = \frac{\Gamma_{\uparrow\uparrow}^2(\epsilon)}{\Gamma_{\uparrow\downarrow}^2(\epsilon) + (\epsilon - \epsilon_{r\uparrow\uparrow}(V))^2},$$

$$T_{\downarrow\downarrow} = \frac{\Gamma_{\uparrow\uparrow}^2(\epsilon)}{\Gamma_{\downarrow\downarrow}^2(\epsilon) + (\epsilon - \epsilon_{r\downarrow\downarrow}(V))^2},$$

with $\epsilon_{r\uparrow\uparrow} \neq \epsilon_{r\downarrow\downarrow}$ in general. To evaluate the expression (13) we define the following quantities, depending only on density of states:

$$W_1(V) = N_M^L(\epsilon - V) N_M^R(\epsilon) |_{\epsilon=V/2} = (N_m^F)^2 \left(r^2 - \frac{\beta^2 \lambda^2}{4} V^2 \right), \quad (14)$$

$$W_2(V) = N_m^L(\epsilon - V) N_m^R(\epsilon) |_{\epsilon=V/2} = (N_m^F)^2 \left(1 - \frac{\beta^2}{4} V^2 \right), \quad (15)$$

$$W_3(V) = N_M^L(\epsilon - V) N_m^R(\epsilon) |_{\epsilon=V/2} = (N_m^F)^2 \left(r + \frac{\beta(r-\lambda)}{2} V - \frac{\beta^2 \lambda}{4} V^2 \right), \quad (16)$$

$$W_4(V) = N_m^L(\epsilon - V) N_M^R(\epsilon) |_{\epsilon=V/2} = (N_m^F)^2 \left(r - \frac{\beta(r-\lambda)}{2} V - \frac{\beta^2 \lambda}{4} V^2 \right), \quad (17)$$

and the quantity $\Sigma_{\sigma\sigma'}(V)$, which is only dependent on the transmission coefficients, as follows:

$$\begin{aligned} \Sigma_{\sigma\sigma'}(V) &= \int_0^V d\epsilon T_{\sigma\sigma'}(\epsilon) \\ &= \int_0^V d\epsilon \frac{\Gamma_{\sigma\sigma'}^2(\epsilon)}{\Gamma_{\sigma\sigma'}^2(\epsilon) + (\epsilon - \epsilon_{r\sigma\sigma'}(V))^2} \\ &= \Gamma_{\sigma\sigma'}(V) \left[\arctan \left(\frac{V - \epsilon_{r\sigma\sigma'}(V)}{\Gamma_{\sigma\sigma'}(V)} \right) + \arctan \left(\frac{\epsilon_{r\sigma\sigma'}(V)}{\Gamma_{\sigma\sigma'}(V)} \right) \right]. \end{aligned} \quad (18)$$

Making use of (14)–(18), we obtain the explicit expressions for the conserving spin direct current, in both P and AP configurations:

$$I_d^{(P)} = \frac{2\pi e}{\hbar} [W_1(V) \Sigma_{\uparrow\uparrow}(V) + W_2(V) \Sigma_{\downarrow\downarrow}(V)], \quad (19)$$

$$I_d^{(AP)} = \frac{2\pi e}{\hbar} [W_3(V) \Sigma_{\uparrow\uparrow}(V) + W_4(V) \Sigma_{\downarrow\downarrow}(V)]. \quad (20)$$

When the spin flipping magnon-assisted current can be neglected, the MR inversion (the MR reverses its sign) is allowed in an interval of voltages if the requirement $I_d^{(P)}(V) < I_d^{(AP)}(V)$ is satisfied, i.e.,

$$\frac{\Sigma_{\downarrow\downarrow}(V)}{\Sigma_{\uparrow\uparrow}(V)} > \frac{W_1(V) - W_3(V)}{W_4(V) - W_2(V)}. \quad (21)$$

The above case is illustrated in Fig. 2, where we have neglected the inelastic current. We have used the following parameters: $r=2.21$ (from Refs. 8, 11, and 12), $\lambda=2.9$, $\beta=0.08$, $a=0.5$ nm, $b=0.1$ nm, $V_0=3.0$ eV. For Figs. 2(a)–2(c), we have chosen the resonant energies to be $\epsilon_{0\uparrow\uparrow}=35$ meV and $\epsilon_{0\downarrow\downarrow}=47$ meV, for spin-up and spin-down, respectively, while for Figs. 2(d)–2(f) we invert the situation making $\epsilon_{0\uparrow\uparrow}=47$ meV and $\epsilon_{0\downarrow\downarrow}=35$ meV. It is clear from Figs. 2(a) and 2(d) that for a finite interval of voltages the current I_{AP} is greater than I_P with the consequent inversion of MR. Looking at Figs. 2(b) and 2(e), we observe that the differential conductance $G=dI/dV$ assume negative values for a range of voltages where the increase of applied voltage produce a reduction of the total current. This behavior is a consequence of the resonant tunneling known as Negative Differential Resistance (NDR) phenomena and takes place in several devices such as tunnel diodes.²⁰ Our attention turns now to Figs. 2(c) and 2(f), where we have plotted the TMR using the expression (9). Observe that in the case of Fig. 2(c) the MR starts from its zero bias value (25%) and increase with the applied voltage until reaching its maximum value near 50%. From its maximum value the MR begins to decrease with the increase of the applied voltage, assuming negative values and reaching a minimum. After that the MR turns to increase with the applied voltage to assume positive values again. Two important consequences follow from the resonant tunneling: (1) greater values of MR are obtained using the RMTJ (maximum MR about 50% against the 25% obtained in a simple MTJ); and (2) inversion of MR in a finite range of the applied voltage. Now we look at the situation shown in Fig. 2(d). The MR starts from a negative value (about -5%) near $V=0$, decreasing with the applied voltage until reaching a minimum value ($\sim -50\%$) to begin to grow up until becoming positive. The maximum positive value is of the order of 50% and the main consequences (an increase of MR values when compared to the simple MTJ's and the MR inversion) are achieved as in the previous case. The MR behavior of both situations can be easily understood with a basis in the resonant transmission coefficients and in the band structure. In the first situation [Figs. 2(a)–2(c)] the resonance for the spin-up transmission coefficient occurs first before for spin-down. When the spin-up resonance is the dominant contribution [$\Sigma_{\uparrow\uparrow}(V) > \Sigma_{\downarrow\downarrow}(V)$] to the direct currents, the parallel I_P depends mainly on the product of majority spin bands $W_1(V) \propto N_M N_m$ while the antiparallel I_{AP} depends on $W_3(V) \propto N_M N_m$, being $W_1 > W_3$. The MR increase with the applied voltage until the spin-down resonance is reached while the spin-up resonance is turned off. Now that the spin-down channel is the dominant contribution to the

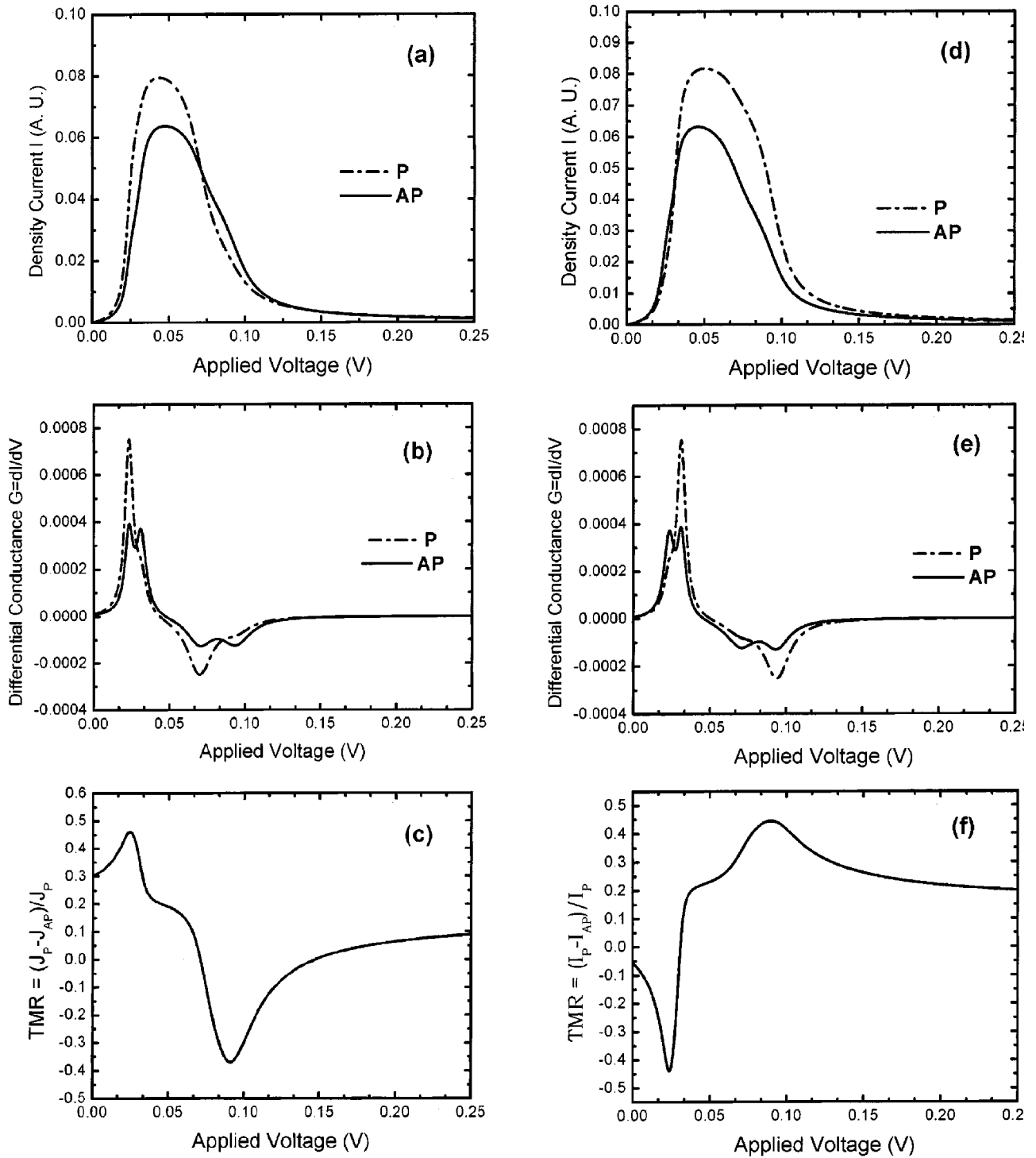


FIG. 2. Neglecting magnon-assisted tunneling we show (a) I-V characteristic; (b) differential conductance $G = dI/dV$ for both P and AP alignments; and (c) the tunneling magnetoresistance defined as $TMR = (I_P - I_{AP})/I_P$ using $\epsilon_{0\uparrow} = 35$ meV and $\epsilon_{0\downarrow} = 47$ meV (d), (e), and (f) show the same as (a), (b), and (c), respectively, for $\epsilon_{0\uparrow} = 47$ meV and $\epsilon_{0\downarrow} = 35$ meV, keeping the other parameters the same.

currents, the parallel I_P depends mainly on the product of minority spin bands $W_2(V) \propto N_M N_M$ while the antiparallel I_{AP} depends on $W_4(V) \propto N_m N_M$, being $W_4 > W_2$. In this way $I_{AP} > I_P$ and the MR inversion is achieved. For greater voltages both resonances are turned off and the resonant junction behaves as a simple MTJ. In the second situation, corresponding to Figs. 2(a)–2(c), spin-down resonance is reached first before spin-up resonance and the behavior is obvious.

Consider now that spin-up and spin-down resonances

occur at the same energy, $\epsilon_{0\uparrow\uparrow} = \epsilon_{0\downarrow\downarrow} = \epsilon_{0d}$, which means $\Sigma_{\uparrow\downarrow}(V) = \Sigma_{\uparrow\uparrow}(V) = \Sigma(V)$, explicitly written below:

$$\Sigma(V) = \int_0^V d\epsilon T_{\uparrow\uparrow}(\epsilon) = \int_0^V d\epsilon T_{\downarrow\downarrow}(\epsilon) = \Gamma_d(V) \times \left[\arctan\left(\frac{V - \epsilon_{rd}(V)}{\Gamma_d(V)}\right) + \arctan\left(\frac{\epsilon_{rd}(V)}{\Gamma_d(V)}\right) \right]. \quad (22)$$

The band structure parameters $W_i(V)$ are well-behaved func-

tions of the applied voltage V being the MR inversion forbidden through elastic processes (unless that $r < 1$, which is impossible; by definition; r is always greater than unity). The direct currents in both P and AP configurations are given by

$$I_d^{(P)} = \frac{2\pi e}{\hbar} [W_1(V) + W_2(V)] \Sigma(V), \quad (23)$$

$$I_d^{(AP)} = \frac{2\pi e}{\hbar} [W_3(V) + W_4(V)] \Sigma(V). \quad (24)$$

In fact, even when $\Sigma_{\downarrow\downarrow}(V) = \Sigma_{\uparrow\uparrow}(V) = \Sigma(V)$, the MR inversion is provided by another mechanism: the magnon-assisted tunneling. We will now investigate the MR inversion as a consequence of inelastic processes. To model the inelastic transmission coefficients, defined as $T_{\sigma,-\sigma}^I = |\langle R, \sigma | H_I | L, -\sigma \rangle|^2$, we will adopt *Lorentzian* functions of the form

$$T_{\downarrow\downarrow}(\epsilon, \omega) = \rho(\omega) \frac{n(\omega)}{N|\Delta|S} \frac{\Gamma_{\downarrow\downarrow}^2(\epsilon)}{\Gamma_{\downarrow\downarrow}^2(\epsilon) + (\epsilon - \epsilon_{r\downarrow\downarrow}(V))^2},$$

$$T_{\uparrow\uparrow}(\epsilon, \omega) = \rho(\omega) \frac{n(\omega) + 1}{N|\Delta|S} \frac{\Gamma_{\uparrow\uparrow}^2(\epsilon)}{\Gamma_{\uparrow\uparrow}^2(\epsilon) + (\epsilon - \epsilon_{r\uparrow\uparrow}(V))^2},$$

where $\rho(\omega)$ is the magnon density of states, $n(\omega) = (\exp[\omega/k_B T] - 1)^{-1}$ is the magnon number, following the Bose–Einstein distribution. The appearance of the number of magnons $n(\omega)$ in the transmission coefficients is due to the magnon creation (destruction) operator $b_q^\dagger(b_q)$. The magnon energy ω is a consequence of the overall electron–magnon system energy conservation. A magnon can be absorbed (emitted) with consequent spin-flip and an increase (decrease) in the electron’s energy. The magnon density of states $\rho(\omega)$ comes from the replacement of an integral in the $\mathbf{q}$ variable to an integral in magnon energy ω . The emission and absorption currents, integrating over all magnon states allowed, are written as follows:

$$I_{em} = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\epsilon \int d\omega (T_{\downarrow\downarrow}(\epsilon, \omega) N_{\downarrow}^L(\epsilon - V + \omega) N_{\uparrow}^R(\epsilon) \\ \times f_L(\epsilon - V + \omega) [1 - f_R(\epsilon)] - T_{\downarrow\uparrow}(\epsilon, \omega) \\ \times N_{\uparrow}^L(\epsilon - V + \omega) N_{\downarrow}^R(\epsilon) f_R(\epsilon + V - \omega) [1 - f_L(\epsilon)]) \quad (25)$$

$$I_{abs} = \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\epsilon \int d\omega (T_{\uparrow\downarrow}(\epsilon, \omega) N_{\uparrow}^L(\epsilon - V + \omega) N_{\downarrow}^R(\epsilon) \\ \times f_L(\epsilon - V + \omega) [1 - f_R(\epsilon)] - T_{\uparrow\uparrow}(\epsilon, \omega) \\ \times N_{\downarrow}^L(\epsilon - V + \omega) N_{\uparrow}^R(\epsilon) f_R(\epsilon + V - \omega) [1 - f_L(\epsilon)]). \quad (26)$$

Introducing a low cutoff in the magnon spectrum and taking the low temperature limit $T \rightarrow 0$ K, we get $n(\omega) \rightarrow 0$ for the Bose–Einstein distribution. This limit excludes the absorption current, leaving only the emission contributions to the total current:

$$I_{em}^{(P)} = \frac{2\pi e}{N|\Delta|S\hbar} (W_3(V) + W_4(V)) \Sigma^1(V), \quad (27)$$

$$I_{em}^{(AP)} = \frac{2\pi e}{N|\Delta|S\hbar} (W_1(V) + W_2(V)) \Sigma^1(V), \quad (28)$$

where we have defined

$$\Sigma^1(V) = \int d\omega \int_0^{V-\omega} d\epsilon \rho(\omega) \frac{\Gamma_{\downarrow\downarrow}^2(V)}{\Gamma_{\downarrow\downarrow}^2(V) + (\epsilon - \epsilon_{r\downarrow\downarrow}(V))^2} \\ = \Gamma_{\downarrow\downarrow}(V) \int d\omega \rho(\omega) \left[\arctan\left(\frac{V - \omega - \epsilon_{r\downarrow\downarrow}(V)}{\Gamma_{\downarrow\downarrow}(V)}\right) \right. \\ \left. + \arctan\left(\frac{\epsilon_{r\downarrow\downarrow}(V)}{\Gamma_{\downarrow\downarrow}(V)}\right) \right]. \quad (29)$$

When the limit $\Gamma(V) \rightarrow 0$ (narrow resonance) is valid, the above equation can be simplified, being the result

$$\Sigma^1(V) = \frac{\pi \Gamma_{\downarrow\downarrow}(V)}{2} \int_0^{3V/2 - \epsilon_{0m}} d\omega \rho(\omega), \quad \text{for } \frac{2\epsilon_{0m}}{3} < V < 2\epsilon_{0m};$$

$$0, \quad \text{otherwise.} \quad (30)$$

We put the magnon density of states in a general form:

$$\rho(\omega) = c_1 \omega^n \exp[-c_2(\omega - \omega_0)^m].$$

The above expression (when the exponents n and m are adequately chosen) discards the need to introduce a low and a maximum abrupt cutoff in the magnon spectrum. The differential conductance due to magnon-assisted tunneling current is readily obtained through $G_{em} = dI_{em}/dV$, being the total

differential conductance given by $G = G_d + G_{em}$. The total currents for both P and AP configurations, including elastic and inelastic terms, are shown below:

$$I^{(P)} = \frac{2\pi e}{\hbar} \left\{ [W_1(V) + W_2(V)] \Sigma(V) \right. \\ \left. + \frac{1}{N|\Delta|S} [W_3(V) + W_4(V)] \Sigma^1(V) \right\}, \quad (31)$$

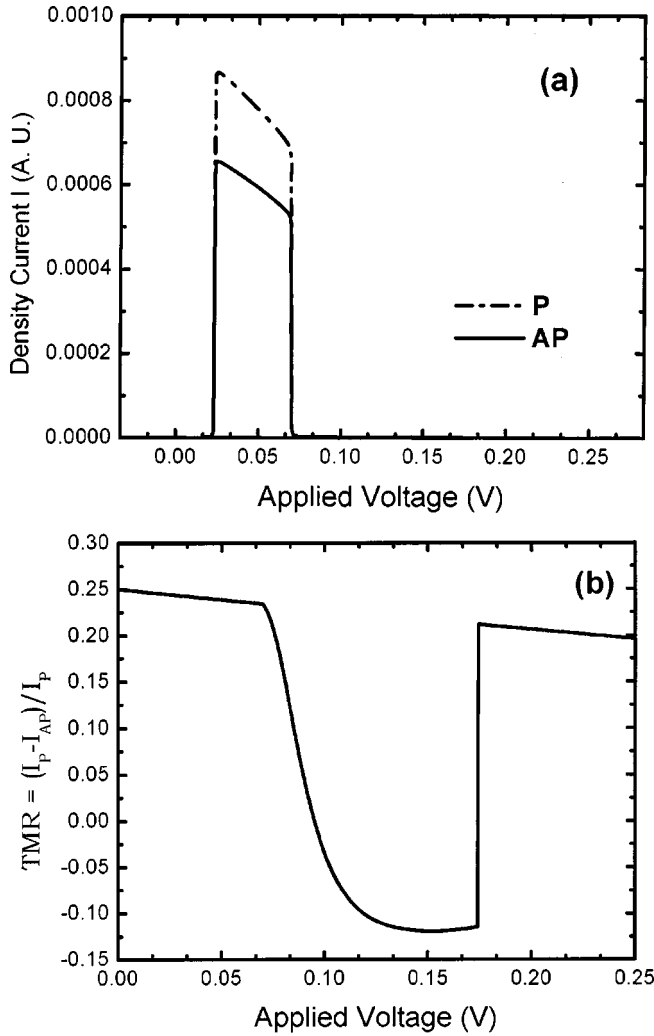


FIG. 3. The MR inversion as a consequence of magnon-assisted tunneling: (a) I-V characteristics and (b) the tunneling magnetoresistance defined by (9), using $\epsilon_{0d}=35$ meV and $\epsilon_{0m}=87.2$ meV.

$$I^{(AP)} = \frac{2\pi e}{\hbar} \left\{ [W_3(V) + W_4(V)]\Sigma(V) + \frac{1}{N|\Delta|S} [W_1(V) + W_2(V)]\Sigma^1(V) \right\}. \quad (32)$$

The MR inversion provided by an inelastic mechanism is obtained when the inequality $I^{(P)}(V) < I^{(AP)}(V)$ is satisfied, or, equivalently,

$$\Sigma(V) < \frac{1}{N|\Delta|S} \Sigma^1(V). \quad (33)$$

Since the resonances for direct and magnon-assisted tunneling occur at different electron energies, allowing the condition (33) to be satisfied, the MR inversion is found in a range of voltages $V_1 < V < V_2$.

In Fig. 3 the main transport properties of a RMTJ including the magnon-assisted tunneling current are shown. The following set of parameters have been used: $a=0.5$ nm, $V_0=3.0$ eV, $N_m^F=1.0$ in normalized units, $r=2.21$, $\lambda=0.08$, $\beta=2.9$, and $\eta=0.1$. We justify the parameter $N|\Delta|S=3/2$ due to the fact that the product of the exchange energy

$|\Delta|$ (~ 10 – 20 meV) with the number of interface atoms N (~ 20 – 100 atoms) is of the order of unity. The spin value is also of the order of unity, so we made $S=3/2$. For the magnon density of states, we chose $\rho(\omega) = \omega \exp[-c_2(\omega - \omega_0)^2]$, being $\omega_0=16$ meV and $c_2=500$ eV $^{-2}$. The value of ω_0 (which corresponds to the peak in the magnon spectrum) is in agreement with the experimental data shown in Ref. 1. Notice that our magnon density of states is not of the form $\sqrt{\omega}$, as one would expect for surface magnons, however eliminating the divergence due to $n(\omega)$ at $\omega=0$, without the need of a lower cutoff in the magnon spectrum. In Fig. 3(a) we show the total currents and in Fig. 3(b) the TMR, calculated with (9). The direct tunneling and inelastic tunneling resonance energies are $\epsilon_{0d}=35$ meV and $\epsilon_{0m}=87.2$ meV, respectively. The RMTJ behaves as expected: the direct resonance occurs first, consequently $I_P > I_{AP}$ due to the fact that $\Sigma(V) \gg \Sigma^1(V)$ and the band structure favor the parallel configuration [$W_1 + W_2 > W_3 + W_4$, $I_P \propto (W_1 + W_2)\Sigma$ and $I_{AP} \propto (W_3 + W_4)\Sigma$]. With the increase of the applied voltage the inelastic process resonance is reached and the direct resonance has been turned off, being this situation being quite different: with $\Sigma(V) \ll \Sigma^1(V)$ the band structure favors the anti-parallel configuration [$W_1 + W_2 > W_3 + W_4$ due to the fact that now $I_P \propto (W_3 + W_4)\Sigma^1$ and $I_{AP} \propto (W_1 + W_2)\Sigma^1$] and, consequently, $I_P < I_{AP}$. The MR inversion is obtained. For greater voltages, both resonances are turned off; the MR turns out to be positive again and the junction behaves as a simple MTJ. We can change the scenario explained above, introducing other inelastic mechanisms like phonon excitations at larger temperatures and impurity doping of the electrodes. Resonance levels can be provided by impurity scattering centers located inside the insulating barrier of a simple MTJ. However, the assumption that the tunneling amplitude from left to right side tunneling is the same as in the opposite direction is not valid, the transmission amplitudes being dependent on the position of the impurity center inside the barrier.

IV. CONCLUSIONS

We have presented a consistent study of the voltage dependence of the “giant” magnetoresistance in ferromagnetic resonant tunneling junctions. Our approach includes (a) a resonant tunneling coefficient with *Lorentzian* shape and lowering of the effective barrier height with the applied voltage, changing the resonance level; (b) different variations of the density of states for each spin band with voltage; and (c) magnon assisted inelastic tunneling near zero bias, allowing the MR inversion.

The MR inversion is an interesting phenomena that can be provided by different transmission coefficients for spin-up and spin-down channels, with spin-up and spin-down resonances occurring at different energies or through inelastic processes entering via magnon excitation. In the last case the resonance level of the inelastic process is different from the direct tunneling resonance allowing the MR inversion. Temperature effects are not discussed in this paper. As shown in Sec. IV, only magnon emission processes are included at low temperature ($T \rightarrow 0$). At finite temperature, we expect a decrease of the resistance near zero bias, due to one-magnon-

absorption assisted tunneling. The above should be superimposed to the thermal smearing in the Fermi–Dirac distribution of tunneling electrons.³

ACKNOWLEDGMENTS

The authors would like to acknowledge partial financial support from *Fundação do Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo* (FAPESP, SP, Brazil), through Project No. 2002/09895-6.

- ¹Y. Ando, J. Murai, H. Kubota, and T. Miyazaki, J. Appl. Phys. **87**, 5209 (2000).
- ²X. H. Xiang, T. Zhu, J. Du, G. Landry, and J. Q. Xiao, Phys. Rev. B **66**, 174407 (2002).
- ³J. J. Akerman, I. V. Roushchin, J. M. Slaughter, R. W. Dave, and I. K. Schuller, Europhys. Lett. **63**, 104 (2003).
- ⁴F. Montaigne, J. Nassar, A. Vours, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, A. Schuhl, and A. Fert, Appl. Phys. Lett. **73**, 2829 (1998).
- ⁵T. Miyazaki and N. Tezuka, J. Magn. Magn. Mater. **139**, L231 (1995).
- ⁶G. G. Cabrera and L. M. Falicov, Phys. Status Solidi B **61**, 539 (1974); Phys. Rev. B **11**, 2651 (1975).

- ⁷M. Julliere, Phys. Lett. **54A**, 225 (1975).
- ⁸S. Zhang, P. M. Levy, A. C. Marley, and S. S. P. Parkin, Phys. Rev. Lett. **79**, 3744 (1997).
- ⁹J. S. Moodera, J. Nowak, and R. J. M. van de Veerdonk, Phys. Rev. Lett. **80**, 2941 (1998).
- ¹⁰J. S. Moodera and G. Mathon, J. Magn. Magn. Mater. **200**, 248 (1999).
- ¹¹G. G. Cabrera and N. Garcia, Appl. Phys. Lett. **80**, 1782 (2002).
- ¹²C. A. Dartora and G. G. Cabrera, J. Appl. Phys. **95**, 6058 (2004).
- ¹³X. Zhang, B. Z. Li, G. Sun, and F. C. Pu, Phys. Rev. B **56**, 5484 (1997); N. Ryzhanova, G. Reiss, F. Kanjouri, and A. Vedyayev, arxiv.cond-mat/0401006 v2, 12 January 2004.
- ¹⁴S. Zhang and P. M. Levy, Eur. Phys. J. B **10**, 599 (1999).
- ¹⁵E. Y. Tsybal, A. Sokolov, I. F. Sabirianov, and B. Doudin, Phys. Rev. Lett. **90**, 186602 (2003).
- ¹⁶E. Y. Tsybal and D. G. Pettifor, Phys. Rev. B **64**, 212401 (2001).
- ¹⁷R. Jansen and J. S. Moodera, Appl. Phys. Lett. **75**, 400 (1999).
- ¹⁸P. LeClair, J. T. Kohlhepp, H. J. M. Swagten, and W. J. M. de Jonge, Phys. Rev. Lett. **86**, 1066 (2001).
- ¹⁹J. M. De Teresa *et al.*, Phys. Rev. Lett. **82**, 4288 (1999).
- ²⁰X. Ferry and X. Goodnick, *Transport in Nanostructures* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- ²¹Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics* (Oxford University Press, New York, 1997).
- ²²C. Kittel, *Quantum Theory of Solids* (Wiley, New York, 1963).

Anexo 3

”Quantum transport in a ferromagnetic
nanowire: conductance and MR effect”

Physics Letters A **334**, p. 46-54

Quantum transport in a ferromagnetic nanowire: conductance and MR effect

C.A. Dartora^{*}, G.G. Cabrera

Instituto de Física ‘Gleb Wataghin’, Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), C.P. 6165, Campinas 13083-970, SP, Brazil

Received 4 October 2004; received in revised form 12 November 2004; accepted 19 November 2004

Available online 2 December 2004

Communicated by R. Wu

Abstract

In this Letter we analyze the general features of quantum transport in a ferromagnetic nanowire based on a simple model. The local spin distribution, provided by well localized *d*-electrons, is governed by the Heisenberg–Ising ferromagnetic Hamiltonian while for the *s*-like conduction electron we have considered the Anderson model. The interaction between local spin and itinerant electrons is given by $H_I = -\Delta \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{\sigma} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$. The conductance formulae and the giant magnetoresistance effect for a nanowire placed between two ferromagnetic electrodes are obtained.

© 2004 Elsevier B.V. All rights reserved.

PACS: 73.61; 75.70.P

Keywords: Giant magnetoresistance; Nanowire

1. Introduction

Nowadays the interest in ferromagnetic nanostructures has been growing significantly due to its potential applications in electronics, information technologies and their drive to reduce devices size [1,2]. Of most importance would be the change in resistivity due to the applied magnetic fields, namely, the magnetoresistance effect (MR), which occurs in sev-

eral structures such as nanocontacts [1–7] and magnetic tunnel junctions (MTJ) [8–11]. In nanocontacts this effect is more pronounceable, been reported in the current literature values of 300–3000% [12–14] for the MR. This is a much larger value compared to the maximum 30–40% encountered in MTJs. It is believed that the main reason for this behavior is that in nanocontacts the transport properties are governed by a strong electron scattering mechanism in the presence of domain walls (DW) [1–7,15] formed at the contact region, being the electron unable to follow adiabatically the local magnetization vector in the ballistic transport regime [1,14] while in MTJs

^{*} Corresponding author.

E-mail address: dartora@ifi.unicamp.br (C.A. Dartora).

the spin majority and minority density of states at each side of a tunneling junction changes with the applied magnetic field, being the transport governed by tunneling and density of states effect [8,10]. Instead of a simple nanocontact (made up of only a few atoms at the end of two ferromagnetic reservoirs), it is possible to place between two bulk ferromagnetic electrodes a nanowire, formed by an atomic chain arranged in a straight line. It is shown that nanowires are capable of support domain wall modes, depending on the boundary conditions imposed by the bulk ferromagnetic reservoirs [3]. However, the quantum transport properties of such structure are not established from a theoretical point of view. Spin splitting of quantized conductance states represent a possible mechanism for the observed large MR effect and pertinent calculations of the conductance and MR in nanosize magnetic contacts were done in Ref. [4] using the Schroedinger equation in the presence of domain walls, which is a quasi-classical treatment.

In this work we analyze the general features of quantum transport in a ferromagnetic nanowire based on a simple theoretical framework. We model the local spin distribution, provided by localized d -electrons, through the Heisenberg–Ising ferromagnetic Hamiltonian while the conduction electrons follow the Anderson model for hopping transport [16,17]. Our model is purely quantum mechanical, allowing a future study of the quantum fluctuations of the conductance. It must be emphasized that d -electrons do not play a crucial role in the conduction phenomena, being the conduction electrons s -like in character. The interaction between local spin and itinerant electrons is given by $H_I = -\Delta \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{\sigma} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$. The conductance formulae and the giant magnetoresistance (GMR) effect for a nanowire placed between two ferromagnetic electrodes are derived and explained.

The Letter is structured in the following way. In Section 2 we develop a theoretical basis for analyzing the quantum transport properties of a nanowire. In Section 3 we show analytical formulae for the conductance of a nanowire, obtained through the Landauer formalism [16–19]. The limiting cases of a long nanowire and a nanocontact are analyzed. Finally, in Section 4, a few conclusions and remarks are added.

2. Theoretical framework

The structure to be studied is shown schematically in Fig. 1. R_1 and R_2 are two ferromagnetic reservoirs (electrodes) between them a nanowire is placed (it can be built up by the stretching of a ferromagnetic bulk). External magnetic fields applied to each electrode along the z -axis (which we choose to be the same of the nanowire orientation) modify the reservoirs band structure and determine the spin distribution by imposing spin boundary conditions at both ends of the nanowire, which interacts with the reservoirs R_1 and R_2 . The whole system, constituted by the two reservoirs and the nanowire, will be in a parallel (P) configuration if the applied magnetic fields are in the same orientation in both electrodes while the anti-parallel (AP) configuration is achieved when the magnetic fields applied to R_1 and R_2 are in opposite orientations. In the P-scheme the majority and minority spin bands are the same for both reservoirs. In contrary, for the AP-scheme the majority spin band in R_1 will be the minority in R_2 . For sake of simplicity, we have considered that localized d -electrons do not participate on the conduction process, being responsible mainly for the magnetic Heisenberg–Ising Hamiltonian of the ferromagnetic spin chain with N sites, as follows:

$$H_M = -J \sum_{i=1}^{N-1} S_i^z S_{i+1}^z - g \sum_{i=1}^N H_i^z S_i^z - h \sum_{i=1}^N (S_i^+ + S_i^-), \quad (1)$$

where J is the exchange energy between neighboring sites and g is some constant related to the coupling of an effective magnetic field H_i^z and the local spin in the nanowire. This effective magnetic field arise from the

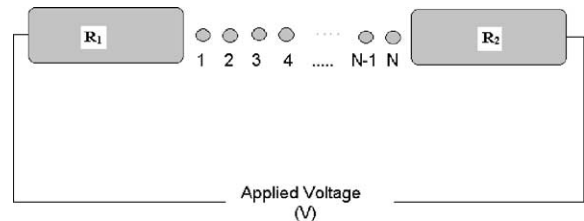


Fig. 1. Schematic of a nanowire between two ferromagnetic reservoirs, R_1 and R_2 .

interaction between the nanowire and the reservoirs and can be much greater in magnitude than the external fields applied to the reservoirs. The external fields are responsible for the magnetization of the electrodes. In a classical sense one can think about an external field H^z applied to the reservoirs orienting the magnetic domains of the bulk, being the resulting magnetization given by $M^z = \chi H^z$, with χ of the order of hundred or thousand in ferromagnetic electrodes. Once the magnetization is established, the nanowire interacts mainly with the magnetization. In the simplest case it can be considered that $H_i = 0$, except for $|H_1| = |H_N| = M$ imposing the spin boundary conditions. The Hamiltonian (1) allow us to calculate the spin distribution along the nanowire, in the absence of conduction electrons. Notice that this Hamiltonian is non-diagonal in the S^z -basis due to the term h . This non-diagonal term represents either the coupling between transverse components of the spin and the effective spin–orbit coupling for d -orbitals, by an effective magnetic field h or an external transverse magnetic field (microwaves, for example) confined to the nanowire region. The P-configuration favors the alignment of all spins of the nanowire while the AP-scheme allow the existence of domain walls in the nanowire. Now we consider the Hamiltonian of the conduction electrons, written below

$$H_e = \int d^3\mathbf{x} \Psi^\dagger(\mathbf{x}) \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \gamma \vec{H} \cdot \vec{\sigma} + V(z) \right) \Psi(\mathbf{x}), \quad (2)$$

being $\Psi(\mathbf{x})$ the fermion field (destroy an electron at $\mathbf{x}$), $\mathbf{p}^2/2m$ the kinetic energy, $\gamma \vec{H} \cdot \vec{\sigma}$ the Zeeman term (which can be neglected, in general) and $V(z)$ the potential energy due to the lattice potential plus an applied voltage. The interaction between the electron–spin and the local magnetization is simply the exchange between conduction and d -localized electrons

$$H_I = -\Delta \sum_i \int d^3\mathbf{x} \Psi^\dagger(\mathbf{x}) \vec{S}_i \cdot \vec{\sigma} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \Psi(\mathbf{x}), \quad (3)$$

where Δ is the exchange energy between s and d electrons, $\vec{\sigma}$ are the Pauli spin matrices and $\delta(\cdot)$ is the Dirac delta function. Let us now express $\Psi(\mathbf{x})$ in terms of atomic orbitals, considering at each site of the nanowire only two s -like orbitals, one for up spin ($\uparrow$)

and another for down spin ($\downarrow$), as follows

$$\Psi(\mathbf{x}) = \sum_{i\sigma} \phi_{i\sigma}(\mathbf{x}) \xi_\sigma,$$

where ξ_σ is the Pauli spinor and $\phi_{i\sigma}$ is the atomic orbital of the i th site with spin σ . The final result is

$$H_e = \sum_{i\sigma} \varepsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \quad (4)$$

and

$$H_I = -\Delta \sum_{ijn} \zeta_{ijn} \{ c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow} S_n^+ + c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} S_n^- + (c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) S_n^z \}, \quad (5)$$

being ε_i the on-site energy, t_{ij} the hopping parameter, $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) the creation (annihilation) operator of a conduction electron with spin σ at the i th site, ζ_{ijn} is a function determined by the atomic orbital shape and the overlap between orbitals located at different sites. The above Hamiltonian is simply the Anderson model of transport by hopping [16,17], considering the electron spin in a ferromagnetic lattice. Looking at the total Hamiltonian, which is a sum of the individual parcels given in (1), (4) and (5), one can easily conclude that the dynamics of the system is very complicated by virtue of the mutual influence between local magnetization and conduction electrons. The conduction electrons (carriers of spin) interact with the local magnetization. The direct hopping (without spin-flip) of an electron with spin σ makes the net charge at the i th site change in time, giving rise to an effective time dependent magnetic field along the z -axis, while the hopping with spin-flip is responsible for a transverse time-dependent magnetic field. Therefore, the magnetic Hamiltonian (1) can be thought as an effective magnetic Hamiltonian, including effective time averaged magnetic fields due to conduction electrons and the interaction between local spins. In a great number of materials and structures are the conduction electrons the responsible for the exchange interaction of the type (1), being the interaction between different sites an indirect exchange provided by the conduction electrons. The exchange parameter J in these cases is a position dependent indirect exchange integral and can be a periodic function as in the RKKY model [20].

The total Hamiltonian of the system $H = H_M + H_e + H_I$ is very difficult to solve in an analytic way

even when considering $S = 1/2$ for the local spin. At this point, to attain analytical expressions, we will simplify the above mentioned model. To do that we consider the tight-binding approximation with a constant hopping parameter t . We allow the spin-flip of conduction electrons only intra-site, which means $\zeta_{ijn} = 1$ for $i = j = n$ and vanishing otherwise, being the result:

$$H_e = \sum_{i\sigma} \varepsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + t \sum_{i,\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + c_{i+1,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}), \quad (6)$$

$$H_I = -\Delta \sum_i \{c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} S_i^+ + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} S_i^- + (c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}) S_i^z\}. \quad (7)$$

In a self-consistent way it can be considered that effective fields due to the conduction electrons act on the local magnetization while an effective local magnetization acts on the conduction electrons. Indeed, we can decompose the total basis $\{|\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N; n\sigma\rangle\}$ into one that diagonalizes the magnetic Hamiltonian $\{|\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle\}$ and another for the conduction electrons $\{|n\sigma\rangle\}$. The dimensionality and complexity of the problem is now reduced. When the boundary conditions strongly determining the local magnetization and only one conduction electron passes through the wire at a time (due to a strong Coulomb repulsion) we have:

$$H_M = -J \sum_{i=1}^{N-1} S_i^z S_{i+1}^z - g \sum_i (H_i^z + \langle n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow} \rangle / 2) S_i^z - \sum_{i=1}^N [(h + \Delta/2 \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle) S_i^+ + (h + \Delta/2 \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle) S_i^-], \quad (8)$$

$$H_0 = \sum_{i\sigma} (\varepsilon_i - \sigma \Delta \langle S_i^z \rangle / 2) c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}, \quad (9)$$

$$H_1 = t \sum_{i,\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + c_{i+1,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) - \frac{\Delta}{2} \sum_i \{c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \langle S_i^+ \rangle + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} \langle S_i^- \rangle\}. \quad (10)$$

$\langle \cdot \rangle$ denoting the average with respect to the density matrix $\rho = \exp[-\beta H]/Z$, being Z the partition function,

$\beta = 1/k_B T$ and T the absolute temperature. The average of electron operators tend to zero for voltages near zero and the problem simplifies for $T \rightarrow 0$ when only the fundamental states are populated.

In the next section we will use the expressions (8)–(10) to obtain the transport properties of the nanowire on the context of the Landauer formalism [16–19]:

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_i T_i,$$

where G is the conductance and T_i is the transmission probability for the i th conduction channel.

3. Conductance and magnetoresistance effect based on Landauer's formalism

For analyzing the conductance through the Landauer formalism we need to evaluate the transition matrix S , obtained by means of a Dyson equation:

$$S = H_1 + H_1 G_0 S,$$

where $G_0 = 1/(\epsilon - \epsilon_0 + i\eta)$ is the free particle Green's function with $\eta \rightarrow 0$. The energies ϵ_0 are given by H_0 , H_1 is represented by (10) and the transmission coefficients are $T_{ij} = |S_{ij}|^2 n_i n_j$ (n_i and n_j are the density of states functions). The conductance from one electrode to another is the probability of an electron initially in the reservoir R_1 be at R_2 after being scattered in the nanowire. In other words, the initial state of the conduction electron is $|1\sigma\rangle$ and we expect the final state to be $|N\sigma'\rangle$. So, we need to evaluate the transition probability $|\langle N\sigma' | S | 1\sigma \rangle|^2$ to obtain the conductance, as follows:

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_{\sigma,\sigma'} |\langle N\sigma' | S | 1\sigma \rangle|^2 n_\sigma n_{\sigma'},$$

being the above expression the two terminal Landauer formula, with $T_{\sigma,\sigma'} = |\langle N\sigma' | S | 1\sigma \rangle|^2 n_\sigma^1 n_{\sigma'}^2$. The term n_σ^p is the density of states for spin σ at the reservoir p . We have considered that the transmission from the reservoir to the nanowire is unitary. For a nanowire with N sites the direct transmission coefficient (without spin-flip) is

$$T_{\sigma,\sigma} = |t|^{2N-2} \left| \prod_{n=2}^{N-1} \frac{1}{\epsilon_\sigma - \epsilon_{n\sigma} + i\eta} \right|^2 n_\sigma^1 n_\sigma^2, \quad (11)$$

while the spin flipping transmission reads

$$T_{-\sigma,\sigma} = |t|^{2N-2} |\Delta|^2 \times \left| \sum_{m=1}^N \prod_{n=2}^m \frac{1}{\epsilon_\sigma - \epsilon_{n\sigma} + i\eta} \left\langle \frac{1}{2} S_m^+ \right\rangle \right|^2 \times \prod_{q=m}^{N-1} \frac{1}{\epsilon_\sigma - \epsilon_{q,-\sigma} + i\eta} \Big| n_\sigma^1 n_{-\sigma}^2. \quad (12)$$

The value of $\epsilon_{n\sigma}$ depends on the configuration scheme. From (9) one can conclude that the averaged local spin influences the conduction electron local energy, being the local spin configuration dependent (the local spin is determined by boundary conditions). Still, we have consider the minority spin band at the left side reservoir R_1 is $n_\downarrow = n$ and the ratio between majority and minority spin bands $n_\uparrow^1 / n_\downarrow^1 = r$ constant for low voltages. Following, we present the general conductance formulae for both P and AP schemes:

$$G_P = \frac{e^2}{2\pi\hbar} |t|^{2N-2} n^2 \times \left[(r^2 + 1) A_P(\epsilon_\sigma) + 2r |\Delta|^2 B_P(\epsilon_\sigma) \right], \quad (13)$$

$$G_{AP} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} |t|^{2N-2} n^2 \times \left[(2r) A_{AP}(\epsilon_\sigma) + (r^2 + 1) |\Delta|^2 B_{AP}(\epsilon_\sigma) \right] \quad (14)$$

with the functions A_c and B_c defined below

$$A_c(\epsilon_\sigma) = \left| \prod_{n=2}^{N-1} \frac{1}{\sigma \Delta (1 - 2\langle S_n^z \rangle_c) / 4 + i\eta} \right|^2, \quad (15)$$

$$B_c(\epsilon_\sigma) = \frac{1}{4} \left| \sum_{m=1}^N \prod_{n=2}^m \frac{1}{\sigma \Delta (1 - 2\langle S_n^z \rangle_c) / 4 + i\eta} \langle S_m^+ \rangle_c \right|^2 \times \prod_{q=m}^{N-1} \frac{1}{\sigma \Delta (1 + 2\langle S_n^z \rangle_c) / 4 + i\eta} \Big|, \quad (16)$$

c denoting the configuration scheme, $c = P$ (AP) for parallel (anti-parallel). In the above definitions we have made the on-site energies $\epsilon_{n\sigma} = \epsilon_n - \sigma \Delta \langle S_n^z(c) \rangle / 2$ and the average of the operators like S_n^z and S_m^+ are functions of the configuration. The functions A_c and B_c are referred to the non-conserving virtual transitions to intermediary states between the initial and final states.

With Eqs. (13)–(16) in hands we can obtain the behavior of conductance and MR making some simple assumptions. To measure the magnetoresistance we will adopt the definition used by Garcia et al. [12],

$$\frac{\Delta G}{G} = \frac{G_P - G_{AP}}{G_{AP}}, \quad (17)$$

being G_P the conductance when the magnetic fields applied to R_1 and R_2 are parallel, G_{AP} the conductance for the anti-parallel alignment. There are two cases admitting a simple analysis:

- (1) the long nanowire with $N \rightarrow \infty$, dimension $2L$ and lattice constant $a = 2L/N$. The magnetization is determined by (8) and it allows the existence of a Bloch domain wall of the form $S_z = \frac{1}{2} \tanh(z/\lambda)$ in the AP scheme [7,15], being λ the effective thickness of the wall;
- (2) the nanocontact, made up with $N = 2$. In this case the magnetization is easily attainable from (8).

For the first case, a nanowire with dimension $2L$ and large number of atoms N , we have the following expressions:

$$B_P \approx 0,$$

$$A_{AP} \approx \left| \prod_{n=2}^{N-1} \frac{1}{\sigma \Delta (1 - \tanh(z_n/\lambda)) / 4 + i\eta} \right|^2,$$

$$B_{AP} \approx \frac{\kappa A_{AP}}{4 |\Delta|^2 a^2} \left| \int_{-L}^L \text{sech}\left(\frac{z}{\lambda}\right) dz \right|^2,$$

where $a = 2L/N$ is the lattice constant, λ is the domain wall thickness formed in the AP-scheme and κ is a constant factor. Making use of the above expressions, the conductance, in the P and AP configurations, is found to be

$$G_P \approx \frac{e^2}{2\pi\hbar} (r^2 + 1) T_P \quad (18)$$

and

$$G_{AP} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} T_{AP} \left[(2r) + (r^2 + 1) |\Delta|^2 \frac{B_{AP}}{A_{AP}} \right], \quad (19)$$

with the transmission coefficient T_c defined as $T_c = |t|^{2N-2} n^2 A_c$, $c = (P, AP)$. The MR is written as fol-

lows:

$$\frac{\Delta G}{G} \approx \frac{r^2 + 1}{2r} \frac{T_P}{T_{AP}} \left(1 - \frac{r^2 + 1}{2r} |\Delta|^2 \frac{B_{AP}}{A_{AP}} \right) - 1. \quad (20)$$

Defining the ratio $T_P/T_{AP} = \gamma \geq 1$ and evaluating the expression for B_{AP} we find

$$\begin{aligned} \frac{\Delta G}{G} \approx \frac{r^2 + 1}{2r} \gamma \left(1 - \frac{r^2 + 1}{2r} \kappa \frac{4\lambda^2}{a^2} \right. \\ \left. \times \left| \text{ArcTan} \left[\text{Tanh} \left(\frac{L}{2\lambda} \right) \right] \right|^2 \right) - 1. \end{aligned} \quad (21)$$

Considering the physical situation where the MR is, in general, positive, we approximate the parameter κ by the expression below:

$$\kappa \approx \frac{2r}{r^2 + 1} \left(1 - \frac{2r}{r^2 + 1} \right) \frac{13a^2}{\pi^2 L^2}$$

and the MR is then

$$\begin{aligned} \frac{\Delta G}{G} \approx \frac{r^2 + 1}{2r} \gamma \left[1 - \left(1 - \frac{2r}{r^2 + 1} \right) \frac{52\lambda^2}{\pi^2 L^2} \right. \\ \left. \times \left| \text{ArcTan} \left[\text{Tanh} \left(\frac{L}{2\lambda} \right) \right] \right|^2 \right] - 1. \end{aligned} \quad (22)$$

From the above expression for the MR we can conclude the following:

(i) the MR obtained with (22) is always positive, even for $r \approx 1$. In that situation the reservoirs are non-magnetic and $r \rightarrow 1$, so we have $\Delta G/G \approx \gamma - 1$, which is negligible ($\gamma \approx 1$ for non-magnetic reservoirs). Therefore, for obtaining considerable MR value it is necessary that the reservoirs present high spin polarization, i.e., $r > 1$;

(ii) the domain wall width λ has a maximum value of the order of L . However an important condition for obtaining appreciable MR value is that $\lambda \ll L$, which means that λ cannot be greater than a few lattice constants. When $\lambda \rightarrow L$ the MR becomes negligible, again it is of the order of $\gamma - 1$.

In order to obtain significant MR values it is needed that $L \gg \lambda$, corresponding to the ballistic regime discussed in Refs. [1,7]. When $\lambda \approx L$ the electron is able to follow the local magnetization adiabatically, being the MR effect negligible. Also, the reservoirs must be magnetic, allowing a high spin polarization, which corresponds to $r \gg 1$. The factor γ relates the

direct transmission of the P configuration to the AP configuration and it is always greater than the unity. Considering that $\lambda \ll L$ in the expression (22) we obtain

$$\frac{\Delta G}{G} \approx \frac{r^2 + 1}{2r} \gamma \left[1 - \left(1 - \frac{2r}{r^2 + 1} \right) \frac{\pi\lambda^2}{L^2} \right] - 1, \quad (23)$$

and we can see clearly in the above expression that the smaller the domain wall width λ , the larger the MR is.

The other limit to be discussed is when $N = 2$, characterizing a simple nanocontact. The solution of (8) is easily determined by the perturbation theory, being the final result written below:

$$\begin{aligned} |P\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\mu\nu}{2\mu+4} \right)^2}} \\ \times \left(|\uparrow\uparrow\rangle + \frac{\mu\nu}{2\mu+4} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \right), \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} |AP\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\mu\nu}{2\mu-4} \right)^2}} \\ \times \left(|\uparrow\downarrow\rangle + \frac{\mu\nu}{2\mu-4} (|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle) \right), \end{aligned} \quad (25)$$

with

$$\mu = \frac{4gM}{\hbar J} \quad \text{and} \quad \nu = \frac{h}{M}. \quad (26)$$

The eigenstate $|P\rangle$ ($|AP\rangle$) represents the magnetization along the nanowire for the fundamental state in the P (AP) configuration. The parameter μ is the ratio between the interaction of the nanowire with the electrodes (gM) and the exchange interaction between neighboring sites ($\hbar J$), while ν is the ratio between the effective transverse magnetic field h and the effective modulus of the electrodes magnetization M . The average of the operator S^+ is configuration dependent,

$$\langle S^+ \rangle_c = \frac{x_c}{1 + x_c^2} \quad (27)$$

with

$$x_P = \frac{\mu\nu}{2\mu+4} \quad (28)$$

and

$$x_{AP} = \frac{\mu\nu}{2\mu-4}. \quad (29)$$

For the nanocontact, $N = 2$, we have $A_P = A_{AP} = 1$ and the energy splitting for spin up and spin down conduction electrons is of the order of Δ . Then, we find:

$$G_P \approx \frac{e^2}{2\pi\hbar} |t|^2 n^2 (r^2 + 1 + 2r|\Delta|^2 B_P), \quad (30)$$

$$G_{AP} \approx \frac{e^2}{2\pi\hbar} |t|^2 n^2 (2r + (r^2 + 1)|\Delta|^2 B_{AP}), \quad (31)$$

being B_P and B_{AP} given by

$$B_P = \frac{1}{4} |\langle S^+ \rangle_P|^2 \left| \frac{2i\eta - \Delta/2}{i\eta(-\Delta/2 + i\eta)} \right|^2 \quad (32)$$

and

$$B_{AP} = \frac{1}{4} |\langle S^+ \rangle_{AP}|^2 \left| \frac{2}{-\Delta/2 + i\eta} \right|^2. \quad (33)$$

In fact, the parameter $\eta = \hbar/\tau$ is related to the decay time τ and we can consider $\eta \approx \Delta$ to obtain:

$$G_P \approx \frac{e^2}{2\pi\hbar} |t|^2 n^2 \left(r^2 + 1 + \frac{17}{10} r \frac{x_P^2}{(1 + x_P^2)^2} \right), \quad (34)$$

$$G_{AP} \approx \frac{e^2}{2\pi\hbar} |t|^2 n^2 \left(2r + \frac{4}{5} (r^2 + 1) \frac{x_{AP}^2}{(1 + x_{AP}^2)^2} \right). \quad (35)$$

For the MR we have the following:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta G}{G} (N = 2) \\ = \frac{r^2 + 1 + \frac{17}{10} r \frac{x_P^2}{(1 + x_P^2)^2}}{2r + \frac{4}{5} (r^2 + 1) \frac{x_{AP}^2}{(1 + x_{AP}^2)^2}} - 1. \end{aligned} \quad (36)$$

The density of states ratio, r , is related to the spin polarization $\Gamma = (r - 1)/(r + 1)$. A spin polarization of 81% corresponds to $r = 10$ (cobalt, for example). Using the above expression our theoretical model uses only a few free parameters, r , μ and ν , to determine the MR value, being the hopping t responsible only for the scaling of the conductance. Adopting, as a practical example, $r = 10$, $\mu = 4$ and $\nu = 0.33$ we obtain $\Delta G/G \approx 260\%$, which is compatible with the experimental data by Garcia ($\sim 225\%$) for a Co–Co contact. In fact, the interaction between the atoms constituting the nanocontact and the reservoirs has origin in an exchange coupling among the nanocontact atoms and the neighboring atoms located at the reservoirs, so we can consider that gM and $\hbar J$ are of the same order of magnitude ($gM \sim \hbar J \leftrightarrow \mu \sim 4$). The parameter

ν is related to the effective transverse magnetic field provided by spin–orbit coupling and transversal exchange interactions and the modulus of the longitudinal magnetization M , being the last one strong enough to enforce the spin boundary conditions. So, we can consider $\nu < 1$ (we have chosen $\nu = 0.33$). With some approximations, the expression (36) corresponds to the ballistic MR case discussed in Ref. [14]. The parameters r , μ and ν are dependent on the material of the nanocontact and we can explain the experimental data shown in Ref. [14] varying those parameters adequately.

For a nanosized contact, however, the energy splitting of the spin channels can be greater than the external applied voltage (in metals the energy splitting is of the order of 0.2–0.3 eV and the low bias regime corresponds to $|V| < 0.1$ V) and it is possible that the minority spin channel is closed in the conduction process. In this case the nanocontact behaves like $r \rightarrow \infty$ and $n \rightarrow 0$, but the product rn remaining finite, even if the reservoirs spin polarization Γ is a moderate value (we can consider that r refers only to the contact region, not to the reservoirs). The nanocontact conductance formulae, for both configurations, reduces to

$$G_P \approx \frac{e^2}{2\pi\hbar} |t_0|^2, \quad (37)$$

$$G_{AP} \approx \frac{4}{5} \frac{e^2}{2\pi\hbar} |t_0|^2 \frac{x_{AP}^2}{(1 + x_{AP}^2)^2}, \quad (38)$$

with $|t_0|^2 = r^2 n^2 |t|^2$. The MR simplifies to the following:

$$\frac{\Delta G}{G} (N = 2) = \frac{5}{4} \frac{(1 + x_{AP}^2)^2}{x_{AP}^2} - 1. \quad (39)$$

Looking at the above expression we can conclude that if the spin-flipping process is not allowed the MR value diverges. In fact, we can have $MR \gg 1$ but remaining finite due to the Heisenberg uncertainty principle, that allows the spin-flip process. Using (39), $\mu = 4$ and $\nu = 0.2$ we found $\Delta G/G = 3280\%$. The parameter ν measures the effective interaction of the transverse components of spin that allows the spin-flipping and when it goes to zero, the MR goes to infinity as a consequence of closing the spin-flip channel in the AP configuration in the case of $r \rightarrow \infty$. In

very recent experiments the MR in the range of 3000–4000% has been observed in Ni point contacts and our result agrees with that obtained in Ref. [4]. However our theoretical model is based on a Heisenberg–Ising spin Hamiltonian and the Anderson transport while the theory described in Ref. [4] is based on a Schroedinger equation in the presence of a domain wall potential, which is a quasi-classical model. The main advantage of using our model is that it allows the study of quantum fluctuations of the conductance. Here we have considered averaged values of the operators S^z and S^+ in explaining the averaged transport properties. However, as said before, the conduction electron interacting with the local magnetization can excite quantum walls or kinks or make them move, changing the transport properties of the conduction channel for another conduction electron. The interaction between the magnetization and the conduction electrons producing quantum conductance and MR fluctuations can be studied within the framework of our theoretical model. The temporal dynamics of the nanowire must be the subject of another work, being the time dependence possibly responsible for the conductance fluctuations in nanosize ferromagnetic structures.

As a last point, we observe that for voltages greater than ≈ 100 mV other conduction channels will be opened. These channels could not be s -like and the spin–orbit coupling may be relevant to explain the transport properties, complicating far more the problem.

4. Conclusion

In this work we have explained the transport properties of a nanocontact using the quantum mechanical rules and the Landauer formalism through the approximation of averaging of the local magnetization. This procedure allowed us to obtain general analytical formulae for the conductance of a nanowire with N atoms. The complete dynamics of our model is very complicated, as expected, but making physical considerations and approximations lead us to estimate the values of the conductance and MR in two limiting cases: (1) a long nanowire with large N and (2) a nanocontact with $N = 2$. For a long nanowire, in order to obtain significant MR values it is needed that $L \gg \lambda$, corresponding to the ballistic regime explained

in Refs. [1,7,14]. When $\lambda \approx L$ the electron is able to follow the local magnetization adiabatically, being the MR effect negligible. Also, the reservoirs must be magnetic, allowing a high spin polarization, which corresponds to $r \gg 1$. For a nanocontact ($N = 2$) the MR value is determined through the use of only a few parameters, at least r , μ and ν , being the hopping t the responsible for the scaling of the conductance. The parameter μ is the ratio between the interaction of the nanowire with the electrodes and the exchange interaction among neighboring sites of the nanowire, while ν is the ratio between the effective transverse magnetic field h and the effective magnetization M . Based on physical considerations, we have adopted $\mu = 4$ and $\nu = 0.33$ to obtain $\Delta G/G \approx 260\%$, which is a compatible value with the experimental data by Garcia for a Co–Co nanocontact ($\sim 225\%$). The parameters r , μ and ν are dependent on the material of the nanocontact and we can explain the experimental data shown in Ref. [14] varying those parameters adequately. Also, in a nanosized contact with $r \rightarrow \infty$ at the atomic contact (even if the spin polarization at the electrodes is moderate) we have shown that the MR depends only on the probability of spin-flip when the reservoirs are in AP alignment. If there is no spin-flip the MR diverges. In fact, it can assume great values ($\Delta G/G > 3000\%$ in our example), remaining finite, however, due to the uncertainty principle that always allows the possibility of spin-flip.

Acknowledgements

The authors would like to acknowledge partial financial support from Fundação do Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP, SP, Brazil), through the project # 2002/09895-6.

References

- [1] G. Tatara, J. Phys. Soc. Jpn. 69 (2000) 2969;
G. Tatara, H. Fukuyama, Phys. Rev. Lett. 78 (1997) 3773.
- [2] M. Viret, S. Berger, M. Gabureac, F. Ott, D. Olligs, I. Petej, J.F. Gregg, C. Fermon, G. Francinet, G. Le Goff, Phys. Rev. B 66 (2002) 220401.
- [3] A. Nakamura, S. Nonoyama, Phys. Lett. A 280 (2001) 227.
- [4] L.R. Tagirov, B.P. Vodopyanov, K.B. Efetov, Phys. Rev. B 65 (2002) 214419;

- L.R. Tagirov, B.P. Vodopyanov, B.M. Garipov, *J. Magn. Magn. Mater.* 258–259 (2003) 61.
- [5] J.B.A.N. van Hoof, K.M. Schep, A. Brataas, G.E.W. Bauer, P.J. Kelly, *Phys. Rev. B* 59 (1999) 138.
- [6] V.K. Dugaev, J. Barnas, A. Lusakowski, L.A. Turski, *Phys. Rev. B* 65 (2002) 224419.
- [7] M. Yamanaka, T. Koma, *J. Phys. Soc. Jpn.* 23 (1999) 141.
- [8] G.G. Cabrera, N. Garcia, *Appl. Phys. Lett.* 80 (2002);
See also C.A. Dartora, G.G. Cabrera, *J. Appl. Phys.* 95 (2004) 6058.
- [9] Y. Ando, J. Murai, H. Kubota, T. Miyazaki, *J. Appl. Phys.* 87 (2000) 5209.
- [10] X.H. Xiang, T. Zhu, J. Du, G. Landry, J.Q. Xiao, *Phys. Rev. B* 66 (2002) 174407.
- [11] S. Zhang, P.M. Levy, A.C. Marley, S.S.P. Parkin, *Phys. Rev. Lett.* 79 (1997) 3744.
- [12] M. Muñoz, N. Garcia, Y.-W. Zhao, *Appl. Phys. Lett.* 76 (2000) 2586;
M. Muñoz, N. Garcia, Y.-W. Zhao, *Phys. Rev. Lett.* 82 (1999) 2923.
- [13] H.D. Chopra, S.Z. Hua, *Phys. Rev. B* 66 (2002) 020403R.
- [14] Y.-W. Zhao, M. Muñoz, G. Tatara, N. Garcia, *J. Magn. Magn. Mater.* 223 (2001) 169.
- [15] G.G. Cabrera, L.M. Falicov, *Phys. Status Solidi B* 61 (1974) 539.
- [16] Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics*, Oxford Univ. Press, Oxford, 1997.
- [17] D.K. Ferry, S.M. Goodnick, *Transport in Nanostructures*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1997.
- [18] R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.* 1 (1957) 223.
- [19] R. Landauer, *Philos. Mag.* 21 (1970) 863.
- [20] C. Kittel, *Quantum Theory of Solids*, Wiley, New York, 1963;
See also: O. Madelung, *Introduction to Solid State Theory*, Springer, Berlin, 1978;
D.C. Mattis, *The Theory of Magnetism*, Harper and Row, New York, 1965;
R.M. White, *Quantum Theory of Magnetism*, McGraw–Hill, New York, 1970.