Polarização Magnética das Correntes de Tunelamento

Imara Lima Fernandes

Orientador: Prof. Dr. Guillermo G. Cabrera

Dissertação de Mestrado apresentada ao Instituto de Física "Gleb Wataghin"da Universidade Estadual de Campinas, como parte dos requisitos exigidos para obtenção do título de Mestre em Física.

Este exemplar corresponde à redação final da Dissertação de Mestrado defendida pela aluna Imara Lima Fernandes e aprovada pela Comissão Julgadora.

Campinas, 29 de abril de 2011.

Guillermo Cabrera

Prof. Dr. Guillermo G. Cabrera

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

F391p

Fernandes, Imara Lima
Polarização magnética das correntes de tunelamento / Imara Lima Fernandes. – Campinas, SP: [s.n.], 2011.

Orientador: Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún.
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".

1. Magnetoresistência. 2. Tunelamento – Física. 3. Junção túnel magnética. I. Cabrera Oyarzún, Guillermo Gerardo. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". III. Título.

(smcc/ifgw)

- **Título em inglês:** Magnetic polarization of tunneling currents
- **Palavras-chave em inglês (Keywords):**
  1. Magnetoresistance
  2. Tunnelling - Physics
  3. Magnetic tunnel junction
- **Área de concentração:** Física da Matéria Condensada
- **Titulação:** Mestre em Física
- **Banca examinadora:**
  Prof. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún
  Prof. Carlos Manuel Giles Antúnez de Mayolo
  Prof. César Augusto Dartora
- **Data da defesa:** 29-04-2011
- **Programa de Pós-Graduação em:** Física

UNICAMP IFGW Instituto de Física Gleb Wataghin

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE MESTRADO DE **IMARA LIMA FERNANDES – RA 044076,** APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN" DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 29/04/2011.

COMISSÃO JULGADORA:

Guillermo Cabrera

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

(Orientador da Candidata)

Carlos Giles

Prof. Dr. Carlos Manuel Giles de Mayolo – DFMC/IFGW/UNICAMP

César

Prof. Dr. César Augusto Dartora – DEE/UFPR

Resumo

Neste trabalho, apresentamos um estudo do tunelamento e do transporte quântico em sistemas mesoscópicos, particularmente em junções de tunelamento magnéticas, visando esclarecer a polarização magnética da corrente de tunelamento. Nos dispositivos de tunelamento, um filme isolante é crescido entre os eletrodos ferromagnéticos. Nesse sistema a condutância é controlada pelo coeficiente de transmissão do efeito túnel. Nos metais de transição (Fe, Co, Ni), as bandas *s*, *p* e *d* contribuem para a condução eletrônica, entretanto a magnetização deve-se à polarização das bandas *d*. Resultados experimentais mostram que essa polarização da corrente pode ser muito diferente da polarização do volume no nível de Fermi, podendo até estar invertida. Qualitativamente sabe-se que os elétrons da banda *d* apresentam menor probabilidade de tunelamento do que os elétrons *s* ou *p*. Os elétrons de condução do tipo *s* são representados por ondas planas com vetores de onda pequenos (centro da zona de Brillouin). Já os elétrons *d* possuem maior massa efetiva e um caráter localizado, portanto, são representados por pacotes de muitas componentes de ondas planas com vetores de onda maiores. Estudamos o tunelamento desses elétrons por barreiras de potencial que representam o material isolante entre eletrodos metálicos. Propomos um modelo simples para a corrente de tunelamento e estimamos o efeito da magnetoresitência.

Palavras chave: Magnetorresistência, Tunelamento, Junção túnel magnética.

Abstract

This work introduces a detailed study of tunneling and quantum transport in mesoscopic systems, particularly in tunneling magnetic junctions, to understand the magnetic polarization of the tunneling current. These systems consist of two ferromagnetic metal layers separated by a thin insulating barrier layer. The conductance is controlled by the transmission coefficient of the tunnel effect. In the transition metal (Fe, Co, Ni), the bands s, p and d contribute to the electronic conduction, however, to the magnetization only the d-band contributes. Experimental results show that the current polarization may be different of the bulk polarization in the Fermi level and may be reversed. Qualitatively it is known that tunneling probability of the d-like electrons is lower than the s-like and p-like electrons. The s-electrons are represented by wave planes with small wave vector (center of the Brillouin zone). Since the d-electrons have higher effective mass and they are localized states, they are represented by wave packet with many components of wave planes with larger wave vectors. We investigate the tunneling of these electrons through potential barriers, which represent the insulating layer between the ferromagnetic electrodes. We propose a simple model for the tunneling current and estimated the effect of the magnetoresistance.

Keywords: Magnetoresistance, Tunneling, Magnetic Tunnel Junction.

Agradecimentos

Sou grata ao Professor Guillermo G. Cabrera, pela sua atenção, pelos ensinamentos e incentivo ao longo da orientação deste trabalho e pela amizade.

Ao pessoal da Secretaria da Pós Graduação do IFGW.

Ao Professor Carlos Giles pelas longas discussões sobre física e pela amizade.

Aos meus amigos André, Aline e Bruna pelos anos amizade e que mesmo distantes fisicamente estão sempre comigo.

Aos amigos que fiz na faculdade Carlos Sato, Débora, Juliana, David, Carol, Santarelli e Clara que me ajudaram durante essa jornada. Em especial ao Guilherme e a Katja pela ajuda nas soluções dos exercícios mais complicados.

Ao Ricardo que apesar de demorar tanto para se tornar meu amigo com certeza estará sempre comigo. Agradeço por estar presente e me ajudar durante as minhas crises.

À minha amiga Larissa pela importe ajuda nos estudos e também por ser companheira de todas as horas ao logo desses anos especialmente durante os momentos mais difíceis.

À minha família pelo apoio durante esta jornada, pela paciência e por terem tornado este trabalho possível. Em especial à minha mãe, Barbara, pelo seu amor e por estar presente em todos os momentos. À minha irmã Ariane por todo seu apoio e pelas longas conversas ao telefone. Ao meu pai, Luis, pelo suporte, pelo amor e pela compreensão da minha ausência em alguns momentos.

Agradeço em especial meu namorado, José Renato, pelo apoio incodicional, carinho e pelas longas discussões sobre física, futebol e tênis. Pessoa sem a qual eu não seria que eu sou hoje.

À CAPES, pelo suporte financeiro.

Aos meus pais, meus irmãos e meu namorado.

Sumário

Lista de Figuras

Lista de Tabelas

Lista de Abreviações e Símbolos

AFM	-	Antiferromagnético
Al_2O_3	-	Óxido de Alumínio
AP	-	Antiparalela
DDP	-	Diferença de potencial
DOS	-	Densidade de Estados
FM	-	Ferromagnético
FM-I-S	-	Ferromagnético-isolante-supercondutor
G	-	Condutância
GMR	-	Magnetorresistência Gigante
M	-	Magnetização
M-I-M	-	Metal-isolante-metal
MMT	-	Método da Matriz de Transferência
MRAM	-	Memórias magnéticas não voláteis
MR	-	Magnetorresistência
MTJ	-	Junção Túnel Magnética
P	-	Paralela
PS	-	Polarização de spin
S	-	Supercondutor
SDT	-	Tunelamento dependente de spin
TMR	-	Magnetoresistência de tunelamento
$3d_i$	-	3d itinerantes
$3d_l$	-	3d localizados
$D(E_F)$	-	Densidade de estado no nível de Fermi
e	-	Módulo da carga elementar do elétron (1.602 10^{-19} C)
E_F	-	Energia de Fermi
h	-	Constante de Planck (4.135 10^{-15} eVs)
$\hbar$	-	Constante de Planck sobre 2π (6.582 10^{-16} eVs)
k_b	-	Constante de Boltzmann (8.617 10^{-5} eVK^{-1})
m_{el}	-	Massa do elétron livre (9.109 10^{-31} kg)
μ	-	Potencial químico
μ_B	-	Magneton de Bohr (927 10^{-26} JT^{-1})
μ_0	-	Permeabilidade magnética no vácuo ($4\pi 10^{-7} Hm^{-1}$)
$T(k)$	-	Coeficiente de Transmissão da onda plana

Capítulo 1

Introdução

A magnetorresistência (MR) consiste na variação da resistência elétrica em metais devido à aplicação de um campo magnético. Para metais ferromagnéticos tais como ferro, cobalto e niquel esta propriedade também depende da direção do campo externo em relação a direção da corrente que atravessa o metal. É conhecido que esta propriedade tem origem no acoplamento spin-órbita do elétron [1]. Em geral, o efeito da MR é pequeno, da ordem de alguns poucos porcentos (menor que 3%).

Posteriormente, foi descoberto o efeito da MR devido à polarização de spin na corrente e com isso o spin eletrônico passou a ter relevância na eletrônica. A primeira vez em que se observou o efeito da MR em junções de tunelamento foi no experimento realizado pelo físico francês Michel Jullière ao estudar o tunelamento entre filmes ferromagnéticos separados por uma camada semicondutora [2]. Nesse experimento, Jullière verificou que a corrente de tunelamento dependia da magnetização relativa entre as camadas ferromagnéticas, que pode ser mudada pela aplicação de um campo magnético, e formulou um modelo capaz de explicar os resultados obtidos. Este efeito foi denominado magnetorresistência de tunelamento (TMR, sigla do inglês *Tunnel magnetoresistance*) e apresenta valores típicos de até 35% em junções de tunelamento [2, 3].

Em 1988, dois grupos de pesquisas independentes descobriram materiais que apresentam um alto valor de magnetorresistência, que atualmente é conhecida por magnetorresistência gigante (GMR, sigla do inglês *Giant magnetoresistance*). O efeito da GMR consiste na dependência da resistência do sistema com a orientação relativa entre os momentos magnéticos das camadas ferromagnéticas e deve-se ao transporte por camadas ferromagnéticas separadas por uma camada de metal não magnético. A descoberta da GMR pelo grupo de Peter Grünberg [4] utilizou um sistema de três camadas compostas por Fe/Cr/Fe e a baixas temperaturas observou-se um efeito de 10% na presença de campo magnético da ordem de 2T. Já o grupo de Albert Fert [5], utilizou multi-camadas de Fe/Cr no qual observou-se um efeito de 50% na presença de campo magnético da ordem de 20T. Recentemente, em nanocontatos foi possível observar um efeito de até 300% [6, 7, 8]. O francês Albert Fert e o alemão Peter Andreas Grünberg foram laureados com o Prêmio Nobel de Física de 2007 pela descoberta da GMR devido à sua importância científico-tecnológica.

As descobertas da GMR e da TMR viabilizaram o desenvolvimento de uma eletrônica baseada em efeitos dependentes de spin controlada por campos magnéticos. Essa nova eletrônica é denominada spintrônica [9] e na última década ocorreu um desenvolvimento muito rápido, tanto no estudo de problemas básicos como nas aplicações. Em relação às junções de tunelamento magnéticas, hoje são produzidos dispositivos que apresentam um grande efeito de magnetoresistência e têm sido recentemente incorporados como elementos em novos tipos de memórias magnéticas não-voláteis (MRAM, sigla do inglês *Magnetoresistive Random Access Memory*) [10].

A revolução digital apresenta uma tendência de miniaturização de dispositivos magnéticos para uma escala nanométrica, i.e., rumo à nanoeletrônica. Tal tendência leva a uma busca crescente por dispositivos eletrônicos e a produção de materiais com possibilidade de armazenar informação em altas densidades (bits por nanometros ao quadrado) [11]. Na escala de poucos nanometros, os elétrons podem propagar-se sem sofrer espalhamento inelástico (regime balístico) e a fase da função de onda pode manter sua coerência em escalas da ordem do tamanho do sistema, dando lugar aos típicos fenômenos de interferência quântica [12]. Nessa situação, a teoria de transporte precisa ser modificada em relação à teoria usual empregada em sistemas macroscópicos [13, 14, 15, 16].

O nosso interesse é estudar o transporte em sistemas mesoscópicos, nos quais barreiras de tunelamento fazem parte de diversos dispositivos eletrônicos [17, 18], particularmente em junções de tunelamento magnéticas. Numa típica junção de tunelamento magnética, dois eletrodos ferromagnéticos estão separados por uma fina camada isolante (por exemplo Al_2O_3), que representa a barreira de tunelamento. Para metais de transição (Fe, Co, Ni), bandas de tipo s, p e d contribuem para a condução eletrônica, entretanto, a magnetização é dominada pela polarização das bandas d. A superfície de Fermi obtida para o *bulk*, apresenta ramos importantes provenientes das bandas tipo d. Em relação aos orbitais tipo s e p, os orbitais d são mais localizados e têm maior energia de rotação. Nos problemas de tunelamento convencionais, os elétrons são descritos usualmente por ondas planas, o que não é válido no problema acima. Queremos, portanto, realizar um cálculo mais realístico do tunelamento dos elétrons d por barreiras de potencial. Por fim, através da estimativa da contribuição de cada banda para a corrente de tunelamento, estimaremos o efeito de magnetoresistência. Os elétrons de condução do tipo s, podem ser bem representados por poucas ondas planas. Esse já não é o caso dos elétrons d, que possuem um caráter mais localizado e têm massa efetiva maior.

Além deste Capítulo 1 de introdução, este trabalho está organizado do seguinte modo:

- No Capítulo 2, são apresentados os fundamentos físicos teóricos necessários para a compreensão do transporte em uma junção túnel-magnética (MTJ, sigla do inglês *Magnetic Tunnel Junction*). Apresenta-se o modelo de Jullière para o efeito TMR, o formalismo de Landauer que será utilizado para o cálculo da condutância nos capítulos subsequentes e o estudo do tunelamento de um pacote de onda por uma barreira de potencial. Como a fórmula de Landauer é unidimensional é estudado apenas o espalhamento em uma dimensão. Por fim introduzimos o modelo utilizado para o cálculo da TMR em MTJ. Em geral, uma MTJ apresenta geometria planar, (quase bi-demensional), entretanto o modelo proposto nessa dissertação é unidimensional e com isso se aproxima de um fio quântico com uma barreira no meio.

- O Capítulo 3 apresenta o cálculo do coeficiente de transmissão de uma onda plana por uma barreira de potencial, considera-se o caso de uma barreira de potencial retangular assimétrica e uma barreira de potencial linear assimétrica. Para estes cálculos, é considerada a massa efetiva do elétron dependente da posição.

- O Capítulo 4 apresenta a análise do tunelamento de pacotes de ondas por barreiras de potencial pelo estudo da transmissão de pacotes de onda gaussiano e pulsos por barreiras de potencial retangular e linear.

- O Capítulo 5 apresenta a análise do transporte em MTJ. A condutividade e o fenômeno de TMR são estudados para uma MTJ convencional constituída de uma barreira isolante entre dois eletrodos metálicos ferromagnéticos idênticos.

- Finalmente, no Capítulo 6 são apresentadas as conclusões gerais obtidas neste trabalho onde fazemos uma discussão crítica da teoria de Jullière, observando que o efeito TMR não depende apenas da densidade de estados no nível de Fermi sendo importante considerar a natureza do processo de espalhamento.

Capítulo 2

Aspectos teóricos

Neste capítulo vamos desenvolver as bases teóricas necessárias para o estudo da polarização magnética das correntes de tunelamento. Na primeira seção iremos discutir os primeiros experimentos realizados em tunelamento dependente de spin. Na segunda seção iremos estudar o efeito da magnetorresistência e o modelo de Jullière. Nas duas seções seguintes será feito um breve estudo sobre o ferromagnetismo itinerante e também sobre o efeito da magnetoresistência em junções túnel-magnéticas. Por fim iremos introduzir o modelo utilizado para o cálculo da corrente de tunelamento.

2.1 Experimentos de Tunelamento dependente de Spin

O efeito do tunelamento dependente de spin (SDT, sigla do inglês *Spin-dependent tunneling*) foi descoberto em 1970 por Meservey and Tedrow [17] em um experimento pioneiro utilizando junção túnel ferromagneto/isolante/supercondutor (FM-I-S) para medir a polarização de spin na corrente de tunelamento originada no eletrodo ferromagnético ao atravessar a camada isolante. Nesse experimento, os elétrons tunelavam da camada ferromagnética para um filme supercondutor de Al, que atuava como detector de spin. A DOS do supercondutor tem um gap de 2Δ no espectro da quase-partícula e singularidades em $E = \pm\Delta$. Ao aplicar um campo magnético paralelo ao plano do filme supercondutor, o campo magnético interage com o spin do elétron pelo efeito Zeeman separando os estados de quase-partícula no supercondutor. Esse campo magnético define a orientação do momento magnético e consequentemente a orientação do spin no filme ferromagnético. O campo magnético desdobra a densidade de estados (DOS, sigla do inglês *Density of States*) no filme supercondutor, gerando bandas de estados de spin para cima e estados de spin para baixo, separados por $2\mu_B H$, como indicado na figura 2.1.

Os picos na DOS do supercondutor tornam possível separar as contribuições com spin para

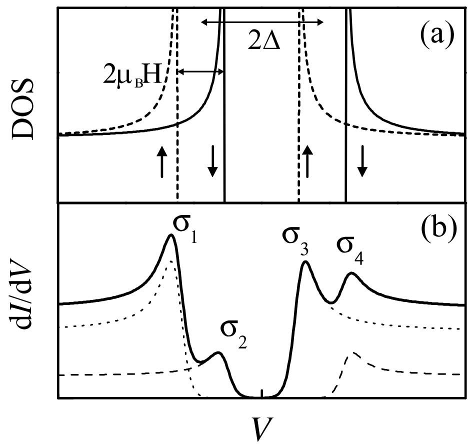


Fig. 2.1: Tunelamento em uma estrutura FM-I-S. (a) A DOS do supercondutor das contribuições de spin para cima e spin para baixo é separada $2\mu_B H$. (b) Condutância em função da voltagem para cada orientação de spin (linhas pontilhadas) e condutância total (linha cheia) [17].

cima e spin para baixo na corrente de tunelamento o que resulta numa forma assimétrica para a condutância, como pode ser observado na figura 2.1. Esta assimetria é devida à diferença na DOS no nível de Fermi para estados com spin para cima e spin para baixo na camada ferromagnética, que determina o número de elétrons que atravessa em cada canal da condutância. Assumindo que o spin não muda no processo de tunelamento a condutância total é a soma da condutância dos canais com spin para cima e spin para baixo, a polarização de spin (PS) pode ser estimada pela medida diferença dos quatro picos na condutância (σ_{1-4}):

$$PS \approx \frac{(\sigma_4 - \sigma_2) - (\sigma_1 - \sigma_3)}{(\sigma_4 - \sigma_2) + (\sigma_1 - \sigma_3)} \tag{2.1}$$

A diferença entre os picos da condutância é uma estimativa do valor de PS e geralmente é superestimada. Pode-se obter uma maior precisão introduzindo espalhamento spin-órbita no supercondutor [17, 19]. Na tabela 2.1 se encontram valores de PS medidos para diferentes metais ferromagnéticos corrigidos pelo espalhamento spin-órbita [20]. Nota-se que o sinal de PS para os metais $3d$ e suas ligas é positivo em todos os casos.

Tab. 2.1: Tunelamento com spin polarizado para junções $FM/Al_2O_3/Al$

FM	Ni	Co	Fe	$Ni_{40}Fe_{60}$	$Ni_{80}Fe_{20}$	$SrRuO_3$	$Co_{40}Fe_{60}$	$Co_{84}Fe_{16}$
PS (%)	33	42	45	48	55	-9.5	55	55

2.2 Magnetorresistência em junções túnel magnéticas

Uma típica junção túnel-magnética (MTJ) consiste de dois eletrodos ferromagnéticos separados por uma fina camada isolante (usualmente Al_2O_3), que representa a barreira de tunelamento. Na figura 2.2 se encontra a micrografia de uma MTJ composta por camadas de MnFe-Py/Al_2O_3/Co, onde Py é uma liga permalloy ($Ni_{81}Fe_{19}$). O MnFe é um material anti-ferromagnético (AFM) e Py é ferromagnético (FM) assim devido à interação *exchange bias* na interface AFM/FM a camada MnFe-Py tem a sua magnetização fixa. Já o eletrodo de Co tem magnetização livre.

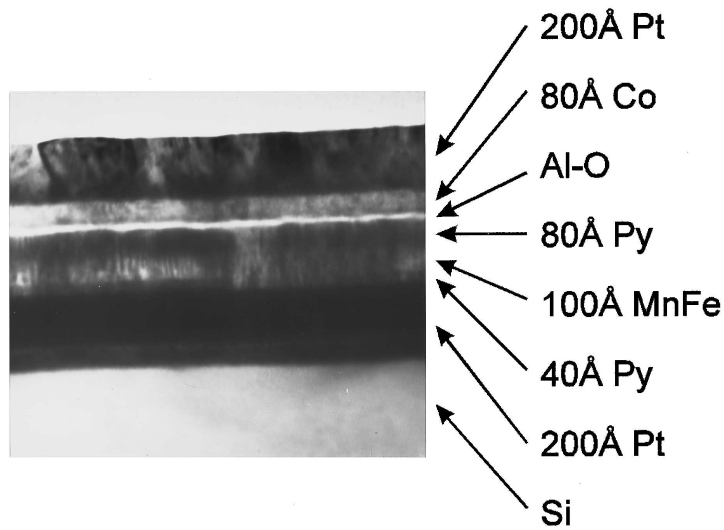
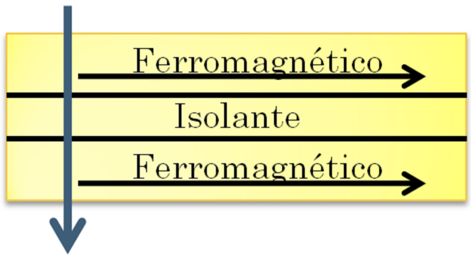
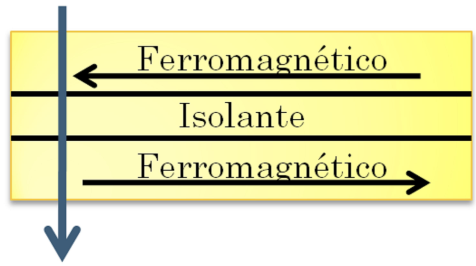


Fig. 2.2: Seção de corte transversal da micrografia de MTJ composta de camadas MnFe-Py/Al_2O_3/Co. O eletrodo de Co é livre. Cada uma das camadas da junção está indicada [21].

Portanto, a polarização dos eletrodos ferromagnéticos pode ser mudada independentemente pela aplicação de campos magnéticos externos locais, como indicado na figura 2.3. Ao compararmos configurações nas quais as polarizações dos eletrodos são paralelas (P) ou anti- paralelas (AP) observa-se o efeito da magnetorresistência, que consiste na variação da resistência em MTJ dependendo da direção relativa entre as magnetizações dos eletrodos. Na configuração P a corrente de tunelamento é alta (resistência baixa), já na configuração AP a corrente de tunelamento é baixa (resistência alta).



(a) Configuração P



(b) Configuração AP

Fig. 2.3: Representação esquemática de uma MTJ. As setas pretas indicam a magnetização do eletrodo ferromagnético e a seta azul indica o sentido da corrente de tunelamento.

2.2.1 Modelo de Jullière

A primeira vez em que se observou o efeito da magnetorresistência (MR) em junções de tunelamento foi no experimento realizado por Jullière em 1975 [2] utilizando uma junção com eletrodos de Fe e Co e separados por uma barreira semicondutora (Ge). Neste experimento estudou-se a condutância de tunelamento em função da orientação relativa entre os eletrodos ferromagnéticos. Jullière obteve um máximo para a TMR de 14% diminuindo rapidamente com a voltagem, como pode ser observado na figura 2.4.

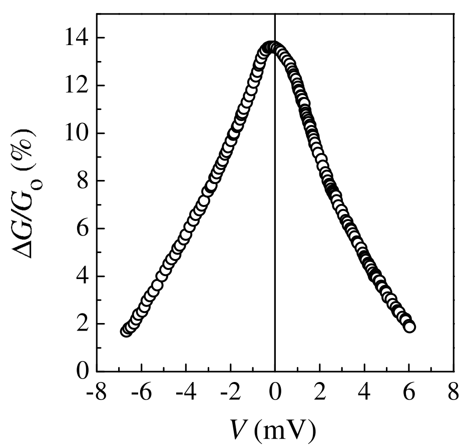
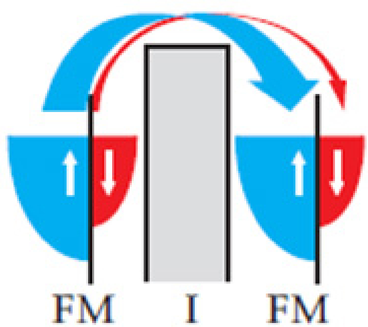
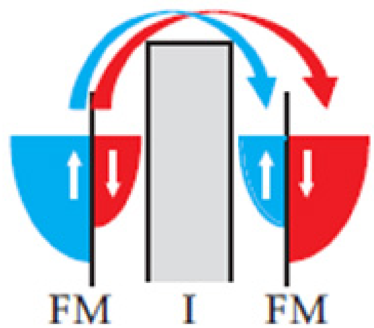


Fig. 2.4: Primeira vez em que foi observado o efeito TMR. Variação da condutância relativa devido à aplicação de um campo magnético externo em função da voltagem aplicada em uma junção Fe/Ge/Co a 4.2 K (modificada de [2]).

Jullière interpretou os resultados obtidos formulando um modelo simples denominado modelo de Jullière, que se baseia em duas condições. A primeira condição é que o spin do elétron é conservado no processo de tunelamento. Assim os elétrons de uma sub-banda tunelam para os estados não preenchidos da outra banda com a mesma orientação, portanto há dois canais independentes para o tunelamento. Se os dois eletrodos estão magnetizados paralelamente os elétrons com spin majoritários de um eletrodo tunelam para estados vazios de spin majoritários do outro eletrodo e os elétrons com spin minoritários de um outro eletrodo tunelam para estados vazios de spin minoritários do outro eletrodo, como indicado na figura 2.5(a). Já se os dois eletrodos estão magnetizados anti-paralelamente os elétrons com spin majoritários tunelam para estados vazios com spin minoritários e os elétrons com spin minoritários tunelam para estados vazios de spin majoritários, como indicado na figura 2.5(b).



(a) Configuração P



(b) Configuração AP

Fig. 2.5: Representação esquemática da DOS na conservação do spin no tunelamento.

A segunda condição é que a condutância de uma orientação de spin é proporcional ao produto da densidade de estados (DOS) no nível de Fermi dos dois eletrodos. De acordo com esses pressupostos a condutância para os alinhamentos paralelos (G_P) e anti-paralelos (G_{AP}) são dadas por:

$$G_P \propto D_D^M(E_F)D_E^M(E_F) + D_D^m(E_F)D_E^m(E_F) \quad (2.2)$$

$$G_{AP} \propto D_D^M(E_F)D_E^m(E_F) + D_E^M(E_F)D_D^m(E_F) \quad (2.3)$$

onde $D_{D,E}^{M,m}(E_F)$ é a DOS no nível de Fermi dos eletrodos ferromagnéticos da direita (D) e da esquerda (E) com spin maioria (M) e spin minoria (m). Usando a definição da TMR relativa ao alinhamento paralelo:

$$TMR \equiv \frac{\Delta G}{G_P} = \frac{G_P - G_{AP}}{G_P} = \frac{R_{AP} - R_P}{R_{AP}} \quad (2.4)$$

e substituindo as equações 2.2 e 2.3 na equação acima, encontramos:

$$TMR = \frac{2PS_D PS_E}{1 + PS_D PS_E} \tag{2.5}$$

onde PS_D e PS_E representam o coeficiente de polarização de spin no eletrodo da direita e da esquerda e são dados por:

$$PS_D = \frac{N_D^{\uparrow}(E_F) - N_D^{\downarrow}(E_F)}{N_D^{\uparrow}(E_F) + N_D^{\downarrow}(E_F)} \tag{2.6}$$

$$PS_E = \frac{N_E^{\uparrow}(E_F) - N_E^{\downarrow}(E_F)}{N_E^{\uparrow}(E_F) + N_E^{\downarrow}(E_F)} \tag{2.7}$$

Portanto, no modelo de Jullière a TMR depende apenas da densidade de estados no nível de Fermi de ambos os eletrodos, não considerando os detalhes do processo de espalhamento. O modelo é baseado na teoria clássica do tunelamento não levando em consideração a dependência do spin no coeficiente de tunelamento. Além disso, em primeira aproximação para baixas voltagens o valor da TMR é constante.

2.3 Ferromagnetismo

O ferromagnetismo dos sistemas macroscópicos pode ser descrito na forma localizada ou itinerante. No modelo localizado os momentos magnéticos e spins, que dão origem às propriedades magnéticas dos sistemas, estão presos aos átomos da rede. Portanto, é um modelo apropriado aos materias isolantes ou em metais cujas camadas atômicas não formam bandas como por exemplo a camada $4f$ nos lantanídeos.

Entretanto, existem vários materiais magnéticos metálicos, como os metais de transição Fe, Ni, Co, onde os spins responsáveis pelo magnetismo não estão localizados e são descritos pelo modelo do ferromagnetismo itinerante. Como nesta dissertação estamos interessados em materias ferromagnéticos do tipo $3d$ iremos estudar o ferromagnetismo itinerante.

2.3.1 Ferromagnetismo itinerante

O momento magnético por átomo de ferro é de aproximadamente $2.2\mu_B$. Este valor fracionário não é possível de entender através da teoria do ferromagnetismo localizado. Esta situação pode ser entendida através da teoria do ferromagnetismo itinerante, no qual a magnetização é devida à separação espontânea das sub-bandas de condução conforme o seu spin. Na aproximação do campo molecular cada spin "sente"o mesmo campo de troca λM produzido pelos seus vizinhos, onde M é a magnetização macroscópica e λ é o parâmetro de contato de Fermi. Em um metal o campo molecular pode magnetizar o gás de elétrons devido ao paramagnetismo de Pauli χ_P [22]. A magnetização resultante do gás de elétrons, $\mathbf{M}$, será responsável pelo campo molecular. Os sistemas naturalmente ocupam sempre o estado de menor energia. Portanto, precisa-se saber se o sistema como um todo poupa energia por torna-se ferromagnético sem a aplicação de campo magnético externo. Supondo que na ausência de campo magnético aplicado um pequeno número de elétrons da sub-banda com spin para baixo é transferida para a sub-banda com spin para cima. Desta forma os elétrons com spin para baixo com energia entre $E_F - \delta E$ e E_F tem seu spin trocado e são transferidos para a sub-banda com spin para cima com energia entre E_F e $E_F + \delta E$, como indicado na figura 2.6. O número de elétrons que se moveram é $1/2g(E_F)\delta E$ e o ganho de energia por elétron é δE. Portanto, o aumento na energia cinética é dado por:

$$\Delta E_{cin} = \frac{1}{2} g(E_F)(\delta E)^2 \tag{2.8}$$

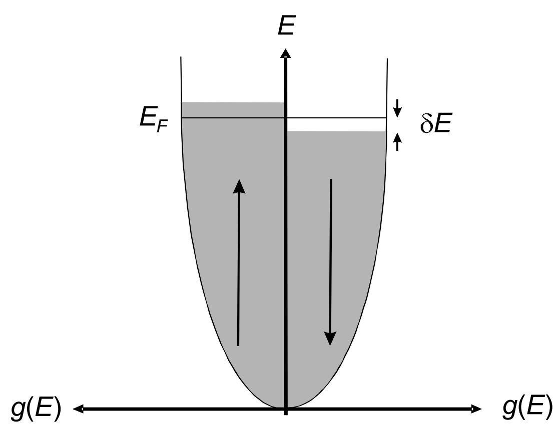


Fig. 2.6: Densidade de estados para elétrons com spin para cima e spin para baixo, mostra-se a separação espontânea das bandas sem aplicação de um campo magnético. [22]

Este aumento de energia é compensado pela interação da magnetização com o campo molecular. A densidade de elétrons com spin para cima e spin para baixo após a transferência de elétrons é dada por:

$$n_\uparrow = \frac{1}{2}n + \frac{1}{2}g(E_F)\delta E \tag{2.9}$$

$$n_\downarrow = \frac{1}{2}n - \frac{1}{2}g(E_F)\delta E \tag{2.10}$$

Assumindo que cada elétron tem momento magnético $1\mu_B$ a magnetização é dada por:

$$M = \mu_B \left(n_\uparrow - n_\downarrow\right) \tag{2.11}$$

Portanto, a energia do campo molecular é dada por:

$$\begin{aligned}
\Delta E_{pot} &= -\frac{1}{2}\mu_0 M \cdot \lambda M && (2.12)\\
&= -\frac{1}{2}\mu_0 \lambda M^2 && (2.13)\\
&= -\frac{1}{2}\mu_0 \mu_B^2 \lambda \left(n_\uparrow - n_\downarrow\right)^2 && (2.14)
\end{aligned}$$

Escrevendo $U = \mu_0\mu_B^2\lambda$, onde U é uma medida da energia de Coulomb, e substituindo as equações 2.9 e 2.10 temos:

$$\Delta E_{pot} = -\frac{1}{2} U \left(g(E_F)\delta E\right)^2 \tag{2.15}$$

Portanto, a varição total de energia ΔE é dada por:

$$\begin{aligned}
\Delta E &= \Delta E_{cin} + \Delta E_{pot}\\
&= \frac{1}{2} g(E_F)(\delta E)^2 - \frac{1}{2} g(E_F)(\delta E)^2 U g(E_F)\\
&= \frac{1}{2} g(E_F)(\delta E)^2 (1 - U g(E_F)). && (2.16)
\end{aligned}$$

O ferromagnetismo espontâneo é possível quando $\Delta E < 0$, o que implica em:

$$U g(E_F) \geq 1 \tag{2.17}$$

que é conhecido como critério de Stoner [22] para o ferromagnetismo. Se o critério de Stoner é satisfeito ocorre uma separação das bandas com spin para cima e spin para baixo de um valor Δ sem a presença de campo magnético externo. Esta condição para o ferromagnetismo envolve tanto a DOS no nível de Fermi quanto o efeito de Coulomb, U, e exige que ambos sejam grandes.

Na figura 2.7 são mostrados os valores de U, $g(E_F)$ e $U \cdot g(E_F)$ para os cinquenta primeiros elementos químicos da tabela periodica. Nota-se que apenas Fe, Co, e Ni possuem $Ug(E_F) \geq 1$ o que ocorre principalmente devido ao alto valor da DOS no nível de Fermi.

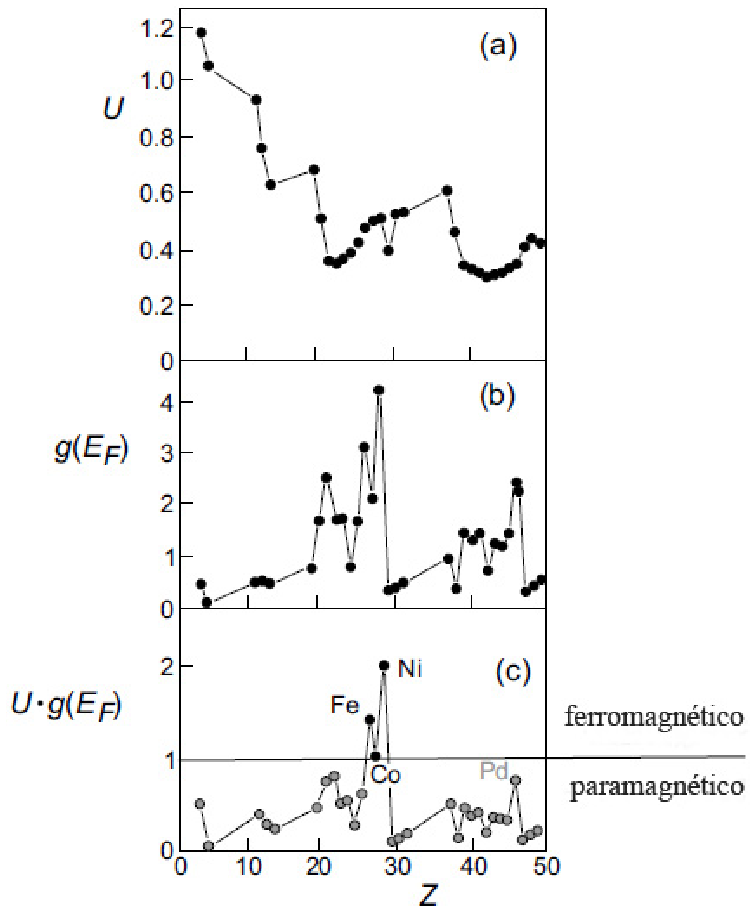


Fig. 2.7: Volores do parâmetro de Stoner U, da DOS de estados por átomo $g(E_F)$ e $g(E_F) \cdot U$ em função do número atômico Z. Apenas os elementos Fe, Co, e Ni satisfazem o critério de Stoner e são ferromagnéticos. [22]

2.4 Condutância - Fórmula de Landauer-Büttiker

A formulação de Landauer expressa a condutância em função das propriedades de espalhamento de um sistema. Ao contrário das teorias clássicas de transporte em sistemas macroscópicos, o formalismo de Landauer considera os aspectos do processo de medição e é amplamente utilizada em sistemas mesoscópicos. A teoria é aplicada no regime balístico e pode-se obter a condutância em função do coeficiente de transmissão por diversos métodos [13, 14, 12, 23, 24].

Para obter a fórmula de Landauer para condutância considera-se dois reservatórios de elétrons conectados por um condutor balístico e seja aplicada uma diferença de potencial entre eles (V_{12}), como indicado na figura 2.8. O condutor balístico é quase unidimensional e apresenta quantização dos estados transversos. Estes estados representam os canais de transmissão.

Os potenciais químicos dos contatos da esquerda (1) e da direita (2) são μ_1 e μ_2, respecti-

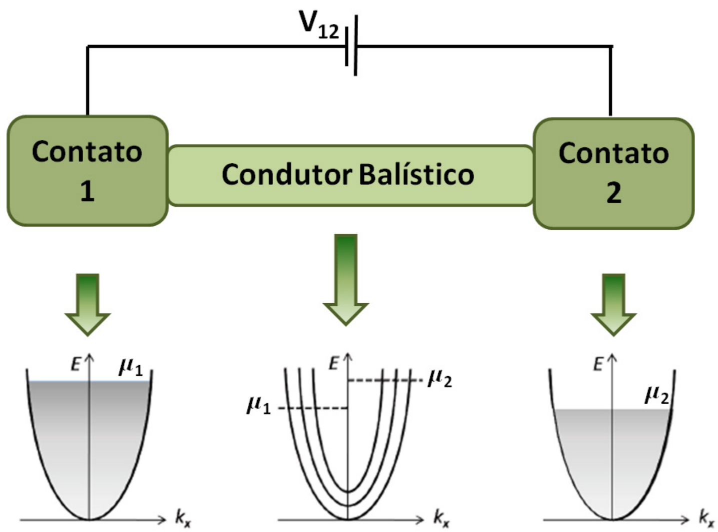


Fig. 2.8: Um condutor balístico conectado a dois contatos. Como os contatos têm uma dimensão infinita em relação ao condutor balístico, os estados nos contatos são contínuos e no consdutor são quantizados. No condutor balístico, os estados têm potencial químico μ_1 para $+k_x$ e μ_2 para $-k_x$. Figura adaptada da referência [24]

vamente. Além disso, temos que $\mu_1 - \mu_2 = eV_{12}$. A corrente é dada por:

$$I = I_{12} + I_{21} \tag{2.18}$$

onde I_{12} é a corrente que flui do contato 1 para o contato 2 e I_{21} é a corrente que flui do contato 2 para o contato 1. Podemos cacular as corrente I_{12} e I_{21} através das seguintes equações [24]:

$$I_{12} = \frac{e}{L} \sum_j \sum_{k_x=0}^{\infty} v_{j,k_x} T_{k_x} f_{j,k_x}^{\mu_1} \tag{2.19}$$

$$I_{21} = \frac{e}{L} \sum_j \sum_{k_x=-\infty}^{0} v_{j,k_x} T_{k_x} f_{j,k_x}^{\mu_2} \tag{2.20}$$

onde L é o comprimento do condutor balístico, j representa a soma sobre os spins, k_x é o vetor de onda na direção x, v_{j,k_x} é a velocidade do elétron no estado (j, k_x), T_{k_x} é a probabilidade dos elétrons com vetor de onda k_x ser transmitido, e $f_{j,k_x}^{\mu_1}$ e $f_{j,k_x}^{\mu_2}$ é ditribuição de Fermi-Dirac nos contatos 1 e 2, respectivamente. Substituindo 2.19 e 2.20 na equação 2.18 obtemos:

$$I = \frac{e}{L}\sum_j \left(\sum_{k_x=0}^{\infty} v_{j,k_x} T_{k_x} f_{j,k_x}^{\mu_1} + \sum_{k_x=-\infty}^{0} v_{j,k_x} T_{k_x} f_{j,k_x}^{\mu_2} \right) \tag{2.21}$$

Substituindo $v_{j,k_x} = \frac{\hbar k_x}{m^*}$:

$$I = \frac{e\hbar}{L2m^*}\sum_j \left(\sum_{k_x=0}^{\infty} k_x T_{k_x} f_{j,k_x}^{\mu_1} + \sum_{k_x=-\infty}^{0} k_x T_{k_x} f_{j,k_x}^{\mu_2} \right) \tag{2.22}$$

Fazendo $k_x \to -k_x$ na segunda integral temos:

$$I = \frac{e\hbar}{L2m^*}\sum_j \sum_{k_x=0}^{\infty} k_x T_{k_x} \left(f_{j,k_x}^{\mu_1} - f_{j,k_x}^{\mu_2} \right) \tag{2.23}$$

Assumindo condições de contorno periódicas, podemos transformar a soma em k_x numa integral:

$$\sum_{k_x} \longrightarrow \frac{L}{2\pi}\int dk_x \tag{2.24}$$

Assim temos que a equação 2.23 se transforma em:

$$I = \frac{e\hbar}{2\pi m^*}\sum_j \int_{k_x=0}^{\infty} k_x T_{k_x} \left(f_{j,k_x}^{\mu_1} - f_{j,k_x}^{\mu_2} \right) dk_x \tag{2.25}$$

Mas $\epsilon = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*}$:

$$I = \frac{e}{h}\sum_j \int T_j(\epsilon) \left(f^{\mu_1}(\epsilon) - f^{\mu_2}(\epsilon) \right) d\epsilon \tag{2.26}$$

A equação acima pode ser reescrita:

$$I = \frac{e^2 V_{12}}{h}\sum_j \int T_j(\epsilon) \frac{\left[f^{\mu_1}(\epsilon) - f^{\mu_2}(\epsilon) \right]}{eV_{12}} d\epsilon \tag{2.27}$$

Se os dois contatos são mantidos no mesmo potencial químico $\mu_1 = \mu_2$ e a corrente é nula, temos $f_1 = f_2 \to I = 0$. Para um pequeno desvio do equilíbrio, a corrente é proporcional a voltagem. Dessa forma:

$$\delta I = \frac{e^2 V_{12}}{h}\sum_j \int \left(\left[T_j(\epsilon) \right]_{Eq.} \delta \left[\frac{\left[f^{\mu_1}(\epsilon) - f^{\mu_2}(\epsilon) \right]}{eV_{12}} \right] + \delta \left[T_j(\epsilon) \right] \left[\frac{\left[f^{\mu_1}(\epsilon) - f^{\mu_2}(\epsilon) \right]}{eV_{12}} \right]_{Eq.} \right) d\epsilon \tag{2.28}$$

O segundo termo é nulo, pois no regime de resposta linear $f_1(\epsilon) = f_2(\epsilon)$. Podemos simplificar o primeiro termo usando expansão em série de Taylor:

$$\delta\left[f^{\mu_1}(\epsilon) - f^{\mu_2}(\epsilon)\right] \approx \left[\mu_1 - \mu_2\right]\left(\frac{\partial f}{\partial \mu}\right) = \left(\frac{\partial f_0}{\partial E}\right)\left[\mu_1 - \mu_2\right] \tag{2.29}$$

onde $f_0(E)$ é a função de fermi no equilíbrio:

$$f_0(E) = \left[\frac{1}{1 + e^{\frac{E-\mu}{k_b T}}}\right]_{\mu = E_F} \tag{2.30}$$

No regime de resposta linear para que a expansão 2.29 seja uma boa aproximação $(\mu_1 - \mu_2) \ll k_b T$, logo devemos ter $eV_{12} \ll k_b T$. Assim podemos escrever a condutância:

$$G = \frac{\delta I}{\left(\mu_1 - \mu_2\right)/e} = \frac{e^2}{h}\sum_j \int T_j(\epsilon)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon}\right) d\epsilon \tag{2.31}$$

No limite de baixas temperaturas:

$$f_0(\epsilon) \approx \theta(E_F - \epsilon) \rightarrow -\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \approx \delta(E_F - \epsilon) \tag{2.32}$$

então a equação 2.31 se reduz no limite de baixas temperaturas no regime de resposta linear, onde a soma é feita sobre todos os canais de transmissão:

$$G = \frac{e^2}{h}\sum_j T_j(E_F) \tag{2.33}$$

2.5 Transmissão de um pacote de onda

Seja Ψ_{inc} um pacote de onda incidente em uma barreira de potencial de largura a, tal que em $t = 0$ está suficientemente longe da barreira. O potencial fora da barreira é nulo e dentro da barreira é $V(x)$. A evolução temporal do pacote é descrito pela equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi_{inc}(x,t)}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi_{inc}(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi_{inc}(x,t) = 0. \tag{2.34}$$

Cada componente com energia E do pacote de onda incidente pode ser escrita como $\Psi_E(x,t) = \psi(x)\exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right)$, onde $\psi(x)$ satisfaz a equação de Schrödinger independente do tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + (V - E)\psi = 0. \tag{2.35}$$

No espaço k pode-se escrever a função de onda incidente, $\phi_{inc}(k)$, como a transformada de Fourier da função de onda incidente,$\Psi_{inc}(x, 0)$, no espaço das coordenadas:

$$\phi_{trans}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx}\Psi_{inc}(x, 0)dx \tag{2.36}$$

A barreira de potencial atua filtrando as componentes com diferentes k, assim a transmissão para uma componente com um dado valor de k específico é dado por $\phi(k)t(k)$. Portanto, o pacote de onda transmitido no espaço de coordenadas pode ser escrito como:

$$\Psi_{trans}(x, t) = \frac{1}{2\pi}\int \phi(k)t(k)\exp\left(-i\frac{\hbar k^2}{2m}t\right)e^{ik(x-x_0)}dk \tag{2.37}$$

A probabilidade de transmissão da função de onda para um dado valor de k é definida como $|\phi_{trans}(k)|^2 = |\phi_{inc}(k)t(k)|^2$ onde $\phi_{trans}(k)$ é a transformada de Fourier da função de onda transmitida. Portanto, define-se a probabilidade de transmissão no espaço k:

$$T_k = \frac{\int|\phi_{trans}(k)|^2dk}{\int|\phi_{inc}(k)|^2dk} \tag{2.38}$$

De modo análogo é possível definir a probabilidade de transmissão no espaço de coordenadas:

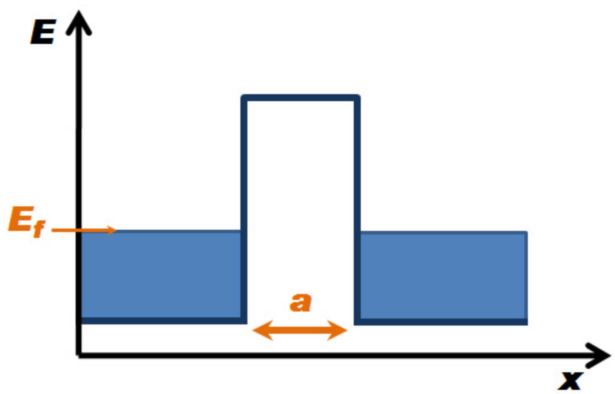
$$T_x(t) = \frac{\int|\Psi_{trans}(x, t)|^2dx}{\int|\Psi_{inc}(x, t)|^2dx} \tag{2.39}$$

As duas expressões para a probabilidade de tunelamento, no espaço de coordenadas e no espaço k, equações 2.39 e 2.38, respectivamente são iguais. Essa igualdade provem da propriedade que relaciona a integral do módulo ao quadrado entre uma função arbitrária, $\Psi(x)$, e a sua transformada de Fourier, $\phi(k)$:

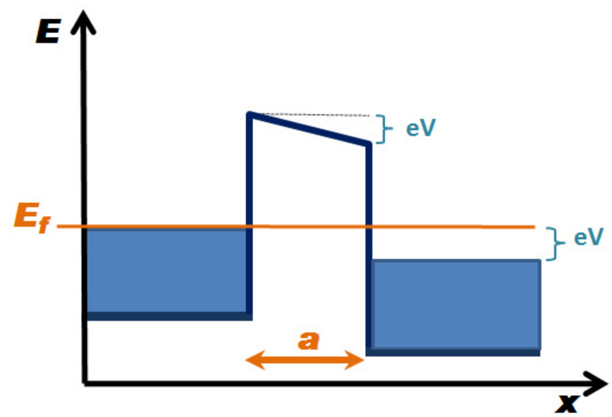
$$\int|\phi(k)|^2dk = 2\pi\int|\Psi(x)|^2dx \tag{2.40}$$

2.6 Modelo Teórico

O tunelamento de elétrons é o fenômeno quântico no qual uma corrente pode fluir entre dois eletrodos através de uma barreira isolante. Supondo dois eletrodos metálicos separados por um filme fino isolante se a barreira for fina o suficiente há uma probabilidade finita do elétron ser encontrado do outro lado da barreira de potencial. A camada isolante é modelada por uma barreira de potencial quadrada. Se os metais possuem a mesma função trabalho, quando não há diferença de potencial o nível de Fermi terá a mesma energia nos dois eletrodos (2.9(a)). Ao aplicar uma voltagem V, o nível de Fermi de um dos eletrodos é deslocado por uma quantidade eV em relação ao outro onde e é a carga do elétron. O potencial se deforma numa barreira linear (2.9(b)).



(a) Voltagem nula



(b) Voltagem V

Fig. 2.9: Diagrama do potencial em uma MTJ.

Considerando dois eletrodos ferromagnéticos idênticos separados por uma barreira isolante e assumindo que haja a conservação do spin, o tunelamento pode ocorrer apenas entre bandas com a mesma orientação de spin, ou seja, de sub-bandas com spin para cima para sub-bandas com spin para cima. A condutância é dada por:

$$G = G_{\uparrow} + G_{\downarrow} \tag{2.41}$$

onde $G_{\uparrow(\downarrow)}$ é a condutância do canal de spin para cima (para baixo).

Considerando o caso em que a magnetização dos eletrodos é paralela (configuração P). Definimos os portadores com spin maioria (M) como os elétrons cujo momento é paralelo a magnetização do ferromagneto. Já os portadores com spin minoria (m) são aqueles cujo spin é anti-paralelo à magnetização do ferromagneto. Devido à conservação do spin na configuração P ocorre o tunelamento de sub-banda com spin M para sub-banda com spin M e da sub-banda com spin m para sub-banda com spin m que denominaremos de M-M e m-m, respectivamente. Substituindo a equação 2.33 em 2.41, nessa configuração é dada por:

$$G_P = \frac{e^2}{h}\left(T_{MM} + T_{mm}\right) \tag{2.42}$$

Já no caso em que a magnetização dos eletrodos é anti-paralela (configuração AP), devido à conservação do spin, nesta configuração, ocorre o tunelamento de sub-banda com spin M para sub-banda com spin m e da sub-banda com spin m para sub-banda com spin M que denominaremos de M-m e m-M, respectivamente. Substituindo a equação 2.33 em 2.41, nessa configuração tem-se:

$$G_{AP} = \frac{e^2}{h}\left(T_{Mm} + T_{mM}\right) \tag{2.43}$$

Nos metais de transição, é bem conhecido que os elétrons d participam da condução. A superfície de Fermi obtida para o volume (*bulk*), apresenta ramos importantes provenientes das bandas tipo d. Os orbitais d são mais localizados e têm maior energia de rotação ao comparar com os orbitais tipo s e p, como indicado na figura 2.10.

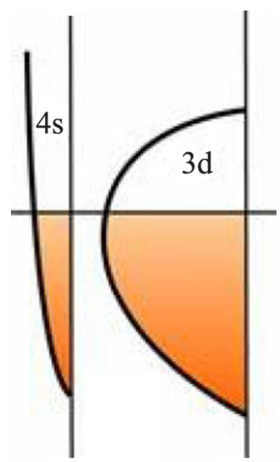


Fig. 2.10: Representação esquemática da DOS nos metais de transição.

Os elétrons de tipo s são modelados por ondas planas com vetores de onda pequenos, representando assim o caráter estendido dos estados. Já os elétrons tipo d serão representados por pacotes de muitas componentes de ondas planas com vetores de onda bem maiores, levando em conta o caráter mais localizado da função de onda. Para simular os elétrons d serão considerados pacotes de onda gaussiano e pulsos, que serão funções do tipo cosseno cortadas de largura l.

Para introduzir a estrutura de banda do metal será considerada a massa efetiva do elétron dependente da banda; os elétrons d tem uma massa efetiva maior ao compará-los com elétrons do tipo s. Além disso ao calcular a massa efetiva dos elétrons d considera-se a massa efetiva dependente da sub-banda.

Para estimar a massa efetiva dos elétrons d utilizamos a razão entre a densidade de estados dos elétrons com spins M e spins m no nível de Fermi. A densidade de estados de elétrons livres no nível de Fermi é dada pela equação [25]

$$D_\sigma(E_F) = \frac{1}{4\pi^2}\left(\frac{2m_\sigma^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{E_F} \tag{2.44}$$

onde $\hbar$ é a constante de Planck sobre 2π, m_σ^* é a massa efetiva do elétrons dependente da sub-banda e E_F é a energia de Fermi. Logo, a razão entre as densidades de estados para os spins M e spins m no nível de Fermi é dada por:

$$\frac{D_M(E_F)}{D_m(E_F)} = \left(\frac{m_M}{m_m}\right)^{\frac{3}{2}} \tag{2.45}$$

Portanto, a razão entre a massa efetiva dos elétrons com spin M e spin m é dada por:

$$\frac{m_M}{m_m} = \left(\frac{D_M(E_F)}{D_m(E_F)}\right)^{\frac{2}{3}} \tag{2.46}$$

Nos metais de transição a banda s não contribui para o ferromagnetismo do material, com isso a razão entre a densidade de estados dos elétrons com spins M e spins m é aproximadamente um.

Capítulo 3

Coeficiente de transmissão para ondas planas

Nesta capítulo é calculado o coeficiente de transmissão para barreiras de potenciais quadradas e lineares utilizando o Método da Matriz de Transferência (MMT) para resolver a equação de Schrödinger [26]. Este método consiste em separar o espaço em regiões nas quais o potencial apresenta o mesmo comportamento, escrever a função de onda em cada região e aplicar as condições de continuidade da função de onda e da primeira derivada. Assim pode-se obter um sistema de equações que relacionam os coeficientes A_n e B_n, que determinam as funções de onda em cada região. Utilizando as relações entre os coeficientes e impondo a normalização da função de onda obtem-se a solução completa do problema. Para obter o coeficiente de transmissão podemos relacionar os coeficientes da função de onda na região incidente com os coeficientes da função de onda transmitida.

3.1 Barreira de potencial quadrada unidimensional

Primeiramente, será estudado o caso de uma barreira de potencial quadrada assimétrica, cujo perfil está indicado na figura 3.1.

A barreira de potencial assimétrica é descrita matematicamente por:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & se \quad x < x_1 & \text{Região 1} \\ V_0 & se \quad x_1 \leq x < x_2 & \text{Região 2} \\ -V_1 & se \quad x \geq x_2 & \text{Região 3} \end{cases} \tag{3.1}$$

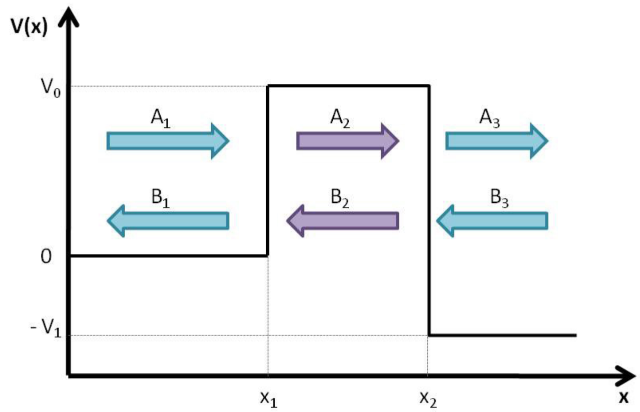


Fig. 3.1: Perfil de uma barreira de potencial quadrada assimétrica.

Região 1

Na região 1 a equação de Schrödinger é dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{d^2\Psi_1(x)}{dx^2} = E\Psi_1(x) \longrightarrow \frac{d^2\Psi_1(x)}{dx^2} = -\frac{2m_1E}{\hbar^2}\Psi_1(x). \tag{3.2}$$

onde m_1 é a massa efetiva e E é a energia da partícula na região 1. A solução da equação 3.2 é dada por ondas planas se movendo tanto da direita para esquerda quanto no sentido contrário:

$$\Psi_1(x) = A_1 \exp{(ikx)} + B_1 \exp{(-ikx)} \tag{3.3}$$

onde $k = \frac{\sqrt{2m_1E}}{\hbar}$ e as constantes A_1 e B_1 são as amplitudes da onda se movendo para direita e para esquerda, respectivamente.

Região 2

Na região 2 o potencial é constante V_0 e a equação de Schrödinger é dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2^*}\frac{d^2\Psi_2(x)}{dx^2} + V_0\Psi_2(x) = E\Psi_3(x) \longrightarrow \frac{d^2\Psi_2(x)}{dx^2} = \frac{2m_2^*(V_0-E)}{\hbar^2}\Psi_2(x) \tag{3.4}$$

onde m_2 é a massa efetiva da partícula na região 2. A solução da equação 3.4 são ondas planas se $E > V_0$ e são ondas evanescentes se $E < V_0$:

$$\Psi_2(x) = \begin{cases} A_2 \exp{(ik_2x)} + B_2 \exp{(-ik_2x)} & se \quad k > \kappa_0 \\ A_2 \exp{(\rho x)} + B_2 \exp{(-\rho x)} & se \quad k < \kappa_0 \end{cases} \tag{3.5}$$

onde:

$$\kappa_0 = \frac{\sqrt{2m_2V_0}}{\hbar}, \rho = \frac{\sqrt{2m_2\left(V_0-E\right)}}{\hbar}, k_2 = \frac{\sqrt{2m_2\left(E-V_0\right)}}{\hbar}$$

Região 3

Na região 3, a equação de Schrödinger é dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_3}\frac{d^2\Psi_3(x)}{dx^2} - V_1\Psi_3(x) = E\Psi_3(x) \longrightarrow \frac{d^2\Psi_3(x)}{dx^2} = -\frac{2m_3(E+V_1)}{\hbar^2}\Psi_3(x) \tag{3.6}$$

fazendo $k_3 = \frac{\sqrt{2m_3(V_1+E)}}{\hbar}$, onde m_3 é a massa efetiva da partícula na região 3. A solução da equação 3.6 são ondas planas se movendo da direita para a esquerda e no sentido oposto:

$$\Psi_3(x) = A_3 \exp\left(ik_3x\right) + B_3 \exp\left(-ik_3x\right) \tag{3.7}$$

Cálculo do coeficiente de transmissão

Para o cálculo do coeficiente de transmissão é necessário obter a relação entre a amplitude das ondas incidente e transmitida. As grandezas físicas que são contínuas são a densidade de probabilidade (ρ) e a densidade de corrente ($\mathbf{J}$) que implicam na continuidade da função de onda (equação 3.10) e da primeira derivada (equação 3.11).

$$\rho = |\Psi(x)|^2 = \Psi(x)^*\Psi(x) \tag{3.8}$$

$$\mathbf{J} = \frac{A}{m}\left(\Psi\frac{d\Psi^*}{dx} - \Psi^*\frac{d\Psi}{dx}\right) \tag{3.9}$$

Portanto, impondo a continudade da função de onda e da primeira derivada em $x = x_1$ e $x = x_2$:

$$\Psi_n(x_n) = \Psi_{n+1}(x_n) \tag{3.10}$$

$$\frac{1}{m_n}\frac{d\Psi_n(x_n)}{dx} = \frac{1}{m_{n+1}}\frac{d\Psi_{n+1}(x_n)}{dx} \tag{3.11}$$

A relação entre $\Psi_n(x)$ e $\Psi'_n(x)$ com os coeficientes A_n e B_n pode ser escrito em função de uma matriz 2 x 2, $M_n(x)$:

$$\begin{bmatrix} \Psi_n(x) \\ \Psi'_n(x) \end{bmatrix} = M_n(x) \begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix} \tag{3.12}$$

Utilizando as condições de contorno dadas pela equação 3.10 pode-se escrever:

$$\begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = M_1^{-1}(x_1)M_2(x_1)M_2^{-1}(x_2)M_3(x_2) \begin{bmatrix} A_3 \\ B_3 \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = M(x_1, x_2) \begin{bmatrix} A_3 \\ B_3 \end{bmatrix} \tag{3.13}$$

Da equação 3.3 tem-se que a matriz $M_1(x)$ é dada por:

$$M_1(x) = \begin{bmatrix} \exp(ikx) & \exp(-ikx) \\ \frac{ik}{m_1}\exp(ikx) & \frac{-ik}{m_1}\exp(-ikx) \end{bmatrix} \tag{3.14}$$

A matriz dada na equação 3.14 pode ser facilmente invertida obtendo:

$$M_1^{-1}(x) = \frac{1}{2k} \begin{bmatrix} k\exp(-ikx) & -im_1\exp(-ikx) \\ k\exp(ikx) & im_1\exp(ikx) \end{bmatrix} \tag{3.15}$$

As matrizes $M_2(x)$ e $M_2^{-1}(x)$ podem ser obtidas a partir de 3.14 e 3.15 fazendo $m_1 \rightarrow m_2$ e se $k > \kappa_0$ fazendo $k \rightarrow k_2$ e se $k < \kappa_0$ fazendo $k \rightarrow -i\rho$. Dessa forma tem-se:

$$M_2(x) = \begin{cases} \begin{bmatrix} \exp(\rho x) & \exp(-\rho x) \\ \frac{\rho}{m_2}\exp(\rho x) & \frac{-\rho}{m_2}\exp(-\rho x) \end{bmatrix} & se \quad k < \kappa_0 \\ \\ \begin{bmatrix} \exp(ik_2x) & \exp(-ik_2x) \\ \frac{ik_2}{m_2}\exp(ik_2x) & \frac{-ik_2}{m_2}\exp(-ik_2x) \end{bmatrix} & se \quad k > \kappa_0 \end{cases} \tag{3.16}$$

$$M_2^{-1}(x) = \begin{cases} \frac{1}{2\rho}\begin{bmatrix} i\rho\exp(-\rho x) & m_2\exp(-\rho x) \\ i\rho\exp(\rho x) & -m_2\exp(\rho x) \end{bmatrix} & se \quad k < \kappa_0 \\ \\ \frac{1}{2k_2}\begin{bmatrix} k_2\exp(-ik_2x) & -im_2\exp(-ik_2x) \\ k\exp(ik_2x) & im_2\exp(ik_2x) \end{bmatrix} & se \quad k > \kappa_0 \end{cases} \tag{3.17}$$

As matrizes $M_3(x)$ e $M_3^{-1}(x)$ podem ser obtidas fazendo $k \rightarrow k_3$ e $m_1 \rightarrow m_3$ em 3.14 e 3.15, respectivamente.

$$M_3(x) = \begin{bmatrix} \exp(ik_3x) & \exp(-ik_3x) \\ \frac{ik_3}{m_3}\exp(ik_3x) & \frac{-ik_3}{m_3}\exp(-ik_3x) \end{bmatrix} \tag{3.18}$$

$$M_3^{-1}(x) = \frac{1}{2k_3}\begin{bmatrix} k_3\exp(-ik_3x) & -im_3\exp(-ik_3x) \\ k_3\exp(ik_3x) & im_3\exp(ik_3x) \end{bmatrix} \tag{3.19}$$

Considerando o caso em que o elétron se move da direita para a esquerda. As ondas incidente e refletida se movem na região 1, com amplitudes A_1 e B_1, respectivamente, e na região 3 há apenas a onda transmitida com ampiltude A_3. Como não há reflexão na segunda interface ($x = x_2$), têm-se $B_3 = 0$. Assim, assumindo $A_1 = 1$, obtem-se que os coeficientes de transmissão e reflexão são dados por:

$$T = \frac{k_3m_1^*}{km_3^*}\frac{1}{|M_{11}|^2} \tag{3.20}$$

$$R = \left|\frac{M_{11}}{M_{21}}\right|^2 \tag{3.21}$$

Para o cálculo do coeficiente de transmissão precisamos do elemento $M_{11}(x_1, x_2)$. Considerando $k > \kappa_0$, após realizar o produto de matrizes indicado na equação 3.13 e algumas simplificações algébricas obtem-se que para:

$$M_{11}(x_1,x_2) = \frac{e^{-i(kx_1-k_3x_2+k_2(x_2-x_1))}}{4kk_2m_2m_3}\left[(k_2m_1+km_2)(k_3m_2+k_2m_3)-\right.$$
$$\left.e^{2ik_2(x_2-x_1)}(k_2m_1-km_2)(-k_3m_2+k_2m_3)\right]. \tag{3.22}$$

O complexo conjugado do elemento M_{11} é dado por:

$$M_{11}^*(x_1,x_2) = \frac{e^{i(kx_1-k_3x_2+k_2(x_2-x_1))}}{4kk_2m_2m_3}\left[(k_2m_1+km_2)(k_3m_2+k_2m_3)-\right.$$
$$\left.e^{-2ik_2(x_2-x_1)}(k_2m_1-km_2)(-k_3m_2+k_2m_3)\right]. \tag{3.23}$$

Fazendo o produto $M_{11}M_{11}^*$ e subtituindo em 3.20 obtem-se que para $k > \kappa_0$ o coeficiente de transmissão é dado por:

$$T(k) = \frac{16k_3k_2m_1m_2^2}{k}\left|(k_2m_1+km_2)(k_3m_2+k_2m_3)-\right.$$

$$\left. e^{2ik_2(x_2-x_1)}(k_2m_1-km_2)(k_2m_3-k_3m_2)\right|^{-2} \tag{3.24}$$

Fazendo algumas simplificações algébricas:

$$T(k) = \frac{16k_3k_2m_1m_2^2}{k}\left[(k_2m_1-km_2)^2(k_2m_3-k_3m_2)^2+(k_2m_1+km_2)^2(k_3m_2+k_2m_3)^2-\right.$$

$$\left. 2(k_2m_1-km_2)(k_2m_3-k_3m_2)(k_2m_1+km_2)(k_3m_2+k_2m_3)\cos\left[2k_2(x_2-x_1)\right]\right]^{-1} \tag{3.25}$$

Rearranjando a equação acima:

$$T(k) = \frac{16k_3k_2m_1m_2^2m_3}{k}\left[\left[(k_2m_1-km_2)(k_2m_3-k_3m_2)-(k_2m_1+km_2)(k_3m_2+k_2m_3)\right]^2+\right.$$

$$\left.(k_2^2m_3^2-k_3^2m_2^2)(k_2^2m_1^2-k^2m_2^2)\sin\left[k_2(x_2-x_1)\right]^2\right]^{-1} \tag{3.26}$$

Fazendo $k_2 \to -i\rho$ na equação acima obtemos o coeficiente de transmissão para $k < \kappa_0$.

3.1.1 Dependência da probabilidade de transmissão com a massa efetiva

Fazendo $m_1 = m_2 = m_3 = rm_{el}$, onde m_{el} é a massa do elétron livre, o coeficiente de transmissão de uma onda plana com vetor de onda k é dado por:

$$T(k) = \begin{cases} \frac{4k_3k}{(k_3+k)^2}\left[1+\frac{(k^2+\rho^2)(k_3^2+\rho^2))}{\rho^2(k_3^2+k^2)}\sinh^2(a\rho)\right]^{-1} & se \quad k < \kappa_0 \\ \frac{4k_3k}{(k_3+k)^2}\left[1-\frac{(k^2-k_2^2)(k_3^2-k_2^2)}{k_2^2(k_3^2+k^2)}\sin^2(ak_2)\right]^{-1} & se \quad k > \kappa_0 \end{cases} \tag{3.27}$$

Na figura 3.2 se encontra o espectro de transmissão para uma barreira de potencial retangular de altura $V_0 = 9.4eV$ e largura $|x_1 - x_2| = a = 10$ Å, para o caso em que a massa efetiva do elétron é proporcional a massa do elétron livre nas três regiões, onde r é a constante de proporcionalidade.

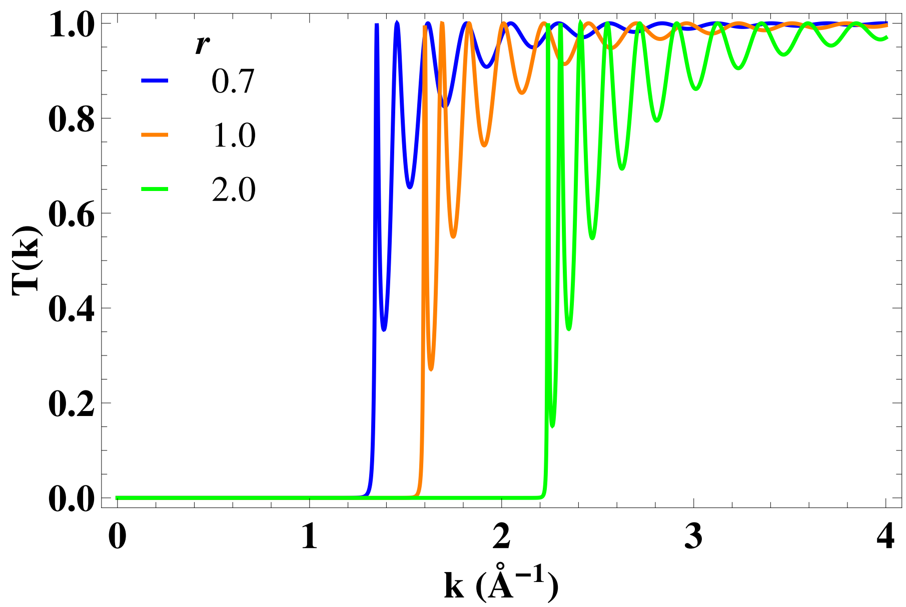
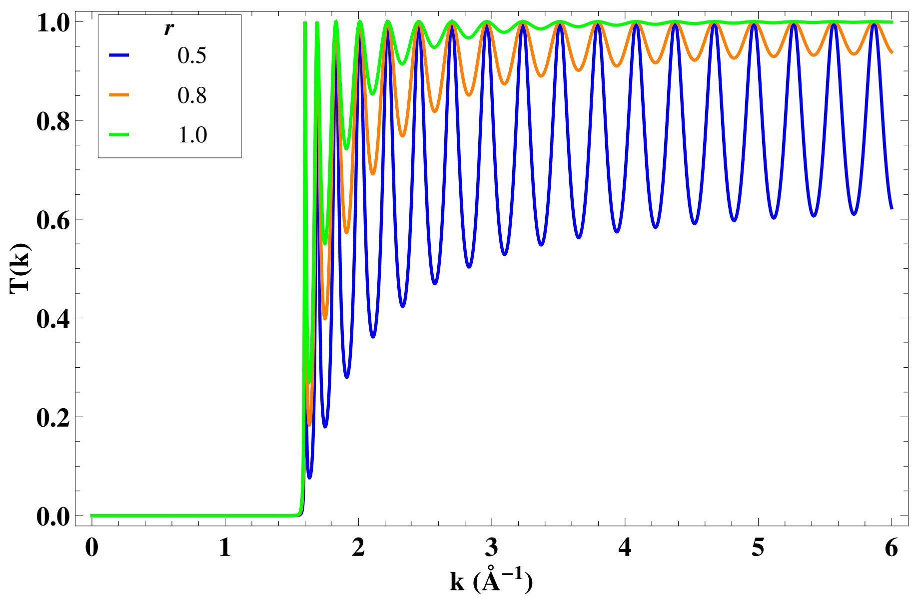


Fig. 3.2: Probabilidade de transmissão em função de k. Considerando o caso em que a massa efetiva do elétron é proporcional a massa do elétron livre nas três regiões, onde r é a constante de proporcionalidade.

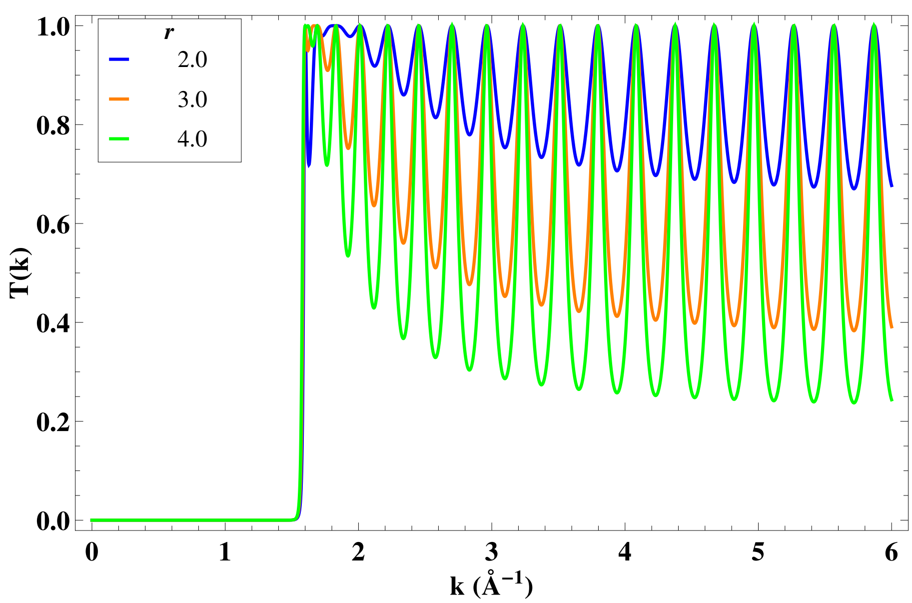
Da figura 3.2, na região $k > \kappa_0$, observa-se que o coeficente de transmissão pode ser menor do que um, ou seja, mesmo estando na região com $E > V_0$ há probabilidade da partícula ser refletida. Os valores de k para os quais $T(k) = 1$ ocorrem quando $ka = n\pi$, onde n é um número inteiro positivo. A partícula é 100% transmitida quando a largura da barreira é exatamente igual a um múltiplo inteiro ou semi-inteiro do comprimento de onda de de Broglie da partícula dentro da barreira. Esse é um fenômeno de interferência quântica, no qual ocorre interferência construtiva entre as ondas refletidas em x_1 e x_2. Além disso, nota-se que quanto menor a massa efetiva da partícula menor é o valor de k para o qual a probabilidade de tunelamento torna-se um valor expressivo. Isso decorre do fato de que a probabilidade de tunelamento aumenta na região $E > V_0$, onde E é a energia da partícula incidente, e portanto ao diminuir a massa efetiva da partícula tem-se que o valor de k para o qual isso ocorre diminui.

Considerando agora o caso, $m_1 = m_3 = rm_{el}$ e $m_2 = m_{el}$. Na figura 3.3 se encontra o espectro de transmissão para uma barreira de potencial de altura $V_0 = 9.4eV$, de largura $a = 10$ Å.

Da figura 3.3 observa-se que ao variar a massa efetiva da partícula nas regiões 1 e 3 varia-se a amplitude das oscilações. Na figura 3.3(a) ao diminuir o parâmetro r a amplitude de oscilação aumenta, já na figura 3.3(b) ao aumentar o parâmetro r a amplitude de oscilação aumenta. Isso decorre do descasamento (*mismatching*) da função de onda nas diferentes regiões do potencial devido à diferença da massa entre essas regiões. Além disso, o período de oscilação do coeficiente de transmissão não se altera. Isso ocorre pois o período leva em conta o comprimento de onda



(a) $r \leq 1$



(b) $r > 1$

Fig. 3.3: Probabilidade de transmissão em função de k considerando $m_1 = m_3 = rm_{el}$ e $m_2 = m_{el}$

da partícula na região da barreira que não se altera.

Considerando a massa efetiva da partícula diferente nas três regiões, $m_1 = r_1 m_{el}$, $m_2 = m_{el}$ e $m_3 = 2m_{el}$. Na figura 3.4 se encontra o espectro de transmissão para uma barreira de potencial de altura $V_0 = 9.4eV$, de largura $a = 10$ Å e observa-se que na região de oscilação o valor máximo do coeficiente de transmissão atinge o valor unitário.

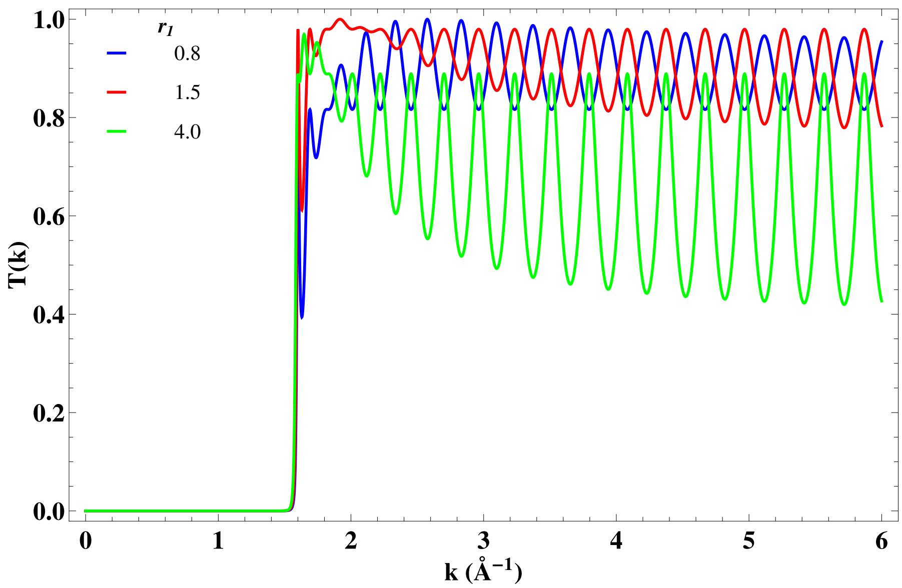


Fig. 3.4: Probabilidade de transmissão em função de k, considerando $m_1 = r_1 m_{el}$, $m_2 = m_{el}$ e $m_3 = 2m_{el}$

3.2 Barreira de potencial linear assimétrica

A barreira de potencial linear assimétrica é especificada pela presença de um potencial linear numa região finita do espaço, como indicada na figura 3.5.

A barreira de potencial linear assimétrica é descrita matematicamente por:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & se \quad x < x_1 \quad \text{Região 1} \\ V_0 + \left(\frac{V_1 - V_0}{x2 - x1}\right) x & se \quad x_1 \leq x < x_2 \quad \text{Região 2} \\ -V_2 & se \quad x \geq x_2 \quad \text{Região 3} \end{cases} \tag{3.28}$$

Nas regiões 1 e 3, a solução da equação de Schrödinger são ondas planas se movendo da direita para a esquerda e ao contrário, descritas pelas equações 3.3 e 3.7, respectivamente.

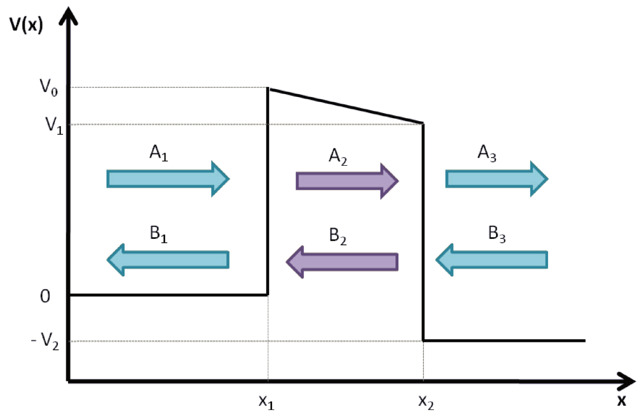


Fig. 3.5: Perfil de uma barreira de potencial linear assimétrica.

Região 2

Na região 2, fazendo as seguintes mudanças de variáveis: $\beta = V_1/V_0$ e $\eta = 1 - \beta$, pode-se reescrever o potencial como: $V(x) = V_0\left(1 - \frac{\eta}{a}x\right)$. Assim nesta região a equação de Schrödinger é dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{d^2\Psi_2(x)}{dx^2} + V_0\left(1 - \frac{\eta}{a}x\right)\Psi_2(x) = E\Psi_2(x), \tag{3.29}$$

onde $k_0^2 = \frac{2m_2V_0}{\hbar^2}$. A equação acima pode ser reescrita na forma abaixo:

$$\frac{d^2\Psi_2(x)}{dx^2} - \left(k_0^2 - k^2 - \frac{k_0^2\eta}{a}x\right)\Psi_2(x) = 0. \tag{3.30}$$

Definindo $\xi = \xi(x) = \alpha\left(1 - \epsilon^2 - \frac{\eta}{a}x\right)$, $\epsilon = \frac{k}{k_0}$ e $\alpha = \left(\frac{k_0 a}{\eta}\right)^{2/3}$ pode-se reescrever a equação 3.30:

$$\frac{d^2\Psi_2(\xi)}{d\xi^2} - \xi\Psi_2(\xi) = 0 \tag{3.31}$$

A solução da equação acima é dada pelas funções de Airy (Função de Bessel Modificada de ordem 1/3, [27]). Dessa forma, a solução da equação na região com potencial inclinado é dada pela combinação das funções de Airy, Ai e Bi:

$$\Psi_2(\xi) = A_2Ai[\xi(x)] + B_2Bi[\xi(x)] \tag{3.32}$$

Cálculo do coeficiente de transmissão

Aplicando as condições de contorno 3.10 e 3.11 obtemos que a relação entre as amplitudes das ondas transmitida e incidente é dada pela equação 3.13 onde as matrizes $M_1(x)$ e $M_3(x)$ e suas inversas são dadas pelas equações 3.14, 3.18, 3.15 e 3.19, respectivamente. Portanto, para obter os coeficiente de transmissão para este potencial precisamos encontrar a matriz $M_2(x)$ e a sua inversa.
Da equação 3.32 obtem-se a matriz $M_2(x)$:

$$M_2(x) = \begin{bmatrix} Ai[\xi(x)] & Bi[\xi(x)] \\ \gamma Ai'[\xi(x)] & \gamma Bi'[\xi(x)] \end{bmatrix} \tag{3.33}$$

onde

$$\gamma = \frac{d\xi}{dx} = \frac{-\alpha\eta}{a}. \tag{3.34}$$

A matriz acima pode ser facilmente invertida obtendo a matriz $M_2^{-1}(x)$:

$$M_2^{-1}(x) = \frac{\pi}{\gamma} \begin{bmatrix} \gamma Bi'[\xi(x)] & -Bi[\xi(x)] \\ -\gamma Ai'[\xi(x)] & Ai[\xi(x)] \end{bmatrix} \tag{3.35}$$

Para o cálculo de 3.35 utilizou-se o Wronskiano das funções de Airy [27]:

$$W[Ai[z], Bi[x]] = \frac{1}{\pi} \tag{3.36}$$

Da equação 3.20 nota-se que é necessário apenas o elemento M_{11} para o cálculo do coeficiente de transmissão. Dessa forma utilizando as equações 3.13, 3.14, 3.15, 3.33 e 3.35, o elemento M_{11} após algumas manipulações algébricas é dado por:

$$\begin{aligned} M_{11}(x_1, x_2) = \frac{e^{-i(kx_1 - k_3x_2)}\pi}{2km_2m_3\gamma} & [k_3m_1m_2\gamma(Ai[\xi(x_2)]Bi'[\xi(x_1)] - Bi[\xi(x_2)]Ai'[\xi(x_1)]) + \\ & km_2m_3\gamma(Ai[\xi(x_1)]Bi'[\xi(x_2)] - Bi[\xi(x_1)]Ai'[\xi(x_2)]) + \\ & ikk_3m_2^2(Ai[\xi(x_2)]Bi[\xi(x_1)] - Ai[\xi(x_1)]Bi[\xi(x_2)]) + \\ & im_1m_3\gamma^2(Ai'[\xi(x_1)]Bi'[\xi(x_2)] - Ai'[\xi(x_2)]Bi'[\xi(x_1)])] \end{aligned} \tag{3.37}$$

Definindo as variáveis abaixo:

$$\zeta_1 = Ai[\xi(x_1)]Bi'[\xi(x_2)] - Bi[\xi(x_1)]Ai'[\xi(x_2)] \tag{3.38}$$
$$\zeta_2 = Ai[\xi(x_2)]Bi'[\xi(x_1)] - Bi[\xi(x_2)]Ai'[\xi(x_1)] \tag{3.39}$$
$$\zeta_3 = Ai[\xi(x_2)]Bi[\xi(x_1)] - Ai[\xi(x_1)]Bi[\xi(x_2)] \tag{3.40}$$
$$\zeta_4 = Ai'[\xi(x_1)]Bi'[\xi(x_2)] - Ai'[\xi(x_2)]Bi'[\xi(x_1)] \tag{3.41}$$

podemos reagrupar a equação 3.42, conforme segue:

$$M_{11}(x_1, x_2) = \frac{e^{-i(kx_1 - k_3x_2)}\pi}{2}\left[\zeta_1 + \frac{k_3m_1}{km_3}\zeta_2 + i\frac{k_3m_2}{\gamma m_3}\zeta_3 + i\frac{m_1m_3\gamma}{km_3}\zeta_4\right] \tag{3.42}$$

O complexo conjugado do elemento M_{11} é dado por:

$$M_{11}^*(x_1, x_2) = \frac{e^{i(kx_1 - k_3x_2)}\pi}{2}\left[\zeta_1 + \frac{k_3m_1}{km_3}\zeta_2 - i\left(\frac{k_3m_2}{\gamma m_3}\zeta_3^* + \frac{m_1m_3\gamma}{km_3}\zeta_4^*\right)\right] \tag{3.43}$$

Portanto o produto $M_{11}M_{11}^*$é dado por:

$$M_{11}M_{11}^* = \frac{\pi^2}{4}\left[\left|\zeta_1 + \frac{k_3m_1}{km_3}\zeta_2\right|^2 + \left|\frac{k_3m_2}{\gamma m_3}\zeta_3 + \frac{m_1m_3\gamma}{km_3}\zeta_4\right|^2\right] \tag{3.44}$$

Assim utilizando as equações 3.20 e 3.44 o coeficiente de transmissão em função da voltagem aplicada é dado por:

$$T(k, V_1) = \frac{\pi^2m_1k_3}{4m_3k}\left[\left|\zeta_1 + \frac{k_3m_1}{km_3}\zeta_2\right|^2 + \left|\frac{k_3m_2}{\gamma m_3}\zeta_3 + \frac{m_1m_3\gamma}{km_3}\zeta_4\right|^2\right] \tag{3.45}$$

Dependência do coeficiente de transmissão com V_1

Considerando $m_1 = m_2 = m_3 = m_{el}$. Na figura 3.6 se encontra o espectro de transmissão para uma barreira de potencial linear mantendo os parâmetros $V_0 = 9.4\ eV$, $a = 10$ Å e $V_2 = 0$ fixos. Nota-se que ao diminuir V_1 a amplitude das oscilações do coeficiente de transmissão diminui. No caso em que $V_1 = 0$, o coeficiente de transmissão não apresenta oscilação.

Na figura 3.7 se encontra o espectro de transmissão para uma barreira de potencial linear

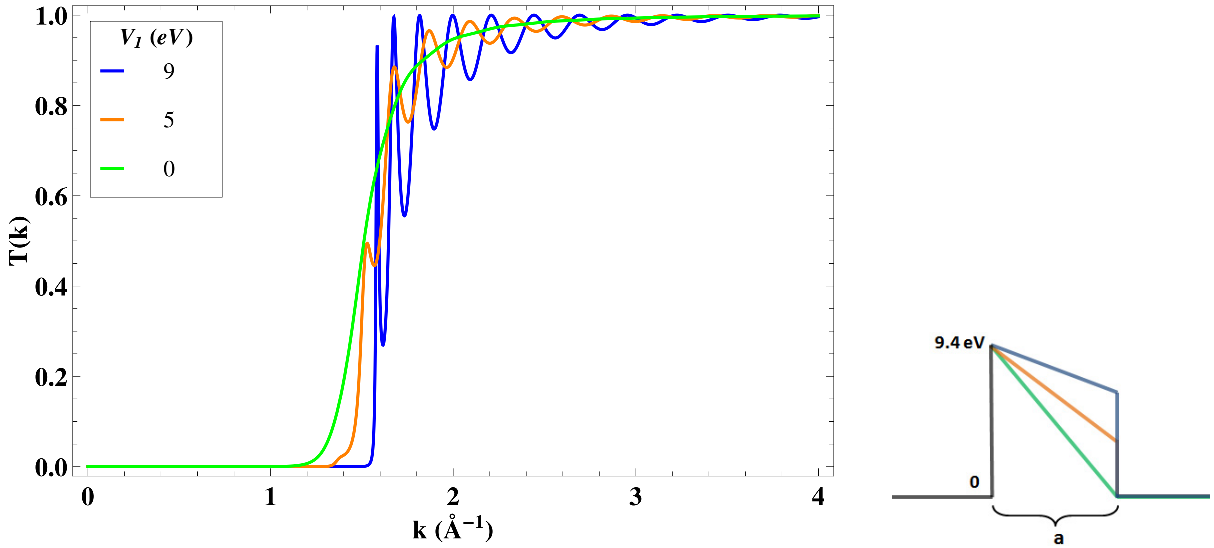


Fig. 3.6: Coeficiente de transmissão em função de k variando o parâmetro V_1.

mantendo os parâmetros $V_0 = 9.4eV$ e $a = 10$ Å fixos e fazendo $V_2 = V_0 - V_1$. Ao introduzir a queda do potencial na região 3, nota-se que mesmo quando $V_1 = 0$ o coeficiente de transmissão apresenta oscilações na região em que a energia da partícula incidente é maior que a altura da barreira.

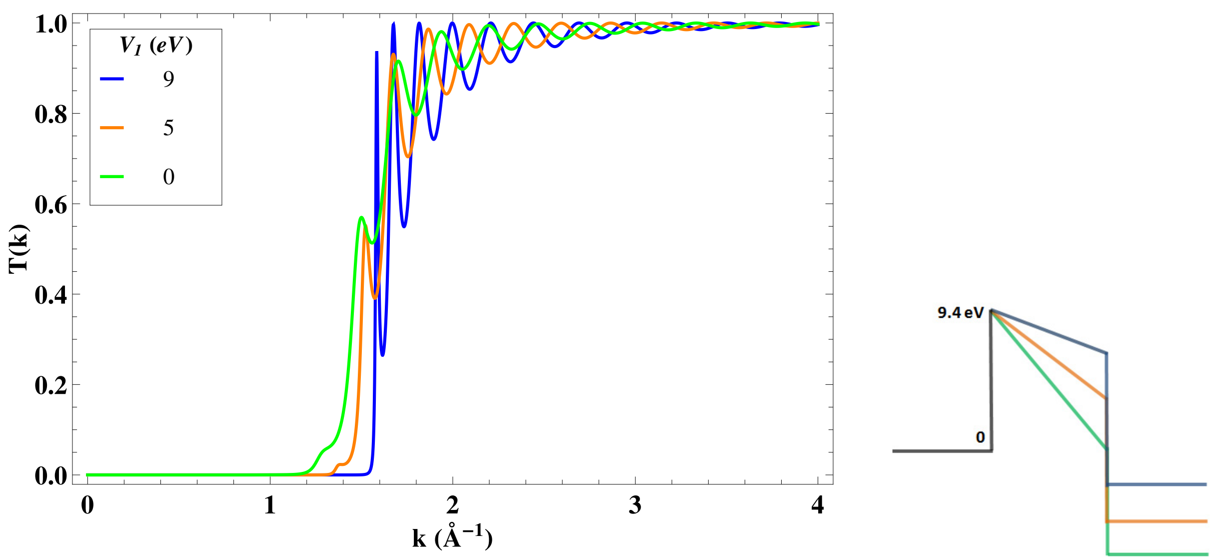


Fig. 3.7: Coeficiente de transmissão em função de k variando o parâmetro V_1 e considerando $V_2 = V_0 - V_1$.

Capítulo 4

Tunelamento de um pacote de onda

Neste capítulo iremos descrever o tunelamento de pacotes de onda por barreiras de potencial. Iremos considerar dois tipos de pacotes de onda: pacotes de onda gaussianos e pulsos (que são funções cosseno cortadas de largura l). Além disso serão considerados dois tipos de barreiras de potencial, barreiras quadradas e barreiras lineares.

4.1 Pacote de onda Gaussiano

4.1.1 Função de onda no espaço k

A condição inicial assumida foi um pacote de onda Gaussiano restrito ao lado esquerdo da barreira cuja largura espacial é σ e está centrado em $x = x_0$, onde $x_0 < 0$ está longe da barreira, e $p_0 = \hbar k_0$ é o momento médio do pacote de onda. Este pacote de onda pode ser descrito por:

$$\Psi(x, t = 0) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}\sigma^{\frac{1}{2}}} e^{\frac{-(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} e^{ik_0 x} \tag{4.1}$$

Utilizando a equação 2.36 pode-se escrever a função de onda incidente no espaço k dada por:

$$\phi(k, t = 0) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}\sigma_k^{\frac{1}{2}}} e^{\frac{-(k-k_0)^2}{2\sigma_k^2}} e^{ix_0(k-k_0)} \tag{4.2}$$

onde $\sigma_k = 1/\sigma$, é a largura do pacote no espaço k. O valor médio da energia do pacote é dada por:

$$E_m = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \tag{4.3}$$

Substituindo 4.2 na equação 2.39 a probabilidade de transmissão de um pacote de onda gaussiano é dado por:

$$PT = \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma_k} \int_0^\infty e^{\frac{-(k-k_0)^2}{\sigma_k^2}} T(k)\, dk \tag{4.4}$$

onde $T(k)$ é o coeficiente de transmissão de onda plana com vetor de onda k.

4.1.2 Tunelamento de um pacote gaussiano em uma barreira retangular

Nesta seção descrevemos o tunelamento de um pacote de onda gaussiano incidindo pela esquerda sobre uma barreira de potencial retangular. Consideramos o elétron livre nas três regiões ($m_1 = m_2 = m_3 = m_{el}$) e uma barreira de potencial de altura $V_0 = 9.4\ eV$ e largura $a = 10$ Å. Estudamos os casos em que a energia média do pocote de onda incidente é dada por: $0.85V_0$, $0.95V_0$, $1.05V_0$ e $1.25V_0$.

Substituindo as equações 3.27 na equação 4.4:

$$\begin{aligned} PT = \ & \tfrac{1}{\sqrt{\pi}\sigma_k} \left(\int_0^{\kappa_0} e^{\frac{-(k-k_0)^2}{\sigma_k^2}} \left[1 + \tfrac{(k^2+\rho^2)^2}{2\rho^2 k} \sinh^2(a\rho) \right]^{-1} + \right. \\ & \left. \int_{\kappa_0}^{\infty} e^{\frac{-(k-k_0)^2}{\sigma_k^2}} \left[1 - \tfrac{(k_3^2-k_2^2)^2}{2k_2^2 k} \sin^2(ak_2) \right]^{-1} \right) \end{aligned} \tag{4.5}$$

A integral 4.5 foi calculada numericamente utilizando o pacote de integração numérica do *Mathematica* versão 7. Na figura 4.1 está graficada a probabilidade de tunelamento para um pacote de onda gaussiano em função da largura espacial do pacote. Além disso está graficado o valor do coeficiente de transmissão para uma onda plana com o vetor de onda k_0.

Observa-se que ao aumentar a largura espacial do pacote a probabilidade de tunelamento tende ao valor da probabilidade de tunelamento da onda plana, quanto maior a razão E_m/V_0 mais largo deve ser o pacote gaussiano para que a probabilidade de tunelamento atinja o valor esperado para a onda plana. Para $E_m/V_0 = 0.85$ e $E_m/V_0 = 0.95$, a probabilidade de

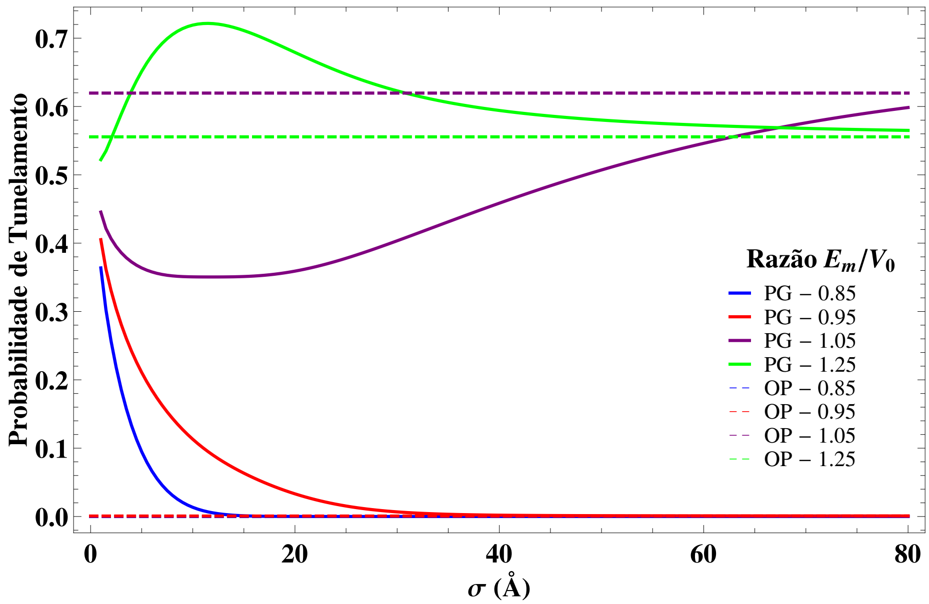


Fig. 4.1: Probabilidade de tunelamento em função da largura espacial do pacote de onda gaussiano (σ), as linhas pontilhadas indicam a probabilidade de tunelamento para a onda plana.

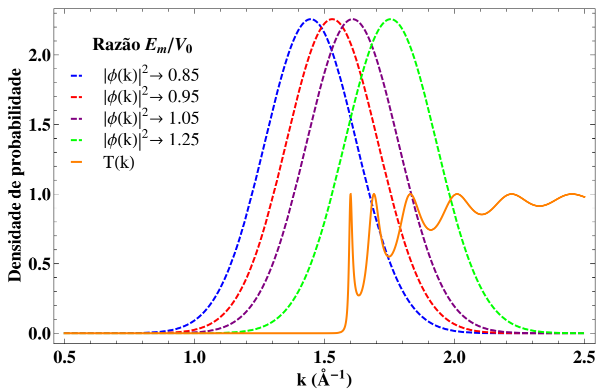
tunelamento atinje o valor da onda plana quando a largura espacial do pacote de onda incidente é da ordem de 10 Å e 30 Å, respectivamente. Já nos casos $E_m/V_0 = 1.05$ e $E_m/V_0 = 1.25$ para que a probabilidade de tunelamento atinja o valor da onda plana a largura dos pacotes são da ordem de 80 Å.

Na figura 4.2(a) está graficada a sobreposição da distribuição de probabilidade em função de k para um pacote gaussiano de largura espacial 4 Å ($\sigma_k = 0.25\text{Å}^{-1}$) e a probabilidade de transmissão de uma onda plana, $T(k)$. Ao aumentar a razão E/V_0, aumentamos o vetor de onda médio do pacote (k_0), e com isso o pacote no espaço k fica centrado numa região não nula de $T(k)$. Assim temos que ao aumentar o momento médio do pacote aumentamos a área de sobreposição entre as duas funções aumentando a probabilidade de tunelamento.

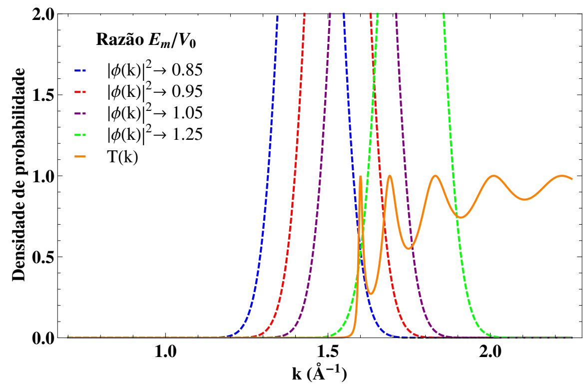
Considerando um pacote com largura espacial 10 Å (figura 4.2(b)), quando a energia média do pacote é menor qua a altura da barreira ($E/V_0 < 1$) a região de sobreposição entre as funções é pequena e com isso a probabilidade de tunelamento é pequena, já que a região da distribuição de probabilidade sobreposta com a região não nula de $T(k)$ é pequena. Já ao considerar o caso em que a energia média do pacote é maior que a altura da barreira ($E/V_0 > 1$) a distribuição de probabilidade está sobreposta a uma região de $T(k)$ não nula com isso há o aumento da probabilidade de tunelamento.

Considerando o caso em que a energia média do pacote é menor que a altura da barreira

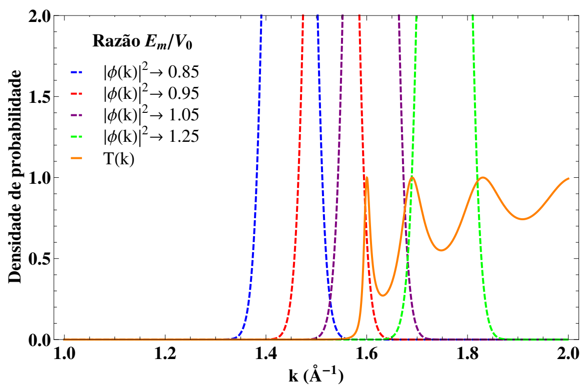
$(E/V_0 < 1)$ ao aumentar a largura espacial do pacote diminui-se a região de sopreposição com $T(k)$ não nulo, como pode ser observado nas figuras 4.2(c) e 4.2(d), fazendo com que a probabilidade de tunelamento do pacote rapidamente caia a zero.



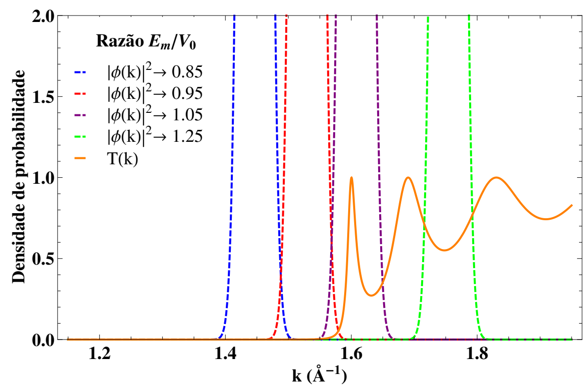
(a) $\sigma = 4$ Å



(b) $\sigma = 10$ Å



(c) $\sigma = 25$ Å



(d) $\sigma = 50$ Å

Fig. 4.2: Probabilidade de transmissão para uma barreira potencial quadrada simétrica e distribuição de probabilidade para um pacote gaussiano

4.1.3 Tunelamento de um pacote gaussiano em uma barreira linear

Nessa seção vamos estudar o tunelamento de pacotes de onda gaussiano ao incidir pela esquerda uma barreira de potencial de altura máxima $V_0 = 9.4\ eV$, de largura $a = 10$ Å, mantendo $V_2 = 0$ e variando o parêmetro V_1, considerando a massa do elétron livre nas três regiões. Estudaremos o caso em a energia média do pacote incidente é tanto maior que a barreira de potencial ($E = 1.15V_0$ e $E = 1.05V_0$) quanto menor ($E = 0.95V_0$ e $E = 0.85V_0$). Substituindo 3.45 em 4.4 e fazendo $m_1 = m_2 = m_3 = m_{el}$ e $k = k_3$ obtemos que a probabilidade de tunelamento para um pacote gaussiano em função da largura é dado pela equação 4.6, que foi calculada numericamente.

$$PT = \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma_k}\int_0^\infty e^{-\frac{(k-k_0)^2}{\sigma_k^2}}\frac{\pi^2}{4}\left[\left|\zeta_1+\zeta_2\right|^2+\left|\frac{k}{\gamma}\zeta_3+\frac{m\gamma}{k}\zeta_4\right|^2\right] \tag{4.6}$$

Considerando um pacote de onda gaussiano localizado cuja largura espacial 3.6 Å. A probabilidade de transmissão em função de V_1 está graficada na figura 4.3. É possível observar que ao aumentar o parâmetro V_1 a probabilidade de tunelamento diminui. Além disso ao aumentar a razão E/V_0 há um aumento da probabilidade de tunelamento.

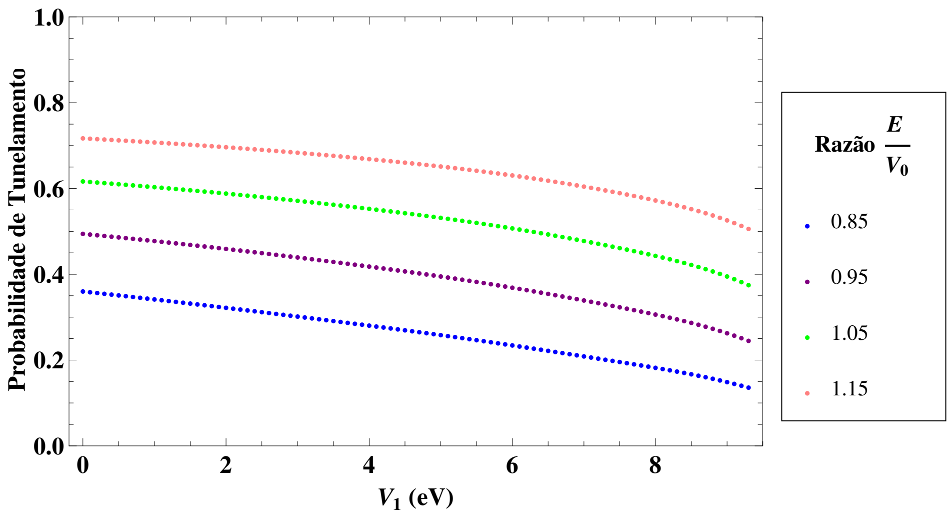


Fig. 4.3: Probabilidade de tunelamento em função de V_1, para pacotes de onda gaussiano com largura $\sigma = 3.6$ Å.

Para efeitos de comparação iremos graficar na figura 4.4 a distribuição de probabilidade do pacote gaussiano no espaço k ($\sigma = 3.6$ Å) e o coeficiente de transmissão da onda plana, $T(k, V_1)$, para $V_1 = 0$, $3eV$, $6eV$ e $9eV$. Nota-se que ao aumentar V_1 há um aumento na oscilação do coeficiente de transmissão da onda plana, o que diminui a área de sopreposição entre a densidade de probabilidade do pacote de onda no espaço k e o coeficiente de transmissão da onda plana. Com isso a probabilidade de transmissão do pacote de onda gaussiano diminui com o aumento de V_1.

A probabilidade de transmissão de um pacote gaussiano de largura espacial 49.6 Å em função de V_1 está graficada na figura 4.5. Observa-se que a probabilidade de tunelamento possui um comportamento oscilatório em função de V_1. Pode-se observar que ocorrem cruzamentos na probabilidade de transmissão nos casos em que a razão E_m/V_0 é maior do que um.

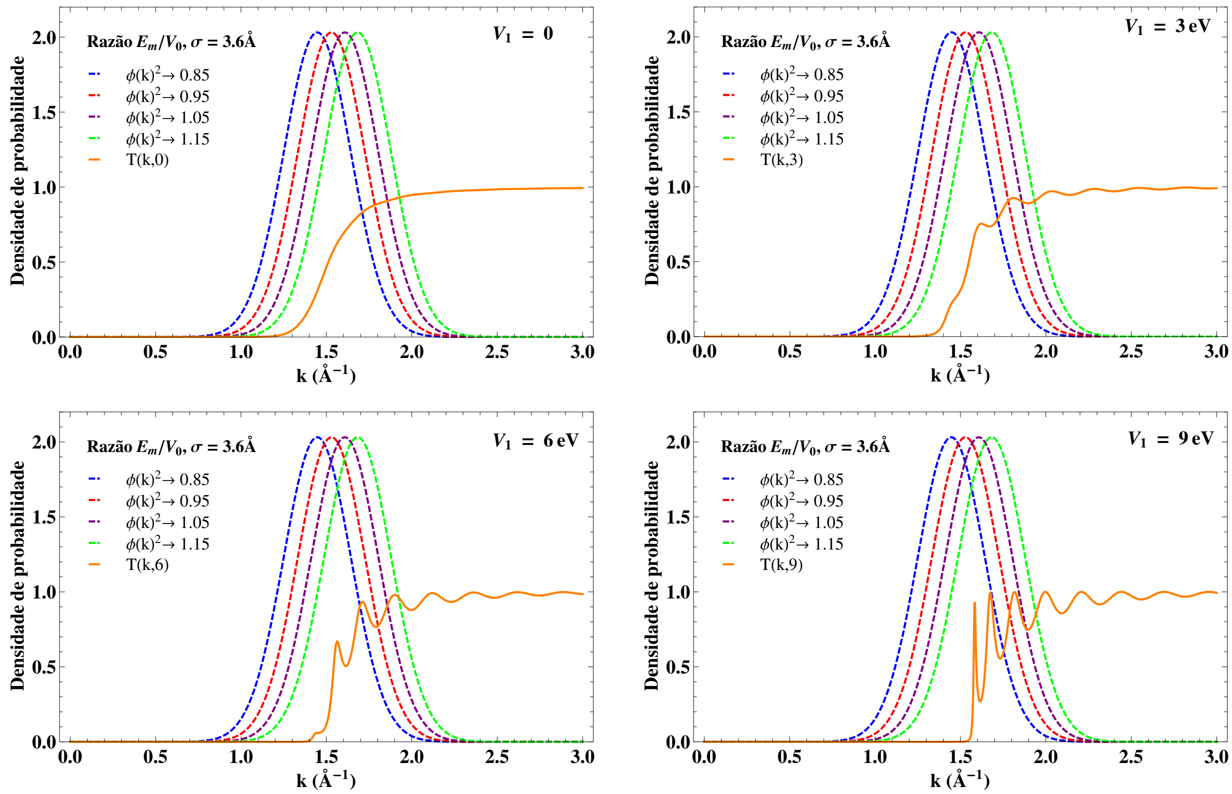


Fig. 4.4: Probabilidade de transmissão para uma barreira com V_1 e distribuição de probabilidade para um pacote gaussiano de largura espacial $\sigma = 3.6$ Å

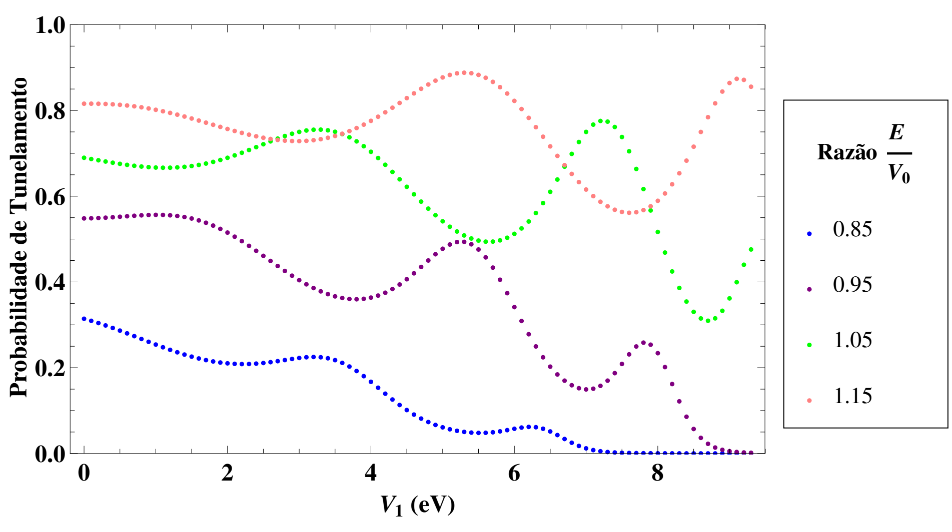


Fig. 4.5: Probabilidade de tunelamento em função de V_1, para pacotes de onda gaussiano com largura $\sigma = 49.6$ Å e diferentes energia médias.

Da seção 4.1.2 tem-se que a probabilidade de tunelamento de um pacote gaussiano com largura espacial da ordem de 50 Å tende ao valor da onda plana. Com isso para verificar se a probabilidade de tunelamento em função do parâmetro V_1 se comporta como uma onda plana na figura 4.6 estão sobrepostos o coeficiente de transmissão uma onda plana em função de V_1 e a probabilidade de tunelamento de um pacote gaussiano com largura espacial 49.6 Å.

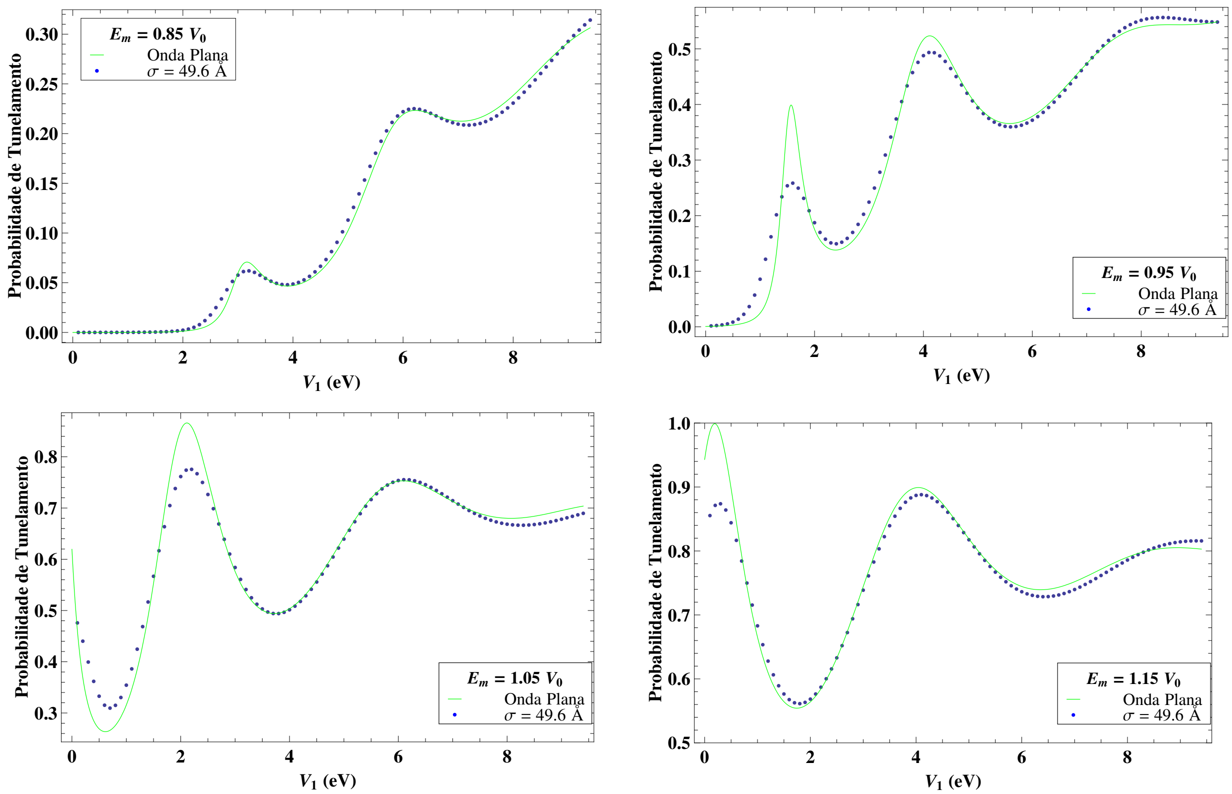


Fig. 4.6: Probabilidade de tunelamento para uma onda plana em função de V_1 (linha cheia) e a probabilidade de tunelamento de um pacote de onda gaussiano de largura espacial 49.6 Å(pontilhado)

4.2 Pacote de onda: Pulso

4.2.1 Função de onda incidente no espaço k

A condição inicial assumida foi um pulso restrito ao lado esquerdo da barreira de largura $l = |a - b|$, onde $a < b < 0$, e $p_0 = \hbar k_0$ é o momento médio do pacote de onda. Como indicado na figura 4.7, o ponto inicial do pulso é mantido fixo em $b = -\frac{\pi}{2k_0}$ de modo que $\cos(k_0 b) = 0$, já o ponto final do pulso a é variado.

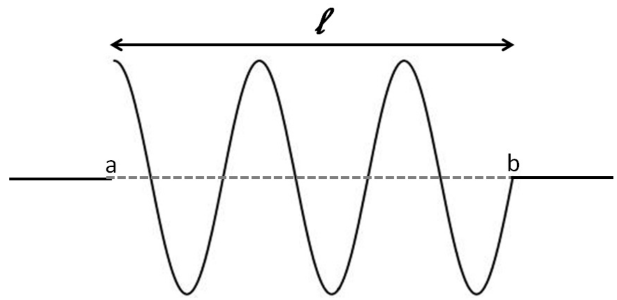


Fig. 4.7: Representação esquemática do pulso.

Este pulso pode ser descrito matematicamente por:

$$\Psi_{inc}(x,0) = \begin{cases} A\cos(k_0 x) & a < x < b \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \tag{4.7}$$

Utilizando a equação 2.36 pode-se escrever a função de onda incidente no espaço k é dado por:

$$\begin{aligned} \phi_{inc}(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \Psi_{inc}(x,0) dk \\ &= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_a^b e^{-ikx} \cos k_0 x \\ &= \frac{A}{2\sqrt{2\pi}} \int_a^b e^{-i(k-k_0)x} + e^{-i(k+k_0)x} \\ &= \frac{A}{2i\sqrt{2\pi}} \left[\frac{e^{-i(k-k_0)b} - e^{-i(k-k_0)a}}{k_0 - k} - \frac{e^{-i(k+k_0)b} - e^{-i(k+k_0)a}}{k_0 + k} \right] \end{aligned} \tag{4.8}$$

onde A é a constante de normalização e é dada por:

$$|A| = \left[b - a \frac{\sin(k_0 b) - \sin(k_0 a)}{2k_0} \right]^{-1/2} \tag{4.9}$$

Após algumas simplificações e manipulações algébricas a equação 4.8 pode ser reescrita:

$$\phi_{inc}(k) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-ika}\left[-ik\cos(k_0 a) + k_0 \sin(k_0 a)\right] + e^{-ikb}\left[ik\cos(k_0 b) - k_0 \sin(k_0 b)\right]}{k^2 - k_0^2}. \tag{4.10}$$

Considerando o pulso da figura 4.7, no qual $b = -\frac{\pi}{2k_0}$ e introduzindo $a = -\frac{\pi}{2k_0} - l$, onde l é a largura do pulso temos que:

$$\begin{aligned}
\phi_{inc}(k,l) =& \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{\frac{ik\pi}{2k_0}} e^{ikl}\left[ik\sin(k_0 l) + k_0\cos(k_0 l)\right] + e^{\frac{ik\pi}{2k_0}} k_0}{k^2 - k_0^2} \\
=& e^{\frac{ik\pi}{2k_0}} \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{ikl}\left[ik\sin(k_0 l) + k_0\cos(k_0 l)\right] + k_0}{k^2 - k_0^2}
\end{aligned} \tag{4.11}$$

Logo temos:

$$|\phi_{inc}(k,l)|^2 = \frac{|A|^2}{2\pi} \frac{\left|e^{ikl}\left[ik\sin(k_0 l) + k_0\cos(k_0 l)\right] + k_0\right|^2}{k^2 - k_0^2} \tag{4.12}$$

Após algumas simplificações algébricas temos:

$$|\phi_{inc}(k,l)|^2 = \frac{|A|^2}{2\pi} \frac{k^2\sin^2(k_0 l) + \cos^2(k_0 l) - 2kk_0\sin(k_0 l)\sin(k_l) + 2k_0\cos(k_0 l)\cos(kl)}{(k^2 - k_0^2)^2} \tag{4.13}$$

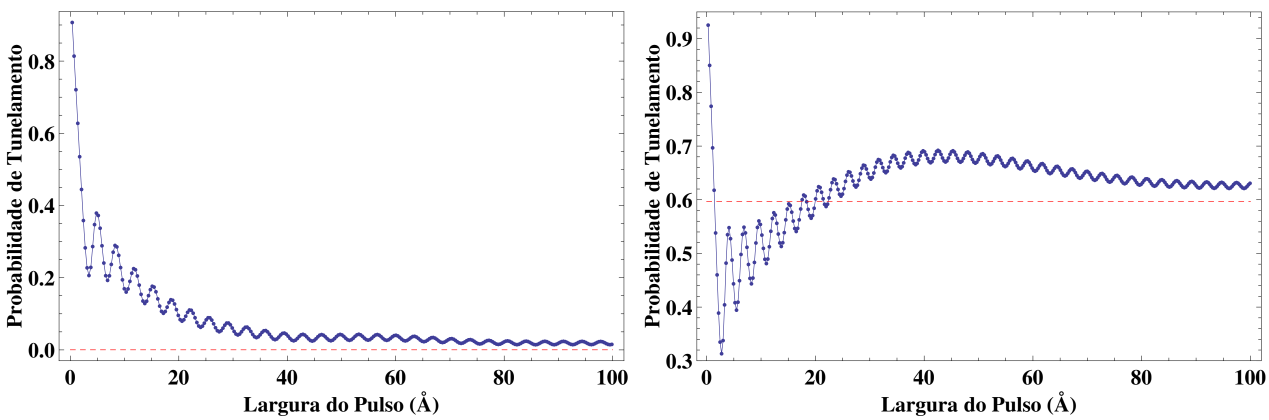
Assim utilizando a equação 2.38 obtemos que a probabilidade de transmissão do pulso é dada por:

$$\begin{aligned}
T_k(l) &= \int_0^\infty T(k)\,|\phi_{inc}(k,l)|^2 \\
&= \frac{|A|^2}{2\pi} \int_0^\infty T(k) \frac{k^2\sin^2(k_0 l)}{(k^2 - k_0^2)^2} + \int_0^\infty T(k) \frac{\cos^2(k_0 l)}{(k^2 - k_0^2)^2} - \\
&\quad \int_0^\infty T(k) \frac{2kk_0\sin(k_0 l)\sin(k_l)}{(k^2 - k_0^2)^2} + \int_0^\infty T(k) \frac{2k_0\cos(k_0 l)\cos(kl)}{(k^2 - k_0^2)^2} \\
&= \frac{|A|^2}{2\pi} \Bigg[\sin^2(k_0 l) \int_0^\infty T(k) \frac{k^2}{(k^2 - k_0^2)^2} + \cos^2(k_0 l) \int_0^\infty T(k) \frac{1}{(k^2 - k_0^2)^2} - \\
&\quad 2k_0\sin(k_0 l) \int_0^\infty T(k) \frac{k\sin(kl)}{(k^2 - k_0^2)^2} + 2k_0\cos(k_0 l) \int_0^\infty T(k) \frac{\cos(kl)}{(k^2 - k_0^2)^2}\Bigg]
\end{aligned} \tag{4.14}$$

4.2.2 Transmissão de um pulso por uma barreira quadrada

Nesta sub-seção vamos analisar a probabilidade de tunelamento em função da largura do pulso para barreiras retangulares de altura $V_0 = 4\ eV$. Para esse estudo será considerada a massa do elétron livre nas três regiões.

Na figura 4.8 está graficada a probabilidade de tunelamento do pulso em função da largura do pulso, considerando a energia menor do que a altura da barreira (4.8(a)) e considerando a energia maior do que a altura da barreira (4.8(b)) em uma barreira de potencial de largura $l = 10$ Å.



(a) $E_m = 0.85V_0$ (b) $E_m = 1.25V_0$

Fig. 4.8: Probabilidade de tunelamento em função da largura do pulso. A linha pontilhada vermelha indica a probabilidade de tunelamento da onda plana.

Da figura 4.8 tem-se que a probabilidade de tunelamento do pulso em função da largura (l) apresenta um comportamento oscilatório e ao aumentar a largura do pulso a probabilidade de tunelamento tende ao coeficiente de transmissão da onda plana com vetor de onda k_0. Além disso, ao aumentar a largura do pulso a amplitude de oscilação diminui. Com o intuito de estudar o período de oscilação na figura 4.9 está gráficada o período de oscilação em função de k_0, variando a razão E_m/V_0 entre 0.65 e 2.0.

O período em função de k_0 pode ser ajustado pela curva especificada pela equação 4.15 e fazendo o ajuste foi obtido $\alpha \approx \pi$, como indicado na tabela 4.1. Portanto, o período é metade do comprimento de onda de De Broglie.

$$P = \frac{\alpha}{k} \tag{4.15}$$

Na figura 4.10 está graficada a probabilidade de transmissão de um pulso com largura fixa em função da razão E_m/V_0, e também está graficado o coeficiente de transmissão de uma onda

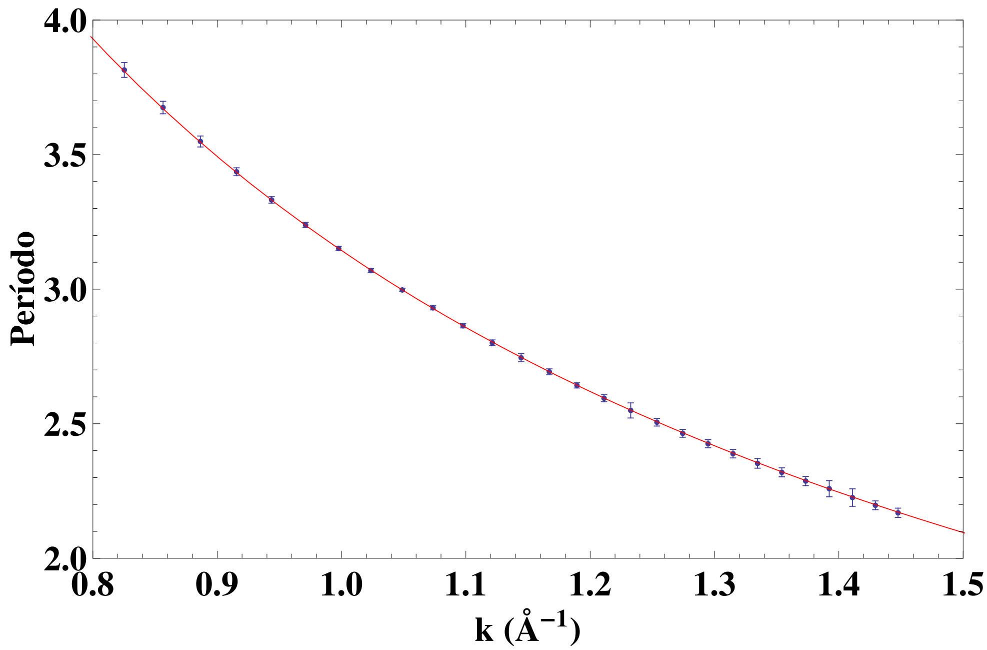


Fig. 4.9: Período de oscilação em função de k_0.

plana. Ao aumentar a largura do pulso a probabilidade de tunelamento tende ao coeficiente de transmissão de uma onda plana (linha verde na figura 4.10).

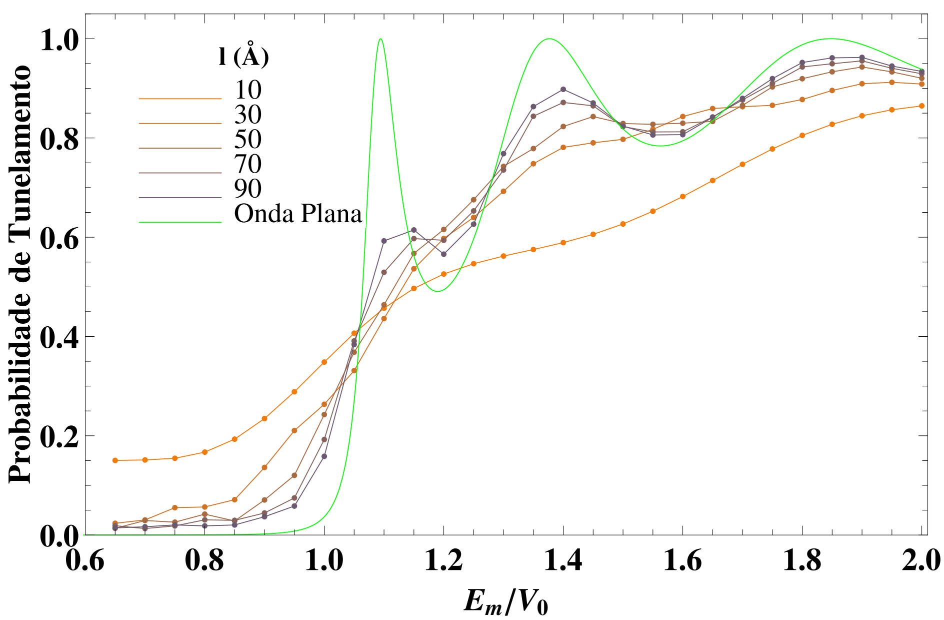
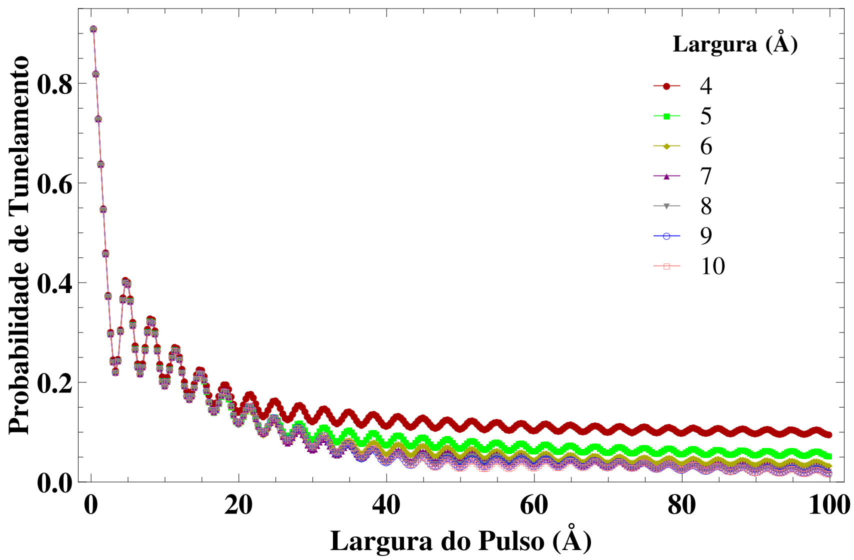


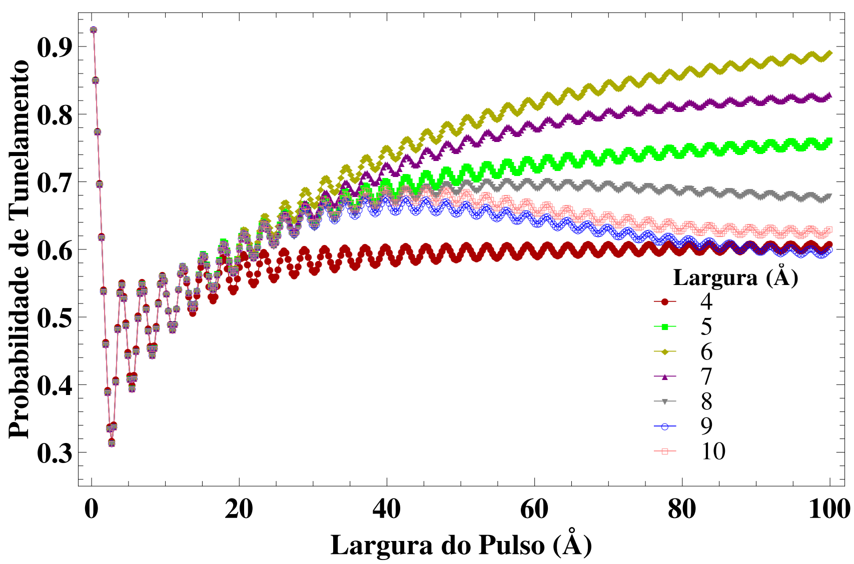
Fig. 4.10: Probabilidade de transmissão em função da razão E/V_0, variando a largura do pulso. A linha verde indica o coeficiente de transmissão da onda plana.

Dependência com a largura da barreira

Para verificar a dependência da probabilidade de tunelamento com a largura da barreira, foram realizados os mesmos cálculos variando a largura da barreira entre 4 Å e 10 Å. Na figura 4.11 mostra-se a probabilidade de tunelamento em função da largura do pulso variando a largura da barreira, considerando a energia menor do que a altura da barreira (figura 4.11(a)) e considerando a energia maior do que a altura da barreira (figura 4.11(b)).



(a) $E_m = 0.85V_0$



(b) $E_m = 1.25V_0$

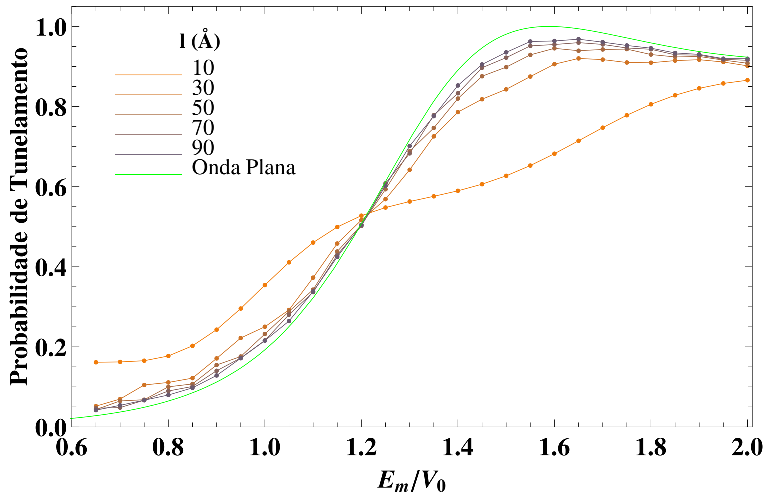
Fig. 4.11: Probabilidade de tunelamento em função da largura do pulso, variando a largura da barreira de potencial.

Da figura 4.11, tem-se que o comportamento oscilatório da probabilidade de tunelamento independe da largura da barreira. Na tabela 4.1 se encontra os valores do ajuste da curva 4.15 ao variar a largura barreira de potencial entre 4 Å e 10 Å e obtem-se que o parâmetro α independente da largura da barreira. O período de oscilação da probabilidade de tunelamento em função da largura é metade do comprimento de de Broglie.

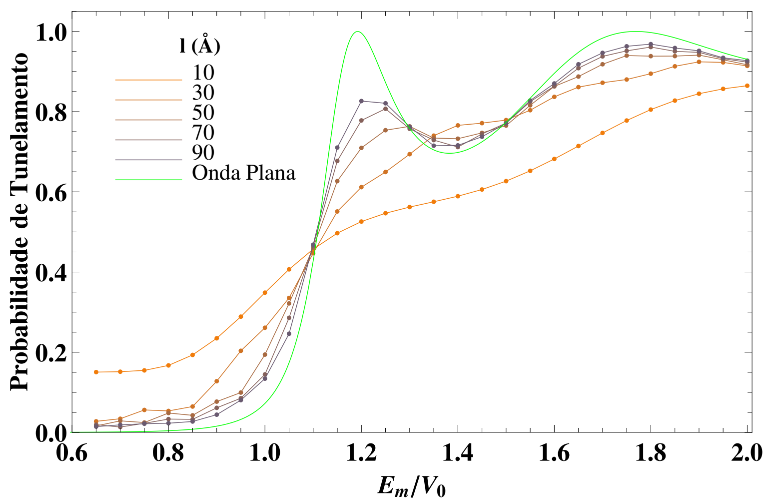
Tab. 4.1: Valor do parâmetro α ao ajustar a curva do período em função de k_0, variando a largura da barreira de potencial.

Largura da barreira (Å)	4	5	6	7	8	9	10
α	3.144	3.144	3.143	3.143	3.143	3.144	3.143
$\Delta\alpha$	0.005	0.005	0.005	0.005	0.005	0.004	0.004

Na figura 4.12 está graficada a probabilidade de transmissão de um pulso com largura fixa em função da razão E_m/V_0 e o coeficiente de transmissão de uma onda plana. Nas figuras 4.12(a) e 4.12(b) a largura da barreira de potencial é 4 Å e 7 Å, respectivamente. Ao aumentar a largura do pulso a probabilidade de tunelamento tende ao coeficiente de transmissão de uma onda plana por esta barreira. Além disso ao diminuir a largura da barreira a probabilidade de tunelamento atinge o coeficiente de transmissão da onda plana com um pulso de largura menor. Para barreira de largura 4Å, figura 4.12(a), ocorre a melhor sobreposição entre o coeficiente de transmissão da onda plana e a probabilidade de tunelamento para um pulso com largura 90 Å.



(a) Largura da Barreira: 4 Å



(b) Largura da Barreira: 7 Å

Fig. 4.12: Probabilidade de transmissão em função da razão E_m/V_0. A linha verde indica o coeficiente de transmissão da onda plana.

Capítulo 5

Estimativa da magnetorresistência

Neste capítulo faremos estimativas do efeito de magnetorresistência em uma junção túnel magnética cujas camadas ferromagnéticas são Fe e a camada isolante de Al_2O_3. Para o cálculo consideramos densidades de estados realísticas em metais ferromagnéticos (tabela 5.1 [28]), onde a razão m_M/m_m foi calculada utilizando a equação 2.46. A camada isolante tem uma espessura de 10 Å e a altura efetiva da barreira de potencial é 9.4 eV [29].

Tab. 5.1: Densidade de estados no nível de Fermi para spins M e m, energia do nível de Fermi em eV, razão entre densidade de estados (equação 2.45) e massa efetiva (equação 2.46)

$D_M(E_F)$	$D_m(E_F)$	$E_F(eV)$	$\frac{D_M(E_F)}{D_m(E_F)}$	$\frac{m_M}{m_m}$
11.29	3.35	7.64	3.37	2.30

No modelo de Jullière, sessão 2.2.1, verificou-se que o valor máximo da TMR depende essencialmente da DOS dos eletrodos ferromagnéticos, não considerando características da camada isolante e desprezando processos de espalhamento. Para uma MTJ composta pelos eletrodos ferromagnéticos de Fe e pela camada isolante de Al_2O_3, utilizando os valores da tabela 5.1 para a DOS das sub-bandas maioria (M) e minoria (m) obtém-se que nessa teoria o valor máximo da TMR é de aproximadamente 45.5%.

Nas próximas seções será calculada a contribuição dos elétrons s e d para a TMR conforme o modelo discutido na seção 2.6.

5.1 Contribuição dos elétrons *d* na corrente de tunelamento

Para a estimativa da contribuição dos elétrons d na corrente de tunelamento é necessário considerar a separação da banda d em duas sub-bandas de spin maioria M e spin minoria m. A massa efetiva de cada sub-banda é dada por m_M e m_m e o número de onda de Fermi associado a cada sub-banda k_M e k_m é dado por:

$$k_M = \frac{\sqrt{2m_M E_F}}{\hbar} \tag{5.1}$$

$$k_m = \frac{\sqrt{2m_m E_F}}{\hbar} \tag{5.2}$$

Iremos estimar a massa efetiva dos portadores M e m mantendo a razão m_M/m_m constante. Os valores que serão utilizados nessa dissertação se encontram na tabela 5.2, onde $m_j = r_j m_{el}$ ($j = M, m$), e foram escolhidos de modo a ilustrar a dependência das propriedades de transporte e da magnetorresistância com a massa efetiva do elétron.

Tab. 5.2: Valores de r_M e r_m estimados e seus respectivos números de Fermi.

r_m	r_M	k_m	k_M
1.5	3.44	1.73	2.62
2.5	5.74	2.24	3.39

Os elétrons d são simulados por pacotes de onda localizados com largura espacial de 4 Å. Primeiro, iremos estudar o tunelamento de pacotes de onda pela barreira de potencial ao aplicar uma voltagem V. O potencial se deforma numa barreira linear e o nível de Fermi de um dos eletrodos é deslocado por uma quantidade eV em relação ao outro onde e é a carga do elétron, como o indicado na figura 5.1. A voltagem aplicada é variada entre 0 e 2.4 eV. Após esse estudo, iremos estimar a condutância do sistema tanto na configuração P quanto na configuração AP, utilizando as equações 2.42 e 2.43, respectivamente. Por fim iremos estimar o valor da TMR utilizando a equação 2.4.

5.1.1 Massa efetiva dos portadores minoria: $m_m = 2.5m_{el}$

Nesta sub-seção é calculada a magnetoresistência de uma MTJ, cujos eletrodos ferromagnéticos são Fe, estimando a massa efetiva dos portadores minoria $m_m = 2.5m_{el}$. Na tabela 5.1

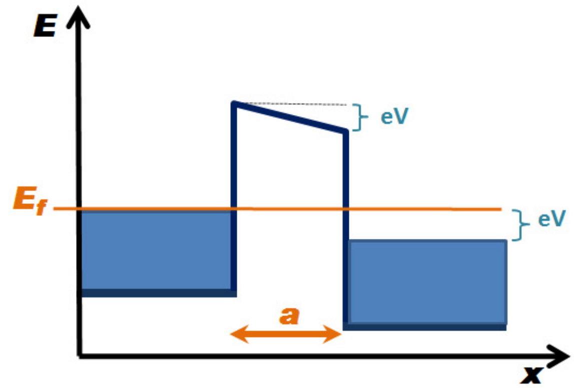
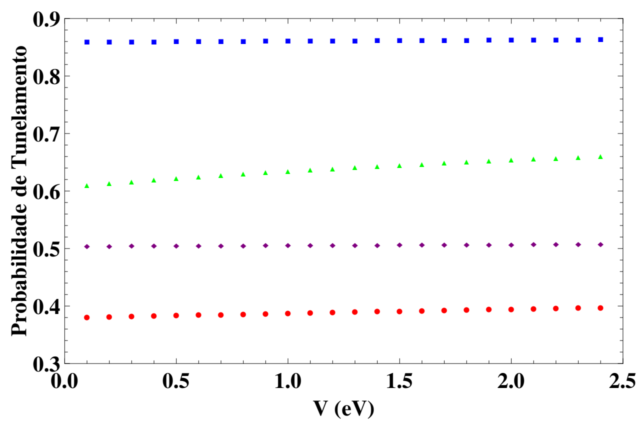


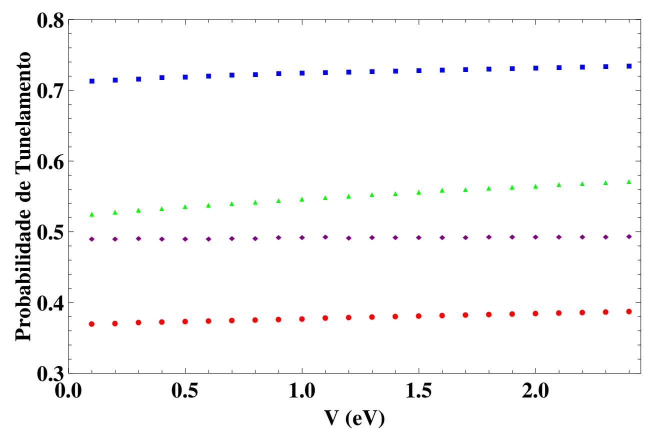
Fig. 5.1: Diagrama da deformação do potencial em uma MTJ ao aplicar uma *bias*.

se encontram os valores da massa efetiva dos portadores maioria e dos vetores de Fermi.

Na figura 5.2 se encontram os gráficos da probabilidade de tunelamento em função da voltagem para um pacote gaussiano incidente com largura espacial $\sigma = 4$ Å (figura 5.2(a)) e a probabilidadde de tunelamento em função da voltagem para pulso de largura $l = 4$ Å (figura 5.2(b)).



(a) Pacote Gaussiano

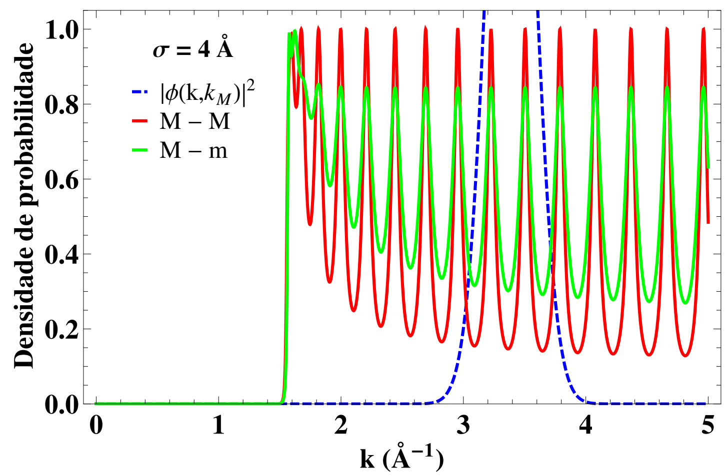


(b) Pulso

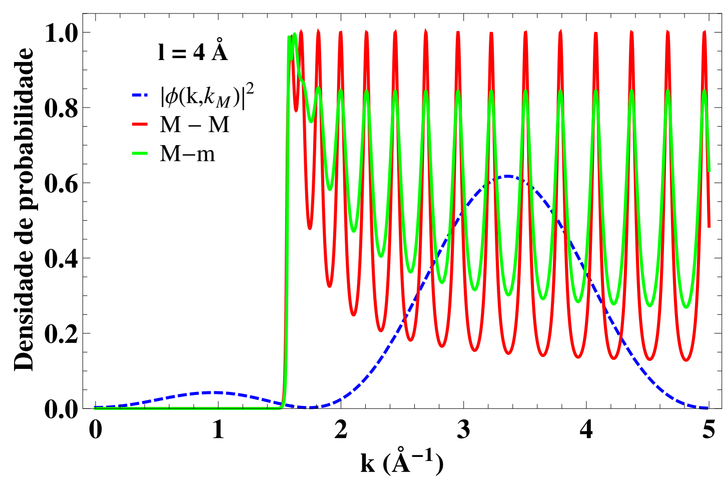
Fig. 5.2: Probabilidade de transmissão em função da voltagem aplicada para um pacote gaussiano e pulso com largura espacial 4 Å - $m_m = 2.5m_{el}$. As cores vermelho, azul, roxo e verde indicam as configurações *M*-*M*, *m*-*m*, *M*-*m* e *m*-*M*, respectivamente.

Da figura 5.2 nota-se que a probabilidade de tunelmento em função da voltagem apresenta o mesmo comportamento tanto para o pacote gaussiano quanto para o pulso. Os casos em que o elétron incidente pertence a sub-banda com spin m têm maior probabilidade de tunelamento, sendo a configuração m - m a de maior probabilidade. A configuração com menor probabilidade de tunelamento é M - M o que contraria o esperado pelo modelo de Jullière, que prediz que a maior probabilidade de tunelamento ocorre na configuração M - M.

Com a finalidade de entendermos o porque da diferença da probabilidade de tunelamento do pulso e do pacote gaussiano vamos estudar a superposição da densidade de probabilide do pacote de onda e o coeficiente de transmissão da onda plana com voltagem aplicada 0.4 eV. Primeiramente, vamos estudar o caso no qual elétron incidente pertence a sub-banda M.



(a) Pacote Gaussiano



(b) Pulso

Fig. 5.3: A linha pontilhada indica a densidade de probabilidade do pacote de onda incidente no espaço k de largura 4 Å, elétron incidente pertence a sub banda M. A linha cheia indica o coeficiente de transmissão da onda plana - $m_m = 2.5m_{el}$

Da figura 5.3(a) tem-se que o coeficiente de transmissão da onda plana na configuração M - M apresenta uma amplitude de oscilação maior do que na configuração M - m, com isso a área de sobreposição na configuração M - m é maior do que na configuração M - M. A oscilação maior é devida ao difícil ajuste (*matching*) entre as funções de onda nas diferentes regiões do potencial para estados com massa efetiva grande. Comparando as figuras 5.3(a) e

5.3(b) nota-se que a densidade de probabilidade no espaço k do pacote de onda gaussiano é mais estreita ao comparar com a do pulso, entretanto, o pico da densidade de probabilidade do pacote gaussiano é mais alto. Assim a área de sobreposição entre densidade de probabilidade no espaço k do pacote de onda gaussiano e o coeficiente de transmissão da onda plana é maior do que a área de sobreposição entre densidade de probabilidade no espaço k do pulso e o coeficiente de transmissão da onda plana. Portanto, qualitativamente pode-se explicar a probabilidade de tunelamento do pacote gaussiano ser maior do que do pulso, além do fato da configuração M - M apresentar a menor probabilidade de tunelamento.

Na figura 5.4 está graficada a superposição da densidade de probabilide do pacote de onda e o coeficiente de transmissão da onda plana com voltagem aplicada 0.4 eV considerando o elétron incidente pertence a sub-banda m.

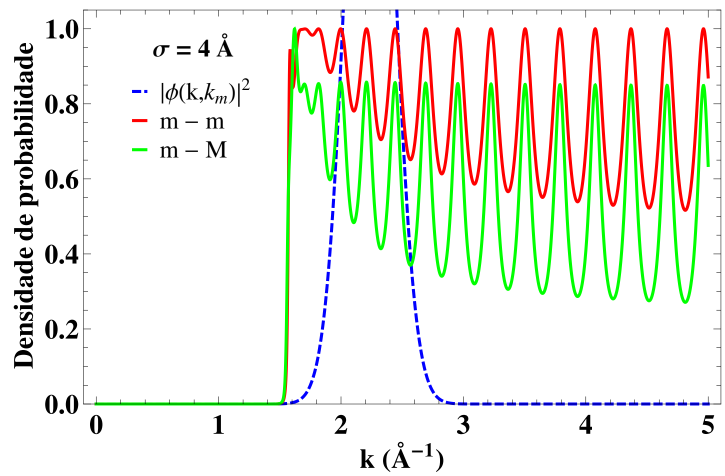
Para elétrons incidentes pertencentes a sub-banda m tem-se que a densidade de probabilidade do pacote de onda no espaço k está centrada em uma região na qual a amplitude de oscilação do coeficiente de transmissão da onda plana é menor ao compararmos com a região na qual os elétrons incidentes pertencentes a sub-banda$M$, figuras 5.4 e 5.3, respectivamente. Assim qualitativamente pode-se explicar o fato da probabilidade de tunelamento dos elétrons m ser maior do que M. Além disso tem-se que o máximo do coeficiente de transmissão, na região de oscilação, na configuração m-m é maior do que na configuração m-M, portanto a área de sobreposição entre a densidade de probabilidade no espaço k e o coeficiente de transmissão é maior na configuração m-m o que implica na probabilidade de tunelamento do pulso maior na configuração m-M.

A probabilidade de tunelamento nas configurações M - m e m - M não é simétrica, isto decorre do fato dos pacotes de onda incidente pertencentes as sub-bandas M e m estarem centrados em k_M e k_m, respectivamente, e o vetor de onda k_M é maior que k_m como indicado na tabela 5.2. Além disso o coeficiente de transmissão da onda plana é diferente nas duas configurações devido à diferença no ajuste (*matching*) entre as funções nas diferentes regiões do potencial.

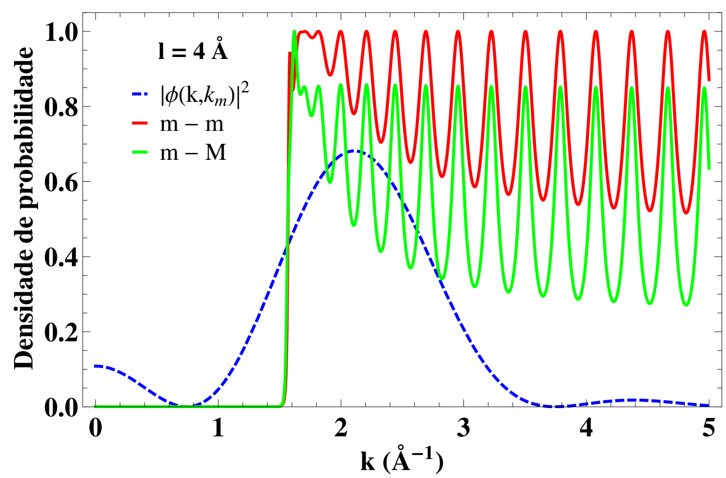
Condutância e TMR

Utilizando as equações 2.42 e 2.43 foi calculada a condutância do sistema na configuração P e AP. Na figura 5.5 se encontra a condutância em função da voltagem para pacotes de ondas incidentes (pacote gaussiano e pulso) com largura espacial de 4 Å.

Da figura 5.5 pode-se observar que os gráficos da condutância em função da voltagem, tanto do pacote gaussiano quanto do pulso, apresentam o mesmo comportamento. Entretanto,



(a) Pacote Gaussiano

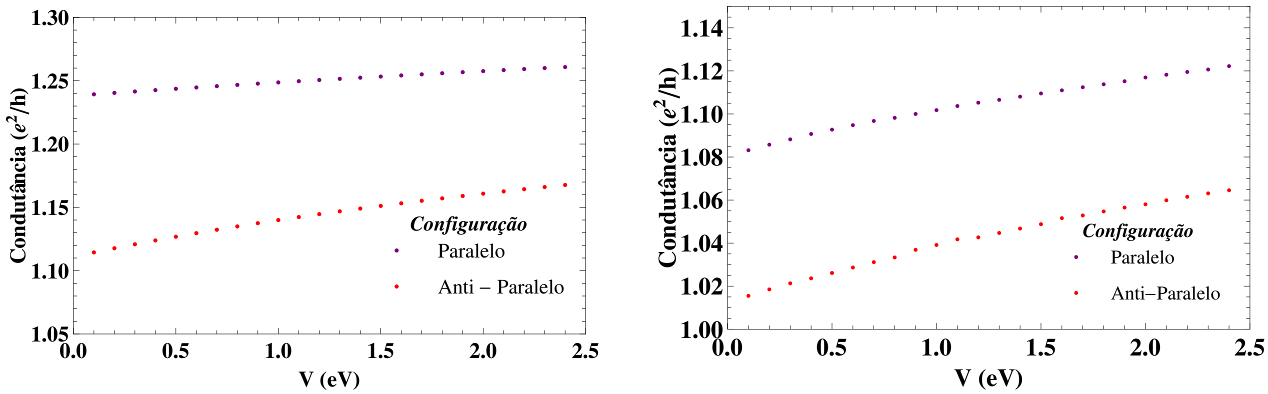


(b) Pulso

Fig. 5.4: A linha pontilhada indica a densidade de probabilidade do pacote de onda incidente no espaço k de largura 4 Å, elétron incidente pertence a sub banda m. A linha cheia indica o coeficiente de transmissão da onda plana - $m_m = 2.5m_{el}$

a condutância ao representar os elétrons d por um pacote de onda gaussiano é maior do que ao simular os elétrons d por um pulso. Além disso nota-se, também, que a diferença entre que a condutância entre a configuração P e AP é maior para o pacote gaussiano.

Por fim é possível estimar o valor da TMR utilizando a equação 2.4. Na figura 5.6 se encontra a TMR em função da voltagem simulando os elétrons d por um pacote de onda gaussiano e simulando os elétrons d por um pulso. Verifica-se que o TMR é maior ao considerar um pacote gaussiano e além disso apresenta uma queda em função da voltagem mais acentuada do que o pulso.



(a) Pacote Gaussiano

(b) Pulso

Fig. 5.5: Condutância em função da voltagem aplicada para um pacote gaussiano e pulso com largura espacial 4 Å - $m_m = 2.5m_{el}$

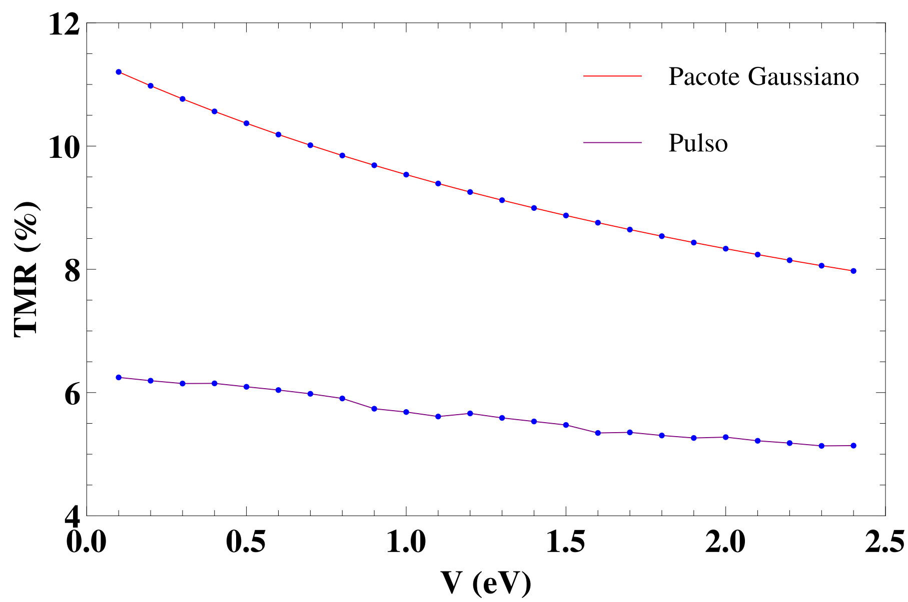
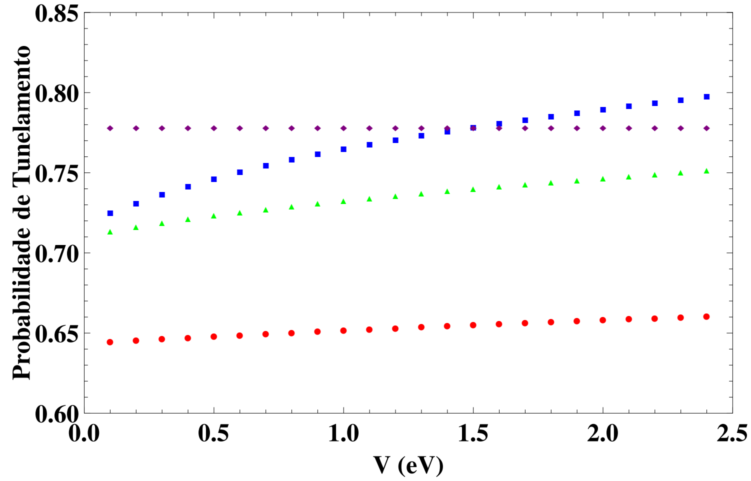


Fig. 5.6: TMR em função da voltagem aplicada para um pacote gaussiano e pulso com largura espacial 4 Å - $m_m = 2.5m_{el}$

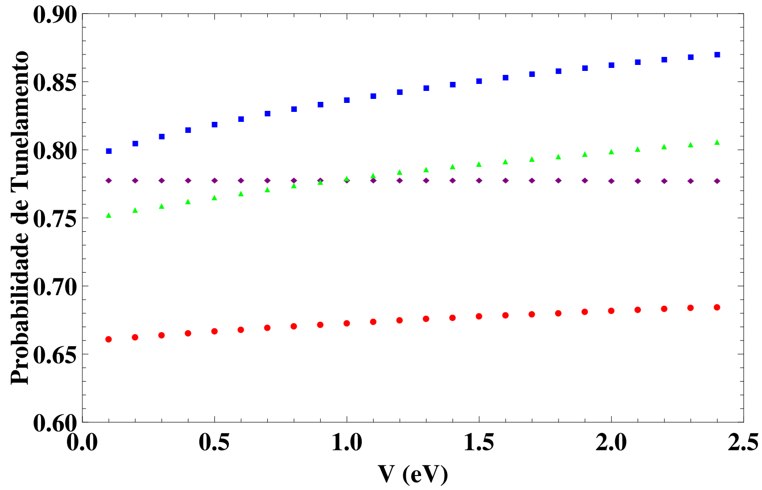
5.1.2 Massa efetiva dos portadores minoria: $m_m = 1.5m_{el}$

Nesta sub-seção é calculada a magnetoresistência da MTJ, cujos eletrodos ferromagnéticos são Fe e a camada isolante é Al_2O_3, estimando a massa efetiva dos portadores minoria $m_m = 1.5m_{el}$. Na tabela 5.1 se encontram os valores da massa efetiva dos portadores maioria e dos vetores de Fermi.

Na figura 5.7 mostra-se os gráficos da probabilidade de tunelamento em função da voltagem para um pacote gaussiano incidente com largura espacial $\sigma = 4$ Å, (figura 5.7(a)), e a probabilidaddde de tunelamento em função da voltagem para um pulso de largura $l = 4$ Å, (figura 5.7(b)).



(a) Pacote Gaussiano



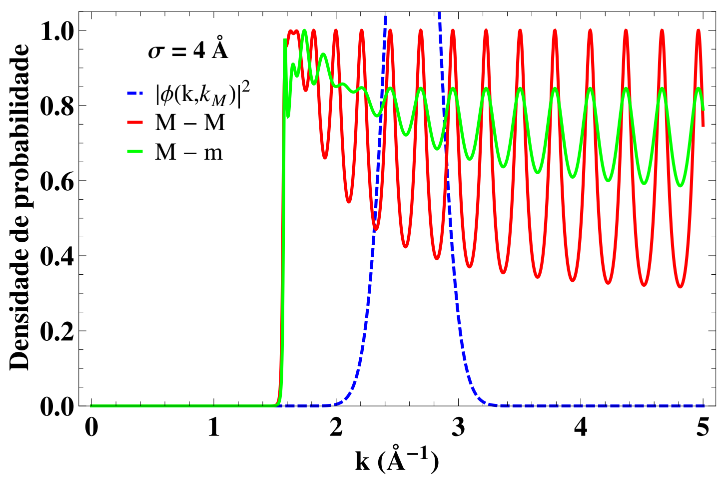
(b) Pulso

Fig. 5.7: Probabilidade de transmissão em função da voltagem aplicada para um pacote gaussiano e um pulso com largura espacial 4 Å- $m_m = 1.5m_{el}$. As cores vermelho, azul, roxo e verde indicam as configurações M-M, m-m, M-m e m-M, respectivamente.

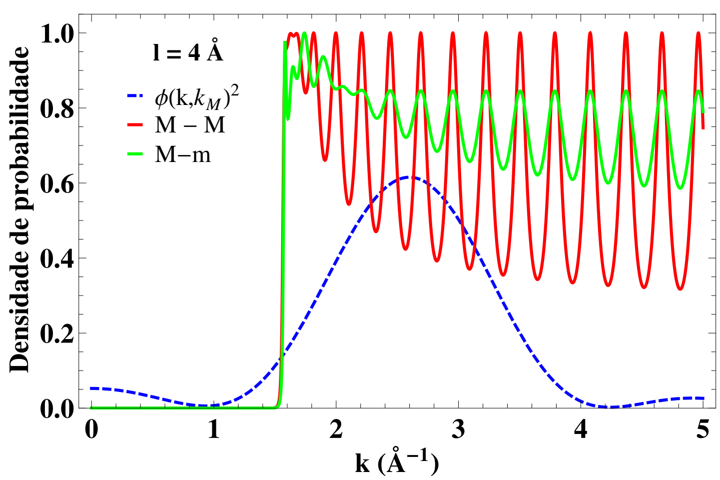
Da figura 5.7 nota-se que a probabilidade de tunelamento no caso $m_m = 1.5m_{el}$ apresenta comportamento semelhante ao caso $m_m = 2.5m_{el}$, a probabilidade de tunelmento na configuração M-M é a menor dentre as configurações. Na figura 5.7(a), a probabilidade de tunelamento de um pacote gaussiano com largura espacial 4 Å apresenta um cruzamento entre as configurações M-m e m-m em $V \approx 1.5$ eV. Para V maior que 1.5 eV a probabilidade de tunelamento na configuração m-m é a maior dentre as quatro configurações.

Já ao analisar a figura 5.7(b) observa-se que a probabilidade de tunelamento na configuração m-m é a maior entre as configurações. Além disso, a probabilidade de tunelamento de um pacote gaussiano com largura espacial 4Å apresenta um cruzamento em $V \approx 0.7$ eV, entre as configurações M-m e m-M sendo que a probabilidade de tunelamento na configuração m-M passa a ser a maior delas.

Com a finalidade de entendermos o porque da diferença da probabilidade das configurações possíveis vamos estudar a sobreposição da densidade de probabilide do pacote de onda e o coeficiente de transmissão da onda plana com voltagem aplicada 0.4 eV. Primeiramente vamos estudar o caso do elétron incidente pertencente a sub-banda M.



(a) Pacote Gaussiano: $\sigma = 4$ Å

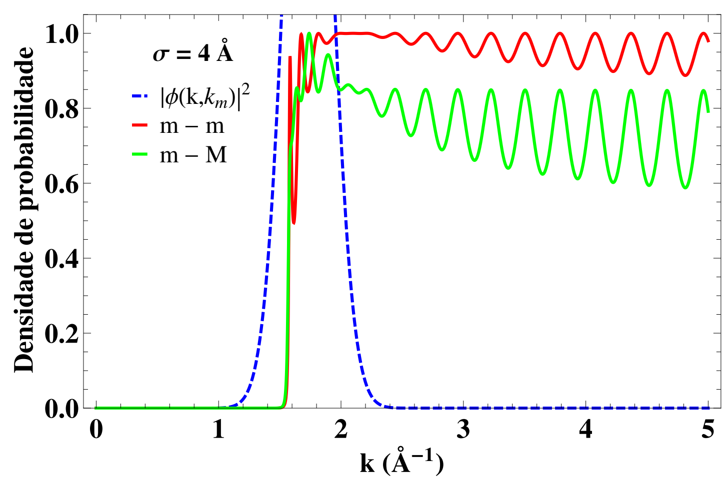


(b) Pulso: $l = 4$ Å

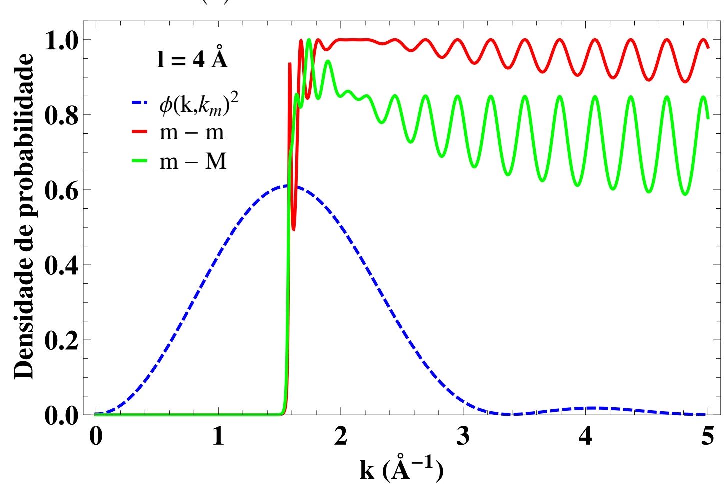
Fig. 5.8: A linha pontilhada indica a densidade de probabilidade do pacote de onda incidente no espaço k, elétron incidente pertence a sub banda M. A linha cheia indica o coeficiente de transmissão da onda plana - $m_m = 1.5m_{el}$.

Da figura 5.8 tem-se o coeficiente de transmissão da onda plana na configuração *M-M* apresenta uma amplitude de ocilação maior do que o coeficiente de transmissão da onda plana na configuração *M-m*. Assim a área de sobreposição entre a densidade de probabilidade no espaço k do pacote de onda gaussiano e do pulso é maior na configuração *M-m*, o que implica na probabilidade de transmissão maior na configuração *M-m* do que na configuração *M-M*.

Na figura 5.9 está graficada a sobreposição da densidade de probabilidade do pacote de onda e o coeficiente de transmissão da onda plana com voltagem aplicada 0.4 eV considerando o elétron incidente pertence a sub-banda m.



(a) Pacote Gaussiano: $\sigma = 4$ Å



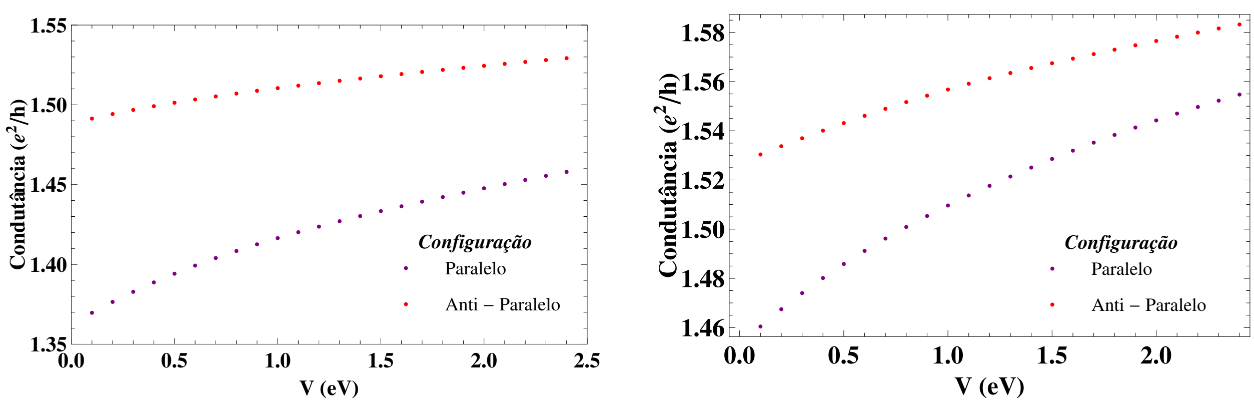
(b) Pulso: $l = 4$ Å

Fig. 5.9: A linha pontilhada indica a densidade de probabilidade do pacote de onda incidente no espaço k, elétron incidente pertence a sub banda m. A linha cheia indica o coeficiente de transmissão da onda plana - $m_m = 1.5 m_{el}$.

Das figuras 5.8 e 5.9 têm-se que o coeficiente de transmissão da onda plana na configuração m-m apresenta uma amplitude de oscilação menor do que o coeficiente de transmissão da onda plana dentre as configurações possíveis o que implica na configuração m - m apresenta o melhor ajuste (*matching*) entre as funções de onda das diferentes regiões do potencial. Além disso, o valor máximo das oscilações na m-m é aproximadamente 1, já na configuração m-M é aproximadamente 0.85. Portanto, a área de sobreposição entre a densidade de probabilidade no espaço k do pacote de onda gaussiano e do pulso é maior na configuração m-m do que na configuração m-M, o que implica na probabilidade de transmissão maior na configuração m-m.

Condutância e TMR

Na figura 5.10 se encontra a condutância em função da voltagem para pacotes de ondas incidentes (pacote gaussiano e pulso) com largura espacial 4 Å. Pode-se observar que os gráficos apresentam o mesmo comportamento sendo a condutância na configuração AP é maior que na configurção P. Além disso tem-se que a condutância do pulso é maior que do pacote gaussiano.



(a) Pacote Gaussiano

(b) Pulso

Fig. 5.10: Condutância em função da voltagem aplicada para um pacote gaussiano e pulso com largura espacial 4 Å - $m_m = 1.5m_{el}$

Por fim é possível estimar o valor da TMR utilizando a equação 2.4. Na figura 5.11 se encontra a TMR em função da voltagem simulando os elétrons d por um pacote de onda gaussiano e simulando os elétrons d por um pulso. A TMR é negativa tanto para o pacote gaussiano quanto para o pulso, isto ocorre devido à condutância na configuração anti-paralela ser maior do que na configuração paralela. Neste caso a MR está invertida em relação ao esperado no modelo de Jullière, isto destaca a relevância do processo de espalhamento no cálculo da MR. A inversão da TMR decorre da condutância na configuração AP ser maior do que na configuração P e foi verificado experimentalmente em MTJ [30, 31].

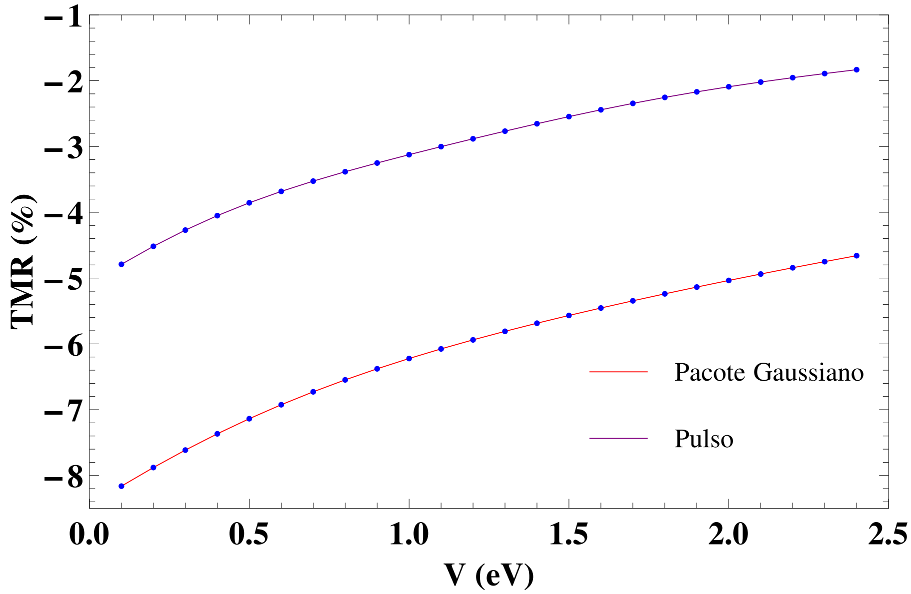


Fig. 5.11: TMR em função da voltagem aplicada para um pacote gaussiano e pulso com largura espacial 4 Å - $m_m = 1.5m_{el}$

5.2 Contribuição dos elétrons s na corrente de tunelamento

Para estimar a contribuição dos elétrons s (com massa efetiva $m_{\sigma,s}$) na corrente de tunelamento, estes serão representados por uma onda plana com vetor de onda de Fermi ($k_{\sigma,s}$), onde $k_{\sigma,s}$ é dado por:

$$k_{\sigma,s} = \frac{\sqrt{2m_{\sigma,s}E_F}}{\hbar} \tag{5.3}$$

Como a banda s quase não contribui para o ferromagnetismo do Fe, a razão entre a densidade de estados dos elétrons com spins M e spins m é aproximadamente 1. Portanto, estimamos essa razão em 1.06:

$$\frac{D_{M,s}(E_F)}{D_{m,s}(E_F)} = 1.06 \rightarrow \frac{m_{M,s}}{m_{m,s}} = 1.04 \tag{5.4}$$

Os elétrons s serão simulados por ondas planas com vetor de onda $k_{i,s}$ e massa efetiva $m_{i,s}$ onde $m_{i,s} = r_{i,s}m_{el}$. Os elétrons s são simulados por ondas planas ao invés de pacotes de ondas largos pois conforme foi verificado no capítulo 3 a probabilidade de tunelamento desse tipo de pacote tende ao valor do coeficiente de transmissão da onda plana. Na tabela 5.3 se encontram os valores estimados para a massa efetiva dos portadores minoria e maioria na banda s e seus respecticos vetores de Fermi.

Tab. 5.3: Valores de $r_{M,s}$ e $r_{m,s}$ estimados e seus respectivos vetores de Fermi.

r_m	r_M	k_m	k_M
1.30	1.35	1.61	1.65

Na figura 5.12 está graficada a probabilidade de tunelamento em função da voltagem para as quatro configurações possíveis (M - M, m - m, M - m e m - M). Observa-se que os gráficos estão quase sobrepostos, o que ocorre devido à massa entre os portadores maioria e minoria serem muito próximas.

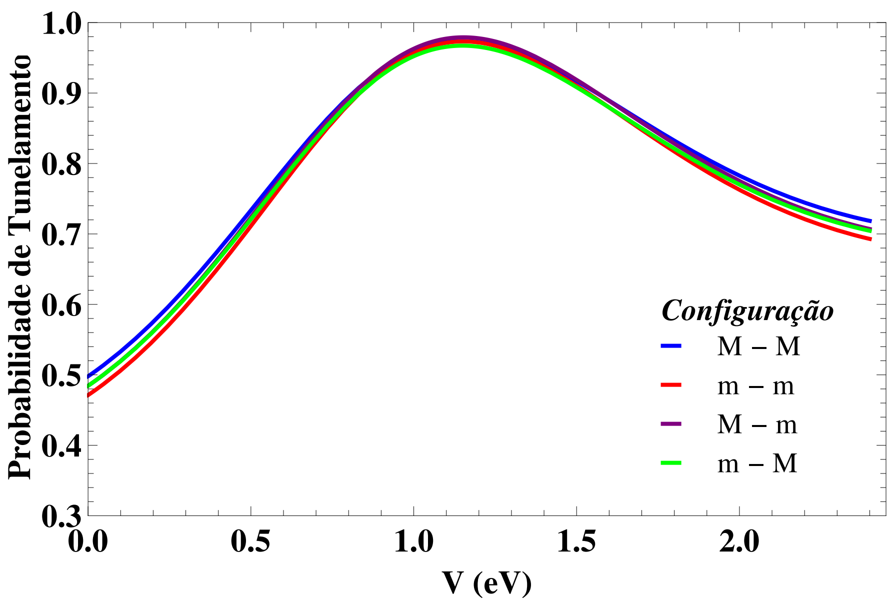
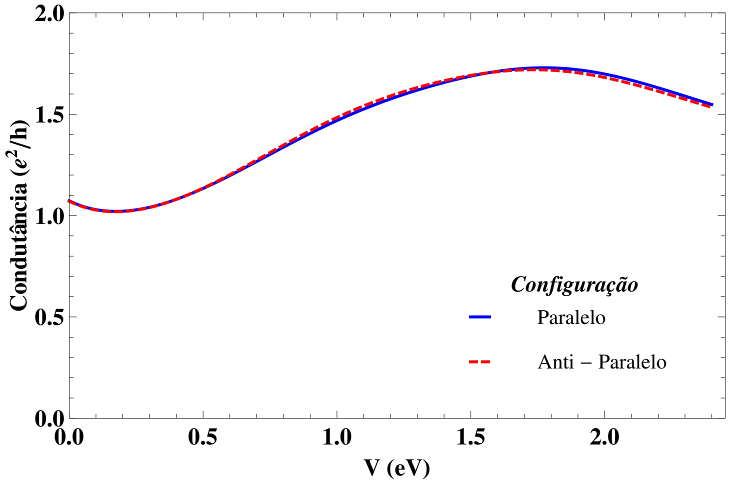


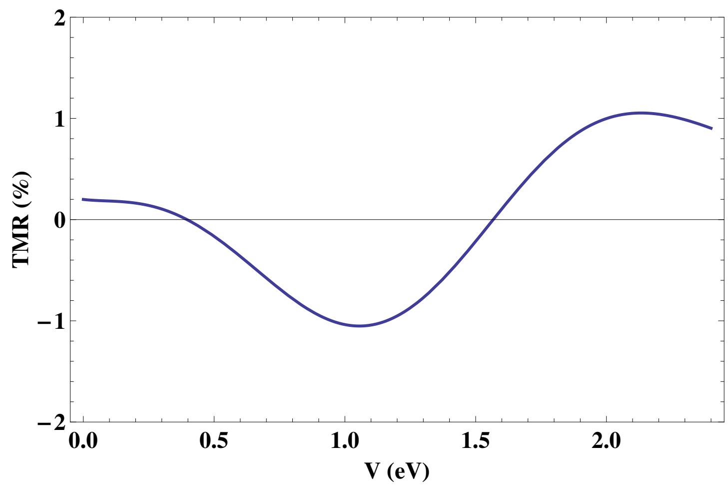
Fig. 5.12: Probabilidade de transmissão em função da voltagem aplicada.

Condutância e TMR

Na figura 5.13(a) se encontra a condutância em função da voltagem para os elétrons s. A condutância em função da voltagem é aproximadamente a mesma em ambas as configurações. Além disso, nota-se que os elétrons s contribuem significaticativamente para o transporte uma vez que o valor máximo da condutância é 2. Entretanto, os elétrons s não apresentam contribuição siginificativa na TMR, como pode ser observado na figura 5.13(b), já que o valor máximo que os elétrons s contribuem é aproximadamente $\pm$ 1%.



(a) Condutância



(b) TMR

Fig. 5.13: Condutância e TMR em função da voltagem aplicada para elétrons s, $m_{m,s} = 1.3m_{el}$.

5.3 Discussão

Pelo modelo proposto na seção 2.6 para o cálculo da TMR em uma MTJ foi possível obter a contribuição dos elétrons s e dos elétrons d tanto para o transporte quanto para a TMR. Obtivemos que o sinal da TMR depende da massa efetiva dos portadores, o que indica que a polarização da corrente de tunelamento pode ser muito diferente da polarização do volume no nível de Fermi. Além disso, obtivemos que tanto os elétrons s quanto os elétrons d contribuem para o transporte.

Ao considerar a representação dos elétrons d por pacotes gaussianos localizados com largura espacial de 4 Å obtivemos que a TMR é maior do que ao considerar elétrons d por pulsos para ambos valores considerados para a massa efetiva dos portadores minoria. Entretanto, a condutância do pacote gaussiano foi maior ao considerar a massa dos portadores minoria $2.5m_{el}$.

O valor máximo obtido para o TMR foi aproximadamente 11% ao considerar elétrons d por um pacote gaussiano com massa dos portadores minoria $2.5m_{el}$ sendo este valor menor do o esperado pelo modelo de Jullière (45.5%), que foi calculado no início desse capítulo. Essa diferença entre esses valores deve-se a alguns fatores. Primeiro, consideramos a DOS no nível de Fermi para o cálculo da TMR no modelo de Jullière o que superestima o valor TMR. Para obtermos uma estimativa melhor deveriamos utilizar a polarização do material obtida experimentalmente para calcular a TMR (equação 2.5). Além disso uma queda na TMR em relação ao modelo de Jullière é esperada pois além da densidade de estados no nível de Fermi consideramos a localização dos elétrons em pacotes de onda, diferentes massas efetivas para as bandas de diferente spin e também consideramos as caracteristicas do material isolante com a mudança da altura da barreira ao aplicar uma voltagem.

Capítulo 6

Conclusão

Nesta dissertação de mestrado apresentamos um modelo simples capaz de explicar a física envolvida no transporte e na magnetoresistência em uma MTJ. Fomos capazes de estimar a contribuição das bandas do material na corrente de tunelamento o que permitiu a estimativa da magnetoresistência. Além disso, o modelo proposto considerou as caracteristicas da camada isolante no cálculo.

Iniciamos nosso estudo no segundo capítulo, no qual procuramos entender os aspectos teóricos importantes para desenvolvimento da dissertação. Primeiramente, estudamos o modelo de Jullière para a magnetoresistência em MTJ. Vimos que nesse modelo a TMR depende essencialmente da densidade de estados no nível de Fermi dos eletrodos ferromagnéticos, não considerando nenhuma característica da camada isolante. Assim propomos um modelo simples para o transporte em MTJ incluindo as características da barreira. O modelo proposto se baseia no tunelamento dos elétrons por uma barreira de potencial retangular que se deforma linearmente ao aplicar uma voltagem. Para isso, simulamos os elétrons d por pacotes de onda localizados e os elétrons s por ondas planas. Optamos por descrever os elétrons s por ondas planas pois verificamos que pacotes de ondas largos apresentam o comportamento de uma onda plana. A diferença entre elétrons s e d aparece fundamentalmente no *matching* das funções de onda nas diferentes regiões da junção, que é descrita no modelo através da massa efetiva dependente da posição.

No terceiro capítulo calculamos o coeficiente de transmissão de ondas planas por barreiras de potencial retangulares e lineares. Introduzimos no cálculo a dependência da massa efetiva com a posição. Estudamos os efeitos da variação da massa nas diferentes regiões do potencial e pudemos verificar que mudança da massa do elétron nas três regiões do potencial acarretam em um aumento da amplitude de oscilação do coeficiente de transmissão e também no valor máximo do coeficiente de transmissão na região de oscilação. A origem do aumento da amplitude da oscilção deve-se ao *matching* da função de onda nas diferentes regiões do potencial. Quanto maior a diferença entre a massa efetiva nas diferentes regiões do potencial mais difícil é o *matching* das funções de onda nas diferentes regiões do potencial.

Iniciamos o quarto capítulo estudando a probabilidade de transmissão de pacotes de onda gaussianos, tanto por uma barreira de potencial retangular quanto por uma barreira de potencial linear. Verificamos que ao aumentar a largura do pacote a probabilidade de transmissão tende ao coeficiente de transmissão da onda plana, o que decorre do fato de que ao aumentar a largura do pacote no espaço de coordenadas, a largura do pacote no espaço k diminui e no limite tem-se uma função delta, que é transformada de Fourier da onda plana. Por fim, estudamos o tunelamento de um pulso por uma barreira retangular e pudemos verificar que a probabilidade de tunelamento apresenta um comportamento oscilatório em função da largura do pulso. Verificamos que o período de oscilação é metade do comprimento de de Broglie e independe da largura barreira de potencial. Além disso, ao aumentar a largura do pulso obtivemos que a probabilidade de tunelamento tende ao valor da onda plana.

Finalmente, o entendimento desses aspectos teóricos relevantes nos permitiu aplicar o modelo proposto para estimar a TMR em uma MTJ composta por eletrodos ferromagnéticos de Fe separados por uma camada isolante de Al_2O_3 de 10 Å. Dentro de um modelo simples, com densidade de estados tipo elétron livre, utilizamos a densidade de estados no nível de Fermi para estimarmos a massa efetiva dos portadores maioria e minoria do Fe na banda d. Para estimarmos a massa efetiva dos portadores maioria e minoria do Fe na banda s, utilizamos que esta banda pouco contribui para o magnetismo do material assim estimamos a razão entre a densidade de estados dos portadores maioria e minoria como aproximadamente um. Estimamos a massa efetiva dos portadores minoria da banda d por 2.5 m_{el} e 1.5 m_{el} e da banda s por 1.3 m_{el}. Observamos que os elétrons s não contribuem significativamente para a magnetoresistência. Além disso pudemos observar que o sinal da TMR depende da massa efetiva dos portadores, o que indica que a polarização da corrente de tunelamento pode ser muito diferente da polarização do volume no nível de Fermi. Além disso, também verificamos que apesar dos elétrons s não contribuirem para a TMR eles contribuem para o transporte devido à alta condutância apresentada. Portanto, obtivemos que a localização dos elétrons em pacotes de ondas, a mudança da altura da barreira ao aplicar uma voltagem e diferentes massas efetivas para as bandas de diferente spin podem mudar substancialmente o valor da TMR, tais elementos não são considerados na teoria de Jullière que considera apenas a densidade de estados das sub-banda M e m para o cálculo da TMR. Entretanto, o modelo de Jullière é válido para baixas voltagens, da ordem de milivolts, e para o cálculo foram consideradas voltagens de 2 V. Além disso devemos ressaltar que o modelo utilizado por ser unidimensional se aproxima a um fio quântico com uma barreira no meio, uma vez que MTJ apresentam geometria planar (quase bi-dimensional). Assim calculamos a condutância utilizando a fórmula de Landauer, considerando apenas dois canais de transmissão um com spin para cima e outro com spin para baixo. É possível aproximar o modelo apresentado nessa dissertação com o modelo de Jullière aumentando a seção transversa da junção e com isso o número de canais de transmissão no cálculo da condutância pela fórmula de Landauer aumenta, e esses canais de transmissão seriam ponderados pela densidade de estados dos eletrodos.

Referências Bibliográficas

[1] Charles Kittel. *Qhuantum Theory of Solids*. John Willey & Songs, Inc, 1th edition, 1963.

[2] M. Julliere. Tunneling between ferromagnetic films. *Physics Letters A*, 54(3):225 – 226, 1975.

[3] G. G. Cabrera and N. Garcia. Low voltage i–v characteristics in magnetic tunneling junctions. *Applied Physics Letters*, 80(10):1782–1784, 2002.

[4] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, and W. Zinn. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. *Phys. Rev. B*, 39(7):4828–4830, 1989.

[5] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas. Giant magnetoresistance of (001)fe/(001)cr magnetic superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, 61(21):2472–2475, Nov 1988.

[6] N. Garcia, M. Munoz, and Y.-W. Zhao. Ballistic magnetoresistance in transition-metal nanocontacts: The case of iron. *Applied Physics Letters*, 76(18):2586–2587, 2000.

[7] N. Garcia, M. Munoz, and Y.-W. Zhao. Magnetoresistance in excess of 200 in ballistic ni nanocontacts at room temperature and 100 oe. *Phys. Rev. Lett.*, 82(14):2923–2926, Apr 1999.

[8] Y. W. Zhao, M. Muñoz, G. Tatara, and N. García. From ballistic to non-ballistic magnetoresistance in nanocontacts: theory and experiments. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 223(2):169 – 174, 2001.

[9] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, and D. M. Treger. Spintronics: A spin-based electronics vision for the future. *Science*, 294(5546):1488–1495, 2001.

[10] Yat Li, Fang Qian, Jie Xiang, and Charles M. Lieber. Nanowire electronic and optoelectronic devices. *Materials Today*, 9(10):18 – 27, 2006.

[11] Scott A. Chambers. A potential role in spintronics. *Materials Today*, 5(4):34 – 39, 2002.

[12] Yoseph Imry. *Introduction to Mesoscopic Physics*. Oxford University Press, Oxford, 1997.

[13] Rolf Landauer. Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices. *Philosophical Magazine*, 21(172):1478–6435, Nov 1970.

[14] Rolf Landauer. Advanced technology and truth in advertising. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 168(1):75 – 87, 1990.

[15] M. Büttiker. Four-terminal phase-coherent conductance. *Phys. Rev. Lett.*, 57(14):1761–1764, Oct 1986.

[16] A. D. Stone. *Transport Theory of Mesoscopic Systems: Application to Ballistic Transport*. Mesoscopic Quantum Physics, 1995.

[17] R. Meservey and P. M. Tedrow. Spin-polarized electron tunneling. *Physics Reports*, 238(4):173 – 243, 1994.

[18] E. L. Wolf. *Principles of electron tunneling spectroscop*. Oxford University Press, New York, 1989.

[19] Jagadeesh S. Moodera and George Mathon. Spin polarized tunneling in ferromagnetic junctions. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 200(1-3):248 – 273, 1999.

[20] J. A. C Bland and B. Heinrich. *Ultrathin Magnetic Structure III*. Spinger, Germany, 2005.

[21] 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. Microstructured magnetic tunnel junctions (invited). *Journal of Applied Physics*, 81(8):3741–3746, 1997.

[22] Mathias Getzlaff. *Fundamentals of Magnetism*. Spinger, 2008.

[23] Ferry and Goodnick. *Transport in Nanostructures*. Cambridge University Press, 1997.

[24] Supriro Datta. *Eletronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge University Press, Cambridge, 10th edition, 1995.

[25] Charles Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. John Willey & Songs, Inc, 8th edition, 2005.

[26] Eugen Merzbacher. *Quantum Mechanics*. John Willey & Songs, Inc, 3th edition, 1997.

[27] Milton Abramowitz and Irene A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover, New York, ninth dover printing, tenth gpo printing edition, 1964.

[28] J. Callaway and C. S. Wang. Energy bands in ferromagnetic iron. *Phys. Rev. B*, 16(5):2095–2105, Sep 1977.

[29] I. Costina and R. Franchy. Band gap of amorphous and well-ordered al_2o_3 on $ni_3al(100)$. *Applied Physics Letters*, 78(26):4139–4141, 2001.

[30] C. Park, Jian-Gang Zhu, Yingguo Peng, D.E. Laughlin, and R.M. White. Inverse magnetoresistance in magnetic tunnel junction with an fe3o4 electrode. *Magnetics, IEEE Transactions on*, 41(10):2691 – 2693, oct. 2005.

[31] A. Gupta, X. W. Li, and Gang Xiao. Inverse magnetoresistance in chromium-dioxide-based magnetic tunnel junctions. *Applied Physics Letters*, 78(13):1894–1896, 2001.