



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΡΟΠΗ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΣΠΙΝ ΣΕ
ΜΑΓΝΗΤΙΚΕΣ ΔΙΕΠΑΦΕΣ ΣΗΡΑΓΓΑΣ

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΙΩΑΝΝΗ Γ. ΘΕΟΔΩΝΗ

Φυσικού

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ:
ΚΩΝ/ΝΟΣ ΠΑΡΑΣΚΕΥΑΪΔΗΣ
Αν. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

ΑΘΗΝΑ, Ιανουάριος 2014



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΡΟΠΗ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΣΠΙΝ ΣΕ
ΜΑΓΝΗΤΙΚΕΣ ΔΙΕΠΑΦΕΣ ΣΗΡΑΓΓΑΣ

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΙΩΑΝΝΗ Γ. ΘΕΟΔΩΝΗ

Φυσικού

ΤΡΙΜΕΛΗΣ ΣΥΜΒΟΥΛΕΥΤΙΚΗ
ΕΠΙΤΡΟΠΗ:

1. Κ.ΠΑΡΑΣΚΕΥΑΪΔΗΣ, Αν. Καθ. ΣΕΜΦΕ Ε.Μ.Π. (Επιβλέπων)
2. Ν.ΚΙΟΥΣΣΗΣ, Καθηγητής California State University Northridge
3. Γ. ΒΑΡΕΛΟΓΙΑΝΝΗΣ, Αν. Καθηγητής ΣΕΜΦΕ Ε.Μ.Π.

ΕΠΤΑΜΕΛΗΣ ΣΥΜΒΟΥΛΕΥΤΙΚΗ
ΕΠΙΤΡΟΠΗ:

1. Κ.ΠΑΡΑΣΚΕΥΑΪΔΗΣ, Αν. Καθ. ΣΕΜΦΕ Ε.Μ.Π. (Επιβλέπων)
2. Ν.ΚΙΟΥΣΣΗΣ, Καθηγητής California State University Northridge
3. Γ. ΒΑΡΕΛΟΓΙΑΝΝΗΣ, Αν. Καθηγητής ΣΕΜΦΕ Ε.Μ.Π.
4. Β. ΓΙΑΝΝΟΠΑΠΑ, Επικ. Καθηγητής ΣΕΜΦΕ Ε.Μ.Π.
5. Λ. ΤΣΕΤΣΕΡΗ, Επικ. Καθηγητής ΣΕΜΦΕ Ε.Μ.Π.
6. Δ. ΝΙΑΡΧΟ, Διευθυντή Ερευνών, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος»
7. Μ. ΠΙΣΣΑ, Διευθυντή Ερευνών, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος»

ΑΘΗΝΑ, Ιανουάριος 2014

στην οικογένεια μου.

Ευχαριστίες

Κατ' αρχάς θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον Καθηγητή κ. Νικόλαο Κιούσση για την ευκαιρία που μου έδωσε να δουλέψω πάνω στο θέμα της ροπής σπιν στο W. M. Keck Computational Materials Theory Center του California State University Northridge. Τον ευχαριστώ επίσης τόσο για τις εποικοδομητικές συζητήσεις μας κατά την διάρκεια της έρευνας μου, όσο και για την υπερπολύτιμη βοήθειά του και τις υποδείξεις του στην συγγραφή των επιστημονικών άρθρων που δημοσιεύσαμε μαζί.

Ένα πολύ μεγάλο ευχαριστώ οφείλω στον Dr. Alan Kalitson με τον οποίο συνεργαστήκαμε στενά τόσο στην δημιουργία του κώδικα όσο και στην ανάλυση των αποτελεσμάτων και ο οποίος αποτελεί πρότυπο ερευνητή για εμένα. Από τον Dr. Alan Kalitson αποκόμισα πολλές γνώσεις μετά από πολύωρες συζητήσεις μαζί του τόσο στον πίνακα όσο και μπροστά από τον υπολογιστή.

Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Prof. M. Chshiev (Université Joseph Fourier) για τις συζητήσεις μας σχετικά με τα φαινόμενα μεταφοράς σπιν και για την βοήθεια του στην συγγραφή άρθρων αλλά και τον Prof. W. H. Butler (University of Alabama) για την πολύ καλή συνεργασία μας.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον Αν. Καθηγητή Κών/νο Παρασκευαΐδη για την διαρκή υποστήριξή του και για την βοήθεια του στην διόρθωση της εργασίας αυτής και τον Αν. Καθηγητή Γεώργιο Βαρελογιάννη για τις χρήσιμες επισημάνσεις του σχετικά με την συγγραφή της παρούσης διατριβής.

Επίσης ευχαριστώ πολύ πολύ τους γονείς μου Γιώργο και Μαρία, για την διαπαιδαγώγηση που μου παρείχαν.

Εν κατακλείδι ευχαριστώ μέσα από την καρδιά μου την γυναίκα μου Ιωάννα, και τις κόρες μου Μαρία-Νεφέλη και Δανάη, για την αγάπη και την υποστήριξη που μου προσφέρουν καθημερινά και τους αφιερώνω την παρούσα διατριβή.

Περίληψη

Στην εργασία αυτή παρουσιάζεται θεωρητική μελέτη του φαινομένου της ροπής μεταφοράς σπιν και της μαγνητοαντίστασης σε μονές και διπλές μαγνητικές διεπαφές σήραγγας. Γίνεται χρήση μοντέλου ισχυρά δέσμιων ηλεκτρονίων με σπιν και του φορμαλισμού των συναρτήσεων Green για συστήματα εκτός ισορροπίας. Παρέχεται μια πλήρης ανάλυση της επίδρασης της πληρότητας ζώνης και της ενέργειας διαχωρισμού των σιδηρομαγνητικών ηλεκτροδίων, στην εξάρτηση των συνιστωσών της ροπής σπιν από την τάση. Η διεύθυνση της κάθετης συνιστώσας της ροπής σπιν T_{\perp} είναι ορθογώνια στο επίπεδο που σχηματίζουν οι μαγνητίσεις των σιδηρομαγνητικών ηλεκτροδίων της μαγνητικής διεπαφής, ενώ η διεύθυνση της παράλληλης συνιστώσας T_{\parallel} είναι μέσα στο επίπεδο αυτό. Και οι δύο συνιστώσες της ροπής σπιν αλλά και η μαγνητοαντίσταση επιδεικνύουν μια μεγάλη και ενδιαφέρουσα συμπεριφορά σαν συνάρτηση της τάσης, ανάλογα με τις παραμέτρους του θεωρητικού μοντέλου.

Σε μονές μαγνητικές διεπαφές σήραγγας δείχνουμε ότι η $T_{\parallel}(V)$ ικανοποιεί μια αναλυτική σχέση που περιλαμβάνει την διαφορά των ρευμάτων πλειονότητας και μειονότητας ανάμεσα στη παράλληλη και αντιπαράλληλη διευσθέτηση των μαγνητίσεων των ηλεκτροδίων, η οποία εν γένει είναι ανεξάρτητη του μοντέλου που χρησιμοποιήθηκε για τον υπολογισμό τους. Προτείνουμε ότι η εξάρτηση της παράλληλης συνιστώσας T_{\parallel} από την τάση μπορεί να έχει πλούσια, μη μονοτονική, συμπεριφορά σαν συνάρτηση της τάσης, ανάλογα με την ενέργεια διαχωρισμού. Δείχνουμε ότι μπορεί να αλλάζει πρόσημο χωρίς να αλλάζει πρόσημο και η φορά του ρεύματος. Ο μηχανισμός που καθορίζει την εξάρτησή της, από την τάση βρίσκεται στην εξάρτηση της διαφοράς των ρευμάτων πλειονότητας και μειονότητας για την παράλληλη και αντιπαράλληλη κατάσταση. Στην παράλληλη κατάσταση των μαγνητίσεων της διεπαφής η διαφορά των ρευμάτων έχει γραμμική εξάρτηση από την τάση αφού τα ηλεκτρόνια διέρχονται από συμμετρικά δυναμικά ενώ στην αντιπαράλληλη κατάσταση η διαφορά των ρευμάτων έχει τετραγωνική εξάρτηση από την τάση αφού το δυναμικό είναι αντισυμμετρικό. Τέλος δείχνουμε ότι η ενέργεια διαχωρισμού και η πληρότητα της ζώνης έχουν μεγάλη επίδραση στην εξάρτηση της μαγνητοαντίστασης από την τάση.

Σε διπλές μαγνητικές διεπαφές σήραγγας προβλέπουμε ότι τόσο η παράλληλη $T_{i,\parallel}$ όσο και η κάθετη $T_{i,\perp}$ συνιστώσα της τοπικής ροπής σπιν μπορεί να ενισχυθεί δραματικά. Η ενίσχυση της ανάμιξης σπιν οφείλεται στην ενεργειακή προσέγγιση των κβαντικών καταστάσεων πηγαδιού διαφορετικού σπιν και τάξης μέσα στο παράθυρο δυναμικού. Η $T_{i,\parallel}$ παρουσιάζει μια βηματική αύξηση ή μείωση σαν συνάρτηση

της τάσης όταν η ενέργεια μιας σπιν κβαντικής κατάστασης πηγαδιού εισέρχεται στο παράθυρο τάσης ή εξέρχεται από την ζώνη αγωγιμότητας αντίστοιχα ενώ η $T_{i,\perp}$ αλλάζει πρόσημο. Η παράλληλη συνιστώσα της ολικής ροπής T_{\perp} εμφανίζει μια πλούσια γωνιακή εξάρτηση λόγω της αλληλοεπίδρασης της διγραμμικής και διτετράγωνης συνιστώσας της.

Λέξεις Κλειδιά

Ροπή Σπιν, Μαγνητικές διεπαφές σήραγγας, Σπιντρονική, MTJ, MRAM

Abstract

We present a theoretical study of the spin transfer torque vector and the tunneling magnetoresistance (TMR) for symmetric magnetic tunnel junctions (MTJ) using the single-band tight-binding model and the non-equilibrium Green's functions formalism. We provide a comprehensive analysis of the effect of band filling and exchange splitting of the FM leads on the bias behavior of the spin-transfer component, T_{\parallel} , in the plane containing the magnetizations of the two magnetic layers, and the field-like component, T_{\perp} , perpendicular to this plane.

We demonstrate that both components of the spin torque and the TMR can exhibit a wide range of interesting and unusual bias behavior. We show that $T_{\parallel}(V)$ satisfies an expression involving the difference in spin currents between the ferromagnetic (FM) and antiferromagnetic (AF) configurations, which is general and independent of the details of the electronic structure. We predict an anomalous bias dependence of the spin transfer torque parallel to interface, T_{\parallel} , in magnetic tunnel junctions (MTJ), which can be selectively tuned by the exchange splitting. It may exhibit a sign reversal *without* a corresponding sign reversal of the bias or even a quadratic bias dependence. We demonstrate that the underlying mechanism is the interplay of spin currents for the ferromagnetic (antiferromagnetic) configurations, which vary linearly (quadratically) with bias, respectively, due to the symmetric (asymmetric) nature of the barrier. The spin transfer torque perpendicular to interface exhibits a quadratic bias dependence. Finally, we show that the exchange splitting and band filling have a large effect on the bias dependence of the TMR.

In double-barrier magnetic tunnel junctions, we predict that the spin-transfer, $T_{i,\parallel}$, and field-like, $T_{i,\perp}$, components of the *local* spin torque are dramatically enhanced. The *spin-mixing* enhancement is due to the energetic proximity of majority and minority quantum well states (QWS) of different quantum numbers within the bias window. $T_{i,\parallel}$ exhibits a switch-on and switch-off step-like bias behavior when spin polarized QWS enter the bias window or exit the energy band, while $T_{i,\perp}$, changes sign between switch-on biases. The *net* T_{\perp} exhibits an anomalous angular behavior due to the bias interplay of the bilinear and biquadratic effective exchange couplings.

Keywords

Spin Transfer Torque, Spintronics, MTJ, Quantum Transport, MRAM

Περιεχόμενα

Ευχαριστίες	3
Περίληψη	5
Abstract	7
Περιεχόμενα	11
Κατάλογος Σχημάτων	13
1 Εισαγωγή	19
1.1 Ροπή μεταφοράς σπιν και μαγνητικές μνήμες	19
1.2 Αντικείμενο της διατριβής	24
1.3 Οργάνωση της διατριβής	26
I Ροπή μεταφοράς σπιν σε μονή MTJ	27
2 Εισαγωγή	27
2.1 Μαγνητοαντίσταση σήραγγας	27
2.2 Ροπή μεταφοράς σπιν	28
2.3 Εξάρτηση ροπής σπιν από την τάση	29
2.4 Σύνοψη	30
3 Μεθοδολογία	31
3.1 Γεωμετρία	31
3.2 Χαμιλτονιανή συστήματος	31
3.3 Συναρτήσεις Green	33
3.4 Εξίσωση Dyson	34
3.5 Μέθοδος Keldysh	35
3.6 Ρεύματα φορτίου και σπιν και τοπική ροπή μεταφοράς σπιν	37
3.7 Ολική ροπή σπιν	38
4 Παρουσίαση και ανάλυση αποτελεσμάτων	40
4.1 Εισαγωγή - Παράμετροι	40
4.2 Εξάρτηση της T_{\parallel} από την τάση	40
4.2.1 Ισοδύναμο κύκλωμα- ανάλυση T_{\parallel} σε ρεύματα	40

4.2.2 Μοντέλο Brinkman	42
4.2.3 Συστηματική Μελέτη - Αποτελέσματα	43
4.3 Εξάρτηση της T_{\perp} από τη τάση	53
4.4 Εξάρτηση της Μαγνητοαντίστασης(TMR) από την τάση	56
5 Συμπεράσματα και προεκτάσεις	60
II Ροπή σπιν σε διπλή MTJ	63
6 Εισαγωγή	63
7 Μεθοδολογία	65
7.1 Χαμιλτονιανή συστήματος - Παράμετροι	65
7.2 Συναρτήσεις Green	65
7.3 Συναρτήσεις Green εκτός ισορροπίας	66
7.4 Ροπές σπιν	67
8 Παρουσίαση και ανάλυση αποτελεσμάτων	68
8.1 Ενέργειες κβαντικών καταστάσεων πηγαδιού	68
8.2 Τοπικές ροπές σπιν	70
8.3 Ολικές ροπές σπιν	76
9 Συμπεράσματα και προεκτάσεις	79
10 Fortran 90 codes	80

Κατάλογος Σχημάτων

- 1.1 Σχηματική αναπαράσταση μιας συσκευής με μαγνητική διεπαφή σήραγγας (Magnetic tunnel junction (MTJ)). Αποτελείται από ένα συνθετικό αντισιδηρομαγνήτη (synthetic anti-ferromagnet (S-AFM)) του οποίου το πάνω σιδηρομαγνητικό (FM) στρώμα έχει σταθερή(καρφωμένη) διεύθυνση μαγνήτισης, και ένα ελεύθερο σιδηρομαγνητικό στρώμα του οποίου η μαγνήτιση μπορεί να αλλάζει διεύθυνση, διαχωριζόμενα από μονωτικό υλικό (MGO). Η χρήση του συνθετικού αντισιδηρομαγνήτη καταργεί τη μαγνητοστατική αλληλεπίδραση μεταξύ του ελεύθερου και του σταθερού μαγνητικού στρώματος. Το στρώμα Ru χρησιμοποιείται για να καταστρέψει την πόλωση σπιν των ηλεκτρονίων που μεταβαίνουν από το κάτω σιδηρομαγνητικό στρώμα του S-AFM στο πάνω. Το κάτωτερο αντισιδηρομαγνητικό στρώμα AFM χρησιμοποιείται για να αυξήσει την θερμική σταθερότητα του σταθερού στρώματος. Δεδομένου ότι, η κύρια μεταφορά σπιν γίνεται μεταξύ του πάνω FM στρώματος του S-AFM και του ελεύθερου FM στρώματος, το μοντέλο που χρησιμοποιούμε για τους υπολογισμούς των φαινομένων μεταφοράς σπιν σε MTJ περιλαμβάνει μόνο τρία στρώματα, το ελεύθερο στρώμα, το φράγμα δυναμικού και το σταθερό στρώμα. Στη μαγνήτιση \mathbf{m} του ελεύθερου FM στρώματος δρουν η παράλληλη T_{\parallel} και η κάθετη T_{\perp} συνιστώσα της ροπής σπιν οι οποίες μπορούν να μεταβάλουν την διεύθυνση της \mathbf{m} 20
- 1.2 a) Συμβατική Μαγνητική μνήμη MRAM, b) Μαγνητική μνήμη ροπής σπιν STT-MRAM. 22
- 1.3 Αρχή της μεταβολής της διεύθυνσης της μαγνήτισης σε μια STT-MRAM μέσω της ροπής μεταφοράς σπιν. (a) Μεταβολή σε παράλληλη κατάσταση και (b) μεταβολή σε αντιπαράλληλη κατάσταση. Πηγή: T. Kawahara, R. Takemura, K. Miura, J. Hayakawa, S. Ikeda, Y.M. Lee, R. Sasaki, Y. Goto, K. Ito, T. Meguro, F. Matsukura, H. Takahashi, H. Matsuoka, H. Ohno, IEEE J. Solid State Circuits, 43(1), 109 (2008). 23

- 1.4 Σύγκριση πειραματικών και θεωρητικών αποτελεσμάτων για την εξάρτηση των συνιστωσών της ροπής σπιν από την τάση. (a) Εξάρτηση της παράλληλης συνιστώσας T_{\parallel} . (b) Εξάρτηση της κάθετης συνιστώσας T_{\perp} . Οι λεπτές γραμμές αποτελούν θεωρητικούς υπολογισμούς της ροπής σπιν για διαφορετικές τιμές της ενέργειας διαχωρισμού σπιν ϵ . Τα σημεία αφορούν πειραματικά αποτελέσματα από πείραμα σιδηρομαγνητικού συντονισμού FMR για μαγνητική διεπαφή σήραγγας Co-FeB/MgO/CoFeB. Πηγή: Θεωρία: Theodonis, I. et al., Phys. Rev. Lett., 97, 237205, 2006 Πείραμα: Kubota, H. et al., Nat. Phys., 4, 37, 2008. 25
- 3.1 (Πάνω) Σχηματική αναπαράσταση της μαγνητικής επαφής σήραγγας η οποία αποτελείται από δύο (αριστερό και δεξιό) ημίπειρα σιδηρομαγνητικά (FM) ηλεκτρόδια, τα οποία διαχωρίζονται από μη μαγνητικό λεπτό μονωτικό στρώμα N ατομικών επιπέδων. Η μαγνήτιση \mathbf{M}' της δεξιάς σιδηρομαγνητικής επαφής βρίσκεται κατά μήκος του z άξονα, ενώ η μαγνήτιση \mathbf{M} της αριστερής σιδηρομαγνητικής επαφής είναι στραμμένη κατά γωνία θ γύρω από τον y άξονα σε σχέση με την \mathbf{M}' . (Κέντρο) Οι τονισμένοι και άτοννοι ελληνικοί δείκτες δηλώνουν ατομικά επίπεδα στην αριστερή και στη δεξιά FM επαφή αντίστοιχα. Οι λατινικοί δείκτες δηλώνουν ατομικά επίπεδα στην περιοχή του μονωτή. (Κάτω) Σχηματική παρουσίαση του προφίλ δυναμικού του φραγμού, όπου σημειώνεται χαρακτηριστικά η διαφορά στην πυκνότητα καταστάσεων των δύο ειδών σπιν κατά 2Δ όπου Δ είναι η ενέργεια διαχωρισμού. Τα ϵ_{\uparrow} , ϵ_{\downarrow} , και ϵ_B είναι οι ενέργειες ατομικών σημείων (on-site energies) των ζωνών πλειονότητας (σπιν πάνω), μειονότητας (σπιν κάτω) και μονωτή αντίστοιχα. Η κάτω διακεκομμένη γραμμή υποδεικνύει την ενέργεια Fermi στην κατάσταση ισορροπίας. 32
- 4.1 Ισοδύναμο κύκλωμα μαγνητικής επαφής σήραγγας με ανάλυση των σπιν ρευμάτων και με αντιστάσεις (ροοστάτες) εξαρτώμενες από την γωνία μεταξύ των μαγνητίσεων των FM επαφών. 41
- 4.2 Το ρεύμα σπιν $I_z^{(s)}(\theta)$, για παράλληλο ($\theta = 0$) και αντιπαράλληλο ($\theta = \pi$) προσανατολισμό των μαγνητίσεων των επαφών. Στην παράλληλη κατάσταση (FM) τόσο τα ηλεκτρόνια πλειονότητας όσο και τα ηλεκτρόνια μειονότητας διέρχονται από συμμετρικά φράγματα δυναμικού Φ^{σ} (κάτω εσωτερικό πάνελ) ενώ στην αντιπαράλληλη κατάσταση (AFM) και τα δύο σπιν διέρχονται μέσα από ασύμμετρα δυναμικά με ίδιο μέσο ύψος φράγματος $\bar{\Phi}^{\sigma}$ και ασύμμετρία $\Delta\Phi^{\sigma}$ με διαφορετικό πρόσημο. 42

- 4.3 Εξάρτηση της παράλληλης συνιστώσας της ροπής μεταφοράς σπιν, T_{\parallel} , για γωνία ανάμεσα στις μαγνητίσεις των επαφών $\theta = \pi/2$ και για διάφορες τιμές της ενέργειας διαχωρισμού Δ για τρεις τιμές της κατάληψης ζώνης 1/4 (πάνω πλαίσιο), 1/2 (μεσαίο πλαίσιο) και 3/4 (κάτω πλαίσιο). 44
- 4.4 Εξάρτηση της πυκνότητας ρεύματος σπιν I_z^s , από την τάση, για την παράλληλη(FM) διευθέτηση των μαγνητίσεων (ανοιχτά σύμβολα) και για την αντίπαράλληλη(AF) διευθέτηση των μαγνητίσεων (γεμάτα σύμβολα) αντίστοιχα, στην Εξ. (4.1). I_z^s παρουσιάζεται για διάφορες τιμές της ενέργειας διαχωρισμού Δ και για $\varepsilon^0 = +3, 0 \text{ eV}$, που αντιστοιχούν στο πάνω και μεσαίο πλαίσιο του Σχ. 4.3, αντίστοιχα. 46
- 4.5 Εξάρτηση της παράλληλης συνιστώσας της ροπής μεταφοράς σπιν T_{\parallel} , από την τάση για $\theta = \pi/2$, διάφορες τιμές της μέσης ενέργειας σημείου ε^0 και για ενέργεια διαχωρισμού $\Delta = 1 \text{ eV}$ (πάνω πλαίσιο) και $\Delta = 2 \text{ eV}$ (κάτω πλαίσιο). 47
- 4.6 Εξάρτηση της πυκνότητας ρεύματος σπιν I_z^s , στην Εξ. (4.1) για την παράλληλη FM (γεμάτα σύμβολα) και αντίπαράλληλη AF (ανοιχτά σύμβολα) διευθέτηση των μαγνητίσεων αντίστοιχα, για διάφορες τιμές της Δ και για τις τιμές της ε^0 που αντιστοιχούν σε αυτές του Σχ. 4.3. . . . 48
- 4.7 Εξάρτηση της T_{\parallel} , για $\theta = \pi/2$, και για διάφορες τιμές της ενέργειας σημείου των ηλεκτρονίων μειονότητας ε^{\downarrow} , και για τρεις τιμές της ενέργειας σημείου ε^{\uparrow} των ηλεκτρονίων πλειονότητας, που αντιστοιχούν σε κατάλληψης ζώνης 1/4 (πάνω πλαίσιο), 1/2(μεσαίο πλαίσιο) και 3/4 (κάτω πλαίσιο), αντίστοιχα. 49
- 4.8 Πυκνότητα ρεύματος σαν συνάρτηση της ε^0 για αρκετές τιμές της τάσης. 50
- 4.9 (a-c): Πυκνότητα ρεύματος αναλυμένη κατά \mathbf{k}_{\parallel} στην δισδιάσταση ζώνη Brillouin, όπως υπολογίζεται από την Εξ. (3.33), στην $E_F = 0$, για τάση 0.1 V και για ε^0 ίση με -3, 0, και +3 eV, αντίστοιχα. (d-f): Οι αντίστοιχες αναλυμένες κατά \mathbf{k}_{\parallel} πιθανότητες διέλευσης, όπως υπολογίζονται από την απλουστευμένη Εξ. (4.3), για τις ίδιες τιμές της ε^0 51
- 4.10 Εξάρτηση της κάθετης συνιστώσας της ροπής μεταφοράς σπιν, T_{\perp} , από την τάση, για $\theta = \pi/2$, διάφορες τιμές της ενέργειας διαχωρισμού Δ , και τρεις τιμές της μέσης ενέργειας σημείου ε^0 54
- 4.11 Εξάρτηση από την τάση της κάθετης συνιστώσας της ροπής μεταφοράς σπιν, T_{\perp} , για $\theta = \pi/2$, διάφορες τιμές της μέσης ενέργειας σημείου ε^0 και για σταθερή ενέργεια διαχωρισμού $\Delta = 1 \text{ eV}$ (πάνω πλαίσιο) και $\Delta = 2 \text{ eV}$ (κάτω πλαίσιο), αντίστοιχα. 55

- 4.12 Εξάρτηση του λόγου TMR από την τάση για διάφορες τιμές της ενέργειας διαχωρισμού Δ και για τρεις τιμές της μέσης ενέργειας σημείου, ε^0 , που αντιστοιχεί σε κατάληψη ζώνης 1/4(πάνω πλαίσιο), 1/2(μεσαίο πλαίσιο) και 3/4 (κάτω πλαίσιο). Οι ένθετες παραστάσεις παρουσιάζουν την εξάρτηση από την τάση τον κανονικοποιημένο λόγο TMR ως προς την τιμή του σε χαμηλή τάση, $TMR(\cdot)/TMR(\cdot \approx 0)$ 57
- 4.13 Εξάρτηση από την τάση του λόγου TMR για διάφορες τιμές της μέσης ενέργειας σημείου ε^0 και για δύο τιμές της ενέργειας διαχωρισμού $\Delta = 1$ eV (πάνω πλαίσιο) και $\Delta = 2$ eV (κάτω πλαίσιο). Οι ένθετες παραστάσεις παρουσιάζουν την εξάρτηση από την τάση του κανονικοποιημένου λόγου TMR ως προς την χαμηλής τάσης τιμή του. 59
- 6.1 Σχηματική αναπαράσταση διπλής επαφής σήραγγας (Double Barrier Magnetic Tunnel junction (DBMTJ)). Αποτελείται από μια κεντρική σιδηρομαγνητική (FM) περιοχή από N_C ατομικά σημεία, και συνδέεται με ημιάπειρες FM επαφές διαμέσω μονωτών I των N σημείων. Η μαγνήτιση $\mathbf{M}_{L(R)}$ των αριστερών και δεξιών (L(R)) FM επαφών είναι στραμμένες κατά μία γωνία θ στο επίπεδο xz σε σχέση με την μαγνήτιση \mathbf{M}_C της κεντρικής περιοχής γύρω από τον άξονα y . Η παράλληλη $T_{i,\parallel}$ και κάθετη $T_{i,\perp}$ ροπή σπίν σε κάθε FM σημείο βρίσκονται κατά μήκος της διεύθυνσης x και y αντίστοιχα. 64
- 8.1 Η ενέργεια E^{n^σ} με ($n^\sigma = 1^\sigma, \dots, N_c^\sigma$), των δέσμιων καταστάσεων πηγαδιού πλειονότητας (χρωματισμένα τρίγωνα) και μειονότητας (άχρωμα τρίγωνα) στην κεντρική FM περιοχή ως προς την ενέργεια Fermi E_F , σαν συνάρτηση του αριθμού των ατομικών σημείων N_c που την αποτελούν για τάση μηδέν και για μηδενική γωνία $\theta = 0$ ανάμεσα σε όλες τις μαγνητίσεις. Ο πυθμένος των ζωνών αγωγιμότητας για τα ηλεκτρόνια πλειονότητας και μειονότητας των επαφών, δίνεται από τα $E_B^{\uparrow(\downarrow)}$ ενώ Δ είναι η ενέργεια διαχωρισμού των ζωνών και υποδεικνύεται από το οριζόντιο διακεκομμένο βέλος. Υπό τάση V , τα χημικά δυναμικά της αριστερής και δεξιάς επαφής (ηλεκτροδίων) μετατοπίζονται ενεργειακά κατά $eV = \mu_R - \mu_L$ γύρω από την ενέργεια Fermi, δημιουργώντας έτσι αυτό που ονομάζεται παράθυρο δυναμικού. 69

- 8.2 Υπολογισμός (a) της κάθετης συνιστώσας $T_{i,\perp}$ και (b) της παράλληλης συνιστώσας $T_{i,\parallel}$ της τοπικής ροπής σπιν, σαν συνάρτηση του αριθμού των ατομικών σημείων N_c που αποτελούν την κεντρική FM περιοχή για χαμηλή θερμοκρασία ($T=5$ K) και για μικρή τάση ($V = 0.1$ V). Ο υπολογισμός των ροπών έγινε στο πρώτο ατομικό σημείο δίπλα στην αριστερή διεπαφή FM/I για τρεις τιμές της γωνίας θ ($\pi/10$, $\pi/2$, και $9\pi/10$). 70
- 8.3 Γωνιακή εξάρτηση της $T_{i,\perp}$ (μαύρα τετράγωνα) και της $T_{i,\parallel}$ (κόκκινοι κύκλοι), για $N_c = 4$ ατομικά σημεία στα παράθυρα (a) και (b), και για $N_c = 7$ ατομικά σημεία στα παράθυρα (c) και (d), αντίστοιχα. Ο υπολογισμός των ροπών έγινε στο πρώτο ατομικό σημείο δίπλα $i = 1$ στην αριστερή διεπαφή FM/I για $T = 5K$ και $V = 0.1V$ 71
- 8.4 Κάθετη $T_{i,\perp}$ (μαύρα τετράγωνα) και παράλληλη $T_{i,\parallel}$ (κόκκινοι κύκλοι), συνιστώσα της ροπής σπιν σαν συνάρτηση του αριθμού του ατομικού σημείου i στο οποίο υπολογίζεται στην κεντρική FM περιοχή, για $N_c = 4$ ατομικά σημεία στα παράθυρα (a) και (b) και για $N_c = 7$ ατομικά σημεία στα παράθυρα (c),(d) αντίστοιχα. Οι υπολογισμοί έγιναν για $T = 5K$, $V = 0.1V$ και $\theta = \pi/2$ 72
- 8.5 (a,b) Εξάρτηση από την τάση V , της πυκνότητας ρεύματος πλειονότητας (κόκκινα σύμβολα) και μειονότητας (μπλε σύμβολα) που διαρρέει την συσκευή για (a) $N_c = 4$ και (b) $N_c = 7$ ατομικά σημεία, αντίστοιχα. Στα πάνελ (c,d) παρουσιάζεται η εξάρτηση από την τάση V της $T_{i,\parallel}$ (μαύρα σύμβολα) και της $T_{i,\perp}$ (κόκκινα σύμβολα) υπολογισμένη στο πρώτο ατομικό σημείο $i = 1$ της κεντρικής περιοχής, για $N_c = 4$ και $N_c = 7$ ατομικά σημεία αντίστοιχα. Οι τιμές της τάσης $V_{on(off)}^\sigma$ υποδηλώνουν τις τάσεις στις οποίες αυξάνει(ανοίγει) και μειώνεται(κλείνει) βηματικά το ρεύμα. Όλοι οι υπολογισμοί έγιναν για $T = 5K$, $V = 0.1V$ και $\theta = \pi/2$ 74
- 8.6 (a1), (a2) Παρουσιάζεται η ενεργειακή εξάρτηση του πραγματικού (με κόκκινα τετράγωνα) και του φανταστικού (με μαύρα τετράγωνα) μέρη της συνάρτησης Green $G^{<\uparrow\downarrow}$ για ενέργειες των σταθμών E^\uparrow, E^\downarrow με μεγάλη διαφορά μεταξύ τους ($E^\downarrow \ll E^\uparrow$) και με μικρή διαφορά ($E^\downarrow \approx E^\uparrow$), αντίστοιχα· (b1) και (b2) Η εξάρτηση από τάση των ροπών σπιν $T_{i,\parallel}$ (με μπλε τετράγωνα) και της $T_{i,\perp}$ (με πράσινα τετράγωνα) που αντιστοιχεί σε ενεργειακές διαφορές των E^\downarrow και E^\uparrow αντίστοιχη με αυτή των (a1) και (a2). 76

8.7 (a) Γωνιακή εξάρτηση της οθλικής (α) πεδιακής T_{\perp} ροπής σπιν και (b) Slonczewski T_{\parallel} ροπής σπιν για $N_c = 4$ διάφορες τιμές της τάσης. Η γωνία ορίζεται ανάμεσα στην μαγνήτιση της κεντρικής περιοχής και των μαγνητίσεων των ηλεκτροδίων οι οποίες θεωρούνται παράλληλες .	77
8.8 Εξάρτηση από την τάση των συντελεστών της εκτός ισορροπίας ενέργειας ανταλλαγής J_1 (διγραμμικός όρος ως προς $\cos(\theta)$), και J_2 (διτετράγωνος όρος ως προς $\cos(\theta)$) για $N_c = 4$	78
10.1 Code flowchart.	80

Κεφάλαιο 1

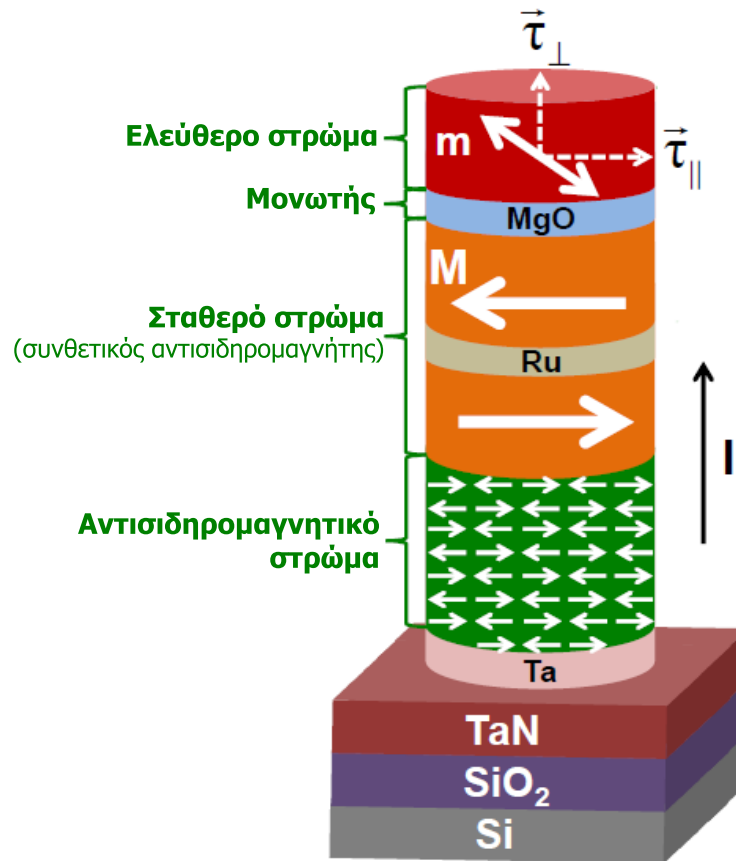
Εισαγωγή

1.1 Ροπή μεταφοράς σπιν και μαγνητικές μνήμες

Η ιδέα ότι η διεύθυνση της μαγνητικής ροπής ενός σιδηρομαγνητικού (FM) υλικού μπορεί να μεταβληθεί χωρίς την εφαρμογή εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, αλλά μόνο με την διέλευση ηλεκτρονίων πολωμένου σπιν, εισήχθη για πρώτη φορά από τον Slonczewski [1, 2] αλλά εμφανίζεται και σε άρθρα του Berger [3] τη δεκαετία του 90. Στα σπιντρονικά φαινόμενα πρώτης γενιάς όπως η γιγαντιαία μαγνητοαντίσταση (giant magnetoresistance (GMR)) [4] και η μαγνητοαντίσταση σήραγγας (tunneling magnetoresistance (TMR)) [5], η σχετική διευσθέτηση των μαγνητίσεων του σταθερού και του ελεύθερου μαγνητικού στρώματος, μόνο ανιχνεύεται, από το ηλεκτρικό ρεύμα. Με το φαινόμενο ροπής μεταφοράς σπιν (spin transfer torque) όμως, μας δίνεται πλέον η δυνατότητα αλλαγής της διεύθυνσης της ελεύθερης μαγνήτισης από το ηλεκτρικό ρεύμα και έτσι μια νέα μαγνητική διευσθέτηση δημιουργείται χωρίς την εφαρμογή μαγνητικού πεδίου.

Αυτή η δυνατότητα μεταβολής της μαγνήτισης ενός μαγνητικού στρώματος μέσω της ροπής μεταφοράς σπιν, έχει αναπτυχθεί σε σημαντικές θεωρητικές και πειραματικές εργασίες κατά τα τελευταία χρόνια [6, 7, 8]. Το ερευνητικό ενδιαφέρον πάνω σε αυτό το νέο κβαντικό φαινόμενο τροφοδοτείται τόσο διότι η ροπή σπιν παρέχει ένα νέο εργαλείο για την βασική μελέτη του σπιν των ηλεκτρονίων, αλλά και επειδή την ίδια στιγμή ανοίγει το δρόμο προς την πραγματοποίηση καινοτόμων, μη μεταβλητών (non-volatile), μαγνητικών μνημών οι οποίες μπορούν να εγγράψουν πληροφορία χωρίς την εφαρμογή εξωτερικού μαγνητικού πεδίου.

Οι πολυστρωματικές μαγνητικές δομές που χρησιμοποιούνται σε μαγνητικές μνήμες είναι η μαγνητική διεπαφή σήραγγας (Magnetic tunnel junction (MTJ)) και η μεταλλική μαγνητική διεπαφή, ή αλλιώς βαλβίδα σπιν (spin valve). Ωστόσο, η διεπαφή σήραγγας παρουσιάζει μεγαλύτερες τιμές μαγνητοαντίστασης (magnetoresistance (MR)) σε σύγκριση με τις μεταλλικές διεπαφές, έτσι όλες οι πρόσφατες ερευνητικές προσπάθειες προσανατολίζονται προς συσκευές ροπής σπιν που βασίζονται σε MTJ (Σχ. 1.1).

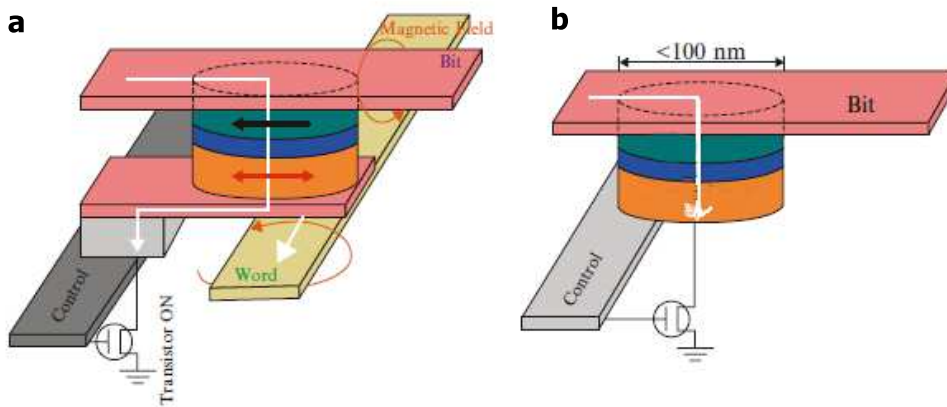


Σχήμα 1.1: Σχηματική αναπαράσταση μιας συσκευής με μαγνητική διεπαφή σήραγγας (Magnetic tunnel junction (MTJ)). Αποτελείται από ένα συνθετικό αντισιδηρομαγνήτη (synthetic anti-ferromagnet (S-AFM)) του οποίου το πάνω σιδηρομαγνητικό (FM) στρώμα έχει σταθερή(καρφωμένη) διεύθυνση μαγνήτισης, και ένα ελεύθερο σιδηρομαγνητικό στρώμα του οποίου η μαγνήτιση μπορεί να αλλάζει διεύθυνση, διαχωριζόμενα από μονωτικό υλικό (MGO). Η χρήση του συνθετικού αντισιδηρομαγνήτη καταργεί τη μαγνητοστατική αλληλεπίδραση μεταξύ του ελεύθερου και του σταθερού μαγνητικού στρώματος. Το στρώμα Ru χρησιμοποιείται για να καταστρέψει την πόλωση σπιν των ηλεκτρονίων που μεταβαίνουν από το κάτω σιδηρομαγνητικό στρώμα του S-AFM στο πάνω. Το κατώτερο αντισιδηρομαγνητικό στρώμα AFM χρησιμοποιείται για να αυξήσει την θερμική σταθερότητα του σταθερού στρώματος. Δεδομένου ότι, η κύρια μεταφορά σπιν γίνεται μεταξύ του πάνω FM στρώματος του S-AFM και του ελεύθερου FM στρώματος, το μοντέλο που χρησιμοποιούμε για τους υπολογισμούς των φαινομένων μεταφοράς σπιν σε MTJ περιλαμβάνει μόνο τρία στρώματα, το ελεύθερο στρώμα, το φράγμα δυναμικού και το σταθερό στρώμα. Στη μαγνήτιση \mathbf{m} του ελεύθερου FM στρώματος δρουν η παράλληλη T_\parallel και η κάθετη T_\perp συνιστώσα της ροπής σπιν οι οποίες μπορούν να μεταβάλουν την διεύθυνση της \mathbf{m} .

Επιγραμματικά μια μαγνητική διεπαφή σήραγγας αποτελείται από δύο σιδηρομαγνητικά στρώματα τα οποία διαχωρίζονται από λεπτό μη-μαγνητικό μονωτικό στρώμα (MgO) (Σχ. 1.1). Η μαγνήτιση του ενός από τα δύο σιδηρομαγνητικά στρώματα έχει σταθερή(καρφωμένη) διεύθυνση ενώ η διεύθυνση της μαγνήτισης του άλλου στρώματος μπορεί να μεταβάλλεται ελεύθερα. Όταν στα άκρα μιας MTJ εφαρμόζεται διαφορά δυναμικού (περνάει ρεύμα) τότε ορίζεται η μαγνητοαντίσταση σήραγγας (TMR) του συστήματος. Η σχετική διευθέτηση των μαγνητίσεων των σιδηρομαγνητικών στρωμάτων της MTJ, επηρεάζει το διερχόμενο ρεύμα σήραγγας από τη συσκευή. Όταν οι μαγνητίσεις είναι προσανατολισμένες αντιπαράλληλα η αντίσταση της MTJ αυξάνει σε μεγάλο ποσοστό σε σχέση με την περίπτωση που οι μαγνητίσεις είναι προσανατολισμένες παράλληλα. Οι μαγνητικές διεπαφές σήραγγας με MgO παρουσιάζουν πολύ μεγάλες τιμές μαγνητοαντίστασης και για το λόγο αυτό έχουν πολλές τεχνολογικές εφαρμογές ως κεφαλές ανάγνωσης σε σκληρούς δίσκους και σε συσκευές αισθητήρων[10, 11, 12, 19]. Επίσης οι μαγνητικές διεπαφές σήραγγας μπορούν να χρησιμοποιηθούν σαν μαγνητικές κυψελίδες μνήμης όπου το «0» και το «1» αντιστοιχούν στην αντιπαράλληλη και παράλληλη διεύθυνση των μαγνητίσεων τους αντίστοιχα. Για το λόγο αυτό οι MTJ έχουν μεγάλο τεχνολογικό ενδιαφέρον για την κατασκευή μαγνητικών μνημών τυχαίας προσπέλασης (MRAM), οι οποίες υπερτερούν των συνηθισμένων μνημών που βασίζονται σε τρανζίστορ(ημιαγωγούς), τόσο σε ταχύτητα όσο και σε σταθερότητα αποθήκευσης της πληροφορίας. Το κύριο πλεονέκτημα των MRAM είναι η δυνατότητα διατήρησης της πληροφορίας όταν διακόπτεται η παροχή ρεύματος.

Η διαδικασία εγγραφής της πληροφορίας σε μια MTJ αντιστοιχεί σε αλλαγή της σχετικής διεύθυνσης των δύο μαγνητίσεων. Στην πρώτη γενιά ανάπτυξης των MRAM η εγγραφή γινόταν κυρίως με την εφαρμογή εξωτερικού μαγνητικού πεδίου (Σχ. 1.2a). Για τον λόγο αυτό όμως, περιοριζόταν η δυνατότητα σμίκρυνσης των MRAM πέραν ενός ορίου. Πρόσφατα έγινε γνωστό ότι ο έλεγχος της διεύθυνσης των δύο μαγνητίσεων σε MTJ μπορεί να γίνει χωρίς την εφαρμογή μαγνητικών πεδίων, μέσω του φαινομένου της ροπής μεταφοράς σπιν (Spin Transfer Torque, STT). Πιο συγκεκριμένα το φαινόμενο της ροπής μεταφοράς σπιν εμφανίζεται σε MTJ στις οποίες οι μαγνητίσεις βρίσκονται υπό γωνία (είναι μη-συγγραμικές) οπότε υπάρχει μεταφορά στροφορμής σπιν από τα διερχόμενα ηλεκτρόνια στην μαγνήτιση των σιδηρομαγνητικών στρωμάτων. Αυτό οφείλεται στο ότι τα ηλεκτρόνια έχουν διαφορετικό άξονα πόλωσης του σπιν τους όταν διέρχονται από το ένα σιδηρομαγνητικό στρώμα στο άλλο. Η διανυσματική αυτή διαφορά στην στροφορμή σπιν, εμφανίζεται ως ροπή που εφαρμόζεται στην μαγνήτιση του σιδηρομαγνητικού στρώματος. Η ροπή αυτή είναι ικανή να στρέψει τη μαγνήτιση αλλάζοντας έτσι την σχετική διεύθυνση των μαγνητίσεων. Το φαινόμενο αυτό έχει επιβεβαιωθεί και πειραματικά. Έτσι οι

MTJ αποτελούν τα δομικά στοιχεία μιας νέας γενιάς μνημών RAM που ονομάζεται Spin-Transfer Torque Random Access Memory (STT-MRAM)[11, 13, 14], οι οποίες πιστεύεται από πολλούς ότι θα αποτελούν τις μελλοντικές μνήμες που θα χρησιμοποιούνται ευρέως(Σχ. 1.2b).

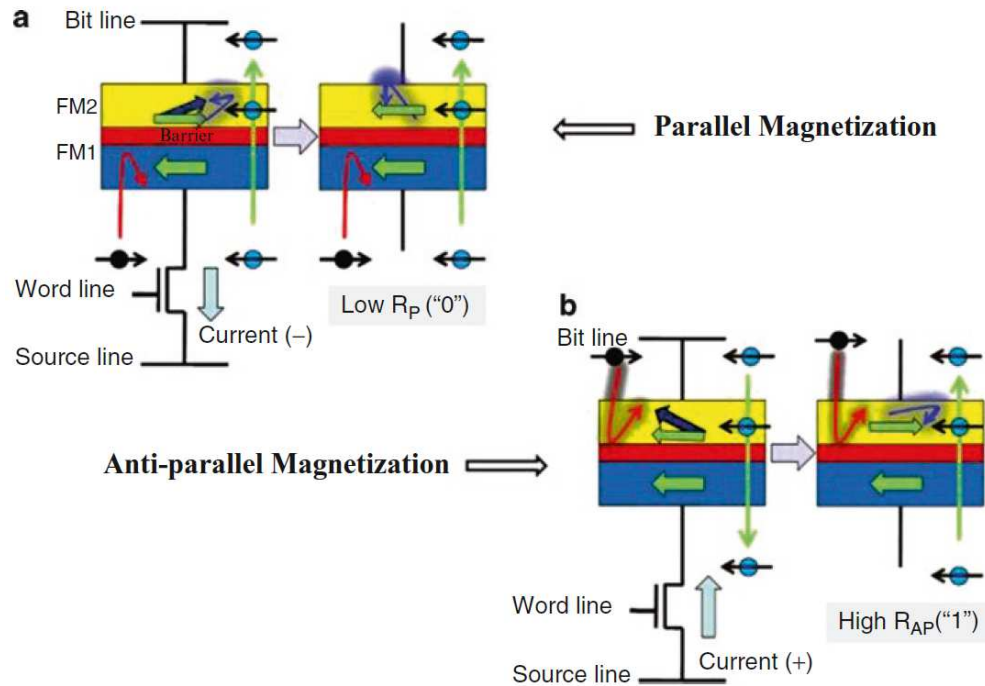


Σχήμα 1.2: α) Συμβατική Μαγνητική μνήμη MRAM, β) Μαγνητική μνήμη ροπής σπιν STT-MRAM.

Η αρχή λειτουργίας εγγραφής σε μία STT-MRAM βασίζεται στην δυνατότητα μεταβολής της διεύθυνσης της μαγνήτισης του ελεύθερου στρώματος, ελέγχοντας τη φορά του ρεύματος. Για να γίνει αυτό κατανοητό ως θεωρήσουμε ένα απλοϊκό μοντέλο κατά το οποίο τα ηλεκτρόνια με σπιν παράλληλο στην μαγνήτιση του εκάστοτε στρώματος διέρχονται χωρίς σκέδαση και δεν ασκούν ροπή σπιν σε αυτό, ενώ τα ηλεκτρόνια με σπιν αντιπαράλληλο στην μαγνήτιση σκεδάζονται πλήρως και ασκούν ροπή σπιν στην μαγνήτιση του υλικού, όπως φαίνεται σχηματικά στο Σχ.1.3(a, b).

Έτσι όταν η μαγνήτιση του ελεύθερου FM στρώματος (κίτρινο πλαίσιο) είναι αντιπαράλληλη με αυτή του σταθερού FM στρώματος (μπλε πλαίσιο) και θέλουμε να την αναστρέψουμε φροντίζουμε ώστε η φορά του ρεύματος είναι τέτοια ώστε τα ηλεκτρόνια να διέρχονται πρώτα μέσω του σταθερού στρώματος. Τότε τα ηλεκτρόνια με σπιν παράλληλο στην σταθερή μαγνήτιση διέρχονται χωρίς σκέδαση στο στρώμα με την ελεύθερη μαγνήτιση ενώ τα ηλεκτρόνια με σπιν αντιπαράλληλο σκεδάζονται πλήρως και ασκούν ροπή σπιν στη σταθερή μαγνήτιση η οποία όμως είναι πολύ δύσκολο να αναστραφεί. Τα διερχόμενα ηλεκτρόνια όταν βρεθούν στο ελεύθερο στρώμα έχουν σπιν αντιπαράλληλο με την μαγνήτισή του και της ασκούν ροπή σπιν, με αποτέλεσμα αυτή να αναστραφεί Σχ.1.3(a) και έτσι να έχουμε την επιθυμητή παράλληλη κατάσταση των δύο μαγνητίσεων.

Στη δεύτερη περίπτωση, όταν η μαγνήτιση του ελεύθερου FM στρώματος είναι παράλληλη προς αυτή του σταθερού FM στρώματος, η φορά του ρεύματος επιλέ-



Σχήμα 1.3: Αρχή της μεταβολής της διεύθυνσης της μαγνήτισης σε μια STT-MRAM μέσω της ροπής μεταφοράς σπιν. (a) Μεταβολή σε παράλληλη κατάσταση και (b) μεταβολή σε αντιπαράλληλη κατάσταση. Πηγή: T. Kawahara, R. Takemura, K. Miura, J. Hayakawa, S. Ikeda, Y.M. Lee, R. Sasaki, Y. Goto, K. Ito, T. Meguro, F. Matsukura, H. Takahashi, H. Matsuoka, H. Ohno, IEEE J. Solid State Circuits, 43(1), 109 (2008).

γεται έτσι ώστε τα ηλεκτρόνια να διέρχονται πρώτα μέσω του ελεύθερου στρώματος, όπως φαίνεται στο Σχήμα 1.3(b). Έτσι τα ηλεκτρόνια με σπιν παράλληλο στην μαγνήτιση διέρχονται χωρίς σκέδαση στο σταθερό στρώμα αλλά τα ηλεκτρόνια με σπιν αντιπαράλληλο σκεδάζονται και ασκούν ροπή σπιν στη μαγνήτιση του ελεύθερου στρώματος με αποτέλεσμα να αναστραφεί αντιπαράλληλα ως προς αυτή του σταθερού στρώματος της STT-MRAM[9].

Η μνήμη STT-MRAM αναδεικνύεται ως μνήμη βέλτιστης απόδοσης που συνδυάζει τα καλύτερα χαρακτηριστικά των σημερινών συμβατικών μνήμων (SRAM, DRAM, Flash κλπ) με τις απαιτήσεις του αύριο διότι παρέχει: (α) μη-μεταβλητότητα (όπως οι μνήμες Flash και MRAM), (β) υψηλή αντοχή (10^{15} κύκλοι σε σύγκριση με τη Flash που έχει 10^6 κύκλους και τη Phase change RAM με 10^9 κύκλους), και (γ) πολύ χαμηλούς χρόνους απόκρισης (latency) ταυτόχρονα [15]. Η Sony Corporation παρουσίασε πρώτη ένα δοκιμαστικό chip στα 180 nm βασισμένο στη λογική της STT-MRAM το 2005 στο IEDM[16], και η Hitachi με το πανεπιστήμιο Tohoku παρουσίασε ένα ολοκληρωμένο κύκλωμα CMOS(200 nm) με μνήμη STT-MRAM 2

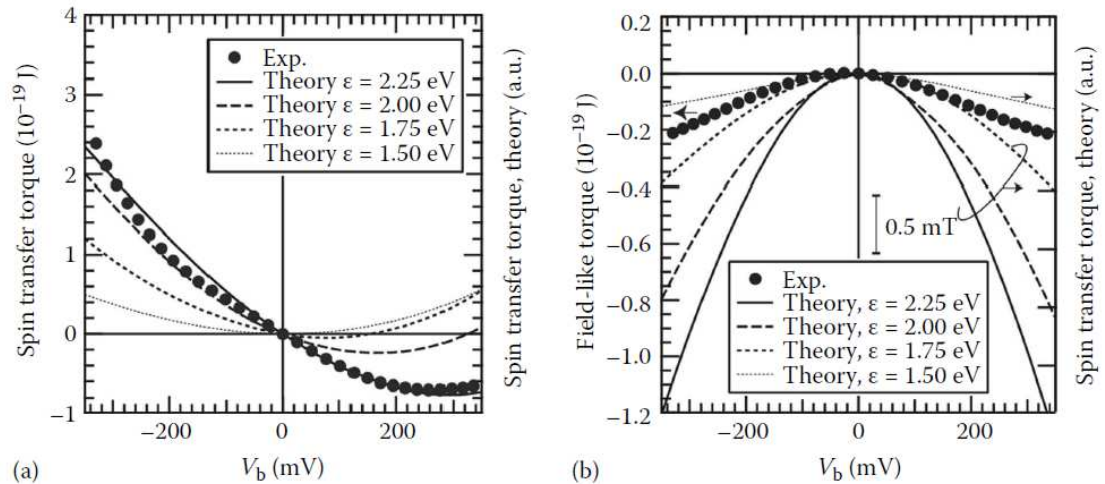
Mb το 2007 στο ISSCC [17]. Πρόσφατα, η εταιρεία Everspin Technologies, Inc ανακοίνωσε την αποστολή του πρώτου εμπορικά διαθέσιμου STT-MRAM chip (64 MB DDR3) στον κόσμο, το 2013 [18]. Ωστόσο, υπάρχουν ακόμα προκλήσεις για να γίνει η STT-MRAM μια επικρατούσα καθολική μνήμη ημιαγωγών. Για να καταλάβουμε καλύτερα την αρχή λειτουργίας της STT-MRAM, είναι σημαντικό να κατανοήσουμε τη διαδικασία ανάγνωσης και εγγραφής της πληροφορίας μέσω της MTJ. Η διαδικασία ανάγνωσης καθορίζεται σε μεγάλο βαθμό από το ρεύμα φορτίου ενώ το φαινόμενο της ροπής σπιν είναι κρίσιμο για τη διαδικασία εγγραφής και η εις βάθος ανάλυση του καθίσταται επιτακτική.

1.2 Αντικείμενο της διατριβής

Αντικείμενο της διατριβής αυτής είναι η θεωρητική διερεύνηση του φαινομένου της ροπής μεταφοράς σπιν και η κατανόηση των μηχανισμών που την ελέγχουν, για διαφορετικές τιμές της εξωτερικά εφαρμοζόμενης διαφοράς δυναμικού σε μαγνητικές διεπαφές σήραγγας. Στο μοντέλο μας η MTJ αποτελείται από ημιάπειρα σιδηρομαγνητικά ηλεκτρόδια με μη συγγραμικές μαγνητίσεις, διαχωριζόμενα από πεπερασμένο μονωτή. Χρησιμοποιήθηκε τρισδιάστατο μοντέλο ισχυρά δέσμιων ηλεκτρονίων μονής ζώνης σε συνδυασμό με τον φορμαλισμό των συναρτήσεων Green εκτός ισοροπίας του (NEFG) επεκτεταμένο στον χώρο των σπιν. Η ολική (καθαρή) ροπή σπιν που θα εφαρμοστεί σε ένα από τα δύο ημιάπειρα σιδηρομαγνητικά στρώματα της MTJ, ισούται με το διανυσματικό σπιν ρεύμα υπολογισμένο στην διεπαφή ανάμεσα στο μονωτή και το σιδηρομαγνητικό στρώμα. Η ροπή μεταφοράς σπιν μπορεί να αναλυθεί σε δύο συνιστώσες, μία κάθετη T_{\perp} και μία παράλληλη T_{\parallel} στο επίπεδο που ορίζεται από τις μαγνητίσεις των σιδηρομαγνητικών ηλεκτροδίων.

Οι θεωρητικοί υπολογισμοί υποδεικνύουν ότι η κάθετη συνιστώσα της ροπής σπιν εξαρτάται από το τετράγωνο της τιμής της διαφοράς δυναμικού, και ότι έχει συγκρίσιμη τιμή με την παράλληλη συνιστώσα. Μεγάλο ενδιαφέρον παρουσιάζει και η εξάρτηση της παράλληλης συνιστώσας της ροπής σπιν από την τάση. Αυτή μπορεί να αλλάξει πρόσημο χωρίς την αλλαγή της πολικότητας της διαφοράς δυναμικού. Τα αποτελέσματα αυτά είναι σύμφωνα με πρόσφατα αποτελέσματα από πειράματα σιδηρομαγνητικού συντονισμού (FMR) όπως φαίνεται στο Σχ.1.4.

Η κατανόηση του μηχανισμού αυτής της μη συμβατικής συμπεριφοράς της παράλληλης ροπής σπιν, έχει μεγάλο τεχνολογικό ενδιαφέρον διότι το πρόσημο της ροπής σπιν καθορίζει κατά κύριο λόγο και την τελική σχετική διευθέτηση των μαγνητίσεων. Μέσω της αρχής διατήρησης της στροφορμής για το ισοδύναμο κύκλωμα της MTJ, αποδεικνύεται ότι η παράλληλη ροπή σπιν, μπορεί να υπολογιστεί από τη διαφορά των σπιν ρευμάτων πλειονότητας και μειονότητας για την παράλληλη και



Σχήμα 1.4: Σύγκριση πειραματικών και θεωρητικών αποτελεσμάτων για την εξάρτηση των συνιστωσών της ροπής σπιν από την τάση. (a) Εξάρτηση της παράλληλης συνιστώσας T_{\parallel} . (b) Εξάρτηση της κάθετης συνιστώσας T_{\perp} . Οι λεπτές γραμμές αποτελούν θεωρητικούς υπολογισμούς της ροπής σπιν για διαφορετικές τιμές της ενέργειας διαχωρισμού σπιν ϵ . Τα σημεία αφορούν πειραματικά αποτελέσματα από πείραμα σιδηρομαγνητικού συντονισμού FMR για μαγνητική διεπαφή σήραγγας CoFeB/MgO/CoFeB. Πηγή: Θεωρία: Theodonis, I. et al., Phys. Rev. Lett., 97, 237205, 2006 Πείραμα: Kubota, H. et al., Nat. Phys., 4, 37, 2008.

αντιπαράλληλη διευσθέτηση των μαγνητίσεων της διεπαφής MTJ. Η σχέση αυτή είναι πολύ σημαντική αφού διευκολύνει κατά πολύ τους υπολογισμούς και είναι γενική, δηλαδή ανεξάρτητη από το μοντέλο που χρησιμοποιείται για να υπολογιστούν τα ρεύματα σήραγγας. Το σπιν ρεύμα για την παράλληλη διευσθέτηση εξαρτάται γραμμικά από το V ενώ το σπιν ρεύμα για την αντιπαράλληλη διευσθέτηση εξαρτάται από το τετράγωνο του V . Αυτό οφείλεται στη συμμετρική και μη συμμετρική μορφή του φράγματος δυναμικού στις δύο περιπτώσεις αντίστοιχα.

Μελετήθηκε επίσης εκτενώς το φαινόμενο της ροπής μεταφοράς σπιν σε συστήματα διπλών μαγνητικών διεπαφών σήραγγας (Double Barrier Magnetic Tunnel Junctions (DBMTJ)). Πιο αναλυτικά οι διπλές μαγνητικές διεπαφές σήραγγας που μελετήθηκαν αποτελούνται από ένα κεντρικό σιδηρομαγνητικό (Ferromagnetic (FM)) στρώμα που συνδέεται μέσω δύο λεπτών μονωτικών στρωμάτων με ημιάπειρες FM επαφές. Το προφίλ δυναμικού της διάταξης μοιάζει με πεπερασμένο πηγάδι δυναμικού. Τα ηλεκτρόνια στο πηγάδι βρίσκονται σε δέσμιες καταστάσεις πολωμένου σπιν παράλληλου ή αντιπαράλληλου με την διεύθυνση της μαγνήτισης του υλικού. Όσο αυξάνεται το μέγεθος της διάταξης, τόσο οι δέσμιες καταστάσεις και των δύο σπιν πυκνώνουν. Για να υπάρχει διέλευση σπιν ρεύματος διαμέσου του κεντρικού

FM στρώματος θα πρέπει να υπάρχουν διαθέσιμες καταστάσεις του αντίστοιχου σπιν, μέσα στο παράθυρο δυναμικού γύρω από την ενέργεια Fermi.

Όταν οι επαφές βρίσκονται κάτω από διαφορά δυναμικού και η μαγνήτιση του κεντρικού σιδηρομαγνητικού στρώματος σχηματίζει γωνία με την μαγνήτιση των επαφών, έχουμε την εμφάνιση του φαινομένου της ροπής σπιν. Βρήκαμε ότι η ροπή σπιν που εφαρμόζεται στη μαγνήτιση του κεντρικού στρώματος, μπορεί να ενισχυθεί όταν δύο δέσμιες καταστάσεις αντίθετου σπιν αλλά διαφορετικού κβαντικού αριθμού συμπίπτουν ενεργειακά και βρίσκονται μέσα στο ενεργειακό παράθυρο της διαφοράς δυναμικού που εφαρμόζεται εξωτερικά. Το αποτέλεσμα αυτό έχει μεγάλο τεχνολογικό ενδιαφέρον, αφού μπορεί να οδηγήσει στην μείωση της έντασης του ρεύματος που είναι απαραίτητο για την μεταβολή της διεύθυνσης της μαγνητικής ροπής του ελεύθερου μαγνητικού στρώματος σε STT-MRAM με διπλή MTJ. Βρίσκουμε επιπλέον ότι η τοπική ροπή σπιν στο κεντρικό FM στρώμα, ταλαντώνεται σαν συνάρτηση της απόστασης από την επαφή. Επίσης δείχνουμε ότι η γωνιακή εξάρτηση της ροπής σπιν δεν ακολουθεί την αναμενόμενη συνημιτονοειδή συμπεριφορά όπως στην περίπτωση της μονής MTJ. Τέλος δείχνουμε ότι η τιμή της ενέργειας των κβαντικών καταστάσεων πηγαδιού πολωμένου σπιν καθορίζει την εξάρτηση από την τάση τόσο της τοπικής όσο και της ολικής ροπής σπιν αλλά και του διγραμμικού και διτετραγωνικού συντελεστή της ενέργειας ανταλλαγής.

1.3 Οργάνωση της διατριβής

Η παρούσα εργασία χωρίζεται σε δύο μέρη.

Το πρώτο μέρος αποτελεί την μελέτη της ροπής σπιν σε απλές μαγνητικές διεπαφές σήραγγας. Διαρθρώνεται ως εξής: Πρώτα υπάρχει μια μικρή εισαγωγή και ακολουθεί η μέθοδος που χρησιμοποιήθηκε για τη μοντελοποίηση της μαγνητικής επαφής σήραγγας και για τους θεωρητικούς υπολογισμούς της ροπής μεταφοράς σπιν και της μαγνητοαντίστασης TMR. Μετά παρουσιάζονται και συζητούνται τα αριθμητικά αποτελέσματα της εξάρτησης των συνιστωσών της ροπής σπιν και της μαγνητοαντίστασης TMR από την τάση και συνοψίζουμε με τα συμπεράσματα.

Το δεύτερο μέρος αποτελεί την μελέτη της ροπής σπιν σε διπλές μαγνητικές διεπαφές σήραγγας. Διαρθρώνεται ως εξής: Στην αρχή του υπάρχει μια μικρή εισαγωγή και συνεχίζει με την μεθοδολογία που χρησιμοποιήθηκε για την μοντελοποίηση της διπλής διεπαφής και για τους υπολογισμούς. Κατόπιν παρουσιάζονται και αναλύονται τα αποτελέσματα και το κεφάλαιο κλείνει με τα συμπεράσματα.

Τέλος, σαν παράρτημα παρατίθενται οι κώδικες που χρησιμοποιήθηκαν για τους υπολογισμούς.

Μέρος I

Ροπή μεταφοράς σπιν σε μονή MTJ

Κεφάλαιο 2

Εισαγωγή

Η μαγνητική διεπαφή σήραγγας MTJ αποτελείται από δύο σιδηρομαγνητικά στρώματα διαχωριζόμενα από λεπτό μη-μαγνητικό μονωτικό στρώμα (φράγμα δυναμικού). Συνήθως η μαγνήτιση ενός από τα δύο σιδηρομαγνητικά στρώματα έχει σταθερή διεύθυνση ενώ η διεύθυνση της άλλης μαγνήτισης μπορεί να ελεγχθεί από σχετικά μικρό, εξωτερικά εφαρμοζόμενο, μαγνητικό πεδίο. Τα τελευταία χρόνια, η μελέτη του σπιν(spin) των ηλεκτρονίων κατά την διέλευση τους μέσα από μαγνητικές διεπαφές σήραγγας (MTJ), έχει συγκεντρώσει μεγάλο επιστημονικό ενδιαφέρον. Αυτό συμβαίνει τόσο λόγω των νέων φυσικών φαινομένων που εμφανίζονται στις διεπαφές MTJ αλλά κυρίως λόγω των πολλών εφαρμογών των διεπαφών MTJ σε κεφαλές μαγνητικής εγγραφής για σκληρούς δίσκους υπολογιστών, σε μαγνητικές μνήμες τυχαίας προσπέλασης (MRAM), καθώς και σε μαγνητικούς αισθητήρες και ταλαντωτές [20, 21, 16].

2.1 Μαγνητοαντίσταση σήραγγας

Στις MTJ εμφανίζεται το φαινόμενο της μαγνητοαντίστασης σήραγγας (TMR - Tunneling Magnetoresistance effect), όπου η ηλεκτρική αντίσταση του συστήματος, ή αλλιώς το ρεύμα σήραγγας διαμέσου του φράγματος δυναμικού, έχει ισχυρή εξάρτηση από τη σχετική διεύθυνση των μαγνητίσεων των ηλεκτροδίων. Η μαγνητο-

αντίσταση σήραγγας TMR ορίζεται ως εξής

$$TMR \equiv \frac{(I_{FM} - I_{AF})}{I_{AF}} \quad (2.1)$$

όπου I_{FM} και I_{AF} είναι τα ρεύματα που διαρρέουν την μαγνητική επαφή σήραγγας διαμέσω του φράγματος δυναμικού, για παράλληλη(σιδηρομαγνητική FM) και αντί-παράλληλη(αντί-σιδηρομαγνητική AF) διευθέτηση των μαγνητίσεων αντίστοιχα, και ισχύει ότι $I_{AF} < I_{FM}$. Έτσι η επαφή MTJ υλοποιεί ένα κομμάτι(bit) πληροφορίας αφού σε παράλληλη διευθέτηση των μαγνητίσεων της, δηλαδή για μεγάλο ρεύμα διέλευσης, μπορεί να αντιστοιχιστεί η τιμή '1' ενώ σε αντιπαράλληλη διευθέτηση, δηλαδή για μικρό ρεύμα διέλευσης αντιστοιχεί η τιμή '0'.

Πρόσφατα πειράματα [12, 19, 22] έχουν δείξει ότι η TMR, σε κρυσταλλικές επαφές σήραγγας Fe/MgO/Fe, έχει πολύ μεγάλη τιμή (αρκετές εκατοντάδες τοις εκατό) σε θερμοκρασία δωματίου, όπως είχε προβλεφθεί θεωρητικά [10, 23]. Δηλαδή, στις MTJ η διάκριση μεταξύ των καταστάσεων '0' και '1' είναι πολύ ευκρινής και αυτό έχει μεγάλη τεχνολογική σημασία. Παρόλα αυτά, ένα από τα πιο γνωστά σημαντικά μειονεκτήματα για την αξιοποίηση των επαφών MTJ σε μαγνητικές μνήμες τυχαίας προσπέλασης(MRAM) είναι η μεγάλη μείωση του φαινομένου της μαγνητοαντίστασης σαν συνάρτηση της τάσης.

Παρόλο που πληθώρα πειραματικών αποτελεσμάτων συστηματικά δείχνουν ότι η TMR σε διεπαφές MTJ μειώνεται όσο αυξάνεται η εφαρμοζόμενη τάση στα άκρα της MTJ, τα περισσότερα είναι αντιφατικά ως προς τους φυσικούς λόγους αυτής της μείωσης [24, 25, 26, 27, 28, 29]. Διάφοροι μηχανισμοί έχουν προταθεί ως υπεύθυνοι για την εξήγηση της μείωσης αυτής, συμπεριλαμβανομένων των εξής : διεργασίες ανελαστικής σκέδασης με μεταβολή του σπιν λόγω ανελαστικών αλληλεπιδράσεων των διερχόμενων ηλεκτρονίων με διεγερμένα επιφανειακά μαγνόνια (magnon excitations) [30, 31], διέλευση σήραγγας των ηλεκτρονίων ανεξάρτητη του σπιν σε δύο βήματα μέσω ενδιάμεσων ενεργειακών καταστάσεων που οφείλονται σε ατέλειες στο μονωτικό στρώμα [32], πυκνότητα καταστάσεων στην ενέργεια Fermi που εξαρτάται από την εφαρμοζόμενη τάση [33], και η ηλεκτρονική δομή των σιδηρομαγνητικών ηλεκτροδίων [27, 28, 34, 35].

2.2 Ροπή μεταφοράς σπιν

Ενώ στα συστήματα μαγνητικών επαφών σήραγγας (MTJ) η σχετική διευθέτηση των μαγνητίσεων επηρεάζει τη ροή του ρεύματος, οι Slonczewski [1] και Berger [3] προέβλεψαν, ανεξάρτητα ο ένας από τον άλλο, το αντίστροφο φαινόμενο. Δηλαδή η ροή ρεύματος ηλεκτρονίων με πολωμένο σπιν σε MTJ με μη συγραμμικές μα-

γνητίσεις, **μπορεί να μεταφέρει στροφορμή σπιν** από τους φορείς στον σιδηρομαγνήτη και να μεταβάλλει τον προσανατολισμό της αντίστοιχης μαγνήτισης ακόμα και σε απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, με τη διέλευση αρκετά μεγάλης πυκνότητας ρεύματος. Αυτό το φαινόμενο, γνωστό ως **ροπή μεταφοράς σπιν** (spin transfer torque) ή πιο απλά ροπή σπιν, έχει έκτοτε μελετηθεί διεξοδικά τόσο θεωρητικά [36, 37, 38, 39, 40, 41, 42] όσο και πειραματικά [43, 7, 44, 45, 46, 47].

Μία σημαντική μακροσκοπική εκδήλωση του φαινομένου της ροπής σπιν είναι η μεταβολή της φοράς της μαγνήτισης μέσω ρεύματος (CIMS - Current Induced Magnetic Switching), η οποία έχει πλέον επιβεβαιωθεί πειραματικά σε μαγνητικές επαφές σήραγγας από πολλά εργαστήρια [13, 14, 94]. Συνεπώς η CIMS παρέχει ένα νέο ισχυρό εργαλείο για τη μελέτη των φαινομένων μεταφοράς σε μαγνητικά νανοσυστήματα. Επιπρόσθετα, η ροπή μεταφοράς σπιν έχει δειχθεί πειραματικά ότι μπορεί να ενεργοποιήσει νανοσκοπικούς ταλαντωτές μικροκυμάτων σε διεπαφές MTJ [48, 49, 50].

Παρόλο που το φαινόμενο της ροπής σπιν έχει αναμφισβήτητα παρατηρηθεί, η ποσοτική συμπεριφορά του φαινομένου σε μία μαγνητική επαφή και πιο συγκεκριμένα η εξάρτηση της ροπής σπιν σαν συνάρτηση της εξωτερικά εφαρμοζόμενης τάσης δεν έχει κατανοηθεί πλήρως και παραμένει αντιφατική [44, 45, 46, 47]. Η ροπή μεταφοράς σπιν μπορεί να αναλυθεί σε δύο συνιστώσες, μία κάθετη T_{\perp} και μία παράλληλη T_{\parallel} στο επίπεδο που ορίζεται από τις μαγνητίσεις των σιδηρομαγνητικών ηλεκτροδίων (βλέπε Σχ.3.1. Η κάθετη T_{\perp} συνηθίζεται να αναφέρεται στην διεθνή βιβλιογραφία ως πεδιακή (field-like) ενώ η παράλληλη T_{\parallel} ως Slonczewski ή μεταφοράς σπιν (spin-transfer) συνιστώσα της ροπής σπιν αντίστοιχα. Και οι δύο συνιστώσες είναι κάθετες στη μαγνήτιση στην οποία επιδρούν αλλά και μεταξύ τους. Έχουν όμως εντελώς διαφορετική συμπεριφορά σαν συνάρτηση της εφαρμοζόμενης τάσης.

2.3 Εξάρτηση ροπής σπιν από την τάση

Για τεχνολογικούς λόγους είναι αναγκαία η πλήρης κατανόηση της συμπεριφοράς της ροπής σπιν σαν συνάρτηση της τάσης και η αναζήτηση της προέλευσής της στην ηλεκτρονική δομή. Πολύ σημαντική είναι επίσης η σχέση του φαινομένου ροπής μεταφοράς σπιν με το φαινόμενο της μαγνητοαντίστασης σήραγγας έτσι ώστε να προετοιμαστεί το έδαφος για νέες τεχνολογικές εφαρμογές που θα βασίζονται σε αυτά τα φαινόμενα [52]. Παλαιότερα πειράματα είχαν υποδείξει [7, 44, 45, 46, 47] ότι το πρόσημο της παράλληλης συνιστώσας της ροπής σπιν T_{\parallel} , αλλάζει με την αλλαγή της φοράς του ρεύματος. Επίσης μέχρι πρότινος η κάθετη συνιστώσα T_{\perp} θεωρούνταν αμελητέα σε σχέση με την παράλληλη σε μικρομαγνητικούς υπολογισμούς σε διεπαφές MTJ. Με άρθρα μας προβλέψαμε θεωρητικά μία ανώμαλη συμπεριφορά

της T_{\parallel} σαν συνάρτηση της τάσης σε MTJ [37]. Πιο συγκεκριμένα, η T_{\parallel} μπορεί να αλλάξει πρόσημο χωρίς αντίστοιχη αλλαγή της φοράς του ρεύματος, ή ακόμα και να έχει μια δευτεροβάθμια εξάρτηση από την τάση. Από την άλλη μεριά προβλέψαμε ότι η T_{\perp} έχει συγκρίσιμη τιμή με την T_{\parallel} και ότι είναι δευτεροβάθμια συνάρτηση της τάσης [37, 51]. Πρόσφατα πειράματα επιβεβαιώνουν τις προβλέψεις μας [44, 45, 94].

2.4 Σύνοψη

Παρακάτω παρουσιάζουμε μία περιεκτική μελέτη της εξάρτησης των φαινομένων της ροπής μεταφοράς σπιν και μαγνητοαντίστασης σήραγγας από την εφαρμοζόμενη τάση. Χρησιμοποιήθηκε μοντέλο ισχυρά δέσμιων ηλεκτρονίων μονής ζώνης (one-band tight-binding (TB) model) και η μέθοδος των συναρτήσεων Green εκτός ισορροπίας (φορμαλισμός Keldysh). Μια σύντομη περιγραφή των αποτελεσμάτων μας δημοσιεύτηκαν πρόσφατα στο άρθρο Phys. Rev. Lett. 97:237205 (2006) [37] και μια πιο αναλυτική στο άρθρο Phys. Rev. B 79:174416, 2009[56]. Γίνεται λεπτομερής μελέτη της επίδρασης της κατάληψης ζώνης (band filling) και της ενέργειας διαχωρισμού (exchange splitting) των σιδηρομαγνητικών ηλεκτροδίων στην συμπεριφορά των T_{\parallel} , T_{\perp} , και του λόγου TMR σαν συνάρτηση της εφαρμοζόμενης τάσης.

Δείχνουμε ότι η παράλληλη συνιστώσα της ροπής μεταφοράς σπιν, T_{\parallel} , μπορεί να εμφανίσει μία πλούσια και απρόβλεπτη συμπεριφορά σαν συνάρτηση της τάσης. Η συμπεριφορά αυτή μπορεί να γίνει κατανοητή, αναλύοντας την T_{\parallel} σε ρεύματα φορτίου και σπιν και μελετώντας την εξάρτηση αυτών των ρευμάτων από την αλληλεπίδραση των μεταβατικών καταστάσεων (evanescent states) του μονωτή με τις επιφάνειες Fermi των σιδηρομαγνητικών ηλεκτροδίων. Επίσης βρίσκουμε ότι η κάθετη συνιστώσα T_{\perp} έχει δευτεροβάθμια εξάρτηση από την τάση V και μάλιστα ισχύει ότι $d^2T_{\perp}/dV^2 < 0$. Ενδιαφέρον έχει ότι ανάλογα με τις τιμές της κατάληψης ζώνης και της ενέργειας διαχωρισμού η T_{\perp} μπορεί να αλλάξει πρόσημο για πεπερασμένη τιμή της τάσης. Το γεγονός αυτό μπορεί να έχει σημαντικές πρακτικές εφαρμογές, αφού έτσι η αλληλεπίδραση λόγω ανταλλαγής (IEC - Interlayer Exchange Coupling) θα μπορούσε να αλλάξει πρόσημο με την τάση [51, 53]. Τέλος, δείχνουμε ότι οι τιμές της κατάληψης ζώνης και της ενέργειας διαχωρισμού έχουν μεγάλη επίδραση στην εξάρτηση του λόγου TMR από την τάση.

Τα παρακάτω κεφάλαια έχουν ως εξής: Πρώτα παρουσιάζεται η μέθοδος που χρησιμοποιήθηκε για τη μοντελοποίηση της μαγνητικής επαφής σήραγγας τους θεωρητικούς υπολογισμούς της ροπής μεταφοράς σπιν και του λόγου TMR. Μετά παρουσιάζονται και συζητούνται τα αριθμητικά αποτελέσματα της εξάρτησης των T_{\parallel} , T_{\perp} , και TMR από την τάση και συνοψίζουμε με τα συμπεράσματα.

Κεφάλαιο 3

Μεθοδολογία

3.1 Γεωμετρία

Στο μοντέλο μας η μαγνητική επαφή σήραγγας MTJ αποτελείται από δύο (αριστερό και δεξιό) ημιάπειρα σιδηρομαγνητικά (FM) ηλεκτρόδια με μη συγγραμμικές μαγνητίσεις, τα οποία διαχωρίζονται από μη μαγνητικό λεπτό μονωτικό στρώμα που αποτελείται από N ατομικά επίπεδα, όπως φαίνεται στο Σχ. 3.1. Η μαγνήτιση \mathbf{M}' της δεξιάς σιδηρομαγνητικής επαφής βρίσκεται κατά μήκος του άξονα z του συστήματος συντεταγμένων που φαίνεται στο Σχ. 3.1. Η μαγνήτιση \mathbf{M} της αριστερής σιδηρομαγνητικής επαφής εκτείνεται στο $x - z$ επίπεδο στραμμένη κατά γωνία θ γύρω από τον y άξονα σε σχέση με την \mathbf{M}' .

3.2 Χαμιλτονιανή συστήματος

Η Χαμιλτονιανή H για το σύστημα της μαγνητικής επαφής σήραγγας (MTJ) περιγράφεται από το άθροισμα των Χαμιλτονιανών ισχυρά δέσμιων ηλεκτρονίων μονού τροχιακού με σπιν για κυβικό πλέγμα (single orbital simple-cubic tight binding Hamiltonian, της αριστερής (L) και δεξιάς (R) σιδηρομαγνητικής επαφής και του μονωτή (B) και των αλληλεπιδράσεων μεταξύ τους. Δηλαδή

$$H = H_L + H_R + H_B + H_{int}, \quad (3.1)$$

όπου

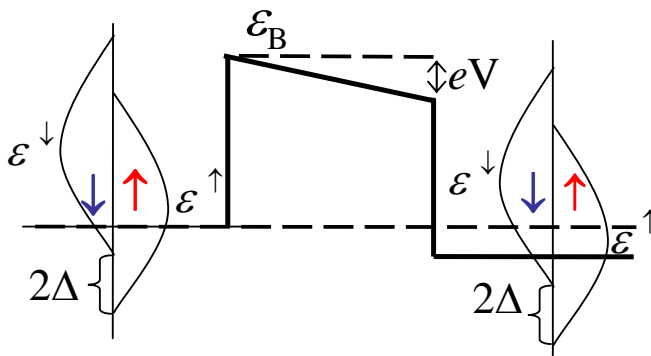
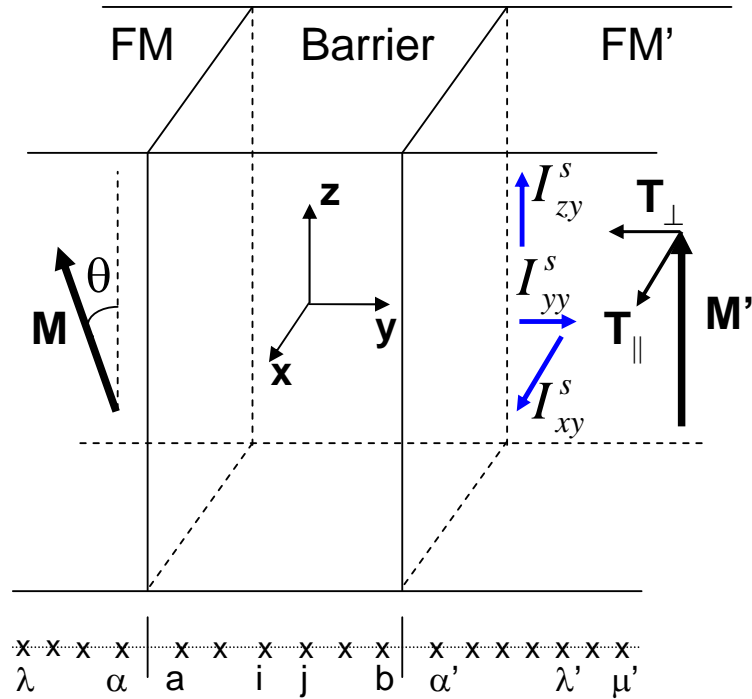
$$H_L = \sum_{\sigma;\lambda} \epsilon_{\lambda}^{\sigma} c_{\lambda}^{\sigma\dagger} c_{\lambda}^{\sigma} + \sum_{\sigma;\lambda,\mu} t_{\lambda\mu}^{\sigma} c_{\lambda}^{\sigma\dagger} c_{\mu}^{\sigma}, \quad (3.2)$$

$$H_R = \sum_{\sigma;\lambda'} \epsilon_{\lambda'}^{\sigma} c_{\lambda'}^{\sigma\dagger} c_{\lambda'}^{\sigma} + \sum_{\sigma;\lambda',\mu'} t_{\lambda'\mu'}^{\sigma} c_{\lambda'}^{\sigma\dagger} c_{\mu'}^{\sigma}, \quad (3.3)$$

$$H_B = \sum_i \epsilon_i c_i^{\dagger} c_i + \sum_{i,j} t_{ij} c_i^{\dagger} c_j, \quad (3.4)$$

και

$$H_{int} = \sum_{\sigma} (t_{a\alpha}^{\sigma} c_a^{\sigma\dagger} c_{\alpha}^{\sigma} + t_{b\alpha'}^{\sigma} c_b^{\sigma\dagger} c_{\alpha'}^{\sigma} + hc). \quad (3.5)$$



Σχήμα 3.1: (Πάνω) Σχηματική αναπαράσταση της μαγνητικής επαφής σήραγγας η οποία αποτελείται από δύο (αριστερό και δεξιό) ημιάπειρα σιδηρομαγνητικά (FM) ηλεκτρόδια, τα οποία διαχωρίζονται από μη μαγνητικό λεπτό μονωτικό στρώμα N ατομικών επιπέδων. Η μαγνήτιση \mathbf{M}' της δεξιάς σιδηρομαγνητικής επαφής βρίσκεται κατά μήκος του z άξονα, ενώ η μαγνήτιση \mathbf{M} της αριστερής σιδηρομαγνητικής επαφής είναι στραμμένη κατά γωνία θ γύρω από τον y άξονα σε σχέση με την \mathbf{M}' . (Κέντρο) Οι τονισμένοι και άτοντοι ελληνικοί δείκτες δηλώνουν ατομικά επίπεδα στην αριστερή και στη δεξιά FM επαφή αντίστοιχα. Οι λατινικοί δείκτες δηλώνουν ατομικά επίπεδα στην περιοχή του μονωτή. (Κάτω) Σχηματική παρουσίαση του προφίλ δυναμικού του φραγμού, όπου σημειώνεται χαρακτηριστικά η διαφορά στην πυκνότητα καταστάσεων των δύο ειδών σπιν κατά 2Δ όπου Δ είναι η ενέργεια διαχωρισμού. Τα ϵ_{\uparrow} , ϵ_{\downarrow} , και ϵ_B είναι οι ενέργειες ατομικών σημείων (on-site energies) των ζωνών πλειονότητας (σπιν πάνω), μειονότητας (σπιν κάτω) και μονωτή αντίστοιχα. Η κάτω διακεκομμένη γραμμή υποδεικνύει την ενέργεια Fermi στην κατάσταση ισορροπίας.

Στις παραπάνω εξισώσεις οι τονισμένοι(άτονοι) ελληνικοί δείκτες δηλώνουν ατομικά επίπεδα στην αριστερή (δεξιά) FM επαφή αντίστοιχα, και οι λατινικοί δείκτες δηλώνουν ατομικά επίπεδα στην περιοχή του μονωτή. Το τελευταίο (πρώτο) ατομικό σημείο στην αριστερή (δεξιά) επαφή δίπλα στην αριστερή (δεξιά) επαφή με τον μονωτή δηλώνονται με a (a') αντίστοιχα, ενώ το πρώτο (τελευταίο) ατομικό σημείο στον μονωτή δηλώνεται με a (b) αντίστοιχα. Με c_μ^σ και $c_\mu^{\sigma\dagger}$ δηλώνονται οι τελεστές καταστροφής και δημιουργίας ενός ηλεκτρονίου στο ατομικό σημείο μ με σπιν σ . Οι ϵ_λ^σ και ϵ_i είναι η ενέργεια ατομικού σημείου(on-site energy) για τις επαφές και τον μονωτή αντίστοιχα που για τις επαφές εξαρτάται από το σπιν, ενώ για τον μονωτή όχι. Με $t_{\lambda\mu}^\sigma$ και t_{ij} δίνονται τα στοιχεία πίνακα σύζευξης (hopping matrix elements) ανάμεσα στα ατομικά σημεία λ και μ των επαφών και i και j του μονωτή αντίστοιχα.

3.3 Συναρτήσεις Green

Η εξέταση των ιδιοτήτων των ρευμάτων μεταφοράς φορτίου και σπιν σε διεπαφές MTJ βασίζεται σε επέκταση της μεθοδολογίας Keldysh [54] με την εισαγωγή πινάκων 2×2 για την περιγραφή του σπιν των ηλεκτρονίων, έτσι ώστε να μπορεί να περιγραφεί η περίπτωση μη συγγραμμικών μαγνητίσεων των δύο FM ηλεκτροδίων. Η εξίσωση Schrödinger ενός ηλεκτρονίου με χρήση πίνακα (retarded) συνάρτησης Green στο χώρο του σπιν,

$$\hat{g}_{pq} = \begin{pmatrix} g_{pq}^{\uparrow\uparrow} & g_{pq}^{\uparrow\downarrow} \\ g_{pq}^{\downarrow\uparrow} & g_{pq}^{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

για κάθε **ασύνδετη** επιμέρους περιοχή $\Omega = L, R$ ή B , μπορεί να γραφεί ως

$$\sum_{p_1, q, p_1 \in \Omega} \left\{ [(E - \epsilon_{\mathbf{k}_\parallel})\delta_{pp_1} - \bar{H}_{pp_1}] \hat{I} - \delta H_{pp_1} \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix} \right\} \times \begin{pmatrix} g_{p_1q}^{\uparrow\uparrow} & g_{p_1q}^{\uparrow\downarrow} \\ g_{p_1q}^{\downarrow\uparrow} & g_{p_1q}^{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} = \delta_{pq} \hat{I}, \quad (3.7)$$

όπου p και q δηλώνουν ατομικά σημεία στην ασύνδετη περιοχή Ω , $\epsilon_{\mathbf{k}_\parallel}$ είναι η ενέργεια του επιπέδου κυματανύσματος (in-plane wave vector), \mathbf{k}_\parallel , της κατάστασης Bloch, ενώ \hat{I} είναι ο 2×2 μοναδιαίος πίνακας, ενώ θ είναι η γωνία στροφής μετρούμενη από τον άξονα z στο επίπεδο xz . Οι ποσότητες

$$\bar{H}_{pq} = \epsilon_\Omega^0 \delta_{pq} + t_\Omega^0 (\delta_{p,q+1} + \delta_{p,q-1}) \quad (3.8)$$

και

$$\delta H_{pq} = \Delta_\Omega \delta_{pq} + \Delta_\Omega^t (\delta_{p,q+1} + \delta_{p,q-1}) \quad (3.9)$$

περιγράφουν τα μέσου σπιν και διαφοράς σπιν μέρη της Χαμιλτονιανής αντίστοιχα, όπου $\varepsilon_{\Omega}^0 = (\varepsilon_{\Omega}^{\uparrow} + \varepsilon_{\Omega}^{\downarrow})/2$, $t_{\Omega}^0 = (t_{\Omega}^{\uparrow} + t_{\Omega}^{\downarrow})/2$, $\Delta_{\Omega} = (\varepsilon_{\Omega}^{\downarrow} - \varepsilon_{\Omega}^{\uparrow})/2$, και $\Delta_{\Omega}^t = (t_{\Omega}^{\uparrow} - t_{\Omega}^{\downarrow})/2$. Για να μειωθεί ο αριθμός των παραμέτρων, θεωρήθηκαν μόνο στοιχεία πίνακα σύζευξης πλησιέστερων γειτόνων ανεξάρτητα από το σπιν, τα οποία είναι τα ίδια και στις δύο σιδηρομαγνητικές επαφές και στον μονωτή και στις συζεύξεις FM/B, δηλαδή $t_{\Omega}^{\sigma} = t_{a\alpha}^{\sigma} = t_{b\alpha'}^{\sigma} = t$. Επίσης, θεωρήθηκαν πανομοιότυπες σιδηρομαγνητικές επαφές, η περίπτωση δηλαδή συμμετρικής μαγνητικής επαφής σήραγγας, με $\Delta_{L(R)} = (\varepsilon_{L(R)}^{\downarrow} - \varepsilon_{L(R)}^{\uparrow})/2$, και $\Delta_{\Omega}^t = \Delta_B = 0$. Κατά την εφαρμογή εξωτερικής διαφοράς δυναμικού στα άκρα των επαφών, $\varepsilon_R^{\sigma} - \varepsilon_L^{\sigma} = eV$, και το δυναμικό μέσα στον μονωτή, $\varepsilon_{B,n} = \varepsilon_B - eV \frac{n-1}{N-1}$ αλλάζει γραμμικά με τον αριθμό του επιπέδου n .

3.4 Εξίσωση Dyson

Ο 2×2 πίνακας της (retarded) συνάρτησης Green, \hat{G}_{pq} ,

$$\hat{G}_{pq} = \begin{pmatrix} G_{pq}^{\uparrow\uparrow} & G_{pq}^{\uparrow\downarrow} \\ G_{pq}^{\downarrow\uparrow} & G_{pq}^{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

του **συνδεδεμένου συνολικού συστήματος** της MTJ μπορεί να προσδιοριστεί λύνοντας ένα σύστημα συνδεδεμένων εξισώσεων Dyson της μορφής

$$\hat{G}_{pq} = \hat{g}_{pq} + \hat{g}_{pa} \hat{\Sigma}_{aa} \hat{G}_{aq} + \hat{g}_{pb} \hat{\Sigma}_{bb} \hat{G}_{bq}, \quad (3.11)$$

όπου λαμβάνεται υπόψη η διάδοση του ηλεκτρονίου διαμέσω των συζεύξεων στις επαφές FM-μονωτή. Παρόμοια εξίσωση μπορεί να γραφεί και για την (advanced) συνάρτηση Green, \hat{G}_{pq} , όπου η \hat{g}_{pq} αντικαθίσταται με $\hat{\hat{g}}_{pq}$. Εδώ \hat{g} είναι ο 2×2 πίνακας διαδότη (propagator) της κάθε ασύνδετης περιοχής όπως υπολογίζεται από την Εξ.3.7, ενώ οι αυτοενέργειες (self energies) στα ατομικά σημεία a και b είναι

$$\hat{\Sigma}_{aa} = t \hat{g}_{\alpha\alpha} t, \quad \hat{\Sigma}_{bb} = t \hat{g}_{\alpha'\alpha'} t. \quad (3.12)$$

Η λύση του συστήματος των συζευγμένων εξισώσεων Dyson(3.11) δίνει αναλυτικές εκφράσεις για τα στοιχεία του πίνακα \hat{G}_{pq} . Για παράδειγμα, τα στοιχεία του πίνακα σπιν της (advanced) συνάρτησης Green ανάμεσα στα δύο άκρα του μονωτή είναι,

$$G_{ab}^{\uparrow\uparrow} = \frac{g_{ab}}{D^{\uparrow} \left[1 - P \left(\Sigma_{aa}^{\downarrow\uparrow} \right)^2 / D^{\uparrow} D^{\downarrow} \right]}, \quad (3.13)$$

και

$$G_{ab}^{\downarrow\uparrow} = \frac{g_{ab}\Sigma_{aa}^{\downarrow\uparrow} \left((1 - g_{bb}\Sigma_{bb}^{\uparrow\uparrow})g_{aa} + g_{ab}g_{ba}\Sigma_{bb}^{\uparrow\uparrow} \right)}{D^{\uparrow}D^{\downarrow} - P \left(\Sigma_{aa}^{\downarrow\uparrow} \right)^2}. \quad (3.14)$$

Εδώ,

$$D^{\uparrow(\downarrow)} = (1 - g_{aa}\Sigma_{aa}^{\uparrow\uparrow(\downarrow\downarrow)})(1 - g_{bb}\Sigma_{bb}^{\uparrow\uparrow(\downarrow\downarrow)}) - g_{ab}g_{ba}\Sigma_{aa}^{\uparrow\uparrow(\downarrow\downarrow)}\Sigma_{bb}^{\uparrow\uparrow(\downarrow\downarrow)}, \quad (3.15)$$

και

$$P = \left(g_{ab}g_{ba}\Sigma_{bb}^{\uparrow\uparrow} + g_{aa}(1 - g_{bb}\Sigma_{bb}^{\uparrow\uparrow}) \right) \left(g_{ab}g_{ba}\Sigma_{bb}^{\downarrow\downarrow} + g_{aa}(1 - g_{bb}\Sigma_{bb}^{\downarrow\downarrow}) \right). \quad (3.16)$$

Παρατηρήστε ότι η συνάρτηση Green για τον ασύνδετο μονωτή, g_{ab} είναι ανεξάρτητη του σπιν εφόσον ο μονωτής είναι μη μαγνητικός. Οι σχέσεις για $G_{ab}^{\downarrow\downarrow}$ και $G_{ab}^{\uparrow\downarrow}$ είναι όμοιες με τις παραπάνω, όπου οι $\Sigma^{\uparrow\uparrow}$ και $\Sigma^{\downarrow\uparrow}$ αντικαθίστανται με τις $\Sigma^{\downarrow\downarrow}$ και $\Sigma^{\uparrow\downarrow}$.

3.5 Μέθοδος Keldysh

Η κινητική εξίσωση (kinetic equation) που χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό του εκτός ισορροπίας (non-equilibrium) 2×2 πίνακα συναρτήσεων Green όπως απορρέει από τη μέθοδο Keldysh [55] είναι

$$\hat{F}_{pq} = \hat{f}_{pq} + \hat{g}_{pq_1}\hat{\Sigma}_{q_1q_2}\hat{F}_{q_2q} + \hat{f}_{pq_1}\hat{\Sigma}_{q_1q_2}\hat{G}_{q_2q}, \quad (3.17)$$

όπου \hat{f} είναι οι εκτός ισορροπίας 2×2 πίνακες συναρτήσεων Green για τις ασύνδετες επαφές και μονωτή, ενώ η αυτοενέργεια είναι

$$\hat{\Sigma}_{q_1q_2} = t\hat{I}(\delta_{q_1a}\delta_{q_2a} + \delta_{q_1a'}\delta_{q_2b}) + hc. \quad (3.18)$$

Η μορφή της αυτοενέργειας δίνεται από την παραπάνω σχέση 3.18 διότι η αλληλεπίδραση μονωτή/επαφών Εξ.(3.5) μπορεί να θεωρηθεί ακαριαία [54]. Για τον υπολογισμό των μεγεθών της ροπής μεταφοράς σπιν στο δεξί ηλεκτρόδιο, είναι αναγκαίος ο υπολογισμός των πινάκων $F_{\lambda'\mu'}$, όπου τα ατομικά σημεία λ' και $\mu' \in R$ (δεξιά επαφή). Έτσι η παραπάνω εξίσωση 3.17 γίνεται [54],

$$\hat{F}_{\lambda'\mu'} = \hat{f}_{\lambda'\mu'} + \hat{g}_{\lambda'a'}t\hat{F}_{b\mu'} + \hat{f}_{\lambda'a'}t\hat{G}_{b\mu'}. \quad (3.19)$$

Επειδή οι διάφοροι πίνακες \hat{F} συσχετίζονται, χρειάζεται να γραφούν όμοιες κινητικές εξισώσεις για τους $\hat{F}_{b\mu'}$, $\hat{F}_{\alpha\mu'}$, $\hat{F}'_{\alpha'\mu'}$, και $\hat{F}_{a\mu'}$, οι οποίες είναι της μορφής

$$\hat{F}_{b\mu'} = \hat{g}_{bat}\hat{F}_{\alpha\mu'} + \hat{g}_{bbt}\hat{F}'_{\alpha'\mu'} + \hat{f}_{bat}\hat{G}_{\alpha\mu'} + \hat{f}_{bbt}\hat{G}'_{\alpha'\mu'}, \quad (3.20)$$

$$\hat{F}_{\alpha\mu'} = \hat{g}_{\alpha\alpha t}\hat{F}_{a\mu'} + \hat{f}_{\alpha\alpha t}\hat{G}_{a\mu'}, \quad (3.21)$$

$$\hat{F}'_{\alpha'\mu'} = \hat{f}'_{\alpha'\mu'} + \hat{g}_{\alpha'\alpha' t}\hat{F}_{b\mu'} + \hat{f}'_{\alpha'\alpha' t}\hat{G}'_{b\mu'}, \quad (3.22)$$

και

$$\hat{F}_{a\mu'} = \hat{g}_{aat}\hat{F}_{\alpha\mu'} + \hat{g}_{abt}\hat{F}'_{\alpha'\mu'} + \hat{f}_{aat}\hat{G}_{\alpha\mu'} + \hat{f}_{abt}\hat{G}'_{\alpha'\mu'}. \quad (3.23)$$

Εφόσον στον απομονωμένο(ασύνδετο) μονωτή η πυκνότητα καταστάσεων είναι μηδέν στην περιοχή του ενεργειακού χάσματος, όπου συντελείται το φαινόμενο σήραγγας, συμπεραίνεται ότι οι συναρτήσεις Green μέσα στο μονωτή έχουν πραγματικές τιμές, δηλαδή

$$\hat{g}_{pq} = \hat{g}'_{pq} = \hat{g}_{pq} \quad p, q \in B \quad (3.24)$$

και $\hat{f}_{pq} = 0$ όταν $p, q \in B$. Οι εκτός ισορροπίας πίνακες συναρτήσεων Green για τις απομονωμένες (ασύνδετες) επαφές σε τοπική ισορροπία είναι

$$\hat{f}_{\lambda\mu} = (1 - 2f_L)(\hat{g}_{\lambda\mu} - \hat{g}'_{\lambda\mu}), \quad (3.25)$$

$$\hat{f}'_{\lambda'\mu'} = (1 - 2f_R)(\hat{g}_{\lambda'\mu'} - \hat{g}'_{\lambda'\mu'}), \quad (3.26)$$

όπου f_L και f_R είναι η κατανομή Fermi-Dirac στην αριστερή και στη δεξιά επαφή αντίστοιχα. Έτσι οι Εξ.(3.19-3.23) αποτελούν το κλειστό σύστημα

$$\begin{cases} \hat{F}'_{\lambda'\mu'} = \hat{f}'_{\lambda'\mu'} + \hat{g}_{\lambda'\alpha' t}\hat{F}_{b\mu'} + \hat{f}'_{\lambda'\alpha' t}\hat{G}'_{bbt}\hat{g}'_{\alpha'\mu'} \\ \hat{F}_{b\mu'} = \hat{g}_{bat}\hat{F}_{\alpha\mu'} + \hat{g}_{bbt}\hat{F}'_{\alpha'\mu'} \\ \hat{F}_{\alpha\mu'} = \hat{g}_{\alpha\alpha t}\hat{F}_{a\mu'} + \hat{f}_{\alpha\alpha t}\hat{G}_{abt}\hat{g}_{\alpha'\mu'} \\ \hat{F}'_{\alpha'\mu'} = \hat{f}'_{\alpha'\mu'} + \hat{g}_{\alpha'\alpha' t}\hat{F}_{b\mu'} + \hat{f}'_{\alpha'\alpha' t}\hat{G}'_{bbt}\hat{g}'_{\alpha'\mu'} \\ \hat{F}_{a\mu'} = \hat{g}_{aat}\hat{F}_{\alpha\mu'} + \hat{g}_{abt}\hat{F}'_{\alpha'\mu'}. \end{cases} \quad (3.27)$$

Η λύση του συστήματος των γραμμικών εξισώσεων Εξ. (3.27) δίνει

$$F_{\lambda'\mu'} = F_{\lambda'\mu'}^{left} + F_{\lambda'\mu'}^{right}, \quad (3.28)$$

όπου

$$\hat{F}_{\lambda'\mu'}^{left} = \hat{g}_{\lambda'\alpha't} \left(\widehat{Den} \right)^{-1} \hat{g}_{bat} \left[\hat{g}_{\alpha\alpha t} (\hat{I} - \hat{g}_{aat} \hat{g}_{\alpha\alpha t})^{-1} \hat{g}_{aat} + \hat{I} \right] \times \hat{f}_{\alpha\alpha t} \hat{G}_{abt} \hat{g}_{\alpha'\mu'}, \quad (3.29)$$

και

$$\begin{aligned} \hat{F}_{\lambda'\mu'}^{right} &= \hat{f}_{\lambda'\mu'} + \hat{f}_{\lambda'\alpha't} \hat{G}_{bbt} \hat{g}_{\alpha'\mu'} \\ + \hat{g}_{\lambda'\alpha't} \left(\widehat{Den} \right)^{-1} &\left[\hat{g}_{bat} \hat{g}_{\alpha\alpha t} (\hat{I} - \hat{g}_{aat} \hat{g}_{\alpha\alpha t})^{-1} \hat{g}_{ab} + \hat{g}_{bb} \right] t(\hat{f}_{\alpha'\mu'} \\ &+ \hat{f}_{\alpha'\alpha't} \hat{G}_{bbt} \hat{g}_{\alpha'\mu'}). \end{aligned} \quad (3.30)$$

Εδώ,

$$\widehat{Den} = \hat{I} - \hat{g}_{bbt} \hat{g}_{\alpha'\alpha't} - \hat{g}_{bat} \hat{g}_{\alpha\alpha t} (\hat{I} - \hat{g}_{aat} \hat{g}_{\alpha\alpha t})^{-1} \hat{g}_{abt} \hat{g}_{\alpha'\alpha't}. \quad (3.31)$$

Αφού καθοριστεί από τα παραπάνω ο πίνακας \hat{F}_{pq} , τότε ο πίνακας των συναρτήσεων Green εκτός ισορροπίας NEGF, $\hat{G}_{pq}^<$ δίνεται από τη σχέση [55]

$$\hat{G}_{pq}^< = \frac{1}{2} \left[\hat{F}_{pq} + \hat{G}_{pq} - \hat{G}_{pq} \right]. \quad (3.32)$$

3.6 Ρεύματα φορτίου και σπιν και τοπική ροπή μεταφοράς σπιν

Η πυκνότητα ρεύματος φορτίου δίνεται από τον τύπο[56]

$$I = I^\uparrow + I^\downarrow = \frac{et}{2\pi\hbar} \int Tr_\sigma [\hat{G}_{p+1,p}^{<\sigma,\sigma'} - \hat{G}_{p,p+1}^{<\sigma,\sigma'}] dEd\mathbf{k}_\parallel, \quad (3.33)$$

ενώ η πυκνότητα ρεύματος σπιν δίνεται από τον τύπο[56]

$$\mathbf{I}_{p,p+1}^s = \frac{t}{4\pi} \int Tr_\sigma \left[(\hat{G}_{p+1,p}^{<\sigma,\sigma'} - \hat{G}_{p,p+1}^{<\sigma,\sigma'}) \boldsymbol{\sigma} \right] dEd\mathbf{k}_\parallel, \quad (3.34)$$

όπου $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ είναι διάνυσμα των πινάκων Pauli. Παρόλο που γενικά η πυκνότητα ρεύματος σπιν είναι τανυστής [57], στην περίπτωση που εξετάζουμε, μόνο οι συνιστώσες I_{xy}^s, I_{yy}^s και I_{zy}^s (βλέπε Σχ. 3.1) είναι μη μηδενικές, αφού η διέλευση των ηλεκτρονίων θεωρείται ότι γίνεται μόνο κατά τη διεύθυνση του άξονα y . Σε αντίθεση με τη πυκνότητα ρεύματος φορτίου I , η οποία διατηρείται κατά μήκος της επαφής MTJ, η πυκνότητα ρεύματος σπιν \mathbf{I}^s , δεν διατηρείται μέσα στις σιδηρομαγνητικές επαφές, δηλαδή $\nabla \cdot \mathbf{I}^s \neq 0$, λόγω της αλληλεπίδρασης των ηλεκτρονίων με το τοπικό

πεδίο ανταλλαγής (local exchange field) [57]. Σύμφωνα με την αρχή διατήρησης της συνολικής στροφορμής του συστήματος, η στροφορμή σπιν που χάνεται σε ένα ατομικό σημείο μεταφέρεται στην τοπική μαγνητική ροπή στο σημείο αυτό, ως εκ τούτου ασκείται μια τοπική ροπή μεταφοράς σπιν [57, 58] $\mathbf{T}_{\lambda'}$ στο ατομικό σημείο λ' στη δεξιά FM επαφή, η οποία δίνεται από τη σχέση

$$\mathbf{T}_{\lambda'} = -\nabla \cdot \mathbf{I}^s = \mathbf{I}_{\lambda'-1, \lambda'}^s - \mathbf{I}_{\lambda', \lambda'+1}^s \quad (3.35)$$

όπου η δεύτερη ισότητα προκύπτει από τη διακριτή μορφή της απόκλισης της πυκνότητας ρεύματος για κυβικό πλέγμα. Με άλλα λόγια, η μαγνήτιση του υλικού εξαναγκάζει τα διερχόμενα ηλεκτρόνια να προσανατολίσουν το σπιν τους στην διεύθυνση της μαγνήτισης ασκώντας τους ροπή. Λόγω του τρίτου νόμου του Νεύτωνα, ίση και αντίθετη ροπή ασκείται στη μαγνήτιση του υλικού από τα διερχόμενα ηλεκτρόνια. Η ροπή αυτή, σε αρκετά μεγάλες ποσότητες ρεύματος, μπορεί να αποσταθεροποιήσει την διεύθυνση της μαγνήτισης του υλικού. Η συνιστώσα z της $\mathbf{T}_{\lambda'}$ μηδενίζεται, διότι

$$I_z^s (\lambda', \lambda'+1) = I_z^s (\lambda'-1, \lambda') = (\hbar/2e)(I^{\uparrow} - I^{\downarrow}), \quad (3.36)$$

όπου $I^{\uparrow(\downarrow)}$ είναι η πυκνότητα ρεύματος φορέων πλειονότητας (μειονότητας) αντίστοιχα, η οποία δίνεται από τα διαγώνια στοιχεία της Εξ. (3.33), και είναι σταθερή. Παρατηρήστε ότι, η πυκνότητα φορτίου και σπιν (Εξ. (3.33) και (3.34) υπολογίζονται σε A/\diamond και eV/\diamond αντίστοιχα, όπου με \diamond δηλώνεται η μοναδιαία επιφάνεια επαφής.

3.7 Ολική ροπή σπιν

Χρησιμοποιώντας την εξίσωση Εξ. (3.35), μπορεί να υπολογιστεί η "ολική" (net) ροπή μεταφοράς σπιν που εφαρμόζεται στη FM επαφή ως το άθροισμα των τοπικών ροπών σπιν,

$$\mathbf{T} = \sum_{i=0}^{\infty} (\mathbf{I}_{\lambda'-1, \lambda'}^s - \mathbf{I}_{\lambda', \lambda'+1}^s) = \mathbf{I}_{-1, 0}^s - \mathbf{I}_{\infty, \infty}^s = \mathbf{I}_{-1, 0}^s. \quad (3.37)$$

Εδώ οι δείκτες -1 και 0 αναφέρονται στο τελευταίο ατομικό σημείο μέσα στον μονωτή και στο πρώτο σημείο μέσα στη σιδηρομαγνητική δεξιά επαφή αντίστοιχα. Όμως στην παραπάνω εξίσωση $\mathbf{I}_{\infty, \infty}^s = 0$ εφόσον οι συνιστώσες της $\mathbf{I}_{\lambda', \lambda'+1}^s$ που είναι κάθετες στην μαγνήτιση \mathbf{M}' τελικά τείνουν στο μηδέν καθώς $\lambda' \rightarrow \infty$ [59, 60]. Έτσι προκύπτει ότι η συνολική ροπή μεταφοράς σπιν που εφαρμόζεται στη δεξιά FM επαφή δίνεται απλά από τη πυκνότητα ρεύματος σπιν στην διεπιφάνεια επαφής μονωτή/FM ηλεκτροδίου [57]. Οι συνιστώσες της ροπής μεταφοράς σπιν, κάθετη ή πεδιακή T_{\perp}

και παράλληλη ή μεταφοράς σπιν T_{\parallel} όπως φαίνεται και στο Σχ. 3.1, είναι κατά μήκος της διεύθυνσης $\hat{\mathbf{M}}' \times (\hat{\mathbf{M}} \times \hat{\mathbf{M}}')$ και $\hat{\mathbf{M}} \times \hat{\mathbf{M}}'$ αντίστοιχα, όπου $\hat{\mathbf{M}}$ και $\hat{\mathbf{M}}'$ είναι μοναδιαία διανύσματα κατά την διεύθυνση των μαγνητίσεων της αριστερής και δεξιάς επαφής αντίστοιχα.

Κεφάλαιο 4

Παρουσίαση και ανάλυση αποτελεσμάτων

4.1 Εισαγωγή - Παράμετροι

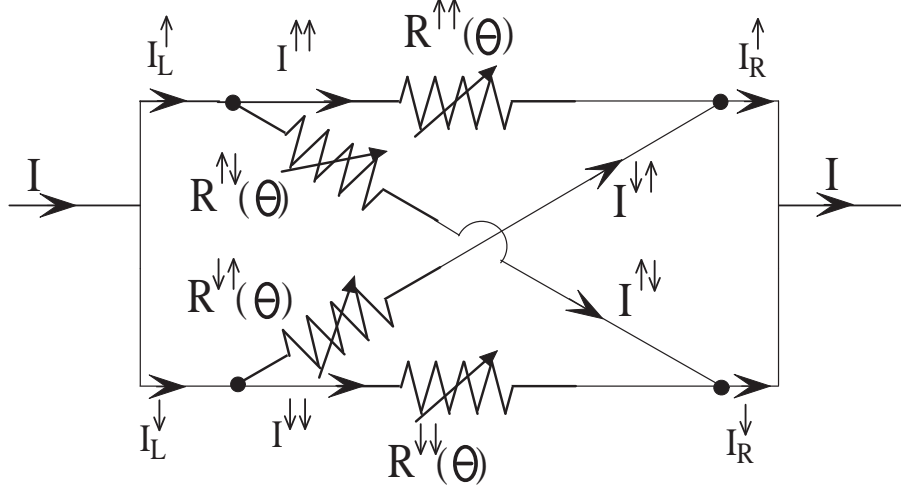
Στη παράγραφο αυτή περιγράφεται αναλυτικά η εξάρτηση των συνιστωσών της ροπής μεταφοράς σπιν σε μαγνητικές διεπαφές σήραγγας, στα ίδια πλαίσια με τα πρόσφατα δημοσιευμένα μας άρθρα [60, 37, 51, 56]. Οι παράμετροι του μοντέλου μας οι οποίες μεταβάλλονται για συστηματική μελέτη του προβλήματος είναι η ενέργεια σημείου μέσου σπιν (spin-averaged on-site energy) $\varepsilon^0 = (\varepsilon^\uparrow + \varepsilon^\downarrow)/2$, η οποία ελέγχει την κατάληψη ζώνης (band filling) και η ενέργεια διαχωρισμού (exchange splitting energy) $\Delta = (\varepsilon^\downarrow - \varepsilon^\uparrow)/2$. Η τιμή των στοιχείων του πίνακα σύζευξης (hopping matrix elements) είναι ίδια σε όλες τις περιοχές $t = -1$ eV. Η ενέργεια σημείου μέσα στον μονωτή $\varepsilon_B = 9$ eV, η ενέργεια Fermi $E_F = 0$ eV, και ο μονωτής θεωρήθηκε ότι αποτελείται από $N = 3$ ατομικά στρώματα. Η επιλογή των παραμέτρων, έγινε έτσι ώστε να παρέχει μια ρεαλιστική προσέγγιση για συστήματα που βασίζονται σε μαγνητικά μέταλλα μετάβασης (magnetic transition metals) και τα κράματά τους [61, 62]. Η κατάληψη ζώνης πειραματικά θα μπορούσε να μεταβληθεί με την δημιουργία νέων υλικών. Για παράδειγμα μειγνύοντας Fe ή Co με ατέλειες (impurities) γεμίζει η ζώνη πλειονότητας Δ_1 .

4.2 Εξάρτηση της $T_{||}$ από την τάση

4.2.1 Ισοδύναμο κύκλωμα- ανάλυση $T_{||}$ σε ρεύματα

Για την κατανόηση του μηχανισμού που είναι υπεύθυνος για τη συμπεριφορά της $T_{||}$ σαν συνάρτηση της τάσης, γενικεύσαμε το ισοδύναμο κύκλωμα μίας μαγνητικής επαφής σήραγγας που προτάθηκε από τον Slonczewski [36]. Χρησιμοποιήθηκαν αντιστάτες (ροοστάτες) που εξαρτώνται από την γωνία μεταξύ των μαγνητίσεων θ , $R^{\sigma,\sigma}(\theta) = R^\sigma(0)\cos^{-2}(\theta/2)$ και $R^{\sigma,\bar{\sigma}}(\theta) = R^\sigma(\pi)\sin^{-2}(\theta/2)$, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.1. Η γωνιακή εξάρτηση των $R^{\sigma,\sigma'}(\theta)$ ισούται με την αντίστροφη πιθανότητα

$[P^{\sigma,\sigma'}(\theta)]^{-1}$ που έχει ένα ηλεκτρόνιο στην κατάσταση σπιν $|\sigma\rangle$ κβαντισμένη στη διεύθυνση της \mathbf{M} να διέλθει μέσω του φράγματος δυναμικού βάσει του φαινομένου σήραγγας σε σπιν κατάσταση $|\sigma'\rangle$ κβαντισμένη στην διεύθυνση της \mathbf{M}' , χωρίς να λαμβάνονται υπόψη πολλαπλές σκεδάσεις μέσα στον μονωτή [37].

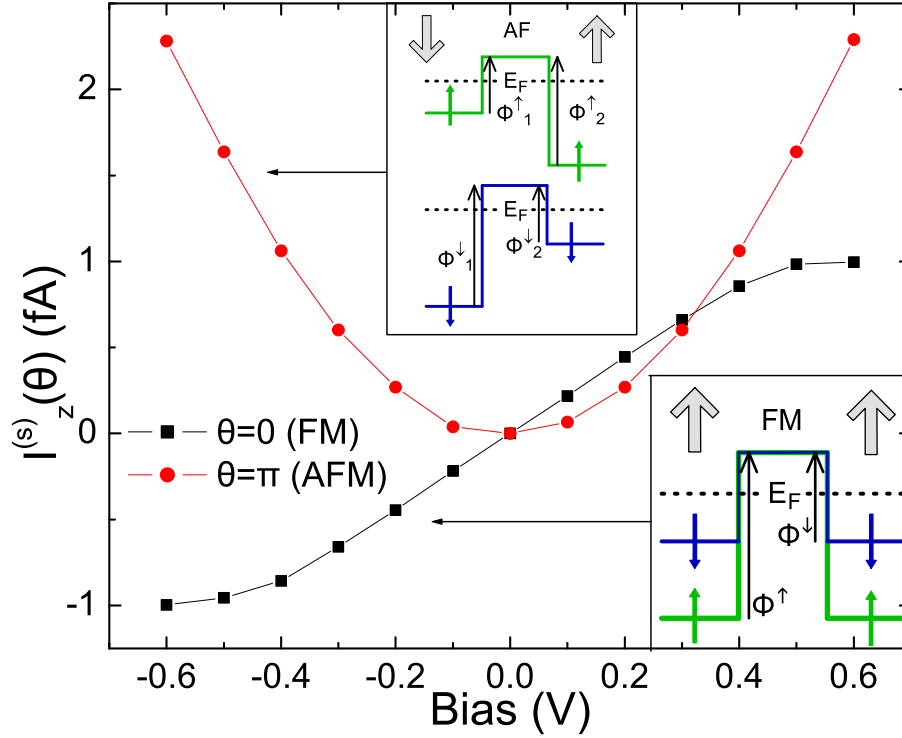


Σχήμα 4.1: Ισοδύναμο κύκλωμα μαγνητικής επαφής σήραγγας με ανάλυση των σπιν ρευμάτων και με αντιστάσεις (ροοστάτες) εξαρτώμενες από την γωνία μεταξύ των μαγνητίσεων των FM επαφών.

Αντικαθιστώντας τα ρεύματα $I_{L(R)}^{\sigma}$ που φαίνονται στο Σχ.4.1 στην Εξ.(5) του άρθρου [36] βρίσκουμε ότι η παράλληλη συνιστώσα της ροπής μεταφοράς σπιν δίνεται από την σχέση [37]

$$T_{||} = \frac{I_z^s(0) - I_z^s(\pi)}{2} \hat{\mathbf{M}}' \times (\hat{\mathbf{M}} \times \hat{\mathbf{M}}'). \quad (4.1)$$

Η έκφραση αυτή είναι **γενική και ανεξάρτητη από τις λεπτομέρειες της ηλεκτρονιακής δομής** για αρκετά μεγάλα φράγματα. Τα αριθμητικά μας αποτελέσματα τόσο με την μέθοδο των ισχυρά δέσιμων ηλεκτρονίων, όσο και με την μέθοδο των ελεύθερων ηλεκτρονίων (η οποία δεν παρουσιάζεται εδώ) επιβεβαιώνουν την ισχύ της σχέσης (4.1) για οποιεσδήποτε παραμέτρους. Εδώ $I_z^s(0) = \frac{\hbar}{2e}(I^{\uparrow}(0) - I^{\downarrow}(0))$ και $I_z^s(\pi) = \frac{\hbar}{2e}(I^{\uparrow}(\pi) - I^{\downarrow}(\pi))$ είναι οι πυκνότητες ρεύματος σπιν κατά την διεύθυνση της \mathbf{M}' για την παράλληλη (P) και αντιπαράλληλη (AP) διευσθέτηση των μαγνητίσεων, αντίστοιχα. Το αποτέλεσμα αυτό είναι πολύ σημαντικό, διότι απλοποιεί τον υπολογισμό της παράλληλης συνιστώσας ροπής μεταφοράς σπιν $T_{||}(\theta)$, η οποία εμφανίζεται όταν οι μαγνητίσεις βρίσκονται υπό γωνία, στον υπολογισμό των πυκνοτήτων σπιν ρευμάτων για παράλληλο και αντιπαράλληλο προσανατολισμό των μαγνητίσεων των επαφών, και είναι συνεπές με αντίστοιχη σχέση που ισχύει στις βαλβίδες σπιν (spin valves) [59].



Σχήμα 4.2: Το ρεύμα σπιν $I_z^{(s)}(\theta)$, για παράλληλο ($\theta = 0$) και αντιπαράλληλο ($\theta = \pi$) προσανατολισμό των μαγνητίσεων των επαφών. Στην παράλληλη κατάσταση (FM) τόσο τα ηλεκτρόνια πλειονότητας όσο και τα ηλεκτρόνια μειονότητας διέρχονται από συμμετρικά φράγματα δυναμικού Φ^σ (κάτω εσωτερικό πάνελ) ενώ στην αντιπαράλληλη κατάσταση (AFM) και τα δύο σπιν διέρχονται μέσα από ασύμμετρα δυναμικά με ίδιο μέσο ύψος φράγματος $\bar{\Phi}^\sigma$ και ασυμμετρία $\Delta\Phi^\sigma$ με διαφορετικό πρόσημο.

4.2.2 Μοντέλο Brinkman

Έχουμε δείξει ότι η διαφορετική εξάρτηση από την τάση μπορεί να εξηγηθεί στα πλαίσια του απλού μοντέλου του Brinkman [64] για μη συμμετρικά φράγματα δυναμικού, γενικευμένου ώστε να συμπεριλαμβάνει το σπιν των ηλεκτρονίων. Η εξάρτηση των I^σ από την τάση, δίνεται από την σχέση [64],

$$I^\sigma(V) = f_1(\bar{\Phi}^\sigma)V - f_2(\bar{\Phi}^\sigma)\Delta\Phi^\sigma V^2 + O(V^3), \quad (4.2)$$

όπου f_1 και f_2 είναι συναρτήσεις του μέσου ύψους του φράγματος δυναμικού, $\bar{\Phi}^\sigma = [\Phi_1^\sigma + \Phi_2^\sigma]/2$, και $\Delta\Phi^\sigma = \Phi_1^\sigma - \Phi_2^\sigma$ είναι το μέτρο της ασυμμετρίας του φράγματος. Εδώ, $\Phi_{1(2)}^\sigma$ είναι το εξαρτώμενο από το σπιν ύψος του φράγματος στην αριστερή (δεξιά) επαφή. (Σχ. 4.2). Έτσι, στην παράλληλη διεύθυνση των δύο μαγνητίσεων τόσο τα ηλεκτρόνια πλειονότητας όσο και τα ηλεκτρόνια μειονότητας πρέπει να διέλθουν από συμμετρικό φράγμα απλά διαφορετικού ύψους Φ^σ για κάθε σπιν.

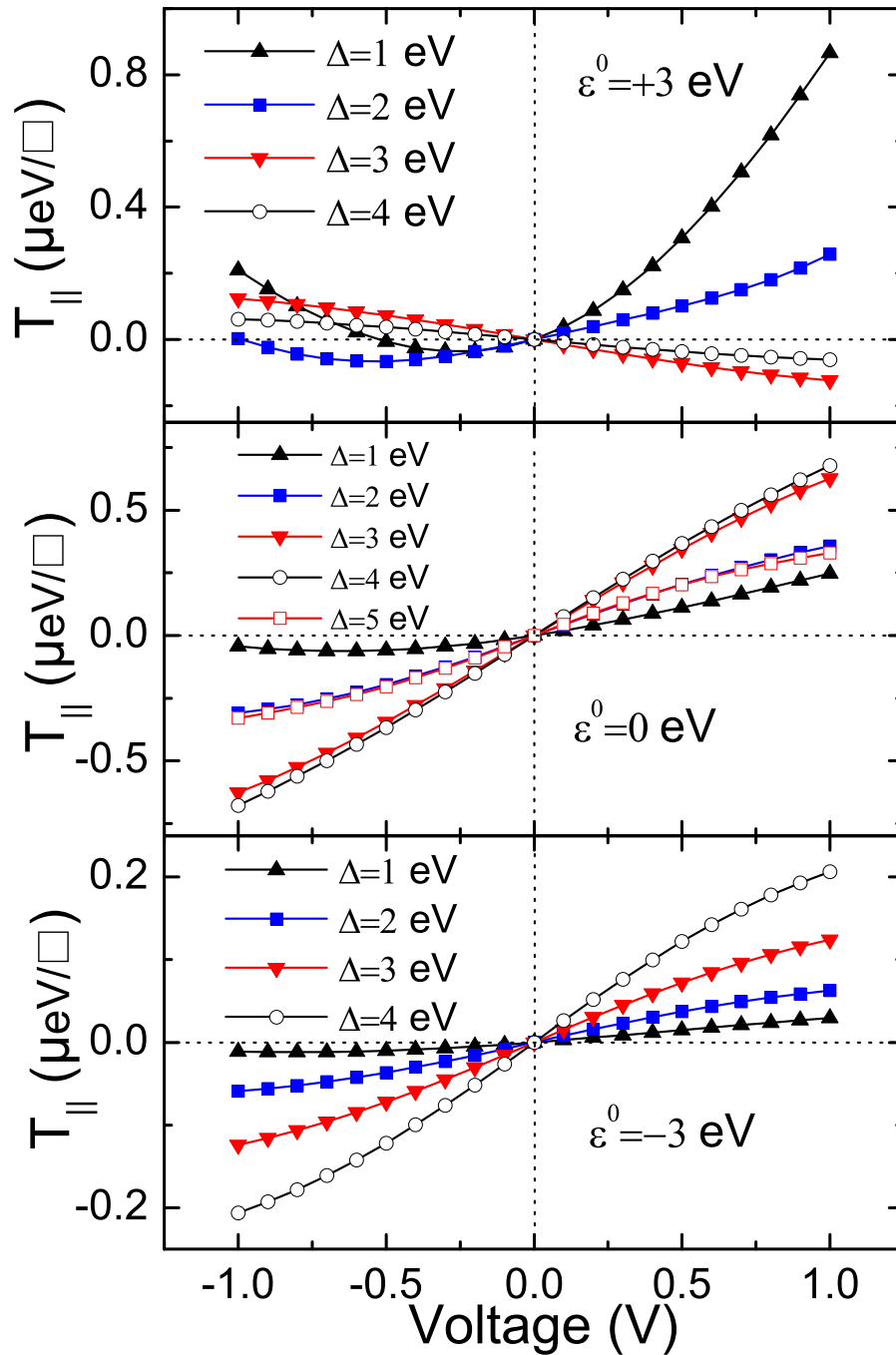
Σε αυτή την περίπτωση $\bar{\Phi}^\uparrow \neq \bar{\Phi}^\downarrow$ και $\Delta\Phi^\uparrow = \Delta\Phi^\downarrow = 0$. Τελικά τόσο η $I^\uparrow(0)$ όσο και η $I^\downarrow(0)$ εξαρτώνται γραμμικά από την τάση V , άρα και η $I_z^{(s)}(0)$ εξαρτάται και αυτή γραμμικά. Στην άλλη περίπτωση όμως, στην αντιπαράλληλη διευσθέτηση των μαγνητίσεων, τόσο τα ηλεκτρόνια πλειονότητας όσο και τα ηλεκτρόνια μειονότητας πρέπει να διέλθουν ένα μη συμμετρικό φράγμα δυναμικού και μάλιστα με το ίδιο μέσο ύψος, $\bar{\Phi}^\uparrow = \bar{\Phi}^\downarrow$, ενώ η ασυμμετρία έχει αντίθετο πρόσημο, $\Delta\Phi^\uparrow = -\Delta\Phi^\downarrow$. Έτσι η γραμμική εξάρτηση της $I^\uparrow(\pi) - I^\downarrow(\pi)$ απαλείφεται, και η $I_z^{(s)}(\pi)$ παρουσιάζει εξάρτηση δευτέρου βαθμού από την τάση.

4.2.3 Συστηματική Μελέτη - Αποτελέσματα

Στο Σχ. 4.3 παρουσιάζουμε την εξάρτηση της 'ολικής' παράλληλης συνιστώσας της ροπής μεταφοράς σπιν $T_{||}$, στη δεξιά FM επαφή της MTJ, όταν οι μαγνητίσεις βρίσκονται υπό γωνία $\theta = \pi/2$. Όλοι οι υπολογισμοί που αναφέρονται στο κεφάλαιο αυτό είναι για αυτή τη γωνία. Οι υπολογισμοί έχουν γίνει για διάφορες τιμές της Δ και για $\varepsilon^0 = 3, 0, -3$ eV, που αντιστοιχεί σε κατάληψη ζώνης 1/4 (πάνω πλαίσιο), 1/2 (κεντρικό πλαίσιο) και 3/4 (κάτω πλαίσιο) αντίστοιχα. Για την περίπτωση με κατάληψη ζώνης 3/4, η $T_{||}$ παρουσιάζει μονοτονική αύξηση τόσο σαν συνάρτηση της τάσης όσο και της ενέργειας ανταλλαγής, με $\left(\frac{\partial T_{||}}{\partial V}\right)_\Delta > 0$ και $\left(\frac{\partial T_{||}}{\partial \Delta}\right)_V > 0$. Αντιθέτως, στην περίπτωση με κατάληψη ζώνης 1/2, ενώ ισχύει ότι $\left(\frac{\partial T_{||}}{\partial V}\right)_\Delta > 0$, η $T_{||}$ αυξάνει σαν συνάρτηση του Δ μέχρι μία τιμή γύρω στα 4 eV και ύστερα μειώνεται σε περαιτέρω αύξηση του Δ . Τέλος στην περίπτωση με κατάληψη ζώνης 1/4, η εξάρτηση της $T_{||}$ από την τάση γίνεται μη μονοτονική σαν συνάρτηση της τάσης και της ενέργειας διαχωρισμού.

Μεγάλο ενδιαφέρον παρουσιάζει το φαινόμενο της αλλαγής του πρόσημου της $T_{||}$ για πεπερασμένες τιμές της τάσης, χωρίς δηλαδή την αλλαγή της φοράς του ρεύματος, το οποίο συμβαίνει για μικρές τιμές του Δ . Για μεγαλύτερες τιμές του Δ (3 και 4 eV) η εξάρτηση της $T_{||}$ από την τάση γίνεται πάλι μονοτονική $\left(\frac{\partial T_{||}}{\partial V}\right)_\Delta < 0$. Έτσι η $T_{||}$ έχει ασυνήθιστη και πλούσια συμπεριφορά από την τάση ανάλογα με τις τιμές της κατάληψης ζώνης και της ενέργειας διαχωρισμού, και είναι σύμφωνη με τις πρόσφατες πειραματικές παρατηρήσεις [44, 45, 63].

Η ασυμφωνία στο πρόσημο της ροπής μεταφοράς σπιν στα προαναφερθέντα άρθρα [44, 45, 63] καθώς και σε πρόσφατες θεωρητικές δουλειές [37, 39, 40, 41, 42] έγκειται απλά στο πρόβλημα σύμβασης πρόσημου, όπως αναφέρεται και στην αναφορά [40]. Η μικρή ασυμμετρία που εμφανίζεται στην εξάρτηση της $T_{||}$ από την τάση στο πειραματικό άρθρο [45] μπορεί να εξηγηθεί από πιθανή μεσολάβηση ηλεκτρονίων μειονότητας, αποκλίνοντας έτσι από την καθαρά συμμετρική(μονοτονική) εξάρτηση της $T_{||}$ από την τάση στην περίπτωση των ημί-μετάλλων (half-metal), δη-



Σχήμα 4.3: Εξάρτηση της παράλληλης συνιστώσας της ροπής μεταφοράς σπιν, $T_{||}$, για γωνία ανάμεσα στις μαγνητίσεις των επαφών $\theta = \pi/2$ και για διάφορες τιμές της ενέργειας διαχωρισμού Δ για τρεις τιμές της κατάληψης ζώνης 1/4 (πάνω πλαίσιο), 1/2 (μεσαίο πλαίσιο) και 3/4 (κάτω πλαίσιο).

λαδή μέταλλα με διαθέσιμες καταστάσεις μόνο για το ένα είδος σπιν στην ενέργεια Fermi).

Η περίπτωση αυτή εξετάζεται περαιτέρω παρακάτω και παρουσιάζεται καθαρά

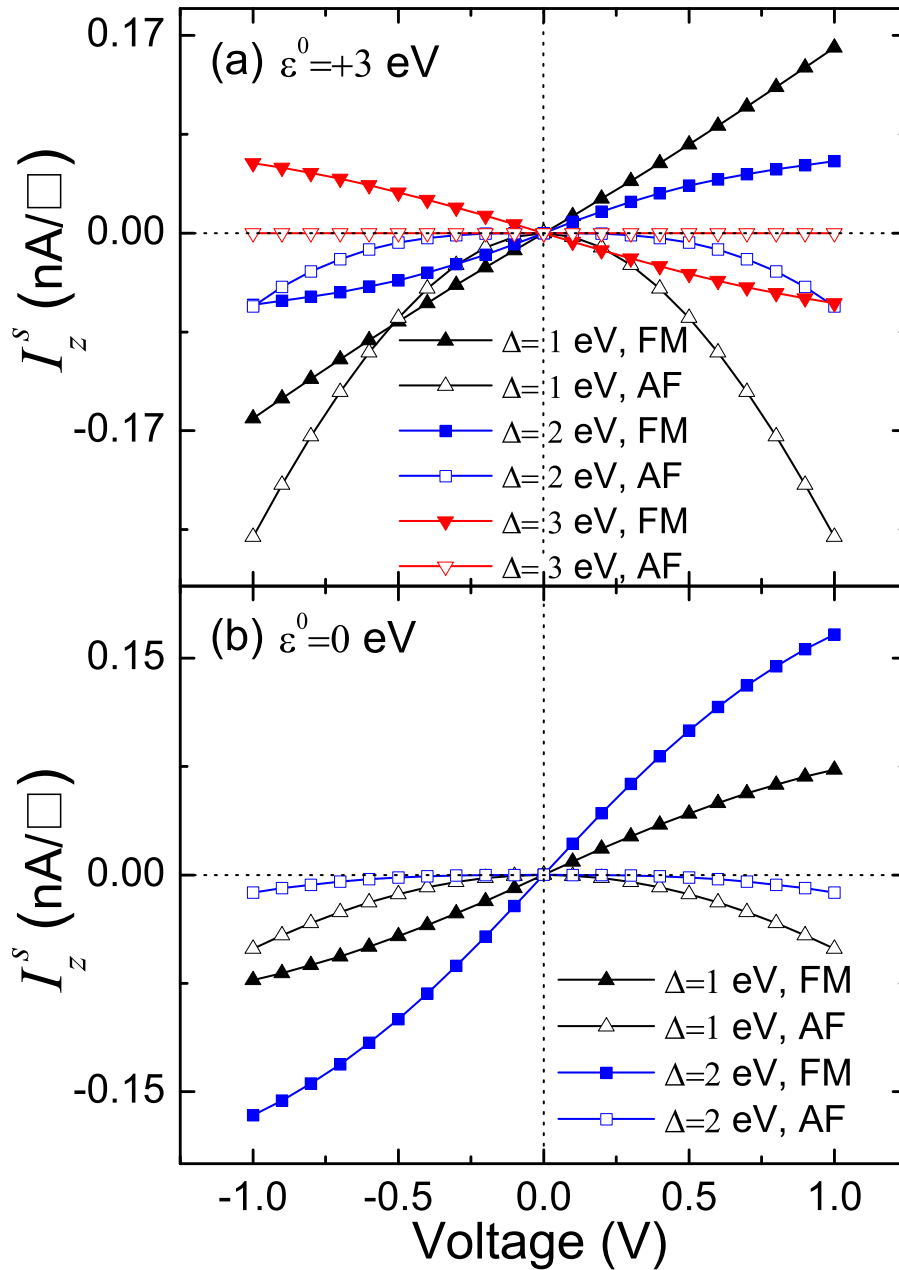
στο πάνω πλαίσιο του Σχ. 4.7 με τις καμπύλες από ανοιχτά τετράγωνα και κύκλους αντίστοιχα. Οι δύο καμπύλες αυτές μπορεί να αναπαριστούν τις διαφορές στις παρατηρήσεις που αναφέρονται στα πειραματικά άρθρα [44, 45]. Επίσης σε προηγούμενη δουλειά μας [37], δεν είχαμε συμπεριλάβει καμπύλη που αντιστοιχεί στην περίπτωση ημί-μέταλλου η οποία είναι προφανώς συμμετρική για θετική και αρνητική τάση παρόμοια με την καμπύλη από υπολογισμούς πρώτων αρχών(ab-initio) στο άρθρο[41].

Εφόσον η $T_{||}$ εξαρτάται από την διαφορά των $I_z^s(0)$ και $I_z^s(\pi)$ μέσω της Εξ.4.1, για την πλήρη κατανόηση του μηχανισμού που είναι υπεύθυνος για την εξάρτηση της $T_{||}$ από την τάση παρουσιάζουμε στο Σχ. 4.4 την εξάρτηση των $I_z^s(0)$ και $I_z^s(\pi)$ από την τάση. Με γεμάτα σύμβολα παρουσιάζεται η $I_z^s(0)$ για παράλληλη (FM) διεύθυνση των μαγνητίσεων, ενώ με ανοιχτά σύμβολα η $I_z^s(\pi)$ για αντιπάρλληλη (AF) διεύθυνση των μαγνητίσεων, για διάφορες τιμές του Δ και του $\varepsilon^0 = +3,0 eV$. Οι τιμές των Δ και ε^0 αντιστοιχούν στο πάνω και μεσαίο πλαίσιο του Σχ. 4.3. Είναι προφανές ότι η $I_z^s(0)$ είναι περιττή συνάρτηση της τάσης ενώ η $I_z^s(\pi)$ άρτια συνάρτηση της τάσης για τιμές της τάσης $-1 V < V < 1 V$.

Παρατηρούμε ότι για $\varepsilon^0 = +3eV$, το $\frac{\partial I_z^s(0)}{\partial V}$ μειώνεται καθώς η Δ αυξάνει και αλλάζει πρόσημο για $\Delta = 3eV$. Ομοίως, το $\left| \frac{\partial^2 I_z^s(\pi)}{\partial V^2} \right|$ μειώνεται καθώς αυξάνεται η Δ . Στην περίπτωση ημί-μέταλλου ($\Delta = 3eV$), $I_z^s(\pi)$ μηδενίζεται για αυτή την περίπτωση λόγω της απουσίας διαθέσιμων καταστάσεων μειονότητας. Συμπερασματικά η περιττή συμπεριφορά της $T_{||}$ σαν συνάρτηση της τάσης για $\varepsilon^0 = +3 eV$ και $\Delta = 3 eV$ οφείλεται αποκλειστικά και μόνο στην εξάρτηση της $I_z^s(0)$ από την τάση. Από την άλλη μεριά, το $\frac{\partial I_z^s(0)}{\partial V}$ αυξάνεται καθώς αυξάνεται η Δ για $\varepsilon^0 = 0 eV$. Έτσι η $T_{||}$ είναι περιττή συνάρτηση της τάσης V όταν $I_z^s(0) \gg I_z^s(\pi)$ (όπως για παράδειγμα στην περίπτωση ημί-μέταλλου), ενώ η μη μονοτονική εξάρτηση συμβαίνει όταν $I_z^s(0) \approx I_z^s(\pi)$. Τέλος, η εξάρτηση της παράλληλης συνιστώσας της ροπής μεταφοράς σπιν για την περίπτωση της κατάληψης 3/4 μπορεί να εξηγηθεί μέσω της αλληλεπίδρασης της εξάρτησης των πυκνοτήτων των ρευμάτων σπιν για τις δύο διευθετήσεις αντίστοιχα. Τα αποτελέσματα αυτά εγείρουν την ερώτηση για το εάν είναι δυνατόν η $T_{||}$ να είναι άρτια συνάρτηση της τάση όταν $I_z^s(0) \ll I_z^s(\pi)$.

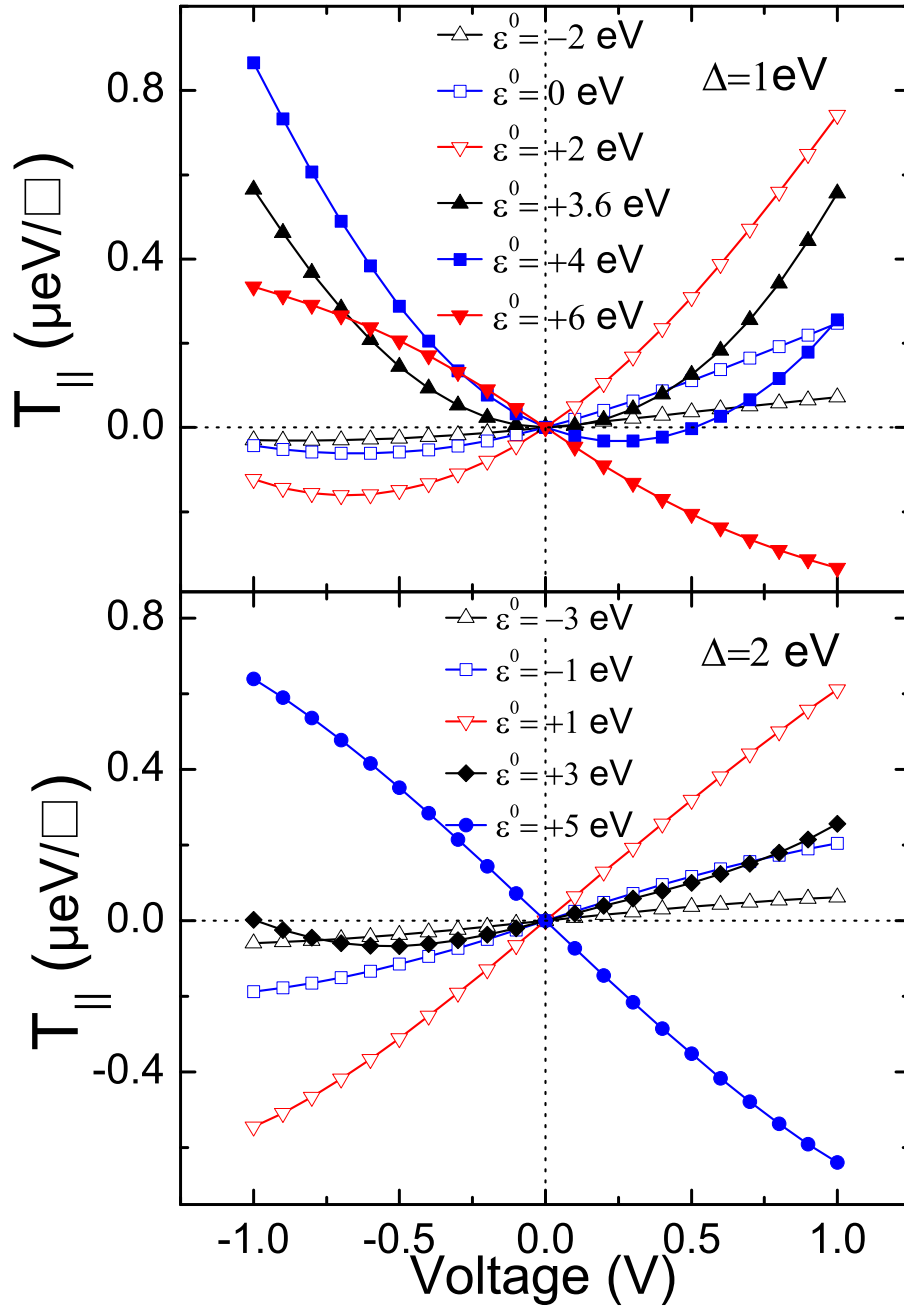
Στο Σχ. 4.5 αναπαριστούμε γραφικά την εξάρτηση της $T_{||}$ για $\theta = \pi/2$ και για σταθερή τιμή της ενέργειας διαχωρισμού αλλά για διαφορετικές τιμές μέσης ενέργειας σημείου ε^0 που αντιστοιχεί σε μέση κατάληψη ζώνης. Πιο συγκεκριμένα αλλάζουμε ταυτόχρονα την κατάληψη και των δύο φορέων έτσι ώστε η Δ να είναι σταθερή σε 1 eV και 2eV στο πάνω και κάτω πλαίσιο αντίστοιχα.

Η εξάρτηση των αντίστοιχων πυκνοτήτων ρεύματος για FM και AF διευθετήσεις παρουσιάζονται στο Σχ. 4.6 για τις ίδιες τιμές Δ και ε^0 που χρησιμοποιούνται στο Σχ. 4.5. Για $\Delta = 1 eV$ και αυξάνοντας την ε^0 (μειώνοντας την μέση κατάληψη ζώνης) η εξάρτηση της $T_{||}$ από την τάση αλλάζει από μονοτονική($\varepsilon^0 = -2,0 eV$) σε



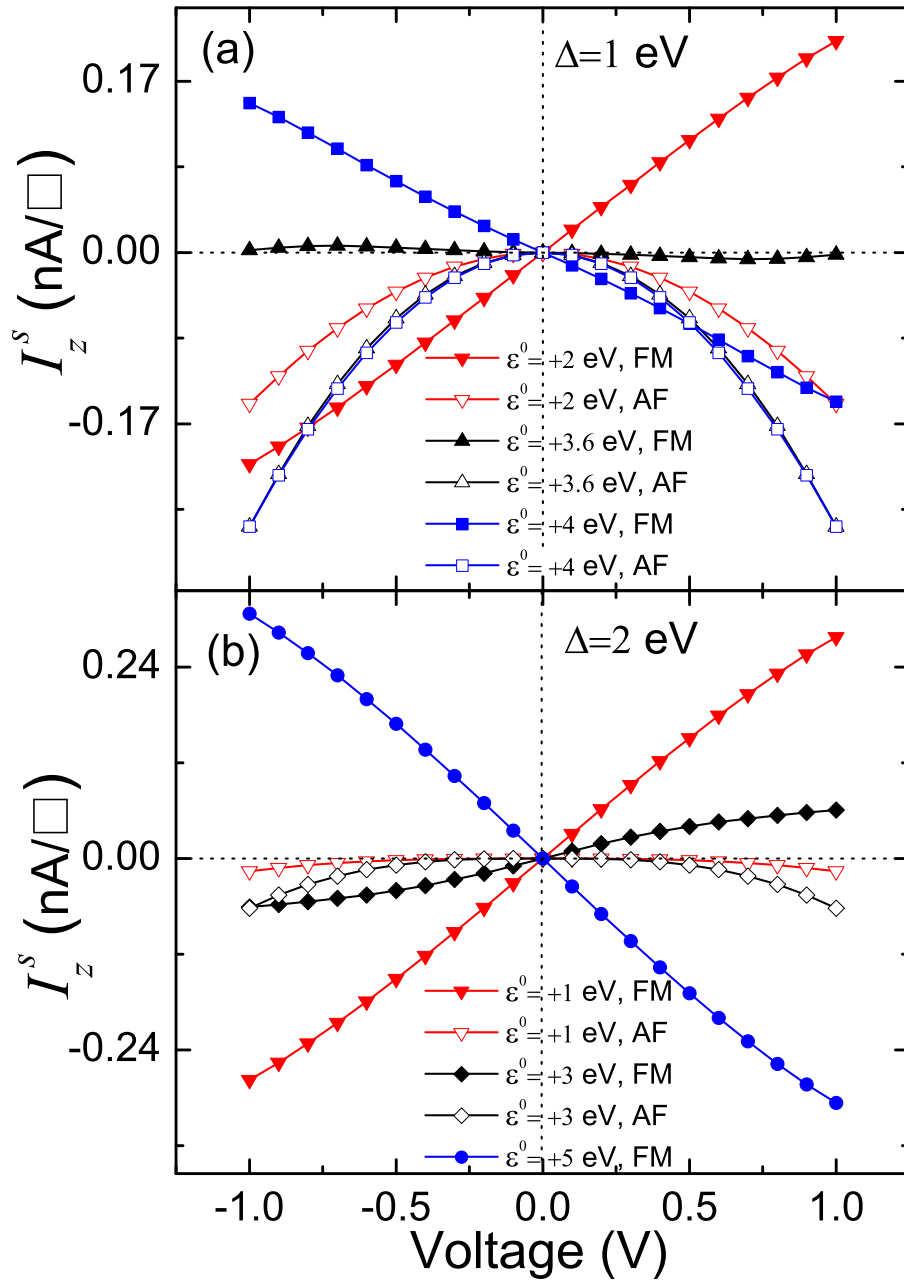
Σχήμα 4.4: Εξάρτηση της πυκνότητας ρεύματος σπιν I_z^s , από την τάση, για την παράλληλη(FM) διεύθυνση των μαγνητίσεων (ανοιχτά σύμβολα) και για την αντίπαράλληλη(AF) διεύθυνση των μαγνητίσεων (γεμάτα σύμβολα) αντίστοιχα, στην Εξ. (4.1). I_z^s παρουσιάζεται για διάφορες τιμές της ενέργειας διαχωρισμού Δ και για $\varepsilon^0 = +3, 0$ eV, που αντιστοιχούν στο πάνω και μεσαίο πλαίσιο του Σχ. 4.3, αντίστοιχα.

μη-μονοτονική ($\varepsilon^0 = 2,4$ eV), μέχρι και σε καθαρά δευτέρου βαθμού($\varepsilon^0 = 3.6$ eV). Στην τελευταία περίπτωση $I_z^s(0) \approx 0$ (γεμάτα μαύρα τρίγωνα στο πάνω πλαίσιο του Σχ. 4.6) και η $T_{||}$ καθορίζεται πλήρως από την $I_z^s(\pi)$ σε αυτές τις τιμές της τάσης.



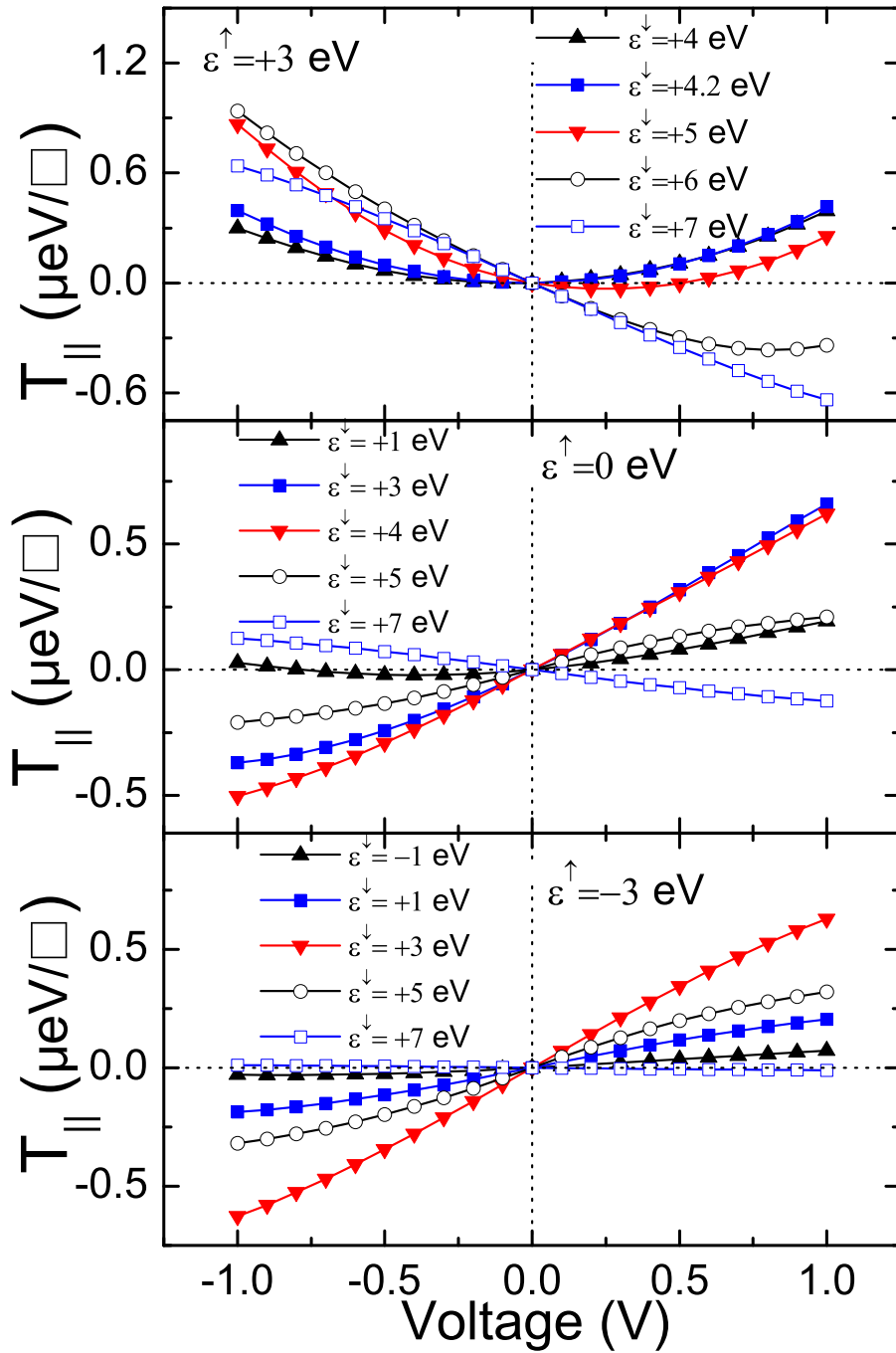
Σχήμα 4.5: Εξάρτηση της παράλληλης συνιστώσας της ροπής μεταφοράς σπιν T_{\parallel} , από την τάση για $\theta = \pi/2$, διάφορες τιμές της μέσης ενέργειας σημείου ε^0 και για ενέργεια διαχωρισμού $\Delta = 1 \text{ eV}$ (πάνω πλαίσιο) και $\Delta = 2 \text{ eV}$ (κάτω πλαίσιο).

Δηλαδή, ο ανταγωνισμός ανάμεσα στην περιττή και άρτια εξάρτηση των $I_z^{(s)}(0)$ και $I_z^{(s)}(\pi)$, αντίστοιχα από την τάση, στην Εξ. (4.1) είναι υπεύθυνος για την εξάρτηση από την τάση της T_{\parallel} στα Σχ. 4.3 και 4.5. Η εξάρτηση αυτή μπορεί να ρυθμιστεί αλλάζοντας την Δ και την κατάληψη ζώνης (ε^0) με αποτέλεσμα να επιτευχθεί μία πλούσια εξάρτηση από την τάση. Η μονοτονική εξάρτηση της T_{\parallel} για την περίπτωση



Σχήμα 4.6: Εξάρτηση της πυκνότητας ρεύματος σπιν I_z^s , στην Εξ. (4.1) για την παράλληλη FM (γεμάτα σύμβολα) και αντίπαράλληλη AF (ανοιχτά σύμβολα) διεύθυνση των μαγνητίσεων αντίστοιχα, για διάφορες τιμές της Δ και για τις τιμές της ε^0 που αντιστοιχούν σε αυτές του Σχ. 4.3.

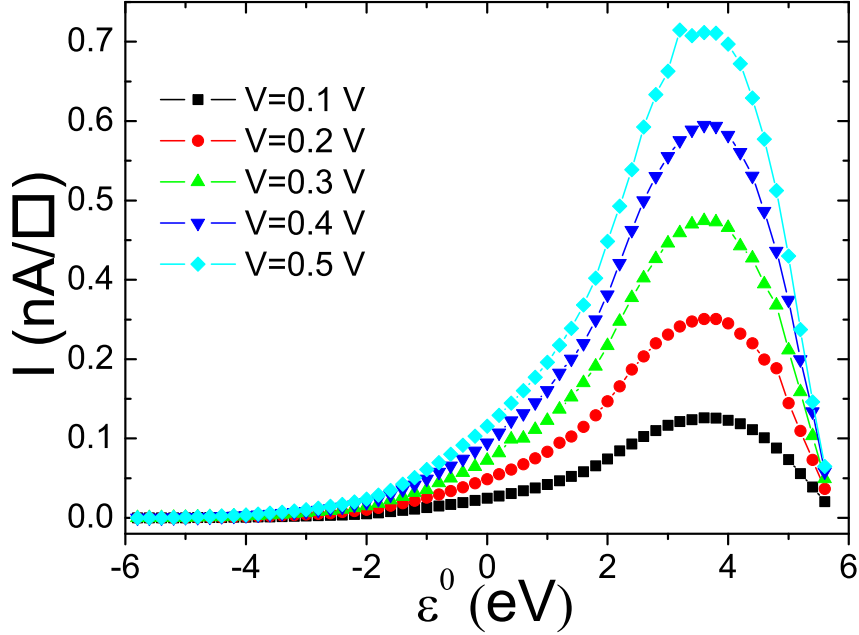
ημί-μετάλλου (μεσαίο πλαίσιο στο Σχ. 4.3) είναι λόγω της εξάρτησης της πυκνότητας ρεύματος $I_z^s(0)$ στην FM διεύθυνση από την τάση, η οποία επικρατεί σε σχέση με την $I_z^s(\pi)$ της AF διεύθυνσης που μηδενίζεται. Στο Σχήμα 4.7 παρουσιάζεται η $T_{||}$ σαν συνάρτηση της τάσης για $\theta = \pi/2$, για $\varepsilon^\uparrow = +3$ eV (πάνω πλαίσιο), 0 eV (μεσαίο πλαίσιο) και -3 eV (κάτω πλαίσιο), που αντιστοιχούν σε κατάληψη ζώνης 1/4,



Σχήμα 4.7: Εξάρτηση της $T_{||}$, για $\theta = \pi/2$, και για διάφορες τιμές της ενέργειας σημείου των ηλεκτρονίων μειονότητας ε^{\downarrow} , και για τρεις τιμές της ενέργειας σημείου ε^{\uparrow} των ηλεκτρονίων πλειονότητας, που αντιστοιχούν σε κατάλληψης ζώνης 1/4 (πάνω πλαίσιο), 1/2 (μεσαίο πλαίσιο) και 3/4 (κάτω πλαίσιο), αντίστοιχα.

1/2 και 3/4 αντίστοιχα, και για διάφορες τιμές της ε^{\downarrow} . Σε αντίθεση με τα Σχ. 4.3 και 4.5, όπου τόσο η ζώνη πλειονότητας όσο και η ζώνη μειονότητας μεταβάλλονταν ταυτόχρονα, καθώς είτε η ε^0 είτε η Δ παρέμενε σταθερή, στο Σχ. 4.7 εξετάζεται η

μεταβολή της ζώνης μειονότητας μόνο, όπου τόσο η ε^0 όσο και η Δ μεταβάλλονται ταυτόχρονα. Όπως και στα Σχ. 4.3 και 4.5, η εξάρτηση της παράλληλης συνιστώσας της ροπής μεταφοράς σπιν, παρουσιάζει μια πλούσια συμπεριφορά η οποία περιλαμβάνει μία πλήρως δευτεροβάθμια εξάρτηση από την τάση για $\varepsilon^\uparrow = +3$ eV και $\varepsilon^\downarrow = +4.2$ eV, όπως φαίνεται στο πάνω πλαίσιο με γεμάτα τετράγωνα, που αντιστοιχούν σε $\varepsilon^0 = 3.6$ eV και $\Delta = 1.2$ eV.

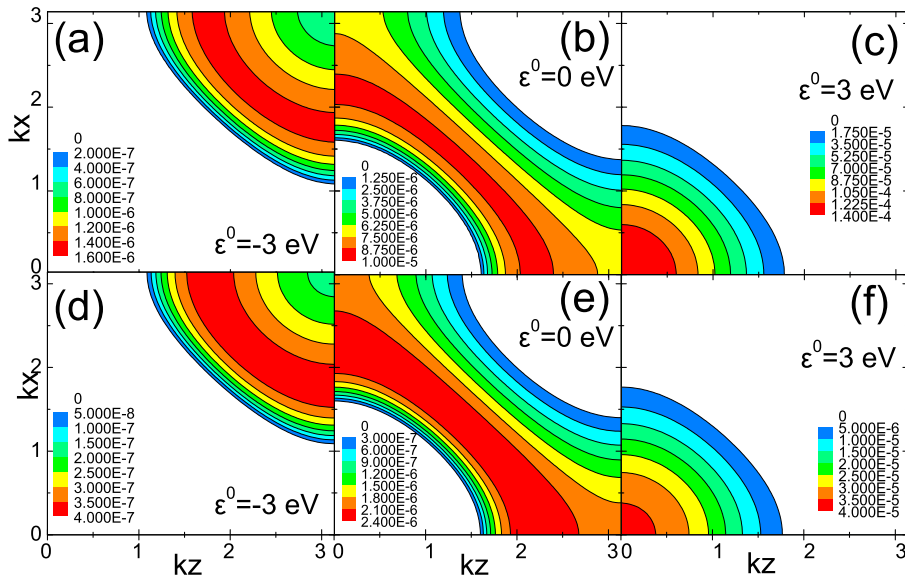


Σχήμα 4.8: Πυκνότητα ρεύματος σαν συνάρτηση της ε^0 για αρκετές τιμές της τάσης.

Γενικά τα αποτελέσματα των υπολογισμών δείχνουν ότι $dI_z^s(0)/dV > 0$ για $\varepsilon^0 < 3.6$ eV και $dI_z^s(0)/dV < 0$ για $\varepsilon^0 > 3.6$ eV, εκτός από την περίπτωση χαμηλής κατάληψης ζώνης ($\varepsilon^0 = +3$ eV) και $\Delta \geq 3eV$ (πάνω πλαίσιο στο Σχ. 4.4), όπου $dI_z^s(0)/dV < 0$. Για να κατανοηθεί η αιτία στην ηλεκτρονιακή δομή που είναι υπεύθυνη για την εξάρτηση της πυκνότητας ρεύματος για την παράλληλη διευθέτηση των μαγνητίσεων $I_z^s(0)$ που παρουσιάζεται στα Σχ. 4.4 και 4.6, από την τάση, είναι απαραίτητο να σχεδιάσουμε στο Σχ. 4.8 την πυκνότητα ρεύματος για μη μαγνητική περίπτωση (ανεξάρτητη του σπιν) σαν συνάρτηση της ενέργειας σημείου ε^0 για διάφορες τιμές της τάσης. Έχει ενδιαφέρον το ότι για όλες τις τιμές της τάσης η πυκνότητα ρεύματος παρουσιάζει μέγιστο γύρω στο $\varepsilon_{max}^0 = 3.6$ eV, όπου συμβαίνει και το $I_z^s(0)$ να μηδενίζεται επίσης. Αφού η μαγνητική περίπτωση (πολωμένου σπιν) μπορεί να ληφθεί από την μη μαγνητική προσθέτοντας και αφαιρώντας Δ στο ε_{max}^0 , δηλαδή $\varepsilon^{\uparrow(\downarrow)} = \varepsilon_{max}^0 \mp \Delta$, η μηδενική τιμή της $I_z^s(0) = I_z^s(\uparrow) - I_z^s(\downarrow)$ είναι απόρροια του γεγονότος ότι η πυκνότητα ρεύματος εμφανίζεται συμμετρική γύρω από ε_{max}^0 , τουλάχιστον για μικρές τιμές της Δ με αποτέλεσμα $I^\uparrow(0) = I^\downarrow(0)$. Το αποτέλεσμα

αυτό ισχύει μέχρι την τιμή της ενέργειας διαχωρισμού για την οποία η επαφή γίνεται ημιμεταλλική, δηλαδή όταν υπάρχουν καταστάσεις για ηλεκτρόνια μόνο για το ένα είδος σπιν. Αυτό συμβαίνει για $\varepsilon^0 \mp \Delta > E_F + 6|t|$. Το Σχ. 4.8 εξηγεί επίσης το γεγονός ότι για όλες τις περιπτώσεις με $\varepsilon^0 < 3.6$ eV και $\varepsilon^0 > 3.6$ eV ισχύει ότι $dI_z^s(0)/dV > 0$ και $dI_z^s(0)/dV < 0$ αντίστοιχα.

Για να κατανοηθεί ο μηχανισμός που είναι υπεύθυνος για την μεταβολή της πυκνότητας φορτίου I σαν συνάρτηση του ε^0 , παρουσιάζουμε στα Σχ. (4.9a)-(4.9c) την ανάλυση της πυκνότητας ρεύματος φορτίου στην ενέργεια Fermi $E_F = 0$ eV στο επίπεδο των κυματανυσμάτων \mathbf{k}_{\parallel} για τάση 0.1 V και για τρεις τιμές της ε^0 -3, 0, και +3 eV, αντίστοιχα. Εδώ, \mathbf{k}_{\parallel} είναι το κυματάνασμα μέσα στο επίπεδο για διδιάστατη επιφανειακή ζώνη Brillouin.



Σχήμα 4.9: (a-c): Πυκνότητα ρεύματος αναλυμένη κατά \mathbf{k}_{\parallel} στην διδιάστατη ζώνη Brillouin, όπως υπολογίζεται από την Εξ. (3.33), στην $E_F = 0$, για τάση 0.1 V και για ε^0 ίση με -3, 0, και +3 eV, αντίστοιχα. (d-f): Οι αντίστοιχες αναλυμένες κατά \mathbf{k}_{\parallel} πιθανότητες διέλευσης, όπως υπολογίζονται από την απλουστευμένη Εξ. (4.3), για τις ίδιες τιμές της ε^0 .

Ενδιαφέρον έχει το γεγονός ότι η μέγιστη τιμή της πυκνότητας ρεύματος για κατάληψη ζώνης κατά 1/4 (για $\varepsilon^0 = +3eV$) βρίσκεται στην περιοχή των $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ και μεταβαίνει προς την άλλη άκρη της ζώνης Brillouin ($k_x \approx k_z \approx \pi$) καθώς αυξάνεται η κατάληψη ζώνης στα 3/4 ($\varepsilon^0 = -3$ eV). Στην περίπτωση με κατάληψη ζώνης 1/2 (για $\varepsilon^0 = 0$ eV) η μέγιστη τιμή της πυκνότητας ρεύματος βρίσκεται για $k_x \approx k_z \approx \frac{2\pi}{3}$. Είναι σημαντικό να αναφέρουμε ότι το ρεύμα μειώνεται κατά περίπου δύο τάξεις μεγέθους καθώς η κατάληψη ζώνης μεταβάλλεται από 1/4 σε 3/4.

Η μεταβολή της αναλυμένης κατά \mathbf{k}_{\parallel} πυκνότητας ρεύματος στην E_F σαν συ-

νάρτηση της ϵ^0 μπορεί να εξηγηθεί από τον ανταγωνισμό ανάμεσα στις καταστάσεις των επαφών και στις φθίνουσες καταστάσεις (evanescent states) στον μονωτή. Για την απλή περίπτωση της Χαμιλτονιανής ισχυρά δέσμιων ηλεκτρονίων, η πιθανότητα διέλευσης μηδενικής τάσης στην $E_F = 0$ eV είναι της μορφής [1, 65, 66]

$$\begin{aligned} T(\mathbf{k}_{||}) &= [T_{int}(\mathbf{k}_{||})]^2 e^{-2Nq_y a} \\ &= \frac{4 \sinh^2 q_y a \sin^2 k_y a}{(\cosh q_y a - \cos k_y a)^2} e^{-2Nq_y a}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

όπου

$$\begin{aligned} \cos(k_y a) &= -\epsilon^0/2t - \cos k_x a - \cos k_z a \\ \cosh(q_y a) &= -\epsilon_B/2t - \cos k_x a - \cos k_z a. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Η Εξ. (4.3) περιγράφει ένα γενικευμένο μοντέλο Jullière για ελεύθερα ηλεκτρόνια [1, 65, 66], ο συντελεστής διέλευσης παραγοντοποιείται στο γινόμενο των, T_{int} , (όμοιο για συμμετρικό φράγμα) και την εκθετική μείωση λόγω της διέλευσης μέσω του φράγματος. Η αναλυμένη κατά $\mathbf{k}_{||}$ πιθανότητα διέλευσης μηδενικής τάσης στην E_F που υπολογίζεται από την Εξ. (4.3) και (4.4) παρουσιάζεται στα Σχ. (4.9δ)-(4.9φ) για τις ίδιες τιμές της ϵ^0 , -3, 0, και +3 eV, αντίστοιχα. Γενικά, η συμφωνία ανάμεσα στις αναλυμένες κατά $\mathbf{k}_{||}$ πυκνότητα ρεύματος και πιθανότητα διέλευσης, είναι πολύ καλή.

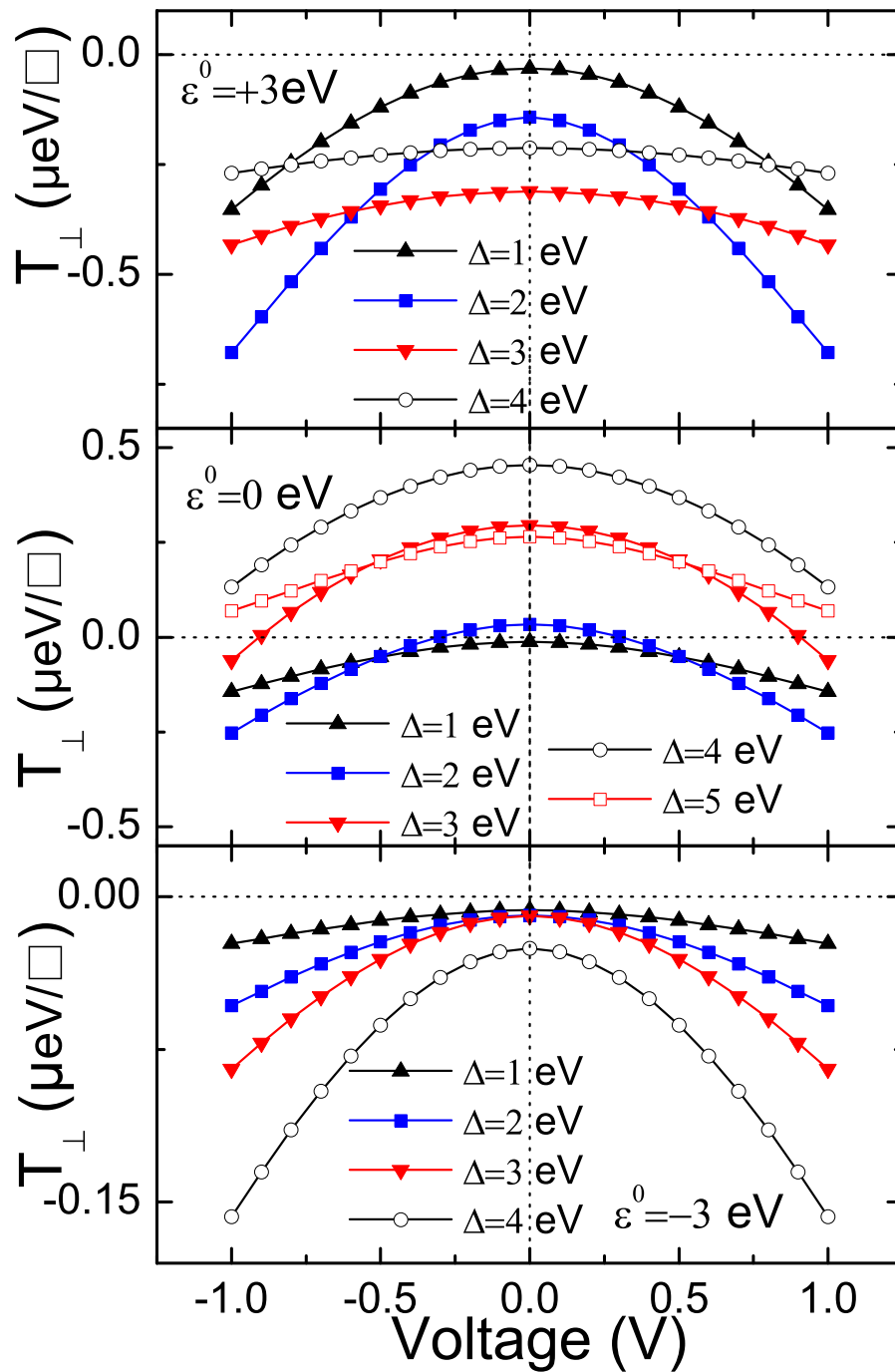
Εφόσον $t = -1$ eV και στις δύο επαφές και στον μονωτή, ο παράγοντας εκθετικής μείωσης έχει την μέγιστη τιμή του για $\mathbf{k}_{||} = 0$. Από την άλλη πλευρά σύμφωνα με τις Εξ. (4.3) και (4.4) η προβολή της επιφάνειας Fermi στην ζώνη Brillouin επιτρέπει διέλευση μόνο μερικών από τις επιφανειακές καταστάσεις ανάλογα την τιμή της κατάληψης ζώνης δηλαδή του ϵ^0 . Οι καταστάσεις αυτές είναι εντοπισμένες γύρω από $\mathbf{k}_{||} = \pi, \pi/2$ και 0, για $\epsilon^0 = -3, 0$ και +3 eV, αντίστοιχα, δηλαδή, η τιμή του $|\mathbf{k}_{||}^{(max)}|$ για το οποίο η T_{int} έχει την μεγαλύτερη τιμή της μειώνεται καθώς μειώνεται η κατάληψη ζώνης ή με άλλα λόγια αυξάνεται η ϵ^0 . Άρα η πιο διευκολυμένη διέλευση συμβαίνει για $\epsilon^0 = +3$ eV, αφού οι μέγιστες τιμές τόσο του εκθετικού συντελεστή μείωσης όσο και της πιθανότητας διέλευσης T_{int} συμπίπτουν για $\mathbf{k}_{||} = 0$. Από την άλλη μεριά όμως ή μέγιστη πυκνότητα καταστάσεων των επιφανειακών καταστάσεων των επαφών $N_{int}(E_F)$, στην E_F έχει μέγιστη τιμή για κατάληψη ζώνης 1/2. Συμπερασματικά η μέγιστη τιμή στη συνολική (ολοκληρωμένη κατά $\mathbf{k}_{||}$) πυκνότητα ρεύματος σαν συνάρτηση της ϵ^0 στο Σχ. 4.8 είναι αποτέλεσμα αυτής της αλληλεπίδρασης των $N_{int}(E_F)$, της μέγιστης πιθανότητας διέλευσης T_{int} στο $|\mathbf{k}_{||}^{(max)}|$, και της μέγιστης τιμής του εκθετικού παράγοντα μείωσης για $\mathbf{k}_{||} = 0$.

4.3 Εξάρτηση της T_{\perp} από τη τάση

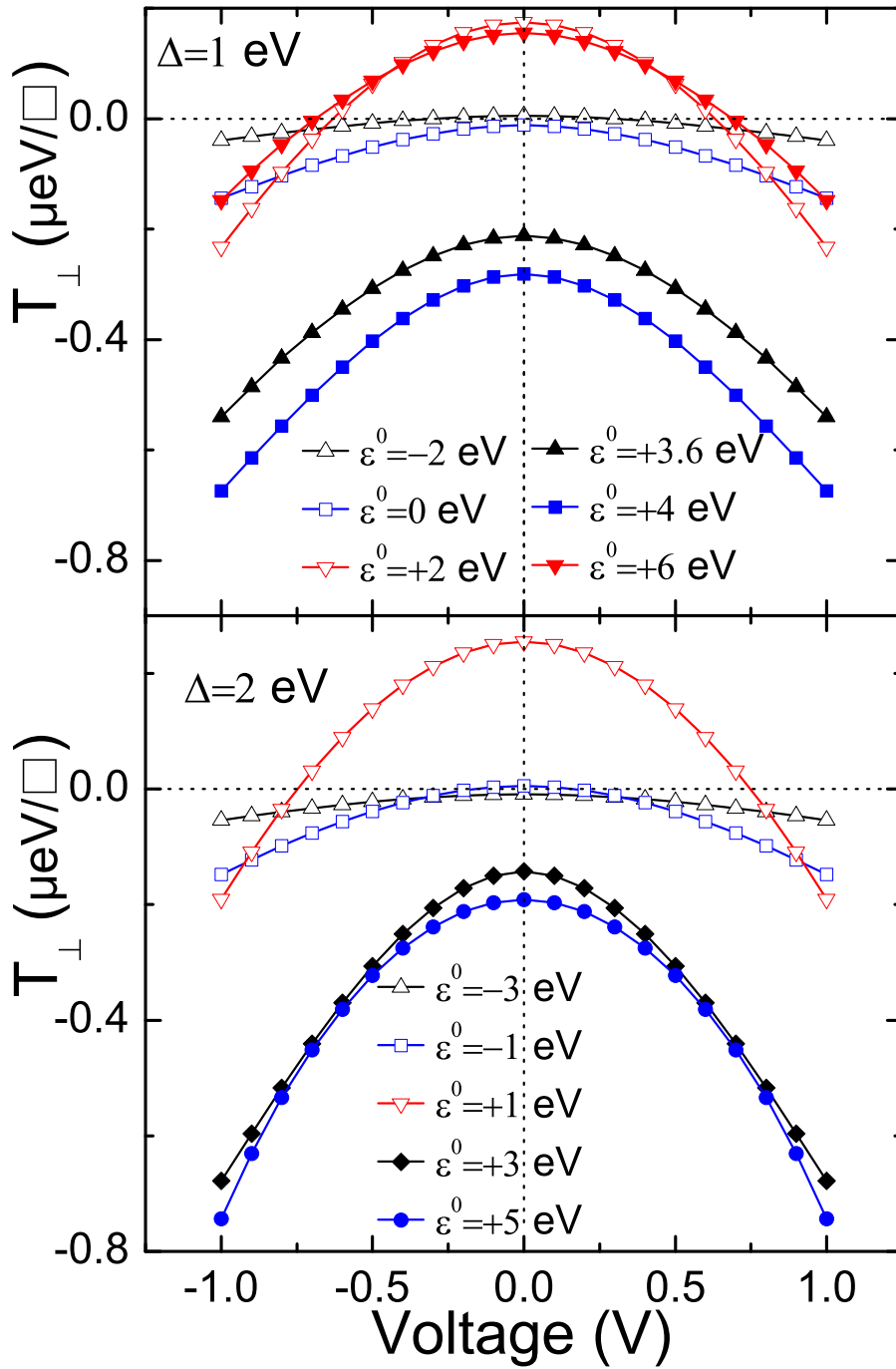
Στο Σχ. 4.10 παρουσιάζουμε την εξάρτηση της κάθετης συνιστώσας της ολικής ροπής μεταφοράς σπιν $T_{\perp}(V)$, που ασκείται στην μαγνήτιση της δεξιάς επαφής, από την τάση. Η γωνία μεταξύ των μαγνητίσεων των δύο επαφών είναι $\theta = \pi/2$, η ενέργεια διαχωρισμού(exchange splitting) παίρνει διάφορες τιμές, ενώ η ενέργεια σημείου(on-site energy) παίρνει τις τιμές $\varepsilon^0 = +3, 0, -3 eV$ που αντιστοιχούν στο πάνω, μεσαίο και κάτω πλαίσιο του Σχ. 4.10. Βρίσκουμε ότι η $T_{\perp}(V)$ μεταβάλλεται σαν δευτεροβάθμια εξίσωση της τάσης, κάτι που είχε προταθεί, χωρίς όμως να υπολογισθεί και από τον Slonczewski [36], και μάλιστα $\left(\frac{d^2 T_{\perp}(V)}{dV^2}\right) < 0$ για κάθε τιμή της κατάληψης ζώνης και της ενέργειας διαχωρισμού [37, 51]. Μεγάλο ενδιαφέρον έχει ότι τα αποτελέσματα αυτά είναι συνεπή με τις μετρήσεις σε πρόσφατα πειράματα [44, 45]. Παρατηρήστε ότι η $\left(\frac{d^2 T_{\perp}(V)}{dV^2}\right)$ εξαρτάται τόσο από τη Δ όσο και από την κατάληψη ζώνης. Για παράδειγμα, στην περίπτωση της κατάληψης ζώνης 1/4 και για μεγάλη ενέργεια διαχωρισμού ($\Delta = 4 eV$) η $\left(\frac{d^2 T_{\perp}(V)}{dV^2}\right) \approx 0$.

Για μηδενική τάση η τιμή της $T_{\perp}(V)$ είναι μη μηδενική σε αντίθεση με την τιμή της $T_{\parallel}(V)$. Πιο συγκεκριμένα σχετίζεται με το φαινόμενο σύζευξης ανταλλαγής (interlayer exchange coupling (IEC)) στην κατάσταση ισορροπίας. Παρατηρούμε ότι μειώνεται μονοτονικά καθώς αυξάνεται η τιμή της Δ για κατάληψη ζώνης 3/4, ενώ για 1/2 και 1/4 μειώνεται αλλά όχι μονοτονικά. Για κατάληψη ζώνης 1/2, η $T_{\perp} > 0$ για $\Delta \geq 2$ και για χαμηλή τάση και αλλάζει πρόσημο σε μεγαλύτερη τάση, σε αντίθεση με τις περιπτώσεις με κατάληψη ζώνης 1/4 και 3/4 που η T_{\perp} παραμένει αρνητική για όλες τις τιμές της τάσης. Αυτή η μεταβολή του προσήμου της σταθεράς ανταλλαγής σύζευξης(IEC), σε κατάσταση εκτός ισορροπίας με την μεταβολή της τάσης[51, 53] μπορεί να έχει σημαντικές πρακτικές εφαρμογές για τον έλεγχο του φαινομένου σύζευξης ανταλλαγής μέσω τάσης.

Στο Σχ. 4.11 παρουσιάζουμε την εξάρτηση από την τάση της T_{\perp} για $\theta = \pi/2$, διάφορες τιμές της μέσης ενέργειας σημείου ε^0 και για σταθερή ενέργεια διαχωρισμού $\Delta = 1 eV$ (πάνω πλαίσιο) και $\Delta = 2 eV$ (κάτω πλαίσιο), αντίστοιχα. Σε όλες τις περιπτώσεις βρίσκουμε ότι $T_{\perp}(V) = T_{\perp}(V = 0) - \left|\frac{d^2 T_{\perp}(V)}{dV^2}\right|V^2$. Ομοίως με το Σχ. 4.10 βρίσκουμε ότι το πρόσημο της $T_{\perp}(V = 0)$ και η εξάρτηση της σταθεράς σύζευξης ανταλλαγής (IEC) από την τάση καθορίζεται τόσο από τη Δ όσο και από την κατάληψη ζώνης.



Σχήμα 4.10: Εξάρτηση της κάθετης συνιστώσας της ροπής μεταφοράς σπιν, T_{\perp} , από την τάση, για $\theta = \pi/2$, διάφορες τιμές της ενέργειας διαχωρισμού Δ , και τρεις τιμές της μέσης ενέργειας σημείου ϵ^0 .



Σχήμα 4.11: Εξάρτηση από την τάση της κάθετης συνιστώσας της ροπής μεταφοράς σπιν, T_{\perp} , για $\theta = \pi/2$, διάφορες τιμές της μέσης ενέργειας σημείου ϵ^0 και για σταθερή ενέργεια διαχωρισμού $\Delta = 1$ eV (πάνω πλαίσιο) και $\Delta = 2$ eV (κάτω πλαίσιο), αντίστοιχα.

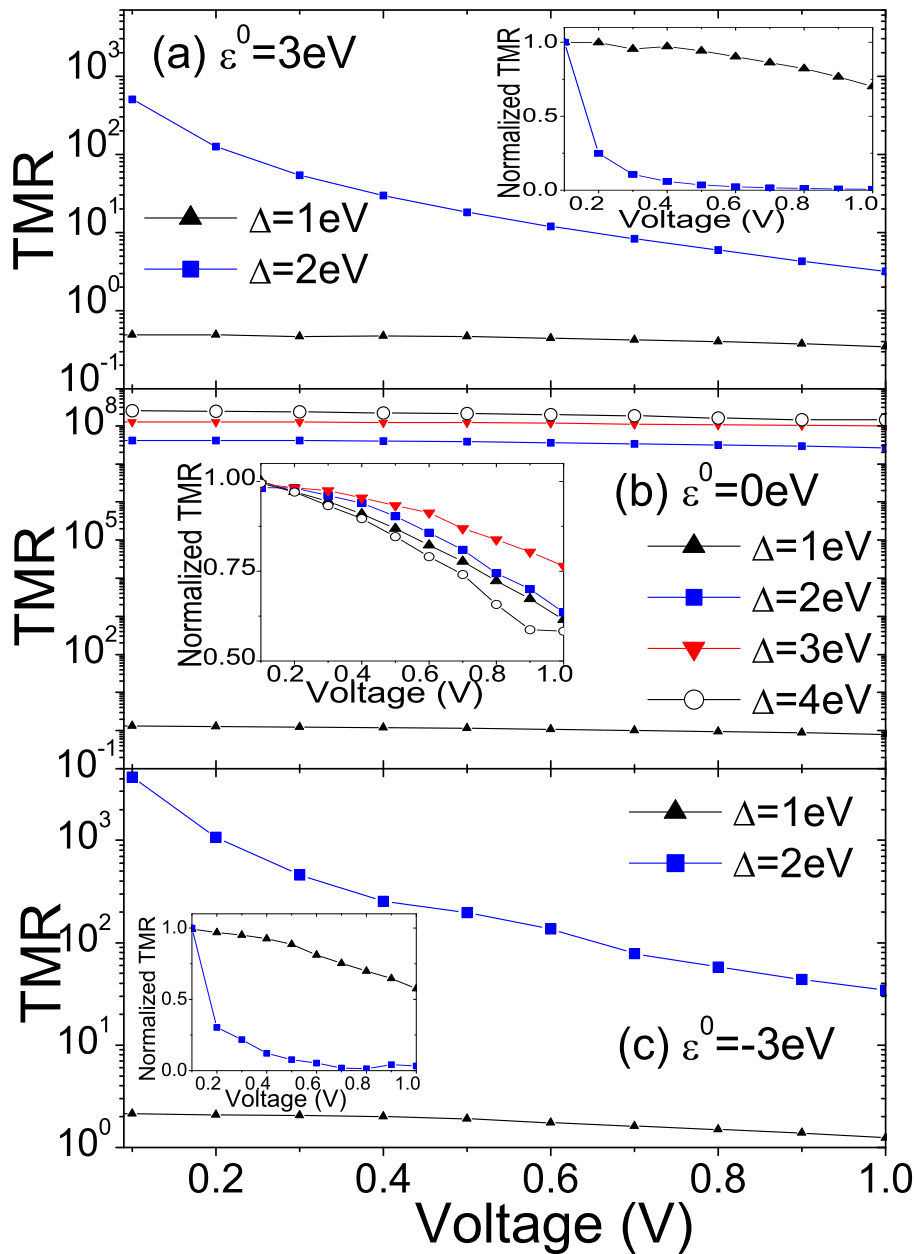
4.4 Εξάρτηση της Μαγνητοαντίστασης(TMR) από την τάση

Ένα από τα πιο γνωστά σημαντικά ελαττώματα των μαγνητικών μνημών τυχαίας προσπέλασης (MRAM) είναι η μεγάλη μείωση του φαινομένου της μαγνητοαντίστασης σαν συνάρτηση της τάσης. Η εξάρτηση του λόγου μαγνητοαντίστασης TMR(Εξ.(2.1) από την τάση μπορεί να εκφραστεί με την χαρακτηριστική τάση $V_{1/2}$, στην οποία έχει μειωθεί στο ήμισυ η τιμή που έχει η TMR για μηδενική τάση. Μεγάλη τιμή της $V_{1/2}$ ή ισοδύναμα αργή μείωση της TMR σαν συνάρτηση της V είναι επιθυμητή για εφαρμογές σε συσκευές [25]. Ενώ προγενέστερα πειράματα[67] έβρισκαν ότι $V_{1/2} \approx 0.2 - 0.3 V$, νεότερες αναφορές κάνουν λόγο για υψηλότερες τιμές της τάξης 0.5-0.6 V για την $V_{1/2}$ [68].

Σε αυτό το σημείο παρουσιάζουμε την επίδραση που έχουν η ενέργεια διαχωρισμού Δ και η μέση ενέργεια σημείου ε^0 στην εξάρτηση από την τάση του λόγου TMR. Σημειώστε ότι στην περίπτωση ημιμετάλλου η TMR απειρίζεται $TMR \rightarrow \infty$, αφού $I_{AP} \rightarrow 0$ (βλέπε Εξ.2.1). Όλα τα σχήματα που παραθέτουμε δείχνουν την εξάρτηση του λόγου TMR από την τάση μόνο για $V > 0$ λόγω του ότι ο λόγος μαγνητοαντίστασης TMR είναι μια άρτια συνάρτηση της τάσης για συμμετρικές μαγνητικές διεπαφές σήραγγας.

Στο Σχ. 4.12 παρουσιάζουμε την εξάρτηση από την τάση του λόγου TMR για δεδομένες τιμές της μέσης ενέργειας σημείου $\varepsilon^0 = 3, 0, -3 eV$ που αντιστοιχούν σε μέση κατάληψη ζώνης 1/4(πάνω πλαίσιο), 1/2(μεσαίο πλαίσιο) και 3/4(κάτω πλαίσιο), αντίστοιχα, ενώ η ενέργεια διαχωρισμού Δ παίρνει διάφορες τιμές. Αναπαράγουμε το γνωστό αποτέλεσμα της μείωσης του λόγου TMR με την αύξηση της τάσης. Αυτό μπορεί να γίνει πιο εμφανές στα ένθετα σχήματα του Σχ. 4.12, όπου παρουσιάζουμε τον κανονικοποιημένο λόγο TMR ως προς την τιμή του σε χαμηλή τάση, $TMR(V)/TMR(V \approx 0)$ σαν συνάρτηση της τάσης. Το παραπάνω αποτέλεσμα είναι σύμφωνο με προηγούμενα θεωρητικά [33, 32] και πειραματικά [24, 25, 26, 27, 28] αποτελέσματα.

Για δεδομένη τιμή της ε^0 η TMR μειώνεται (παρατηρήστε την λογαριθμική κλίμακα για το λόγο TMR), καθώς αυξάνεται η Δ λόγω της αύξησης της πυκνότητας ρεύματος για την αντισιδηρομαγνητική διευθέτηση των μαγνητίσεων $I(\pi)$, σε αντίθεση με την πιο περίπλοκη εξάρτηση που είχε η $T_{||}$ από τη Δ στο Σχ. 4.3. Συνεπώς, βρίσκουμε ότι η TMR και η ροπή μεταφοράς σπιν δεν συσχετίζονται. η TMR για μικρές τιμές της Δ έχει δευτεροβάθμια εξάρτηση από τη Δ , ενώ για μεγάλες τιμές εξαρτάται εκθετικά από τη Δ . Για μέση κατάληψη ζώνης 1/2 ($\varepsilon^0 = 0 eV$), ο κανονικοποιημένος λόγος TMR παρουσιάζει ασθενή εξάρτηση από την τάση, ανεξαρτήτου τιμής της Δ με χαρακτηριστική υψηλή τιμή για την $V_{1/2} \simeq 1 V$. Η τιμή αυτή είναι

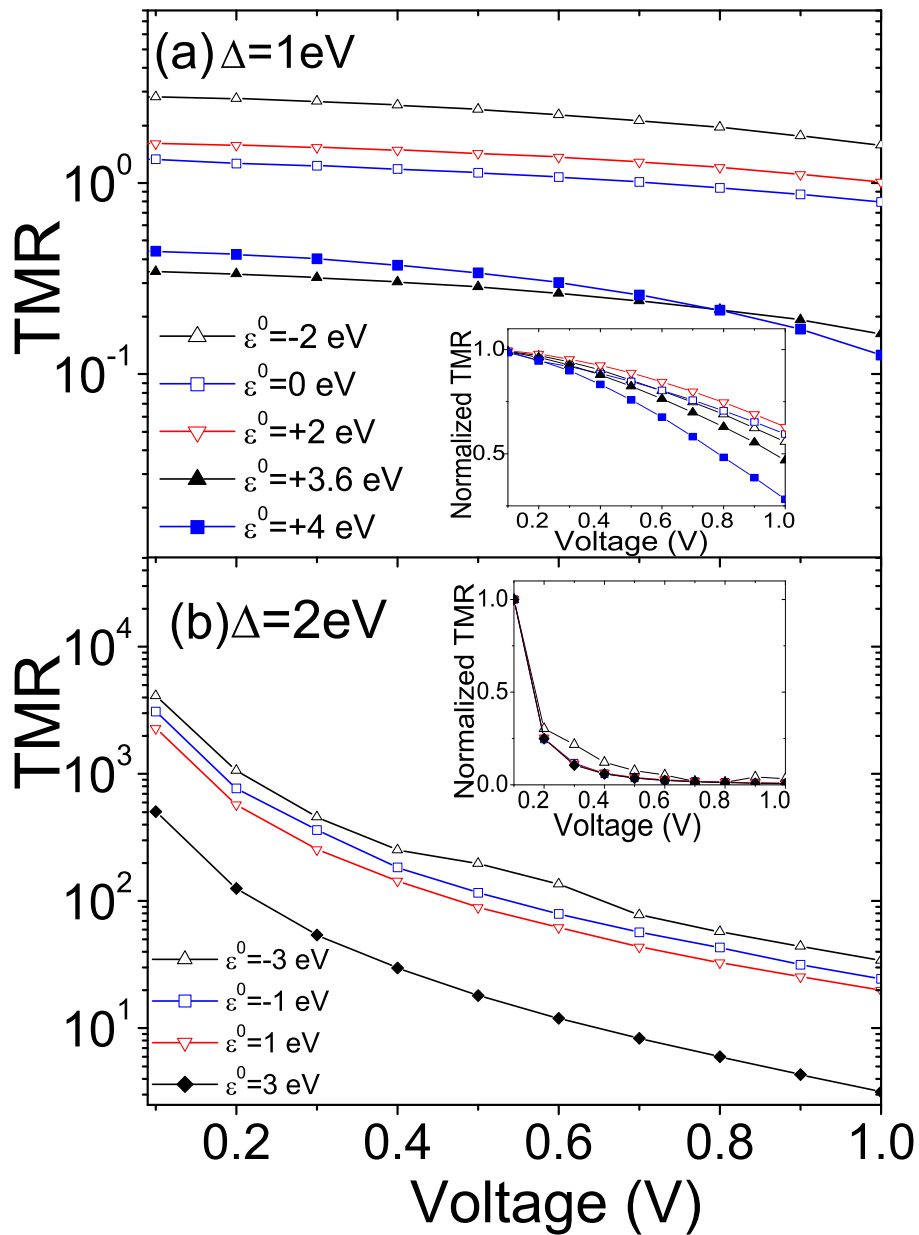


Σχήμα 4.12: Εξάρτηση του λόγου TMR από την τάση για διάφορες τιμές της ενέργειας διαχωρισμού Δ και για τρεις τιμές της μέσης ενέργειας σημείου, ε^0 , που αντιστοιχεί σε κατάληψη ζώνης 1/4(πάνω πλαίσιο), 1/2(μεσαίο πλαίσιο) και 3/4(κάτω πλαίσιο). Οι ένθετες παραστάσεις παρουσιάζουν την εξάρτηση από την τάση τον κανονικοποιημένο λόγο TMR ως προς την τιμή του σε χαμηλή τάση, $TMR(\infty)/TMR(\approx 0)$.

περίπου διπλάσια της πειραματικής τιμής της $V_{1/2}$ για "καθαρές" μαγνητικές επαφές. Από την άλλη μεριά, για μέση κατάληψη ζώνης 1/4 και 3/4 (ένθετα σε πάνω και κάτω πλαίσια του Σχ. 4.12) υπάρχει μία ασθενής πτώση ($V_{1/2}$ περίπου 1 V) του

κανονικοποιημένου λόγου TMR για Δ της τάξης του 1 eV ενώ υπάρχει μία έντονη πτώση ($V_{1/2}$ περίπου 0.2 V) για Δ της τάξης των 2 eV. Συνεπώς, τα αποτελέσματα προτείνουν ότι για συμμετρική ιδεατή μαγνητική επαφή σήραγγας χωρίς ατέλειες (disorder) και σε απουσία διεγέρσεων μαγνονίων (magnon excitations), η βέλτιστη κατάληψη ζώνης για υψηλές τιμές της $V_{1/2}$ είναι η 1/2, και το αποτέλεσμα αυτό είναι ανεξάρτητο της τιμής της Δ .

Στο Σχ. 4.13 παρουσιάζουμε την εξάρτηση του λόγου TMR από την τάση για σταθερή τιμή της Δ και για διάφορες τιμές της ε^0 που αντιστοιχούν σε διαφορετικές τιμές της κατάληψης ζώνης. Για μικρή ενέργεια διαχωρισμού ανταλλαγής, $\Delta = 1\text{eV}$, η TMR είναι περίπου της ίδιας τάξης μεγέθους για όλες τις τιμές της ε^0 και μειώνεται ελάχιστα σαν συνάρτηση της τάσης, όπως είναι προφανές στο ένθετο, αποδίδοντας έτσι μεγάλες τιμές της $V_{1/2} \approx 1\text{eV}$. Από την άλλη μεριά, για $\Delta = 2\text{eV}$, η TMR μειώνεται αρκετές τάξεις μεγέθους καθώς αυξάνεται η ε^0 η ισοδύναμα μειώνεται η κατάληψη ζώνης. Επιπρόσθετα, ο κανονικοποιημένος λόγος TMR μειώνεται απότομα σαν συνάρτηση της τάσης για όλες τις τιμές της ε^0 , αποδίδοντας έτσι χαμηλή τιμή για την $V_{1/2} \approx 0.2\text{V}$, αποτέλεσμα που είναι σε συμφωνία με προηγούμενα πειράματα [67]. Συμπερασματικά, όπως και στην περίπτωση της ροπής μεταφοράς σπιν, η TMR και η εξάρτηση του από την τάση μπορεί να ρυθμιστεί επιλεκτικά με την επιλογή κατάλληλων τιμών της ενέργειας διαχωρισμού και της κατάληψης ζώνης.



Σχήμα 4.13: Εξάρτηση από την τάση του λόγου TMR για διάφορες τιμές της μέσης ενέργειας σημείου ε^0 και για δύο τιμές της ενέργειας διαχωρισμού $\Delta = 1 \text{ eV}$ (πάνω πλαίσιο) και $\Delta = 2 \text{ eV}$ (κάτω πλαίσιο). Οι ένθετες παραστάσεις παρουσιάζουν την εξάρτηση από την τάση του κανονικοποιημένου λόγου TMR ως προς την χαμηλής τάσης τιμή του.

Κεφάλαιο 5

Συμπεράσματα και προεκτάσεις

Παρουσιάσαμε υπολογισμούς ηλεκτρονικής δομής ισχυρά δέσμιων ηλεκτρονίων σε συνδυασμό με τον φορμαλισμό Keldysh συναρτήσεων Green εκτός ισορροπίας σε συμμετρικές μαγνητικές διεπαφές σήραγγας. Ο σκοπός της έρευνας είναι η συστηματική μελέτη της επίδρασης της ενέργειας διαχωρισμού (exchange splitting) και της μέσης κατάληψης ζώνης (band filling) στην εξάρτηση της κάθετης ή πεδιακή, T_{\perp} , συνιστώσας καθώς και παράλληλης ή μεταφοράς σπιν, T_{\parallel} , συνιστώσας της ροπής μεταφοράς σπιν, όσο και του λόγου της μαγνητοαντίστασης TMR από την εφαρμόζομενη τάση. Βρίσκουμε ότι τόσο η μαγνητοαντίσταση, όσο και οι δύο συνιστώσες της ροπής μεταφοράς σπιν εκδηλώνουν μια ευρεία ποικιλία από ενδιαφέρουσες και ασυνήθιστες συμπεριφορές σαν συνάρτηση της τάσης.

Κάνουμε την πρόβλεψη μίας μη μονοτονικής εξάρτησης από την τάση της συνιστώσας μεταφοράς σπιν της ροπής μεταφοράς σπιν, που σε αντίθεση με τις επικρατούσες πεποιθήσεις μπορεί να αλλάξει πρόσημο χωρίς την παράλληλη αλλαγή πρόσημου του ρεύματος ή της τάσης όπως και να έχει πλήρη δευτεροβάθμια εξάρτηση από την τάση. Γενικεύοντας το ισοδύναμο κύκλωμα μιας μαγνητικής επαφής σήραγγας [2, 37] χρησιμοποιώντας γωνιακά εξαρτώμενους ροοστάτες, δείχνουμε ότι η T_{\parallel} ικανοποιεί μία εξίσωση που περιλαμβάνει την διαφορά των πυκνοτήτων ρεύματος σπιν για την σιδηρομαγνητική(παράλληλη) FM και την αντισιδηρομαγνητική(αντιπαράλληλη) AF διευθέτηση των μαγνητίσεων των δύο επαφών. Η πυκνότητα ρεύματος σπιν για την διευθέτηση FM(AF) έχει γραμμική(δευτεροβάθμια) εξάρτηση από την τάση. Η προέλευση των παραπάνω εξαρτήσεων οφείλεται στη συμμετρική και ασυμμετρική φύση του φράγματος δυναμικού αντίστοιχα. Η αλληλεπίδραση των πυκνοτήτων ρεύματος σπιν είναι το κλειδί στην εξάρτηση της συνιστώσας μεταφοράς σπιν της ροπής μεταφοράς σπιν από την τάση και οδηγεί σε πλούσια συμπεριφορά. Εδώ ας σημειώσουμε ότι η συμπεριφορά αυτή είναι ανεξάρτητη μοντέλου προσομοίωσης αρκεί να ικανοποιείται ο όρος $I_z^s(0) \approx I_z^s(\pi)$

Από την άλλη μεριά, βρίσκουμε ότι η κάθετη συνιστώσα της ροπής μεταφοράς σπιν T_{\perp} , έχει δευτεροβάθμια εξάρτηση από την τάση, $T_{\perp}(V) = T_{\perp}(V = 0) + \left(\frac{d^2 T_{\perp}(V)}{dV^2}\right) V^2$ για τάσεις στο εύρος των τιμών $-1 V \leq V \leq 1 V$, ανεξάρτητη από την κατάληψη ζώνης. Τα αποτελέσματα αυτά είναι σύμφωνα με πρόσφατα πειραματικά αποτελέσματα [44, 45]. Η τιμή μηδενικής τάσης της σταθεράς σύ-

ζευξης ανταλλαγής (interlayer exchange coupling (IEC)) $T_{\perp}(V = 0)$, καθώς και η d^2T_{\perp}/dV^2 , εξαρτώνται τόσο από την κατάληψη ζώνης όσο και από την ενέργεια διαχωρισμού. Ενδιαφέρον έχει το γεγονός ότι για ημικατάληψη ζώνης ή κοντά σε αυτή για αρκετά μεγάλη ενέργεια διαχωρισμού, η $T_{\perp}(V)$ αλλάζει πρόσημο για πεπερασμένη τιμή της τάσης, γεγονός που προτείνει ότι η σταθερά σύζευξης ανταλλαγής (IEC) θα μπορούσε να καθοριστεί μέσω της εφαρμογής τάσης.

Ο λόγος της μαγνητοαντίστασης TMR παρουσιάζει μείωση, καθώς αυξάνεται η τάση, επιβεβαιώνοντας πληθώρα πειραματικών αποτελεσμάτων. Παρ' όλα αυτά δεν συσχετίζεται με την συμπεριφορά των συνιστωσών της ροπής μεταφοράς τάσης σαν συνάρτηση της τάσης. Η χαρακτηριστική τάση, $V_{1/2}$, στην οποία υποδιπλασιάζεται η τιμή του λόγου TMR για χαμηλή τάση μπορεί να ελεγχθεί επιλεκτικά δια της ενέργειας διαχωρισμού και της κατάληψης ζώνης. Η ημικατάληψη ζώνης είναι η βέλτιστη τιμή για υψηλή τιμή της $V_{1/2}$, ανεξάρτητα της τιμής της ενέργειας διαχωρισμού.

Μελλοντική επέκταση της εργασίας μπορεί να συμπεριλαμβάνει τα αποτελέσματα των ροπών σπιν στη λύση της εξίσωσης Landau-Lifshitz-Gilbert έτσι ώστε να υπολογίζεται η κρίσιμη τιμή του ρεύματος για την αναστροφή της μαγνήτισης στο σύστημα.

Μέρος II

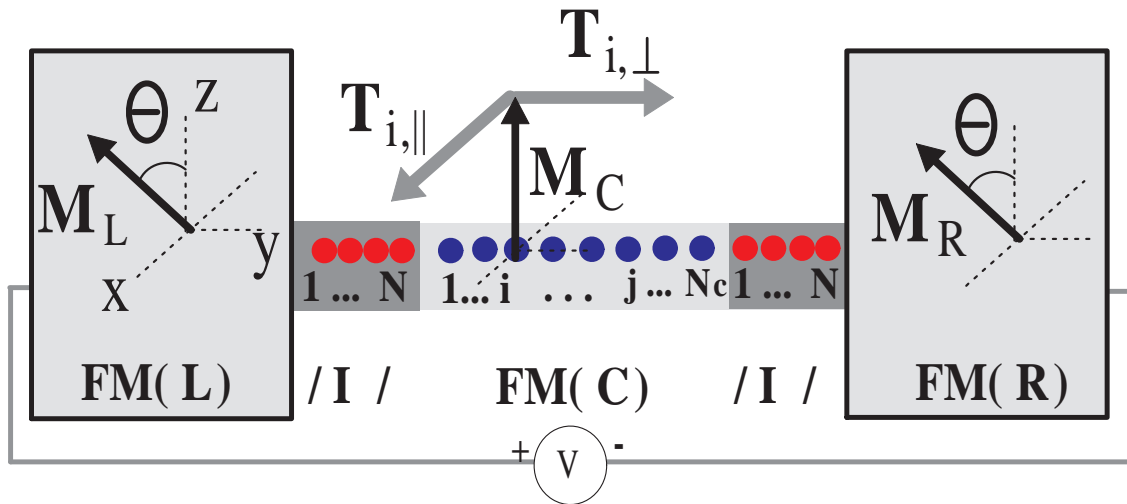
Ροπή σπιν σε διπλή ΜΤJ

Κεφάλαιο 6

Εισαγωγή

Η διπλή μαγνητική επαφή σήραγγας double-barrier magnetic tunnel junction (DBMTJ) είναι μία μαγνητική πολυστρωματική συσκευή που αποτελείται από ένα κεντρικό λεπτό μεταλλικό σιδηρομαγνητικό (FM) στρώμα πλαισιωμένο από δύο μονωτικά(διηλεκτρικά) στρώματα συνδεδεμένα με δύο σιδηρομαγνητικά ηλεκτρόδια (βλέπε Σχ. 6.1). Είναι γνωστό ότι σε τέτοια συστήματα εμφανίζεται λόγω περιορισμού διακριτό ενεργειακό φάσμα και η μαγνητοαντίσταση σήραγγας (TMR) μπορεί να αυξηθεί σημαντικά λόγω φαινομένων συντονισμού[78, 79, 80, 81]. Το κεφάλαιο αυτό αναφέρεται στην μελέτη του φαινομένου της ροπής σπιν σε DBMTJ και εξετάζεται η επίδραση της θέσης των διακριτών ενεργειακών καταστάσεων κβαντικού πηγαδιού και της σχετικής διεύθυνσης της μαγνήτισης των σιδηρομαγνητικών περιοχών, στο ρεύμα και στη ροπή σπιν που αναπτύσσεται στη διάταξη.

Το πιο ενδιαφέρον αποτέλεσμα της μελέτης είναι η μεγάλη αύξηση του φαινομένου της ροπής σπιν υπό συνθήκες ενεργειακής σύμπτωσης κβαντικών ενεργειακών σταθμών διαφορετικού σπιν. Επιπρόσθετα μελετήθηκε η εξάρτηση της ροπής σπιν από την τάση και βρέθηκε ότι η παράλληλη συνιστώσα $T_{i,\parallel}$ (ή αλλιώς ροπή σπιν Slonewski) αυξάνεται βηματικά, καθώς ενεργειακές στάθμες ανεξαρτήτως του σπιν εισέρχονται στο "παράθυρο τάσης", και μειώνεται επίσης βηματικά όταν εξέρχονται από την ενεργειακή ζώνη των ηλεκτροδίων, σε αντιστοιχία με το ρεύμα φορτίου. Αντιθέτως η εξάρτηση της κάθετης συνιστώσας της ροπής σπιν $T_{i,\perp}$ (ή αλλιώς πεδιακή



Σχήμα 6.1: Σχηματική αναπαράσταση διπλής επαφής σήραγγας (Double Barrier Magnetic Tunnel junction (DBMTJ)). Αποτελείται από μια κεντρική σιδηρομαγνητική (FM) περιοχή από N_C ατομικά σημεία, και συνδέεται με ημιάπειρες FM επαφές διαμέσω μονωτών I των N σημείων. Η μαγνήτιση $\mathbf{M}_{L(R)}$ των αριστερών και δεξιών (L(R)) FM επαφών είναι στραμμένες κατά μία γωνία θ στο επίπεδο xz σε σχέση με την μαγνήτιση \mathbf{M}_C της κεντρικής περιοχής γύρω από τον άξονα y . Η παράλληλη $T_{i,\parallel}$ και κάθετη $T_{i,\perp}$ ροπή σπιν σε κάθε FM σημείο βρίσκονται κατά μήκος της διεύθυνσης x και y αντίστοιχα.

ροπή σπιν) από την τάση παρουσιάζει αλλαγή προσήμου καθώς ενεργειακές στάθμες διαφορετικού σπιν εισέρχονται στο παράθυρο τάσης.

Τέλος υπολογίζεται η συνολική ροπή σπιν που εμφανίζεται στα FM ηλεκτρόδια. Βρίσκουμε ότι η κάθετη συνιστώσα της ροπής σπιν T_{\perp} , η οποία σχετίζεται με την ενέργεια ανταλλαγής (interlayer exchange coupling energy) $E_X C$, εμφανίζει υπό τάση, ενδιαφέρουσα μη συνημιτονοηδή εξάρτηση από την γωνία ανάμεσα στη μαγνήτιση του κεντρικού στρώματος και των μαγνητίσεων των επαφών που θεωρούνται παράλληλες.

Κεφάλαιο 7

Μεθοδολογία

7.1 Χαμιλτονιανή συστήματος - Παράμετροι

Το υπό μελέτη σύστημα αποτελεί μία άπειρη μονοδιάσταση αλυσίδα και η Χαμιλτονιανή του γράφεται ως εξής

$$H = H_L + H_M + H_R + H_{L,M} + H_{R,M} + hc, \quad (7.1)$$

όπου το $H_M = H_I + H_C + H_{I,C} + hc$ είναι η Χαμιλτονιανή της κεντρικής $I/FM/I$ περιοχής σκέδασης, τα $H_{L(R),M}, H_{I,C}$ αναφέρονται στη σύζευξη των διεπαφών $L(R)/M$ και I/C αντίστοιχα. Η Χαμιλτονιανή σε κάθε FM περιοχή, H_α όπου $\alpha = L, R, C$, περιγράφεται στα πλαίσια της προσέγγισης μονοδιάστατου μοντέλου ισχυρά δέσμιων ηλεκτρονίων μονού τροχιακού από όρους άλματος· hopping πλησιέστερων γειτόνων, t_α ανεξαρτήτου σπιν, και ενέργεια $\varepsilon_\alpha^\sigma$ που εξαρτάται από το σπιν,

$$H_\alpha = \sum_{\sigma,i} \varepsilon_\alpha^\sigma c_i^\dagger c_i + \sum_i t_\alpha c_i^\dagger c_{i+1} + hc. \quad (7.2)$$

Η Χαμιλτονιανή, H_I , για τους μονωτές είναι αντίστοιχη της H_α , όπου αντί για παράμετρο hopping t_α έχουμε t_I και αντί για $\varepsilon_\alpha^\sigma$ έχουμε ε_I ανεξάρτητο από το σπιν. Η Χαμιλτονιανή στη διεπαφή FM/I γράφεται ως $H_{\alpha,I} = t_{\alpha/I} c_\alpha^\dagger c_I$. Η ενέργεια ανταλλαγής ορίζεται, $\Delta_\alpha = \varepsilon_\alpha^\uparrow - \varepsilon_\alpha^\downarrow$, και είναι ίδια στους FM, στο μονωτή $\Delta_I = 0$. Οι παράμετροι $\varepsilon_\alpha^\uparrow - E_F = 0.318eV$, $\varepsilon_\alpha^\downarrow - E_F = 0.736eV$, και $\varepsilon_I - E_F = 6.5eV$, όπου E_F είναι η ενέργεια Φέρμι και $t_\alpha = 0.4eV$ στους FM, $t_I = 1eV$ στους μονωτές και $t_{\alpha/I} = 0.5eV$ στις διεπαφές, σύμφωνα με τιμές από πρώτες αρχές για μονοδιάστατο FM νανοσύρμα Co[83].

7.2 Συναρτήσεις Green

Έγινε επέκταση του φορμαλισμού του S. Datta [84], αντικαθιστώντας τις βαθμωτές συναρτήσεις Green που περιγράφουν την μεταφορά φορτίου, με 2×2 πίνακες στο χώρο των σπιν έτσι ώστε να μελετηθούν τα φαινόμενα μεταφοράς σπιν. Έτσι η

H_α μπορεί να εκφραστεί στη μορφή, $H_\alpha = \bar{H}_\alpha + \delta H_\alpha$, όπου

$$\bar{H}_\alpha = \frac{1}{2}(\varepsilon_\alpha^\uparrow + \varepsilon_\alpha^\downarrow) + t_\alpha, \quad (7.3)$$

και

$$\delta H_\alpha = \frac{1}{2}(\varepsilon_\alpha^\uparrow - \varepsilon_\alpha^\downarrow). \quad (7.4)$$

Η μονοηλεκτρονιακή εξίσωση Schrödinger σε κάθε ημιάπειρη FM επαφή, μπορεί να γραφτεί για retarded συνάρτηση Green $g_{pq}^{\sigma,\sigma'}$ ως εξής,

$$\sum_{p_1} \left[(E\delta_{pp_1} - \bar{H}_{pp_1})I - \delta H_{pp_1} \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix} \right] \times \begin{pmatrix} g_{p_1q}^{\uparrow\uparrow} & g_{p_1q}^{\uparrow\downarrow} \\ g_{p_1q}^{\downarrow\uparrow} & g_{p_1q}^{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} = \delta_{pq}I, \quad (7.5)$$

όπου I είναι ο 2×2 μοναδιαίος πίνακας. Σύμφωνα με τον Datta [84] η retarded συνάρτηση Green \hat{G}_M της κεντρικής περιοχής σκέδασης M δίνεται από τον τύπο

$$\hat{G}_M = [E\hat{I} - \hat{H}_M - \hat{\Sigma}_L - \hat{\Sigma}_R]^{-1}, \quad (7.6)$$

όπου E είναι η ενέργεια του ενός ηλεκτρονίου. Τα \hat{H}_M και $\hat{\Sigma}_{L(R)}$ είναι η Χαμιλτονιανή και η αυτοενέργεια (self-energy σε μορφή πίνακα $(2N_M \times 2N_M)$ αντίστοιχα, και $N_M = 2N + N_C$ είναι ο αριθμός των ατομικών σημείων που αποτελούν την κεντρική περιοχή $I/FM/I$. Τα μόνα μη μηδενικά στοιχεία του πίνακα της αυτοενέργειας $\hat{\Sigma}_{L(R)}$, στην προσέγγιση πλησιέστερων γειτόνων είναι οι (2×2) πίνακες αυτοενέργειας στις διεπαφές ανάμεσα στην κεντρική περιοχή σκέδασης και στα ημιάπειρα ηλεκτρόδια, και δίνονται από

$$\tilde{\Sigma}_{L(R)}(\theta) = t_{\alpha/I}^2 \tilde{g}_{L(R)}(\theta), \quad (7.7)$$

όπου $\tilde{g}_{L(R)}(\theta)$ είναι οι επιφανειακές retarded συναρτήσεις Green σε μορφή 2×2 πίνακα στο χώρο των σπιν, των απομονωμένων ηλεκτροδίων $L(R)$, που προκύπτουν από την λύση της Εξ.7.5.

7.3 Συναρτήσεις Green εκτός ισορροπίας

Οι συναρτήσεις Green που περιγράφουν το σύστημα όταν βρίσκεται εκτός ισορροπίας(υπό τάση) προκύπτουν από την λύση της κινηματικής εξίσωσης [84]

$$\hat{G}_M^< = i\hat{G}_M\hat{\Sigma}^<\hat{G}_M^+, \quad (7.8)$$

όπου $\hat{\Sigma}^< = f_L(\hat{\Sigma}_L^\dagger - \hat{\Sigma}_L) + f_R(\hat{\Sigma}_R^\dagger - \hat{\Sigma}_R)$, είναι οι εκτός ισορροπίας πίνακες αυτό-ενεργειας και $f_{L(R)}$ είναι η συνάρτηση κατανομής Fermi-Dirac που περιγράφει τα L(R) (δεξιά και αριστερά) ηλεκτρόδια αντίστοιχα.

7.4 Ροπές σπιν

Η τοπική ροπή σπιν \mathbf{T}_i , που ασκείται στην εντοπισμένη μαγνήτιση στο ατομικό σημείο i της κεντρικής FM περιοχής ισούται με την απόκλιση της πυκνότητας ρεύματος σπιν στο σημείο i [85],

$$\mathbf{T}_i \equiv -\nabla \cdot \mathbf{I}^{(s)} = \mathbf{I}_{i-1,i}^{(s)} - \mathbf{I}_{i,i+1}^{(s)}, \quad (7.9)$$

όπου

$$\mathbf{I}_{i,i\pm 1}^{(s)} = \frac{t_C}{4\pi} \int \text{Tr}_\sigma \left[(\tilde{G}_{i,i\pm 1}^< - \tilde{G}_{i\pm 1,i}^<) \boldsymbol{\sigma} \right] dE, \quad (7.10)$$

είναι το ρεύμα σπιν ανάμεσα σε δύο γειτονικά ατομικά σημεία[85], και $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ είναι το διάνυσμα των πινάκων Pauli.

Η κάθετη συνιστώσα (ή πεδιακή) $T_{i,\perp}$, και η παράλληλη συνιστώσα (ή Slonczewski) $T_{i,\parallel}$, της τοπικής ροπής σπιν, όπως φαίνεται και στο Σχ.6.1, είναι κατά μήκος της $\hat{M}_C \times (\hat{M}_{L(R)} \times \hat{M}_C)$ και $\hat{M}_C \times \hat{M}_{L(R)}$ διεύθυνση αντίστοιχα. Όπου \hat{M}_C και $\hat{M}_{L(R)}$ είναι τα μοναδιαία διανύσματα κατά μήκος των μαγνητίσεων των C, L, R FM περιοχών της διπλής επαφής σήραγγας.

Κεφάλαιο 8

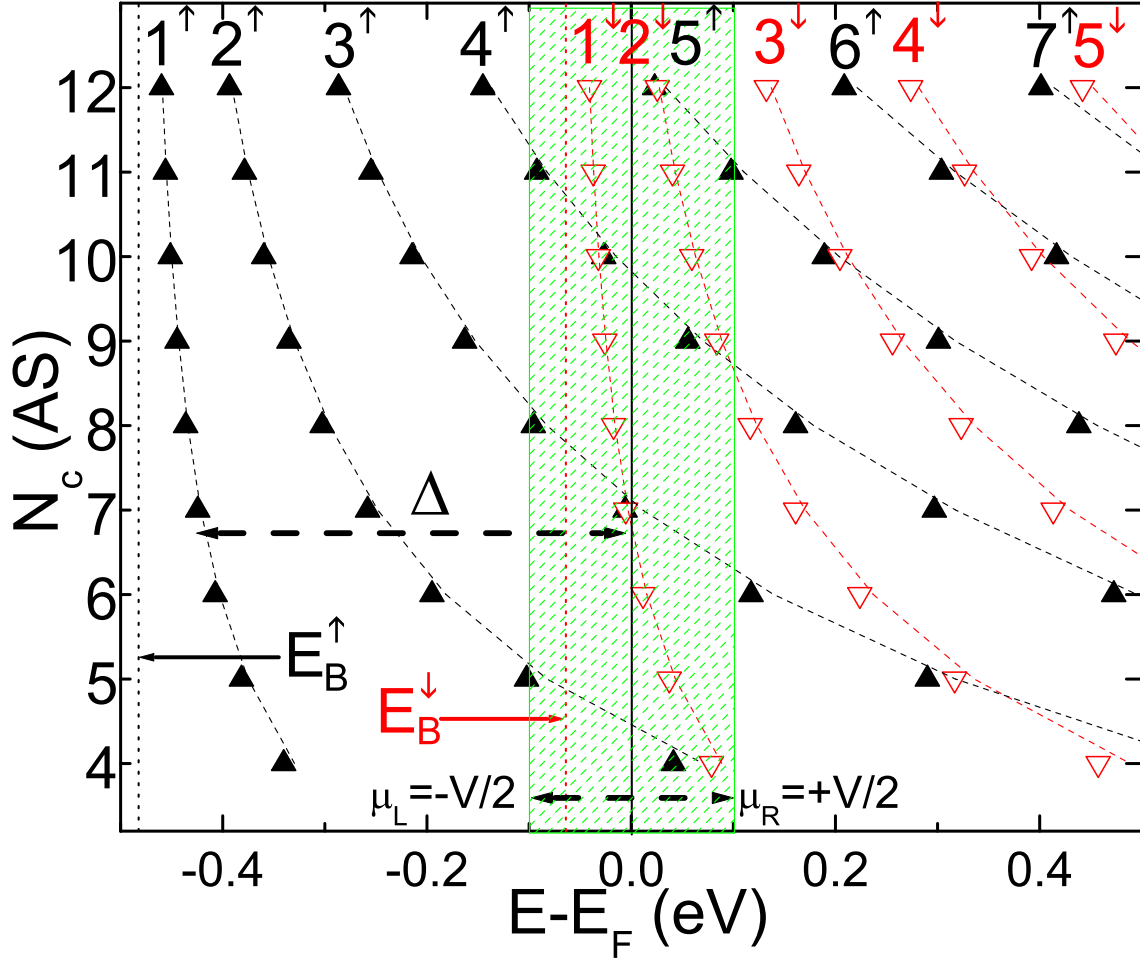
Παρουσίαση και ανάλυση αποτελεσμάτων

8.1 Ενέργειες κβαντικών καταστάσεων πηγαδιού

Οι ενέργειες των δέσμιων καταστάσεων πηγαδιού E^{n^σ} , για σπιν πάνω (πλειονότητας - χρωματισμένα τρίγωνα) και σπιν κάτω (μειονότητας - άχρωμα τρίγωνα) ηλεκτρόνια ως προς την ενέργεια Fermi E_F δίνονται στο Σχ. 8.1, σαν συνάρτηση του πάχους (αριθμού ατομικών σημείων που αποτελούν) N_C της κεντρικής FM περιοχής. Οι αριθμοί δίπλα σε κάθε σειρά αποτελεσμάτων(τριγώνων) αναφέρονται στον κύριο κβαντικό αριθμό $n^\sigma = 1^\sigma, 2^\sigma, \dots, N_C^\sigma$, των δέσμιων καταστάσεων. Οι διακεκομμένες γραμμές υποδεικνύουν την ενεργειακή θέση των καταστάσεων πηγαδιού $E_0^{n^\sigma} = \varepsilon^\sigma + 2t \cos(n^\sigma \pi / (N_C + 1))$ της απομονωμένης κεντρικής περιοχής. Η σύζευξη με τις επαφές έχει σαν αποτέλεσμα τη μετατόπιση και την διεύρυνση των ενεργειών του πηγαδιού.

Ο πυθμένας των ζωνών αγωγιμότητας για τα ηλεκτρόνια πλειονότητας και μειονότητας των επαφών υπό μηδενική τάση, δίνεται από τα $E_B^{\uparrow(\downarrow)}$ ενώ Δ είναι η ενέργεια διαχωρισμού των ζωνών και υποδεικνύεται από το οριζόντιο διακεκομμένο βέλος. Υπό τάση V , τα χημικά δυναμικά της αριστερής και δεξιάς επαφής (ηλεκτροδίων) μετατοπίζονται ενεργειακά κατά eV γύρω από την ενέργεια Fermi, $\mu_R = +eV/2$ και $\mu_L = -eV/2$, δημιουργώντας έτσι αυτό που ονομάζεται παράθυρο δυναμικού που παρουσιάζεται με σκιασμένο παραλληλόγραμμο στο Σχ.8.1.

Παρατηρείται ότι για $N_C = 7$ ατομικά σημεία οι καταστάσεις με $n^\uparrow = 3^\uparrow$ για ηλεκτρόνια πλειονότητας και $n^\downarrow = 1^\downarrow$ για ηλεκτρόνια μειονότητας βρίσκονται σε πολύ μεγάλη ενεργειακή προσέγγιση, και είναι σε κοντά στην ενέργεια Fermi. Όταν το σύστημα βρίσκεται υπό τάση οι ενεργειακές καταστάσεις πηγαδιού που βρίσκονται μέσα στο παράθυρο δυναμικού συνισφέρουν στο συντονισμένο φαινόμενο σήραγγας (Resonant Tunneling).

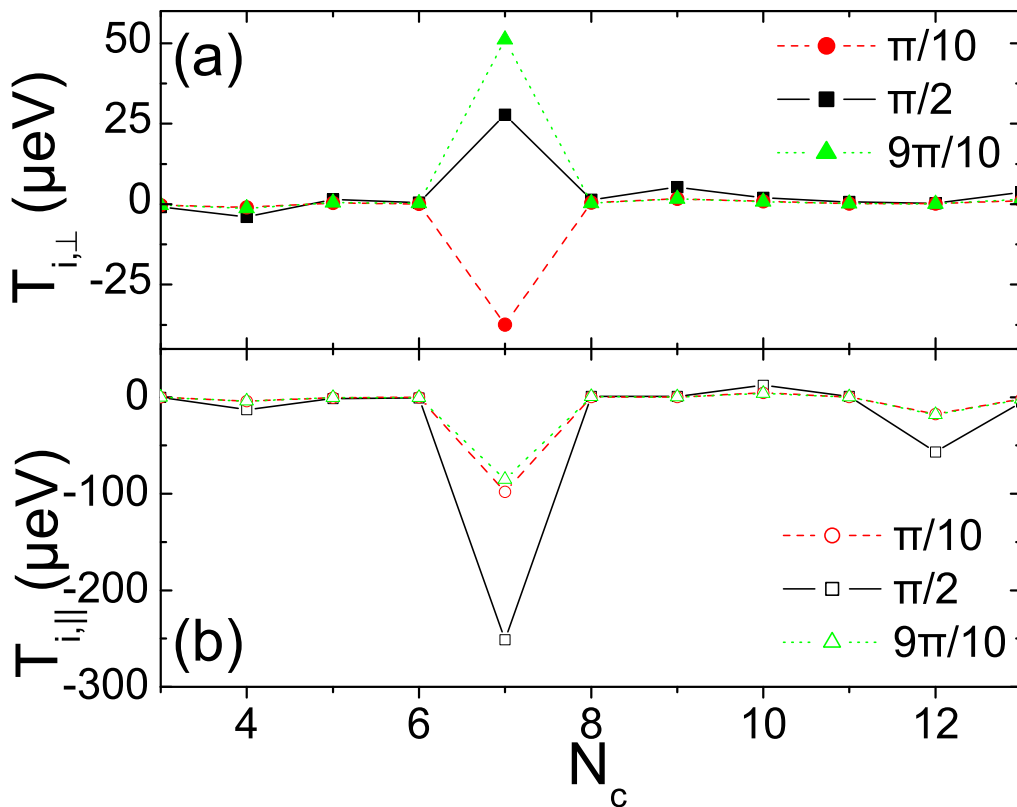


Σχήμα 8.1: Η ενέργεια E^{n^σ} με ($n^\sigma = 1^\sigma, \dots, N_c^\sigma$), των δέσμιων καταστάσεων πηγαδιού πλειονότητας (χρωματισμένα τρίγωνα) και μειονότητας (άχρωμα τρίγωνα) στην κεντρική FM περιοχή ως προς την ενέργεια Fermi E_F , σαν συνάρτηση του αριθμού των ατομικών σημείων N_c που την αποτελούν για τάση μηδέν και για μηδενική γωνία $\theta = 0$ ανάμεσα σε όλες τις μαγνητίσεις. Ο πυθμένας των ζωνών αγωγιμότητας για τα ηλεκτρόνια πλειονότητας και μειονότητας των επαφών, δίνεται από τα $E_B^{\uparrow(\downarrow)}$ ενώ Δ είναι η ενέργεια διαχωρισμού των ζωνών και υποδεικνύεται από το οριζόντιο διακεκομμένο βέλος. Υπό τάση V , τα χημικά δυναμικά της αριστερής και δεξιάς επαφής (ηλεκτροδίων) μετατοπίζονται ενεργειακά κατά $eV = \mu_R - \mu_L$ γύρω από την ενέργεια Fermi, δημιουργώντας έτσι αυτό που ονομάζεται παράθυρο δυναμικού.

8.2 Τοπικές ροπές σπιν

Στα Σχ.8.2a και 8.2b παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της κάθετης $T_{i,\perp}$, και της παράλληλης $T_{i,\parallel}$, συνιστώσας της τοπικής ροπής σπιν υπολογισμένες στο πρώτο ατομικό σημείο ($i = 1$) της κεντρικής FM περιοχής δίπλα στη αριστερή FM/I διεπιφάνεια, σαν συνάρτηση του αριθμού των ατομικών σημείων N_c που αποτελούν την κεντρική περιοχή. Οι υπολογισμοί και για τις δύο συνιστώσες έγιναν για χαμηλή θερμοκρασία $T = 5K$ και τάση $V = 0.1V$. Επίσης έγιναν υπολογισμοί για τρεις διαφορετικές γωνίες ανάμεσα στις μαγνητίσεις των ηλεκτροδίων και την μαγνήτιση της κεντρικής περιοχής και πιο συγκεκριμένα εμφανίζονται τα αποτελέσματα για τη σχεδόν παράλληλη διευθέτιση των μαγνητίσεων με $\theta = \pi/10$, για την κάθετη διευθέτιση με $\theta = \pi/2$ και για την σχεδόν αντιπαράλληλη διευθέτιση με $\theta = 9\pi/10$.

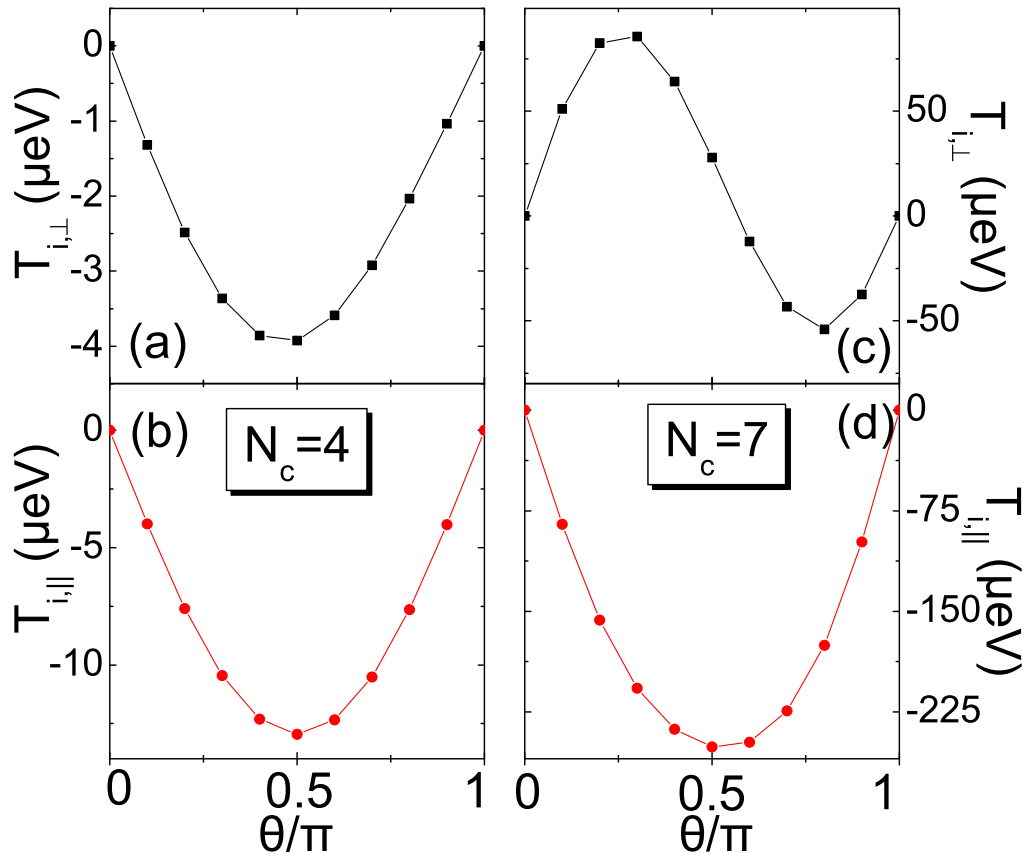
Βρίσκουμε ότι τόσο η $T_{i,\perp}$ όσο και η $T_{i,\parallel}$ είναι σημαντικά ενισχυμένες κατά μία



Σχήμα 8.2: Υπολογισμός (a) της κάθετης συνιστώσας $T_{i,\perp}$ και (b) της παράλληλης συνιστώσας $T_{i,\parallel}$ της τοπικής ροπής σπιν, σαν συνάρτηση του αριθμού των ατομικών σημείων N_c που αποτελούν την κεντρική FM περιοχή για χαμηλή θερμοκρασία ($T=5$ K) και για μικρή τάση ($V = 0.1$ V). Ο υπολογισμός των ροπών έγινε στο πρώτο ατομικό σημείο δίπλα στην αριστερή διεπαφή FM/I για τρεις τιμές της γωνίας θ ($\pi/10$, $\pi/2$, και $9\pi/10$).

και δύο τάξεις μεγέθους για $N_c = 7$ ατομικά σημεία σε σχέση με τις άλλες τιμές. Η ενίσχυση αυτή παραμένει ακόμα και για μικρές γωνίες σε σχέση με την παράλληλη και αντιπαράλληλη διευθέτηση των μαγνητίσεων. Επίσης έχει ενδιαφέρον ότι η $T_{i,\perp}$ για $N_c = 7$ αλλάζει πρόσημο με την αύξηση της γωνίας θ , σε αντίθεση με την $T_{i,\parallel}$ της οποίας το πρόσημο παραμένει το ίδιο.

Στα σχήματα 8.3a,8.3c και 8.3b,8.3d παρουσιάζεται η γωνιακή εξάρτηση της κάθετης (πεδιακής) $T_{i,\perp}$ με μαύρα τετράγωνα, και της παράλληλης (Slonczewski) $T_{i,\parallel}$ με κόκκινους κύκλους συνιστωσών της τοπικής ροπής σπιν για $N_c = 4$ ατομικά σημεία και $N_c = 7$ ατομικά σημεία, αντίστοιχα. Ο υπολογισμός των ροπών έγινε στο πρώτο ατομικό σημείο δίπλα $i = 1$ στην αριστερή διεπαφή FM/I για $T = 5K$ και $V = 0.1V$. Παρατηρούμε ότι και στις δύο περιπτώσεις (Εξ.8.3b και 8.3d) η $T_{i,\parallel}$ εμφανίζει ημιτονοειδή γωνιακή εξάρτηση παρόμοια με αυτή της μονής μαγνητικής επαφής σήραγγας MTJ[2]. Την ίδια αναμενόμενη ημιτονοειδή συμπεριφορά εμφανίζει και η $T_{i,\perp}$ για $N_c = 4$ ατομικά σημεία (Εξ. 8.3a) ενώ για $N_c = 7$, όταν η συνθήκη

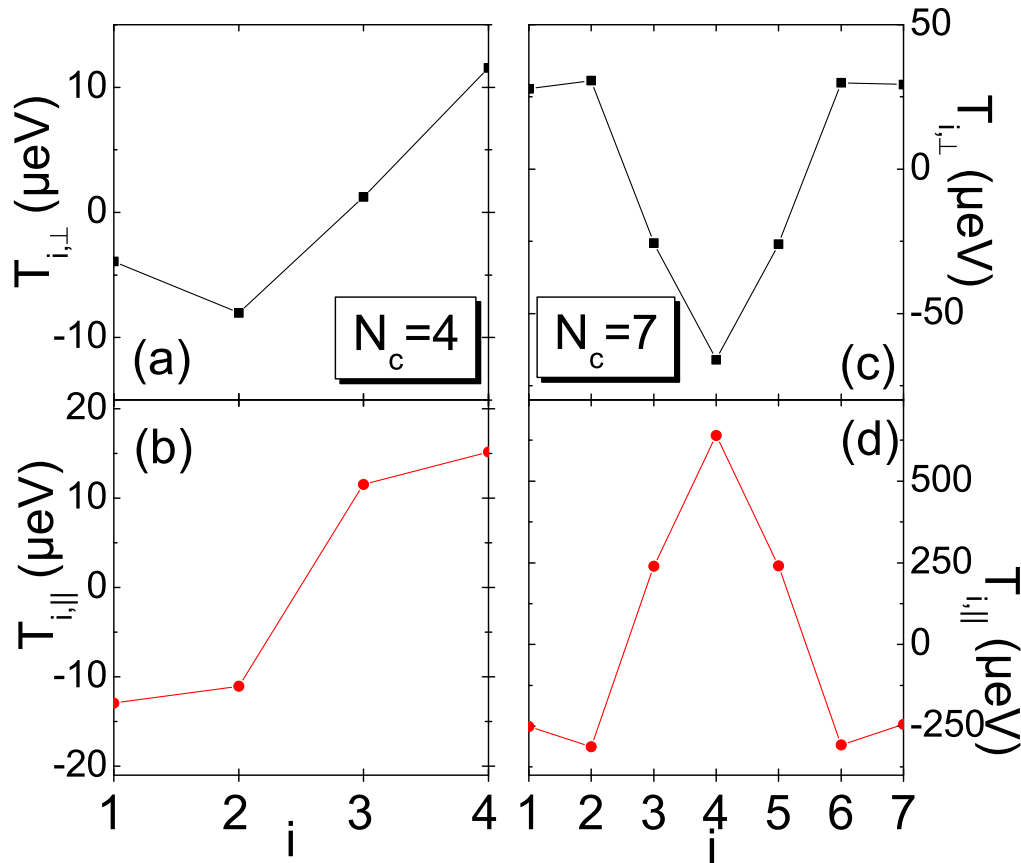


Σχήμα 8.3: Γωνιακή εξάρτηση της $T_{i,\perp}$ (μαύρα τετράγωνα) και της $T_{i,\parallel}$ (κόκκινοι κύκλοι), για $N_c = 4$ ατομικά σημεία στα παράθυρα (a) και (b), και για $N_c = 7$ ατομικά σημεία στα παράθυρα (c) και (d), αντίστοιχα. Ο υπολογισμός των ροπών έγινε στο πρώτο ατομικό σημείο δίπλα $i = 1$ στην αριστερή διεπαφή FM/I για $T = 5K$ και $V = 0.1V$.

ενίσχυσης της ροπής ικανοποιείται (Εξ. 8.3c), η $T_{i,\perp}$ παρουσιάζει ενδιαφέρουσα μη ημιτονοειδή γωνιακή συμπεριφορά κατά την οποία μάλιστα αλλάζει και πρόσημο στο διάστημα $[0, \pi]$.

Στα Σχ. 8.4(a),(c) και 8.4(b),(d) παρουσιάζονται η κάθετη $T_{i,\perp}$, με μαύρα τετράγωνα και η παράλληλη συνιστώσα $T_{i,\parallel}$ με κόκκινους κύκλους της τοπικής ροπής σπιν σαν συνάρτηση της θέσης υπολογισμού μέσα στην κεντρική περιοχή για $N_c = 4$ ατομικά σημεία και $N_c = 7$ ατομικά σημεία, αντίστοιχα. Οι υπολογισμοί έχουν γίνει για $T = 5K$, $V = 0.1V$, και $\theta = \pi/2$. Έχει ενδιαφέρον ότι τόσο η $T_{i,\perp}$ όσο και η $T_{i,\parallel}$ ταλαντώνονται γύρω από το μηδέν σαν συνάρτηση του i . Η σημαντική ενίσχυση της $T_{i,\perp}$ και της $T_{i,\parallel}$ για $N_c = 7$ ισχύει για όλα τα ατομικά σημεία i .

Στα σχήματα 8.5a και 8.5b, παρουσιάζονται η εξάρτηση από την τάση, των πυκνοτήτων ρεύματος πολωμένου σπιν I^\uparrow και I^\downarrow , για $N_c = 4$ και $N_c = 7$, αντίστοιχα. Όλοι οι υπολογισμοί έγιναν για $i = 1$, $T = 5K$, $V = 0.1V$ και $\theta = \pi/2$. Τα ρεύματα



Σχήμα 8.4: Κάθετη $T_{i,\perp}$ (μαύρα τετράγωνα) και παράλληλη $T_{i,\parallel}$ (κόκκινοι κύκλοι), συνιστώσα της ροπής σπιν σαν συνάρτηση του αριθμού του ατομικού σημείου i στο οποίο υπολογίζεται στην κεντρική FM περιοχή, για $N_c = 4$ ατομικά σημεία στα παράθυρα (a) και (b) και για $N_c = 7$ ατομικά σημεία στα παράθυρα (c),(d) αντίστοιχα. Οι υπολογισμοί έγιναν για $T = 5K$, $V = 0.1V$ και $\theta = \pi/2$.

σπιν αυξάνονται απότομα στην τάση $V_{on}^\sigma = 2|E^{n^\sigma} - E_F|$, όταν η δέσμια ενεργειακή κατάσταση n^σ εισέρχεται στο παράθυρο τάσης $eV = \mu_L - \mu_R$. Όταν συμβαίνει αυτό υπάρχει πλέον διαθέσιμη κατάσταση στο πηγάδι για να συντελεστεί το φαινόμενο σήραγγας και να έχουμε ροή ρεύματος ανάμεσα στα ηλεκτρόδια L και R .

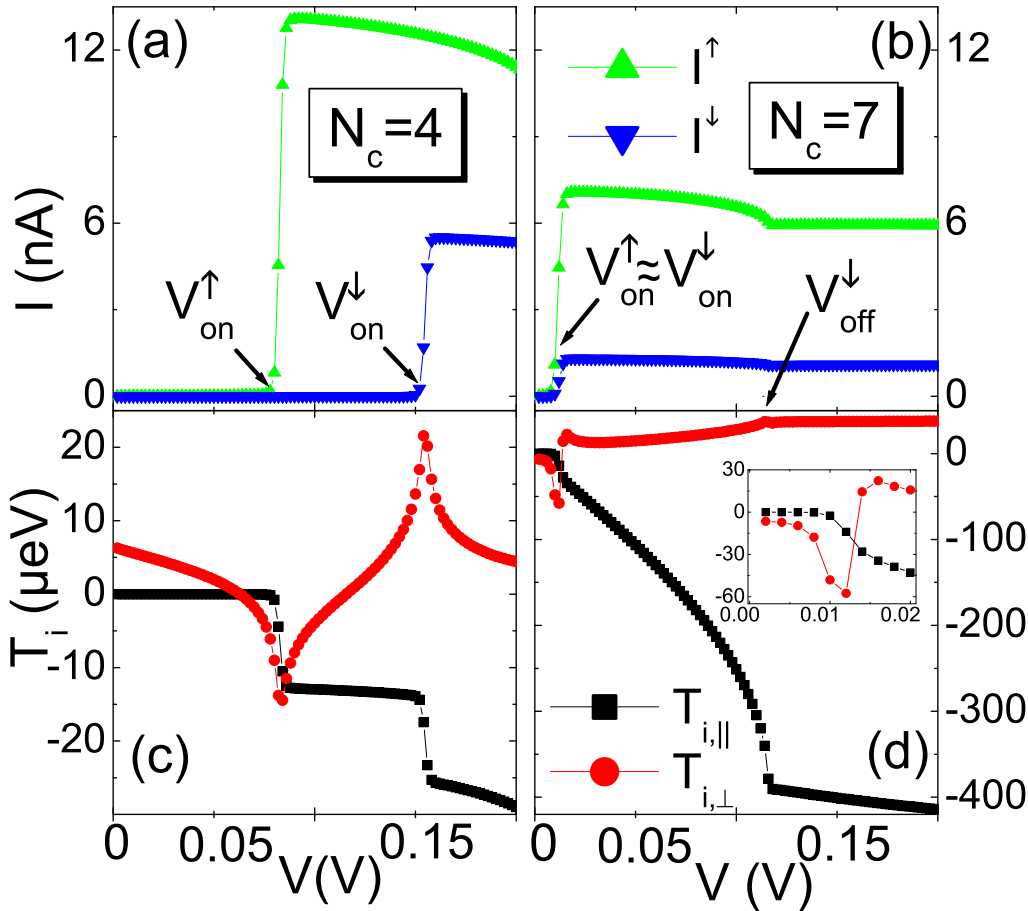
Παρατηρούμε ότι για $N_c = 7$, η απότομη αύξηση και των δύο ρευμάτων σπιν (μειονότητας (\downarrow) και πλειονότητας (\uparrow)) γίνεται σχεδόν στην ίδια τάση, $V_{on}^\uparrow \approx V_{on}^\downarrow$, λόγω του ότι $|E^{1^\downarrow} - E_F| \approx |E^{3^\uparrow} - E_F|$ όπως φαίνεται και στο Σχ. 8.1. Καθώς αυξάνουμε την τάση το συνολικό ρεύμα μειονότητας και πλειονότητας μειώνεται. Αυτό συμβαίνει διότι μειώνεται η τιμή της πυκνότητας καταστάσεων των σπιν μειονότητας της πηγής στην ενέργεια E^{n^σ} , όπου n^σ δέσμια κατάσταση συντονισμού πηγαδιού που βρίσκεται μέσα στο παράθυρο δυναμικού. Όταν η τάση αποκτήσει την κρίσιμη τιμή $V_{off}^\downarrow = 2(E^{n^\sigma} + |E_B^\downarrow|)$ η ενέργεια των κβαντικών καταστάσεων πηγαδιού 1^\downarrow και 3^\uparrow , E^{1^\downarrow} και E^{3^\uparrow} , βρίσκονται ενεργειακά κάτω από τον πυθμένα της ενέργειας της ζώνης μειονότητας της πηγής. Για το λόγο αυτό η συνεισφορά των ηλεκτρονίων μειονότητας από την πηγή στο τελικό ρεύμα μηδενίζεται.

Στα Σχήματα 8.5c και 8.5d παρουσιάζεται για τις ίδιες συνθήκες με τις a και b , η συμπεριφορά των συνιστωσών της ροπής σπιν $T_{i,\parallel}$, (παράλληλη συνιστώσα με μαύρα τετράγωνα) και $T_{i,\perp}$ (κάθετη συνιστώσα με κόκκινους κύκλους) καθώς μεταβάλλεται αντίστοιχα η εξωτερική τάση. Η $T_{i,\parallel}$ παρουσιάζει βαθμιαία απότομη αύξηση της τιμής της στις τιμές V_{on}^\uparrow και V_{on}^\downarrow αντίστοιχη δηλαδή συμπεριφορά με αυτή των ρευμάτων σπιν των Σχ.8.5a, b. Αντιθέτως η $T_{i,\perp}$, η οποία έχει μη μηδενική τιμή για μηδέν τάση, δεν είναι μονοτονική συνάρτηση της τάσης και αλλάζει πρόσημο ανάμεσα στις τάσεις V_{on}^\uparrow και V_{on}^\downarrow , συμπεριφορά ανάλογη της εξάρτησης της τιμής του πεδίου ανταλλαγής σε σύστημα κβαντικών τελείων συνδεδεμένων με σιδηρομαγνητικά ηλεκτρόδια υπό τάση [87].

Εδώ θα πρέπει να σημειωθεί η σημαντική αύξηση (τουλάχιστον μία τάξη μεγέθους) της τιμής των $T_{i,\parallel}$ και $T_{i,\perp}$ για $N_c = 7$ σε σχέση με αυτή για $N_c = 4$ ατομικά σημεία, χωρίς αντίστοιχη αύξηση στην η τιμή των ρευμάτων σπιν. Και μάλιστα η τιμή των ρευμάτων για $N_c = 7$ είναι μικρότερη από την αντίστοιχη για $N_c = 4$ ατομικά σημεία. Προτείνεται δηλαδή ενίσχυση της ροπής σπιν του συστήματος χωρίς αντίστοιχη αύξηση της τιμής του ρεύματος των φορέων σπιν. Το αποτέλεσμα αυτό επιδεικνύει καθαρά ότι ο μηχανισμός ελέγχου της ενίσχυσης της ροπής σπιν είναι η ενεργειακή σύμπτωση διαθέσιμων κβαντικών στάσιμων ενεργειακών καταστάσεων FM πηγαδιού ($SPQWS$), διαφορετικού κύριου κβαντικού αριθμού και διαφορετικού σπιν, μέσα στο παράθυρο τάσης, όπως στη περίπτωση για $N_c = 7$ ατομικά σημεία όπου $E^{n^\uparrow} \approx E^{n^\downarrow}$. Έτσι ενισχύεται η ανάμιξη σπιν $\sigma \leftrightarrow \bar{\sigma}$ στην κεντρική FM , όταν ηλεκτρόνια διέρχονται στις κβαντικές καταστάσεις μέσω του φαινομένου σήραγγας από την πηγή στη υποδοχή σε κατάσταση εφαρμοζόμενης εξωτερικής τάσης. Η

ενίσχυση της ροπής σπιν μέσω της ενεργειακής σύμπτωσης των $SPQWS$ έχει τεχνολογικό ενδιαφέρον για εφαρμογές σπιντρονικής αφού κάτω από αυτές τις συνθήκες υποβοηθείται σημαντικά η μεταβολή της τοπικής μαγνήτισης χωρίς μεγάλη αύξηση του ρεύματος σήραγγας.

Για να διαφωτιστεί ο ρόλος των δέσμιων καταστάσεων $SPQWS$ τόσο στην ενίσχυση της ροπής σπιν όσο και στην εξάρτηση της από την τάση, χρησιμοποιήθηκε μοντέλο ενός μόνο σιδηρομαγνητικού ατομικού σημείου, συνδεδεμένου χαλαρά (μέσω της παραμέτρου t_C) με τις επαφές. Αποδεικνύεται[93] ότι η συνάρτηση *Green* ανάμιξης



Σχήμα 8.5: (a, b) Εξάρτηση από την τάση V , της πυκνότητας ρεύματος πλειονότητας (κόκκινα σύμβολα) και μειονότητας (μπλε σύμβολα) που διαρρέει την συσκευή για (a) $N_c = 4$ και (b) $N_c = 7$ ατομικά σημεία, αντίστοιχα. Στα πάνελ (c, d) παρουσιάζεται η εξάρτηση από την τάση V της $T_{i,\parallel}$ (μαύρα σύμβολα) και της $T_{i,\perp}$ (κόκκινα σύμβολα) υπολογισμένη στο πρώτο ατομικό σημείο $i = 1$ της κεντρικής περιοχής, για $N_c = 4$ και $N_c = 7$ ατομικά σημεία αντίστοιχα. Οι τιμές της τάσης $V_{on(off)}^\sigma$ υποδηλώνουν τις τάσεις στις οποίες αυξάνει(ανοίγει) και μειώνεται(κλείνει) βηματικά το ρεύμα. Όλοι οι υπολογισμοί έγιναν για $T = 5K$, $V = 0.1V$ και $\theta = \pi/2$.

σπιν σε πρώτη προσέγγιση ως προς t_C , δίνεται από τη σχέση

$$G^{<\uparrow\downarrow} \approx i \sum_{\alpha=L,R} f_{\alpha} G_r^{\uparrow\uparrow} \Sigma_{\alpha}^{\uparrow\downarrow} G_a^{\downarrow\downarrow}. \quad (8.1)$$

Όπου, $\Sigma_{\alpha}^{\uparrow\downarrow} = t_C^2 \pi [N_{\alpha}^{\uparrow} - N_{\alpha}^{\downarrow}] \sin(\theta)$ είναι η ιδιοενέργεια λόγω των επαφών, $N_{\alpha}^{\uparrow(\downarrow)}$ είναι οι επιφανειακές (άκρο) πυκνότητες καταστάσεων των $L(R)$ επαφών, οι οποίες χάριν απλότητας έχουν θεωρηθεί ανεξάρτητες από την ενέργεια. Για χαλαρή σύνδεση οι *retarded* και *advanced* συναρτήσεις *Green* του συζευγμένου συστήματος, $G_{r(a)}^{\sigma\sigma}$, μπορούν να αντικατασταθούν από τις αντίστοιχες $g_{r(a)}^{\sigma\sigma}$, του απομωνομένου. Δηλαδή $G_{r(a)}^{\sigma\sigma} \approx g_{r(a)}^{\sigma\sigma} = [E - E^{\sigma} \pm i\eta]^{-1}$, όπου η μικρή ποσότητα η διαλέγεται να είναι ανεξάρτητη του σπιν. Οι συνιστώσες της ροπής σπιν υπολογισμένες μέσω της συσσωρευμένης μαγνήτισης στο σημείο σε κατάσταση εκτός ισορροπίας [60], δίνονται από

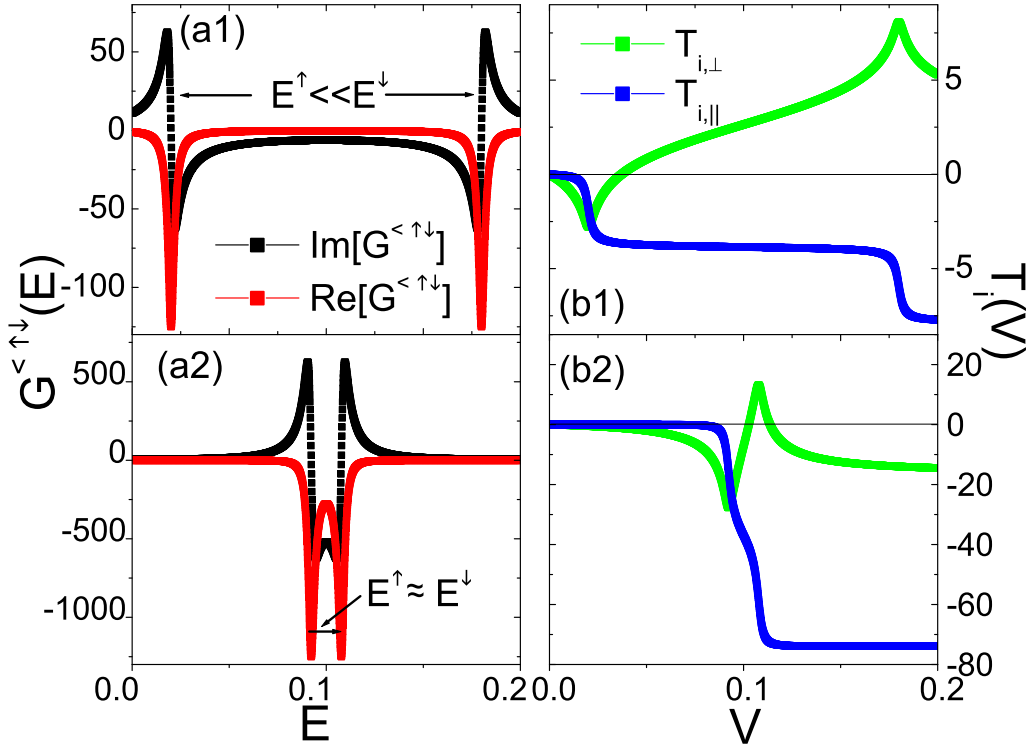
$$T_{i,\parallel} \propto \int_{-\infty}^{eV} \frac{\eta(E^{\uparrow} - E^{\downarrow})}{((E - E^{\uparrow})^2 + \eta^2)((E - E^{\downarrow})^2 + \eta^2)} dE, \quad (8.2)$$

και

$$T_{i,\perp} \propto \int_{-\infty}^{eV} \frac{(E - E^{\uparrow})(E - E^{\downarrow}) + \eta^2}{((E - E^{\uparrow})^2 + \eta^2)((E - E^{\downarrow})^2 + \eta^2)} dE. \quad (8.3)$$

Στο Σχ. 8.6, στα δύο πρώτα πάνελ, παρουσιάζεται η ενεργειακή εξάρτηση του πραγματικού και φανταστικού μέρους της $G^{<\uparrow\downarrow}$ (κόκκινα και μαύρα τετράγωνα αντίστοιχα), για δύο περιπτώσεις, (a1) μη σύμπτωσης των ενεργειακών σταθμών διαφορετικού σπιν ($E^{\downarrow} \ll E^{\uparrow}$) και (a2) σύμπτωσης των ενεργειακών σταθμών διαφορετικού σπιν ($E^{\downarrow} \approx E^{\uparrow}$). Η αντίστοιχη εξάρτηση των συνιστωσών της ροπής σπιν $T_{i,\parallel}$ και $T_{i,\perp}$ παρουσιάζεται με μπλε και πράσινα τετράγωνα στα πάνελ (b1) και (b2) του Σχ. 8.6.

Είναι εμφανές ότι η γενική συμπεριφορά των μεγεθών σαν συνάρτηση της τάσης, στο απλό αυτό μοντέλο, αναπαράγει τα χαρακτηριστικά που εμφανίζονται στο πλήρες σύστημα (βλέπε Σχ. 8.5c και d). Πιο συγκεκριμένα υπάρχει η απότομη αύξηση της $T_{i,\parallel}$ και η αλλαγή προσύμου της $T_{i,\perp}$ σε τιμές τάσης που σχετίζονται με τη τιμή των ενεργειών των δέσμιων καταστάσεων διαφορετικού σπιν. Επίσης, όταν υπάρχει ενεργειακή σύμπτωση των σταθμών $E^{\uparrow} \approx E^{\downarrow}$ παρουσιάζεται και στο απλό αυτό μοντέλο, σημαντική αύξηση στην τιμή της ροπής σπιν, όπως φαίνεται χαρακτηριστικά στα Σχ. 8.6(a2). Η αύξηση αυτή οφείλεται στην ύπαρξη πόλων υψηλότερης τάξης όπως φαίνεται και στις Εξ. (8.2) και (8.3).

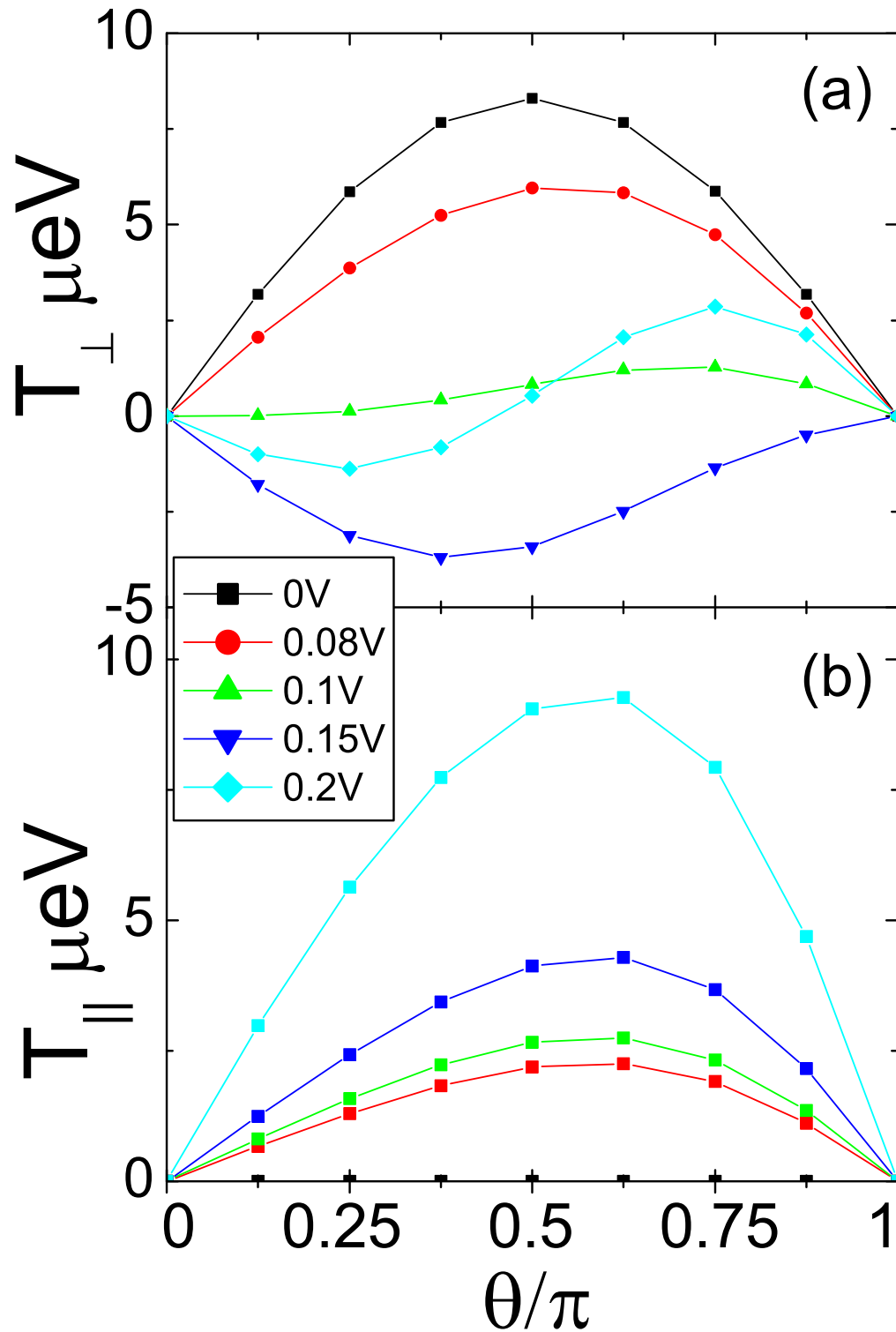


Σχήμα 8.6: (a1), (a2) Παρουσιάζεται η ενεργειακή εξάρτηση του πραγματικού (με κόκκινα τετράγωνα) και του φανταστικού (με μαύρα τετράγωνα) μέρη της συνάρτησης Green $G^{<↑↓}$ για ενέργειες των σταθμών E^\uparrow, E^\downarrow με μεγάλη διαφορά μεταξύ τους ($E^\uparrow \ll E^\downarrow$) και με μικρή διαφορά ($E^\uparrow \approx E^\downarrow$), αντίστοιχα. (b1) και (b2) Η εξάρτηση από τάση των ροπών σπιν $T_{i,\parallel}$ (με μπλε τετράγωνα) και της $T_{i,\perp}$ (με πράσινα τετράγωνα) που αντιστοιχεί σε ενεργειακές διαφορές των E^\uparrow και E^\downarrow αντίστοιχη με αυτή των (a1) και (a2).

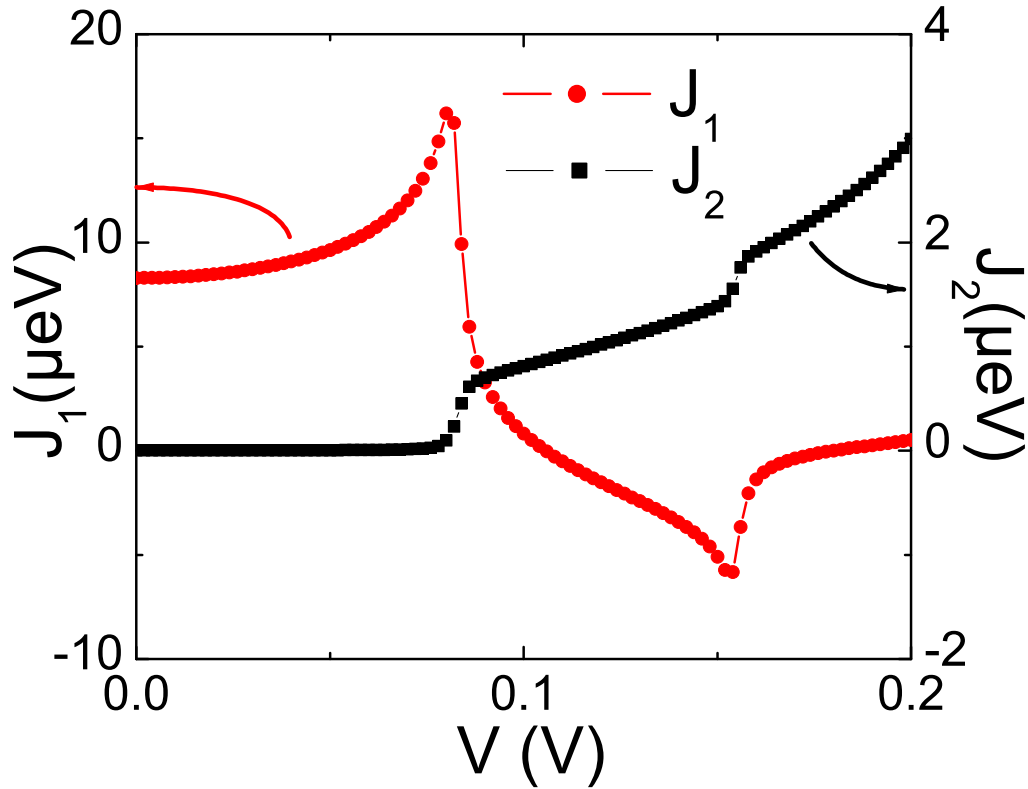
8.3 Ολικές ροπές σπιν

Η ολική ροπή σπιν $T_{\parallel(\perp)} = \sum_{i \in C} T_{i,\parallel(\perp)}$, που προκύπτει ως άθροισμα σε όλα τα ατομικά σημεία της κεντρικής FM περιοχής, δεν παρουσιάζει τόσο μεγάλη αύξηση όσο οι τοπικά εφαρμοζόμενες ροπές $T_{i,\parallel}$ και $T_{i,\perp}$. Αυτό οφείλεται στο ότι οι τοπικές ροπές ταλαντώνονται ως προς το i λόγω της μετάπτωσης του σπιν των ηλεκτρονίων στην κεντρική FM περιοχή (Σχ.8.4). Στα Σχ. 8.7a και 8.7b παρουσιάζονται η γωνιακή εξάρτηση της ολικής T_\perp και της T_\parallel , για διάφορες τάσεις και για $N_c = 4$ ατομικά σημεία. Για μηδενική τάση η T_\perp παρουσιάζει ημιτονοειδή συμπεριφορά η οποία όμως αλλάζει δραματικά καθώς αυξάνει η τάση. Η πεδιακή συνιστώσα της ροπής σπιν συσχετίζεται με την ενέργεια ανταλλαγής [70, 90] σύμφωνα με την σχέση

$$T_\perp = -\partial E_{XC}(\theta)/\partial \theta, \quad (8.4)$$



Σχήμα 8.7: (a) Γωνιακή εξάρτηση της ολικής (a) πεδιακής T_{\perp} ροπής σπιν και (b) Slonczewski T_{\parallel} ροπής σπιν για $N_c = 4$ διάφορες τιμές της τάσης. Η γωνία ορίζεται ανάμεσα στην μαγνήτιση της κεντρικής περιοχής και των μαγνητίσεων των ηλεκτροδίων οι οποίες θεωρούνται παράλληλες



Σχήμα 8.8: Εξάρτηση από την τάση των συντελεστών της εκτός ισορροπίας ενέργειας ανταλλαγής J_1 (διγραμμικός όρος ως προς $\cos(\theta)$), και J_2 (διτετράγωνος όρος ως προς $\cos(\theta)$) για $N_c = 4$.

όπου

$$E_{XC}(\theta) = -J_1 \cos(\theta) - J_2 \cos^2(\theta) + \dots, \quad (8.5)$$

είναι η ενέργεια ανταλλαγής [91] που προκύπτει από την σχετική διευσθέτηση των μαγνητίσεων της κεντρικής περιοχής \mathbf{M}_C και των επαφών $\mathbf{M}_{L(R)}$ εάν η μεταξύ τους γωνία είναι θ , ενώ $\mathbf{M}_L \parallel \mathbf{M}_R$. J_1 και J_2 είναι η διγραμμική (bilinear) και η διτετράγωνη (biquadratic), ως προς $\cos(\theta)$, συνιστώσες της ενέργειας ανταλλαγής και μπορούν να υπολογιστούν από την $T_{\perp}(\theta)$. Στο Σχ. 8.8 παρουσιάζεται η εξάρτηση των J_1 και J_2 από την τάση για $N_c = 4$ ατομικά σημεία. Είναι σημαντικό να αναφερθεί ότι η J_1 (κόκκινοι κύκλοι) αλλάζει πρόσημο σαν συνάρτηση της τάσης, συμπεριφορά παρόμοια με αυτή της $T_{i,\perp}(V)$ στο Σχ. 8.5c. Αντιθέτως η J_2 (μαύρα τετράγωνα) αυξάνεται βηματικά όπως και η $T_{i,\parallel}(V)$. Επομένως υπάρχει μια μεγάλη περιοχή τάσεων για τις οποίες ισχύει ότι $J_2 > J_1$ που σημαίνει ότι για τις τάσεις αυτές, η κάθετη διευσθέτηση των μαγνητίσεων \mathbf{M}_C και $\mathbf{M}_{L(R)}$ είναι προτιμητέα[91]. Από την άλλη η γωνιακή εξάρτηση της T_{\parallel} παρουσιάζει μια ελαφρά παρέκκλιση από την ημιτονοειδή συμπεριφορά (Σχ. 8.7b) παρόμοια με αυτή που εμφανίζεται στις βαλβίδες σπιν.

Κεφάλαιο 9

Συμπεράσματα και προεκτάσεις

Συνοψίζοντας τα κυριότερα αποτελέσματα, προτείνουμε ότι η τοπική ροπή σπιν που εφαρμόζεται στη μαγνήτιση της κεντρικής σιδηρομαγνητικής περιοχής του πηγαδιού, μπορεί να ενισχυθεί σημαντικά όταν υπάρχει ενεργειακή σύμπτωση κβαντικών δέσμιων καταστάσεων πηγαδιού διαφορετικού σπιν μέσα στο παράθυρο δυναμικού. Η ενίσχυση αυτή μπορεί να διευκολύνει την μεταβολή της μαγνήτισης σε μαγνητικές μνήμες χωρίς την διέλευση μεγάλων ρευμάτων. Το κριτήριο για την ενίσχυση των ροπών σπιν μπορεί να επιτευχθεί ελέγχοντας εξωτερικά τις ενέργειες των κβαντικών καταστάσεων πηγαδιού με μαγνητικό πεδίο ή με μαγνητικά φράγματα δυναμικού. Επίσης δείχνουμε ότι η τιμή της ενέργειας των κβαντικών καταστάσεων πηγαδιού πολωμένου σπιν καθορίζει την εξάρτηση από την τάση των συνιστωσών τόσο της τοπικής όσο και της ολικής ροπής σπιν αλλά και του διγραμμικού και διτετραγωνικού συντελεστή της ενέργειας ανταλλαγής. Μελλοντική επέκταση της εργασίας μπορεί να συμπεριλαμβάνει τα αποτελέσματα των ροπών σπιν στη λύση της εξίσωσης *Landau – Lifshitz – Gilbert* έτσι ώστε να υπολογίζεται η κρίσιμη τιμή του ρεύματος για την αναστροφή της μαγνήτισης στο σύστημα.

Κεφάλαιο 10

Fortran 90 codes

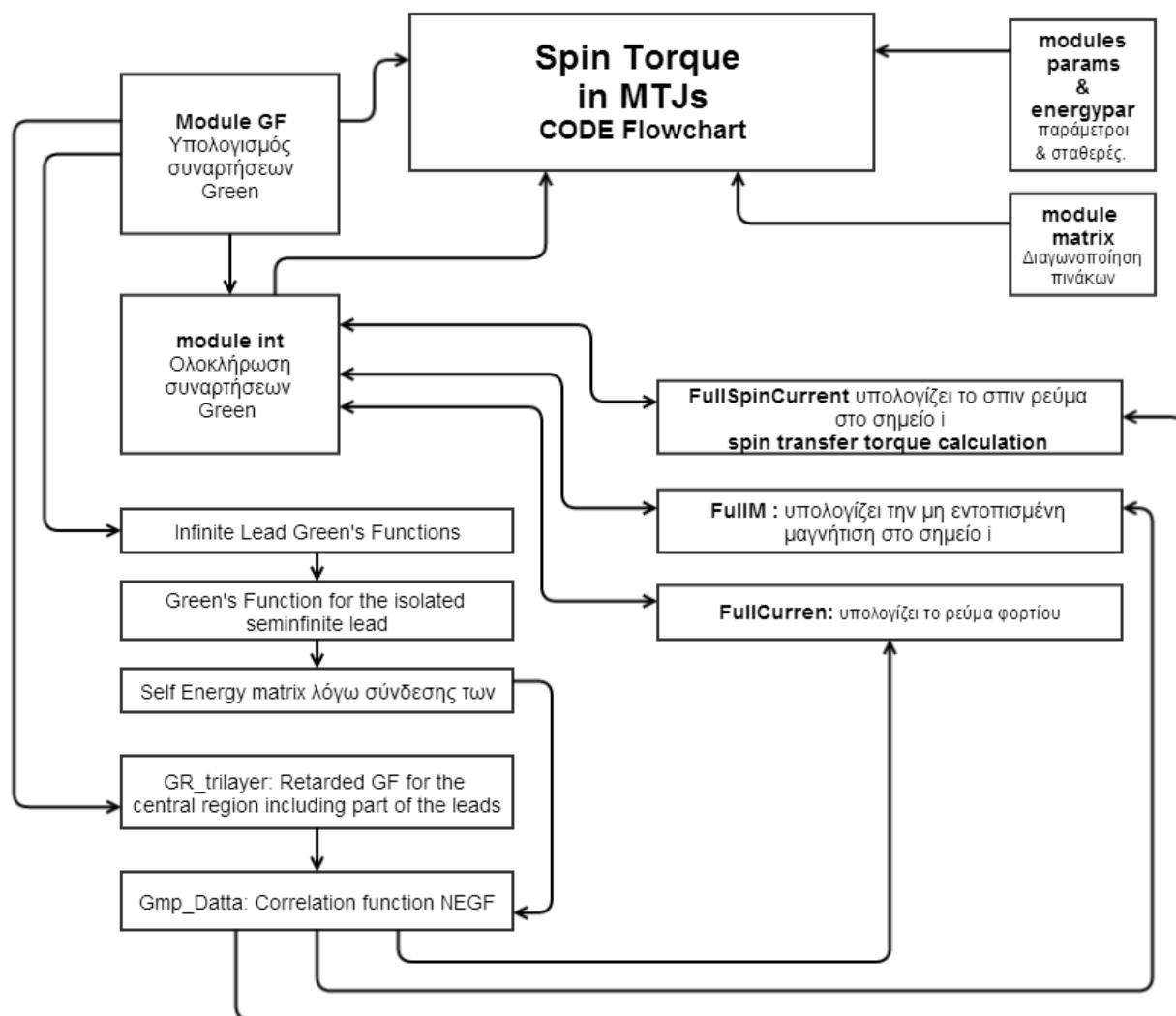


Figure 10.1: Code flowchart.


```

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
module GF
contains

!-----
! Infinite Lead Green Functions
!-----

!----- UP-UP -----

complex*16 function g_inf_up_up(energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2)

! Retarded up_up green function between two sites (x1,x2) for an infinite lead.
!
! Parameters defined in module 'params'
!
! t_up    spin up electron hopping between nearest neighbors sites
! t_down  spin down electron hopping between nearest neighbors sites
!
! e_up    spin up electron on-site energy
! e_down  spin down electron on-site energy
!
! energy  electron energy
! V       the voltage drop
! gamma   angle
! x1,x2   site number
!
use params

implicit none

real*8,intent(in)      :: energy,gamma,V
complex*16             :: dup,ddw
complex*16             :: nup,ndw
integer,intent(in)     :: x1,x2
real*8                 :: e_up1,e_down1,t_up1,t_down1,theta1,theta2
complex*16             :: energy1

energy1=dcmplx(energy,delta)
e_up1=e_up+2.d0*t_up*(cos(theta1)+cos(theta2))
e_down1=e_down+2.d0*t_down*(cos(theta1)+cos(theta2))
t_up1=t_up
t_down1=t_down

dup=sqrt(dcmplx(4.0D0*t_up1**2.0D0-(energy1-e_up1-V)**2.0D0))
ddw=sqrt(dcmplx(4.0D0*t_down1**2.0D0-(energy1-e_down1-V)**2.0D0))
nup=(energy1-e_up1-V)/(2.0D0*t_up1)-qi*sign(1.0D0,t_up)
*sqrt(dcmplx(1.0D0-((energy1-e_up1-V)/(2.0D0*t_up1))**2.0D0))
ndw=(energy1-e_down1-V)/(2.0D0*t_down1)-qi*sign(1.0D0,t_down)
*sqrt(dcmplx(1.0D0-((energy1-e_down1-V)/(2.0D0*t_down1))**2.0D0))

g_inf_up_up=(-qi/2.0D0)*((1.0D0+cos(gamma))*nup**abs(x1-x2)/dup

```

```

+ (1.0D0-cos (gamma)) *ndw**abs (x1-x2) /ddw)

end function g_inf_up_up

!----- UP-DOWN -----
complex*16 function g_inf_up_down (energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2)

use params

implicit none

real*8,intent (in)      :: energy,gamma,V
complex*16              :: dup,ddw
complex*16              :: nup,ndw
integer,intent (in)    :: x1,x2
real*8                  :: e_up1,e_down1,t_up1,t_down1,theta1,theta2
complex*16              :: energy1

energy1=dcmplx (energy,delta)
e_up1=e_up+2.d0*t_up*(cos (theta1)+cos (theta2))
e_down1=e_down+2.d0*t_down*(cos (theta1)+cos (theta2))
t_up1=t_up
t_down1=t_down

dup=sqrt (dcmplx (4.0D0*t_up1**2.0D0-(energy1-e_up1-V)**2.0D0))
ddw=sqrt (dcmplx (4.0D0*t_down1**2.0D0-(energy1-e_down1-V)**2.0D0))
nup=(energy1-e_up1-V) / (2.0D0*t_up1)-qi*sign (1.0D0,t_up)*sqrt (dcmplx (1.0D0
-((energy1-e_up1-V) / (2.0D0*t_up1))**2.0D0))
ndw=(energy1-e_down1-V) / (2.0D0*t_down1)-qi*sign (1.0D0,t_down)
*sqrt (dcmplx (1.0D0-((energy1-e_down1-V) / (2.0D0*t_down1))**2.0D0))

g_inf_up_down=(-qi*sin (gamma) /2.0D0) *(nup**abs (x1-x2) /dup-ndw**abs (x1-x2) /ddw)

end function g_inf_up_down

!----- DOWN-UP -----
complex*16 function g_inf_down_up (energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2)

implicit none

real*8,intent (in)      :: energy,gamma,V,theta1,theta2
integer,intent (in)    :: x1,x2

g_inf_down_up=g_inf_up_down (energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2)

end function g_inf_down_up

!----- DOWN_DOWN -----

```

```

complex*16 function g_inf_down_down(energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2)

use params

implicit none

real*8,intent(in)      :: energy,gamma,V
complex*16             :: dup,ddw
complex*16             :: nup,ndw
integer,intent(in)     :: x1,x2
real*8                 :: e_up1,e_down1,t_up1,t_down1,theta1,theta2
complex*16             :: energy1

energy1=dcmplx(energy,delta)
e_up1=e_up+2.d0*t_up*(cos(theta1)+cos(theta2))
e_down1=e_down+2.d0*t_down*(cos(theta1)+cos(theta2))
t_up1=t_up
t_down1=t_down

dup=sqrt(dcmplx(4.0D0*t_up1**2.0D0-(energy1-e_up1-V)**2.0D0))
ddw=sqrt(dcmplx(4.0D0*t_down1**2.0D0-(energy1-e_down1-V)**2.0D0))
nup=(energy1-e_up1-V)/(2.0D0*t_up1)-qi*sign(1.0D0,t_up)*sqrt(dcmplx(1.0D0
-((energy1-e_up1-V)/(2.0D0*t_up1)**2.0D0))
ndw=(energy1-e_down1-V)/(2.0D0*t_down1)-qi*sign(1.0D0,t_down)
*sqrt(dcmplx(1.0D0-((energy1-e_down1-V)/(2.0D0*t_down1)**2.0D0))

g_inf_down_down=(-qi/2.0D0)*((1.0D0-cos(gamma))*nup**abs(x1-x2)
/dup+(1.0D0+cos(gamma))*ndw**abs(x1-x2)/ddw)

end function g_inf_down_down

!-----
! Matrix representations of green's functions
!-----

subroutine Mg_inf_cre(energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2,Mg_inf)

!this subroutine calculates the matrix form of
!green's fuction for the the infinite lead

complex*16,intent(out) ::Mg_inf(2,2)
real*8,intent(in)      ::energy,gamma,V,theta1,theta2
integer,intent(in)     ::x1,x2

Mg_inf(1,1)=g_inf_up_up(energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2)
Mg_inf(1,2)=g_inf_up_down(energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2)
Mg_inf(2,1)=g_inf_down_up(energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2)
Mg_inf(2,2)=g_inf_down_down(energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2)

end subroutine Mg_inf_cre

```



```

!-----
! END END Bulk Green Function for the isolated seminfinite lead
!-----
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!-----
!----- HOPING MATRIX -----
!-----
!----- Hoping in bulk material -----

subroutine Mt_cre (gamma,Mt)

!this subroutine gives the matrix for the hopping

use params

complex*16,intent(out)          :: Mt(2,2)
real*8,intent(in)              :: gamma

real*8                          :: t_up_up,t_down_down,t_up_down,t_down_up

t_up_up=(t_up*(1+cos(gamma))+t_down*(1-cos(gamma)))/2
t_down_down=(t_up*(1-cos(gamma))+t_down*(1+cos(gamma)))/2
t_up_down=(t_up-t_down)*sin(gamma)/2
t_down_up=t_up_down

Mt(1,1)=t_up_up
Mt(1,2)=t_up_down
Mt(2,1)=t_down_up
Mt(2,2)=t_down_down

end subroutine Mt_cre
!-----
!----- Coupling Hoping matrix -----
!-----
subroutine Mt_cpl_cre (gamma,Mt_cpl)

! this subroutine gives the matrix for the hopping
! between the leads and the barriers
! left hoping matrix metal to barrier gamma=0
! right hoping matrix barrier to metal gamma nonzero

use params

complex*16,intent(out)          :: Mt_cpl(2,2)
real*8,intent(in)              :: gamma

Mt_cpl(1,1)=t_cpl_up*(1.0+cos(gamma))+t_cpl_down*(1.0-cos(gamma))
Mt_cpl(1,2)=sin(gamma)*(t_cpl_up-t_cpl_down)
Mt_cpl(2,1)=sin(gamma)*(t_cpl_up-t_cpl_down)
Mt_cpl(2,2)=t_cpl_up*(1.0-cos(gamma))+t_cpl_down*(1.0+cos(gamma))
Mt_cpl=0.5*Mt_cpl

```

```

end subroutine Mt_cpl_cre
!-----

!-----
!-----
!----- Self Energy matrix -----
!-----

!-----
!-----
!----- Self Energy matrix -----
!-----

subroutine MSelf_Energy(Energy,V,gamma,theta1,theta2,S)

! this subroutine gives the matrix for the self energy

real*8,intent(in)      :: Energy,V,gamma,theta1,theta2
complex*16             :: Mt(2,2),g_int(2,2)
complex*16,intent(out) :: S(2,2)

!we calculate the hoping matrices

call Mt_cpl_cre(gamma,Mt)

! we calculate the green function at the interface
call Mg_seminf_blk_cre(energy,V,gamma,0,0,theta1,theta2,g_int)

S=matmul(matmul(Mt,g_int),Mt)

end subroutine MSelf_Energy

subroutine MSelf_Energy2(Energy,V,gamma,theta1,theta2,S)

! this subroutine gives the matrix for the self energy

real*8,intent(in)      :: Energy,V,gamma,theta1,theta2
complex*16             :: Mt(2,2),g_int(2,2)
complex*16,intent(out) :: S(2,2)

!we calculate the hoping matrices

call Mt_cre(gamma,Mt)

! we calculate the green function at the interface
call Mg_seminf_blk_cre(energy,V,gamma,0,0,theta1,theta2,g_int)

S=matmul(matmul(Mt,g_int),Mt)

end subroutine MSelf_Energy2

```

```

!----- End Self Energy -----
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!G_retarded for the central region including lead's site
!(one to left, ksites to the right
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

subroutine GR_trilayer(Energy,V,gamma1,gamma2,Mgamma,B1gamma,B2gamma,N1,N2,M
,ksites1,ksites2,theta1,theta2,GR)

! the retarded green function using datta's formalism
! of the coupled trilayer(barrier-finite magnetic-barrier)
! coupled to leads (using Self Energy)

use params
use matrix
implicit none

integer,intent(in)      :: N1,N2,M,ksites1,ksites2
real*8,intent(in)      :: energy,V,gamma1,gamma2,Mgamma,theta1,theta2,B1gamma,B2gamma
complex*16,intent(out) :: GR(2*(N1+M+N2+ksites1+ksites2),2*(N1+M+N2+ksites1+ksites2))

integer                :: size,i,j,allocstat
complex*16            :: H(2*(N1+M+N2+ksites1+ksites2),2*(N1+M+N2+ksites1+ksites2))
complex*16            :: Sigma(2*(N1+M+N2+ksites1+ksites2),2*(N1+M+N2+ksites1+ksites2))
complex*16            :: S1(2,2),S2(2,2)
real*8                :: eb1(2,2),eb2(2,2),emm(2,2),emmL(2,2),emmR(2,2)
real*8                :: tb1(2,2),tb2(2,2),tbm(2,2),tmb(2,2),tmm(2,2)
real*8                :: Vmid
real*8                :: gamma1p,gamma2p,Mgammap
real*8                :: e_up1,e_down1,e_clu_up1,e_clu_down1

e_up1=e_up+2.d0*t_up*(cos(theta1)+cos(theta2))
e_down1=e_down+2.d0*t_down*(cos(theta1)+cos(theta2))
e_clu_up1=e_clu_up+2.d0*t_clu*(cos(theta1)+cos(theta2))
e_clu_down1=e_clu_down+2.d0*t_clu*(cos(theta1)+cos(theta2))

if (N2.NE.0.AND.M.NE.0) then

! for double barrier
! bring local spin system at middle angle at measure angles from there.

gamma1p=gamma1!-Mgamma
Mgammap=Mgamma!0.0d0
gamma2p=gamma2!-Mgamma

else

!for single barrier bring right along z and measure from there

gamma1p=gamma1!-gamma2

```

```

gamma2p=gamma2!0.0

end if

size=2*(N1+M+N2+ksites1+ksites2)

If (N1+N2.NE.0) Vmid=V*N1/(N1+N2)

eb1=0
eb1(1,1)=e_clu_up1*(1+cos(B1gamma))+e_clu_down1*(1-cos(B1gamma))
eb1(1,2)=(e_clu_up1-e_clu_down1)*sin(B1gamma)
eb1(2,1)=(e_clu_up1-e_clu_down1)*sin(B1gamma)
eb1(2,2)=e_clu_up1*(1-cos(B1gamma))+e_clu_down1*(1+cos(B1gamma))
eb1=0.5d0*eb1

eb2=0
eb2(1,1)=e_clu_up1*(1+cos(B2gamma))+e_clu_down1*(1-cos(B2gamma))
eb2(1,2)=(e_clu_up1-e_clu_down1)*sin(B2gamma)
eb2(2,1)=(e_clu_up1-e_clu_down1)*sin(B2gamma)
eb2(2,2)=e_clu_up1*(1-cos(B2gamma))+e_clu_down1*(1+cos(B2gamma))
eb2=0.5d0*eb1

emm=0.0D0
emm(1,1)=(e_up1+Vmid)*(1+cos(Mgamma))+ (e_down1+Vmid)*(1-cos(Mgamma))
emm(1,2)=sin(Mgamma)*(e_up1-e_down1)
emm(2,1)=sin(Mgamma)*(e_up1-e_down1)
emm(2,2)=(e_up1+Vmid)*(1-cos(Mgamma))+ (e_down1+Vmid)*(1+cos(Mgamma))
emm=0.5d0*emm

emml=0.0D0
emml(1,1)=e_up1*(1+cos(gamma1p))+e_down1*(1-cos(gamma1p))
emml(1,2)=sin(gamma1p)*(e_up1-e_down1)
emml(2,1)=sin(gamma1p)*(e_up1-e_down1)
emml(2,2)=e_up1*(1-cos(gamma1p))+e_down1*(1+cos(gamma1p))
emml=0.5d0*emml

emmr=0.0D0
emmr(1,1)=(e_up1+V)*(1+cos(gamma2p))+ (e_down1+V)*(1-cos(gamma2p))
emmr(1,2)=sin(gamma2p)*(e_up1-e_down1)
emmr(2,1)=sin(gamma2p)*(e_up1-e_down1)
emmr(2,2)=(e_up1+V)*(1-cos(gamma2p))+ (e_down1+V)*(1+cos(gamma2p))
emmr=0.5d0*emmr

tb1=t_clu*Unitmat(2)
tb2=t_clu*Unitmat(2)

tbn=0.0D0
tbn(1,1)=t_cpl_up
tbn(2,2)=t_cpl_down

tmb=0.0D0

```

```

tmb(1,1)=t_cpl_up
tmb(2,2)=t_cpl_down

tmm=0.0D0
tmm(1,1)=t_up
tmm(2,2)=t_down

H=0.0D0

!!!!!!!!!!ksites1 site at the left included

do i=1,2*ksites1-1,2

H(i:i+1,i:i+1)=emmL
if (i.ne.2*ksites1-1) then
H(i:i+1,i+2:i+3)=tmm
H(i+2:i+3,i:i+1)=tmm
else
H(i:i+1,i+2:i+3)=tmb
H(i+2:i+3,i:i+1)=tmb
end if

end do

!!!!!!!!!! single barrier code !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

if ((N2.EQ.0).AND.(M.EQ.0)) then

j=1

do i=2*ksites1+1,2*(ksites1+N1)-1,2

H(i:i+1,i:i+1)=eb1+Vmid*(j-1)/(N1-1)*Unitmat(2)
j=j+1

if (i.NE.2*(ksites1+N1)-1) then
H(i:i+1,i+2:i+3)=tb1
H(i+2:i+3,i:i+1)=tb1
else
H(i:i+1,i+2:i+3)=tbm
H(i+2:i+3,i:i+1)=tbm
end if

end do

do i=2*(ksites1+N1)+1,2*(ksites1+N1+ksites2)-1,2

H(i:i+1,i:i+1)=emmR
if (i.NE.2*(ksites1+N1+ksites2)-1) then
H(i:i+1,i+2:i+3)=tmm
H(i+2:i+3,i:i+1)=tmm
end if

end do

```

```

!!!!!!!!!!!! End Single Barrier code !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!!!!!!!!!!!! Start Double Barrier code !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
else if ((N2.NE.0).AND.(M.NE.0)) then

j=1
do i=2*ksites1+1,2*(ksites1+N1)-1,2

H(i:i+1,i:i+1)=eb1+Vmid*(j-1)/(N1-1)*Unitmat(2)
j=j+1

if (i.NE.2*(ksites1+N1)-1) then
H(i:i+1,i+2:i+3)=tb1
H(i+2:i+3,i:i+1)=tb1
else
H(i:i+1,i+2:i+3)=tbn
H(i+2:i+3,i:i+1)=tbn
end if
end do

do i=2*(ksites1+N1)+1,2*(ksites1+N1+M)-1,2

H(i:i+1,i:i+1)=emm
if (i.NE.2*(ksites1+N1+M)-1) then
H(i:i+1,i+2:i+3)=tmm
H(i+2:i+3,i:i+1)=tmm
else
H(i:i+1,i+2:i+3)=tmb
H(i+2:i+3,i:i+1)=tmb
end if
end do

j=1
do i=2*(ksites1+N1+M)+1,2*(ksites1+N1+M+N2)-1,2

H(i:i+1,i:i+1)=eb2+Vmid*Unitmat(2)+(j-1)*(V-Vmid)/(N2-1)*Unitmat(2)
j=j+1

if (i.NE.(2*(ksites1+N1+M+N2)-1)) then
H(i:i+1,i+2:i+3)=tb2
H(i+2:i+3,i:i+1)=tb2
else
H(i:i+1,i+2:i+3)=tbn
H(i+2:i+3,i:i+1)=tbn
end if
end do

do i=2*(ksites1+N1+M+N2)+1,2*(ksites1+N1+M+N2+ksites2)-1,2

H(i:i+1,i:i+1)=emmR
if (i.NE.2*(ksites1+N1+M+N2+ksites2)-1) then
H(i:i+1,i+2:i+3)=tmm

```

```

H(i+2:i+3,i:i+1)=tmm
end if
end do

else

write(*,*) 'Choose different N2 and M'
stop

end if

!call writemat2(size,Dreal(H))

Sigma=0.0D0

call MSelf_Energy2(Energy,0.0D0,gamma1p,theta1,theta2,S1)
call MSelf_Energy2(Energy,V,gamma2p,theta1,theta2,S2)

Sigma(1:2,1:2)=S1
Sigma(size-1:size,size-1:size)=S2
GR=(dcmplx(Energy,0.0D0)*Unitmat(size)-H-Sigma)

call inverse(GR)

end subroutine GR_trilayer

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!!!!!!!!!!!!!! G minus plus !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

subroutine Gmp_Datta(Energy,V,gamma1,gamma2,Mgamma,B1gamma,B2gamma,N1,N2,M,ksites1
,ksites2,theta1,theta2,GmpL,GmpR)
use params
implicit none

integer,intent(in)      :: N1,N2,M,ksites1,ksites2
real*8,intent(in)      :: Energy,V,gamma1,gamma2,Mgamma,theta1,theta2,B1gamma,B2gamma
complex*16,intent(out) :: GmpL(2*(N1+N2+M+ksites1+ksites2),2*(N1+N2+M+ksites1+ksites2))
complex*16,intent(out) :: GmpR(2*(N1+N2+M+ksites1+ksites2),2*(N1+N2+M+ksites1+ksites2))

integer                :: size,allocstat
complex*16             :: SigmaINL(2*(N1+N2+M+ksites1+ksites2),2*(N1+N2+M+ksites1+ksites2))
complex*16             :: SigmaINR(2*(N1+N2+M+ksites1+ksites2),2*(N1+N2+M+ksites1+ksites2))
complex*16             :: GRR(2*(N1+N2+M+ksites1+ksites2),2*(N1+N2+M+ksites1+ksites2))

complex*16             :: SL(2,2),SR(2,2),g_int(2,2)
real*8                 :: gamma1p,gamma2p,Mgammap

if (N2.NE.0.AND.M.NE.0) then

```



```

module Int

contains

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! MAGNETIZATION Anywhere in scattering REGION
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

function Mi_Function(k,m)

use params
use energypar
use GF

real*8,intent(in)          :: k(:)
integer,intent(in)        :: m
integer                   :: Msize
real*8                    :: Mi_Function(m)
complex*16,allocatable    :: GmpR(:, :), GmpL(:, :)
complex*16                :: GmpL_i(2,2), GmpR_i(2,2)

Msize=2*(N1_par+N2_par+M_par+ksites1_par+ksites2_par)
allocate(GmpL(Msize,Msize),GmpR(Msize,Msize))

if (V_par<0) then

if (k(3).GE.(e_up-6.0d0*abs(t_up))) then

call Gmp_Datta(k(3),V_par,gamma1_par,gamma2_par,Mgamma_par,B1gamma_par,B2gamma_par
,N1_par,N2_par,M_par,ksites1_par,ksites2_par,k(1),k(2),GmpL,GmpR)
GmpL_i(1:2,1:2)=GmpL(2*p_par-1:2*p_par,2*p_par-1:2*p_par)
GmpR_i(1:2,1:2)=GmpR(2*p_par-1:2*p_par,2*p_par-1:2*p_par)

else if ((k(3).LT.(e_up-6.0d0*abs(t_up))).AND.(k(3).GT.(e_up-6.0d0*abs(t_up)+V_par))) then

call Gmp_Datta(k(3),V_par,gamma1_par,gamma2_par,Mgamma_par,B1gamma_par,B2gamma_par
,N1_par,N2_par,M_par,ksites1_par,ksites2_par,k(1),k(2),GmpL,GmpR)
GmpL_i(1:2,1:2)=0.0
GmpR_i(1:2,1:2)=GmpR(2*p_par-1:2*p_par,2*p_par-1:2*p_par)
else
GmpL_i(1:2,1:2)=0.0
GmpR_i(1:2,1:2)=0.0
end if
else
call Gmp_Datta(k(3),V_par,gamma1_par,gamma2_par,Mgamma_par,B1gamma_par,B2gamma_par
,N1_par,N2_par,M_par,ksites1_par,ksites2_par,k(1),k(2),GmpL,GmpR)

GmpL_i(1:2,1:2)=GmpL(2*p_par-1:2*p_par,2*p_par-1:2*p_par)
GmpR_i(1:2,1:2)=GmpR(2*p_par-1:2*p_par,2*p_par-1:2*p_par)

end if

Mi_Function(1)=DREAL(qi*(GmpL_i(1,2)+GmpL_i(2,1))) !M_xL
Mi_Function(2)=DREAL(qi*(GmpR_i(1,2)+GmpR_i(2,1))) !M_xR

```

```

Mi_Function(3)=DREAL(GmpL_i(2,1)-GmpL_i(1,2)) !M_yL
Mi_Function(4)=DREAL(GmpR_i(2,1)-GmpR_i(1,2)) !M_yR

Mi_Function(5)=DREAL(qi*(GmpL_i(1,1)-GmpL_i(2,2))) !M_zL
Mi_Function(6)=DREAL(qi*(GmpR_i(1,1)-GmpR_i(2,2))) !M_zR

deallocate(GmpL,GmpR)

end function Mi_Function

subroutine FullM(Vin,gammalin,gamma2in,Mgammain,B1gammain,B2gammain
,N1in,N2in,Min,ksites1in,ksites2in,pin,Mx,My,Mz)

use params
use energypar
USE nag_quad_md

integer,intent(in)      :: N1in,N2in,Min,ksites1in,ksites2in,pin
real*8,intent(in)      :: Vin,gammalin,gamma2in,Mgammain,B1gammain,B2gammain
real*8,intent(out)     :: Mx,My,Mz

integer,parameter :: m=6,n=3
real*8  :: a(n),b(n),rel_acc,abs_acc
real*8  :: result(m)

if (Vin>0) then
a(3)=e_up-6.0d0*abs(t_up)
b(3)=Intlimit+Vin
else
a(3)=e_up-6.0d0*abs(t_up)+Vin
b(3)=Intlimit
end if

a(1)=-pi
b(1)=pi
a(2)=-pi
b(2)=pi

rel_acc=relacc
abs_acc=absacc
V_par=Vin
N1_par=N1in
N2_par=N2in
M_par=Min
ksites1_par=ksites1in
ksites2_par=ksites2in
p_par=pin
gamma1_par=gammalin
gamma2_par=gamma2in
Mgamma_par=Mgammain
B1gamma_par=B1gammain

```

```

B2gamma_par=B2gammmain

CALL nag_quad_md_rect_mintg(Mi_Function,a,b,result,&
                             rel_acc=rel_acc,abs_acc=abs_acc,max_fun_eval=100000000)

Mx=(result(1)+result(2))/2.0d0/pi/2.0d0/pi/2.0d0/pi
My=(result(3)+result(4))/2.0d0/pi/2.0d0/pi/2.0d0/pi
Mz=(result(5)+result(6))/2.0d0/pi/2.0d0/pi/2.0d0/pi

end subroutine FullM

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! SPIN CURRENT anywhere in middle region
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

function SC_Function(k,m)

use params
use energypar
use GF
use matrix

real*8,intent(in)          :: k(:)
integer,intent(in)        :: m
integer                   :: Msize
real*8                    :: SC_Function(m)
complex*16,allocatable    :: GmpR(:, :), GmpL(:, :)
complex*16                :: GmpL_i(2,2), GmpR_i(2,2), GmpL_i1(2,2), GmpR_i1(2,2)
complex*16                :: Mt(2,2), JjL(2,2), JjR(2,2)

Msize=2*(N1_par+N2_par+M_par+ksites1_par+ksites2_par)
allocate(GmpL(Msize,Msize),GmpR(Msize,Msize))

if (V_par<0) then

if (k(3).GE.(e_up-6.0d0*abs(t_up))) then

call Gmp_Datta(k(3),V_par,gamma1_par,gamma2_par,Mgamma_par,B1gamma_par,B2gamma_par
,N1_par,N2_par,M_par,ksites1_par,ksites2_par,k(1),k(2),GmpL,GmpR)

! G^{<}_{i,i+1}

GmpL_i(1:2,1:2)=GmpL(2*p_par-1:2*p_par,2*(p_par+1)-1:2*(p_par+1))
GmpR_i(1:2,1:2)=GmpR(2*p_par-1:2*p_par,2*(p_par+1)-1:2*(p_par+1))

! G^{<}_{i+1,i}

GmpL_i1(1:2,1:2)=GmpL(2*(p_par+1)-1:2*(p_par+1),2*p_par-1:2*p_par)
GmpR_i1(1:2,1:2)=GmpR(2*(p_par+1)-1:2*(p_par+1),2*p_par-1:2*p_par)

else if ((k(3).LT.(e_up-6.0d0*abs(t_up)).AND.(k(3).GT.(e_up-6.0d0*abs(t_up)+V_par)))
then

```

```

call Gmp_Datta(k(3),V_par,gamma1_par,gamma2_par,Mgamma_par,B1gamma_par,B2gamma_par
,N1_par,N2_par,M_par,ksites1_par,ksites2_par,k(1),k(2),GmpL,GmpR)
! G^{<}_{i,i+1}

GmpL_i(1:2,1:2)=0.0d0
GmpR_i(1:2,1:2)=GmpR(2*p_par-1:2*p_par,2*(p_par+1)-1:2*(p_par+1))

! G^{<}_{i+1,i}

GmpL_i1(1:2,1:2)=0.0d0
GmpR_i1(1:2,1:2)=GmpR(2*(p_par+1)-1:2*(p_par+1),2*p_par-1:2*p_par)

else

GmpL_i(1:2,1:2)=0.0
GmpR_i(1:2,1:2)=0.0

GmpL_i1(1:2,1:2)=0.0
GmpR_i1(1:2,1:2)=0.0
end if
else
call Gmp_Datta(k(3),V_par,gamma1_par,gamma2_par,Mgamma_par,B1gamma_par,B2gamma_par
,N1_par,N2_par,M_par,ksites1_par,ksites2_par,k(1),k(2),GmpL,GmpR)

! G^{<}_{i,i+1}

GmpL_i(1:2,1:2)=GmpL(2*p_par-1:2*p_par,2*(p_par+1)-1:2*(p_par+1))
GmpR_i(1:2,1:2)=GmpR(2*p_par-1:2*p_par,2*(p_par+1)-1:2*(p_par+1))

! G^{<}_{i+1,i}

GmpL_i1(1:2,1:2)=GmpL(2*(p_par+1)-1:2*(p_par+1),2*p_par-1:2*p_par)
GmpR_i1(1:2,1:2)=GmpR(2*(p_par+1)-1:2*(p_par+1),2*p_par-1:2*p_par)

end if

!change for different t in different regions
if (p_par<ksites1_par) then
call Mt_cre(0.0d0,Mt)
else if (p_par.eq.ksites1_par) then
call Mt_cpl_cre(0.0d0,Mt)
else if (p_par>ksites1_par.and.p_par<ksites1_par+N1_par) then
Mt=t_clu*unitmat(2)
else if (p_par.eq.ksites1_par+N1_par) then
call Mt_cpl_cre(0.0d0,Mt)
else if (p_par>ksites1_par+N1_par.and.p_par<ksites1_par+N1_par+M_par) then
call Mt_cre(0.0d0,Mt)
else if (p_par.eq.ksites1_par+N1_par+M_par) then
call Mt_cpl_cre(0.0d0,Mt)
else if (p_par>ksites1_par+N1_par+M_par.and.p_par<ksites1_par+N1_par+M_par+N2_par) then
Mt=t_clu*unitmat(2)
else if (p_par.eq.ksites1_par+N1_par+M_par+N2_par) then
call Mt_cpl_cre(0.0d0,Mt)
else if (p_par>ksites1_par+N1_par+M_par+N2_par) then

```

```

call Mt_cre(0.0d0,Mt)
end if

JJL=matmul (Mt,GmpL_i1-GmpL_i)
JJR=matmul (Mt,GmpR_i1-GmpR_i)

SC_Function(1)=DREAL (JJL(1,2)+JJL(2,1))    !Q_xL
SC_Function(2)=DREAL (JJR(1,2)+JJR(2,1))    !Q_xR

SC_Function(3)=DREAL (qi*JJL(1,2)-qi*JJL(2,1)) !Q_yL
SC_Function(4)=DREAL (qi*JJR(1,2)-qi*JJR(2,1)) !Q_yR

SC_Function(5)=DReal (JJL(1,1)-JJL(2,2)) !Q_zL
SC_Function(6)=DReal (JJR(1,1)-JJR(2,2)) !Q_zR

deallocate (GmpL,GmpR)

end function SC_Function

subroutine FullSpinCurrent (Vin, gammalin, gamma2in, Mgammain, Blgammain, B2gammain, N1in, N2in, Min
, ksites1in, ksites2in, pin, SCx, SCy, SCz)

use params
use energypar
USE nag_quad_md

integer, intent (in)      :: N1in, N2in, Min, ksites1in, ksites2in, pin
real*8, intent (in)      :: Vin, gammalin, gamma2in, Mgammain, Blgammain, B2gammain
real*8, intent (out)     :: SCx, SCy, SCz

integer, parameter :: m=6, n=3
real*8  :: a(n), b(n), rel_acc, abs_acc
real*8  :: result(m)

a(1)=-pi
b(1)=pi
a(2)=-pi
b(2)=pi

if (Vin>0) then
a(3)=e_up-6.0d0*abs(t_up)
b(3)=Intlimit+Vin
else
a(3)=e_up-6.0d0*abs(t_up)+Vin
b(3)=Intlimit
end if

rel_acc=relacc
abs_acc=absacc
V_par=Vin
N1_par=N1in
N2_par=N2in

```

```

M_par=Min
ksites1_par=ksites1in
ksites2_par=ksites2in
p_par=pin

gamma1_par=gamma1in
gamma2_par=gamma2in
Mgamma_par=Mgammain
Blgamma_par=Blgammain
B2gamma_par=B2gammain

CALL nag_quad_md_rect_mintg(SC_Function,a,b,result,&
                             rel_acc=rel_acc,abs_acc=abs_acc,max_fun_eval=100000000)

SCx=(result(1)+result(2))/2.0d0/2.0d0/pi/2.0d0/pi/2.0d0/pi
SCy=(result(3)+result(4))/2.0d0/2.0d0/pi/2.0d0/pi/2.0d0/pi
SCz=(result(5)+result(6))/2.0d0/2.0d0/pi/2.0d0/pi/2.0d0/pi

end subroutine FullSpinCurrent

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! CURRENT calculate anywhere
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

function I_Function(k,m)

use params
use energypar
use GF
use matrix

real*8,intent(in)          :: k(:)
integer,intent(in)        :: m
integer                   :: Msize
real*8                   :: I_Function(m)
complex*16,allocatable    :: GmpR(:, :), GmpL(:, :)
complex*16               :: GmpL_i(2,2), GmpR_i(2,2), GmpL_i1(2,2), GmpR_i1(2,2)
complex*16               :: Mt(2,2), Cint(2,2)

Msize=2*(N1_par+N2_par+M_par+ksites1_par+ksites2_par)
allocate(GmpL(Msize,Msize),GmpR(Msize,Msize))

call Gmp_Datta(k(3),V_par,gamma1_par,gamma2_par,Mgamma_par,Blgamma_par,B2gamma_par
,N1_par,N2_par,M_par,ksites1_par,ksites2_par,k(1),k(2),GmpL,GmpR)

! G^{<}_{i,i+1}

GmpL_i(1:2,1:2)=GmpL(2*p_par-1:2*p_par,2*(p_par+1)-1:2*(p_par+1))
GmpR_i(1:2,1:2)=GmpR(2*p_par-1:2*p_par,2*(p_par+1)-1:2*(p_par+1))

! G^{<}_{i+1,i}

```

```

GmpL_i1(1:2,1:2)=GmpL(2*(p_par+1)-1:2*(p_par+1),2*p_par-1:2*p_par)
GmpR_i1(1:2,1:2)=GmpR(2*(p_par+1)-1:2*(p_par+1),2*p_par-1:2*p_par)

!change for different t in different regions
if (p_par<ksites1_par) then
call Mt_cre(gamma1_par,Mt)
else if (p_par.eq.ksites1_par) then
call Mt_cpl_cre(gamma1_par,Mt)
else if (p_par>ksites1_par.and.p_par<ksites1_par+N1_par) then
    Mt=t_clu*unitmat(2)
else if (p_par.eq.ksites1_par+N1_par) then
call Mt_cpl_cre(gamma1_par,Mt)
else if (p_par>ksites1_par+N1_par.and.p_par<ksites1_par+N1_par+M_par) then
call Mt_cre(Mgamma_par,Mt)
else if (p_par.eq.ksites1_par+N1_par+M_par) then
call Mt_cpl_cre(Mgamma_par,Mt)
else if (p_par>ksites1_par+N1_par+M_par.and.p_par<ksites1_par+N1_par+M_par+N2_par) then
    Mt=t_clu*unitmat(2)
else if (p_par.eq.ksites1_par+N1_par+M_par+N2_par) then
call Mt_cpl_cre(Mgamma_par,Mt)
else if (p_par>ksites1_par+N1_par+M_par+N2_par) then
call Mt_cre(gamma2_par,Mt)
end if

Cint=-2*matmul(Mt,GmpL_i1+GmpR_i1-(GmpL_i+GmpR_i))

I_Function(1)=DREAL(Cint(1,1)) !Iup
I_Function(2)=DREAL(Cint(2,2)) !Idown

deallocate(GmpL,GmpR)
end function I_Function

subroutine FullCurrent(Vin,gamma1in,gamma2in,Mgammain,B1gammain,B2gammain,N1in,N2in,Min
,ksites1in,ksites2in,pin,Iup,Idown)

use params
use energypar
USE nag_quad_md

integer,intent(in)      :: N1in,N2in,Min,ksites1in,ksites2in,pin
real*8,intent(in)      :: Vin,gamma1in,gamma2in,Mgammain,B1gammain,B2gammain
real*8,intent(out)     :: Iup,Idown

integer,parameter :: m=2,n=3
real*8  :: a(n),b(n),rel_acc,abs_acc
real*8  :: result(m)

a(1)=-pi
b(1)=pi
a(2)=-pi

```

```

b(2)=pi

if (Vin>0) then
a(3)=-2*Intlimit
b(3)=2*Intlimit+Vin
else
a(3)=-2*Intlimit+Vin
b(3)=2*Intlimit
end if

rel_acc=relacc
abs_acc=absacc
V_par=Vin
N1_par=N1in
N2_par=N2in
M_par=Min
ksites1_par=ksites1in
ksites2_par=ksites2in
p_par=pin
gamma1_par=gamma1in
gamma2_par=gamma2in
Mgamma_par=Mgammain
Blgamma_par=Blgammain
B2gamma_par=B2gammain

CALL nag_quad_md_rect_mintg(I_Function,a,b,result,&
                             rel_acc=rel_acc,abs_acc=abs_acc,max_fun_eval=10000000)

Iup=result(1)/2.0d0/pi/2.0d0/pi/2.0d0/pi
Idown=result(2)/2.0d0/pi/2.0d0/pi/2.0d0/pi

end subroutine FullCurrent

end module Int

!----- PARAMETERS -----
module params
implicit none

integer, parameter    :: R_KIND = 8
real*8, parameter    :: pi=3.1415926535897932384626433832795028841971693993751058D0
complex*16,parameter :: qi=(0.0D0,1.0D0)

real*8, parameter    :: relacc=1.0d-3
real*8, parameter    :: absacc=0.0d0

real*8                :: e_up
real*8                :: e_down
real*8                :: t_up=-1.0001D0
real*8                :: t_down=-1.0001D0

```



```

real*8          :: e_clu_up=9.0D0
real*8          :: e_clu_down=9.0D0

real*8          :: t_clu=-1.0001D0

real*8          :: t_cpl_up=-1.0001D0
real*8          :: t_cpl_down=-1.0001D0

real*8          :: delta=1.0d-6
real*8          :: Intlimit=0.5d0

end module params

!----- END PARAMETERS -----

!Single Barrier Code 3D
program singleMTJ

use params
use GF
use matrix
use Int_2Dnew
implicit none
integer        :: N,i
real*8         :: V,gamma,Iup0,Idown0,Iuppi,Idownpi
real*8         :: SCx,SCy,SCz
N=3
e_up=-5.0d0
e_down=-1.0d0
open(unit=123,file="c3.out")
V=0.0d0
gamma=pi/2.0d0
call FullSC_lead_bar3D(V,gamma,N,SCx,SCy,SCz)
call Current3D(V,gamma,N,1,Iuppi,Idownpi)

end program singleMTJ

!.....
module Int_2Dnew
contains
! Energy and K_parallel multiintegration
! spin current at the interface I/FM lead
function Full_SC_BL_Function(k,m)
use params
use energypar
use GF
real*8,intent(in) :: k(:)
integer,intent(in) :: m
real*8            :: Full_SC_BL_Function(m)
complex*16        :: G_Llb(2,2),G_Rlb(2,2),G_Lbl(2,2),G_Rbl(2,2)
complex*16        :: JJL(2,2),JJR(2,2),Mtcpl(2,2)
if (V_par<0) then
if (k(3).GE.(e_up-6.0d0*abs(t_up))) then
call G_mp_bar_lead(k(3),V_par,gamma_par,N_par,N_par,0,k(1),k(2),G_Lbl,G_Rbl)

```

```

call G_mp_lead_bar(k(3),V_par,gamma_par,N_par,0,N_par,k(1),k(2),G_Llb,G_Rlb)
call Mt_cpl_cre(0.0d0,Mtcpl)

JJL=matmul(Mtcpl,G_Llb-G_Lbl)
JJR=matmul(Mtcpl,G_Rlb-G_Rbl)

else if ((k(3).LT.(e_up-6.0d0*abs(t_up))).AND.(k(3).GT.(e_up-6.0d0*abs(t_up)+V_par))) then

call G_mp_bar_lead(k(3),V_par,gamma_par,N_par,N_par,0,k(1),k(2),G_Lbl,G_Rbl)
call G_mp_lead_bar(k(3),V_par,gamma_par,N_par,0,N_par,k(1),k(2),G_Llb,G_Rlb)
call Mt_cpl_cre(0.0d0,Mtcpl)

JJL=0.0d0
JJR=matmul(Mtcpl,G_Rlb-G_Rbl)

end if

else

if (k(3).GE.(e_up+6.0d0*abs(t_up))) then

call G_mp_bar_lead(k(3),V_par,gamma_par,N_par,N_par,0,k(1),k(2),G_Lbl,G_Rbl)
call G_mp_lead_bar(k(3),V_par,gamma_par,N_par,0,N_par,k(1),k(2),G_Llb,G_Rlb)
call Mt_cpl_cre(0.0d0,Mtcpl)

JJL=0.0d0
JJR=matmul(Mtcpl,G_Rlb-G_Rbl)

else

call G_mp_bar_lead(k(3),V_par,gamma_par,N_par,N_par,0,k(1),k(2),G_Lbl,G_Rbl)
call G_mp_lead_bar(k(3),V_par,gamma_par,N_par,0,N_par,k(1),k(2),G_Llb,G_Rlb)
call Mt_cpl_cre(0.0d0,Mtcpl)

JJL=matmul(Mtcpl,G_Llb-G_Lbl)
JJR=matmul(Mtcpl,G_Rlb-G_Rbl)

end if

end if

Full_SC_BL_Function(1)=DREAL(JJL(1,2)+JJL(2,1)) !Q_xL
Full_SC_BL_Function(2)=DREAL(JJR(1,2)+JJR(2,1)) !Q_xR

Full_SC_BL_Function(3)=DREAL(qi*JJL(1,2)-qi*JJL(2,1)) !Q_yL
Full_SC_BL_Function(4)=DREAL(qi*JJR(1,2)-qi*JJR(2,1)) !Q_yR

Full_SC_BL_Function(5)=DREAL(JJL(1,1)-JJL(2,2)) !Q_zL
Full_SC_BL_Function(6)=DREAL(JJR(1,1)-JJR(2,2)) !Q_zR

end function Full_SC_BL_Function

subroutine FullSC_lead_bar3D(Vin,gamma_in,Nin,SCx,SCy,SCz)
use params

```

```

use energypar
USE nag_quad_md

integer,intent(in)      :: Nin
real*8,intent(in)      :: Vin,gammain
real*8,intent(out)     :: SCx,SCy,SCz

integer,parameter :: m=6,n=3
real*8  :: a(n),b(n),rel_acc,abs_acc
real*8  :: result(m)

a(1) = -pi
a(2) = -pi

b(1) = pi
b(2) = pi

if (Vin>0) then
a(3)=e_up-6.0d0*abs(t_up)
b(3)=Intlimit+Vin
else
a(3)=e_up-6.0d0*abs(t_up)+Vin
b(3)=Intlimit
end if

rel_acc=relacc
abs_acc=absacc
V_par=Vin
N_par=Nin
gamma_par=gammain

CALL nag_quad_md_rect_mintg(Full_SC_BL_Function,a,b,result,&
                             rel_acc=rel_acc,abs_acc=abs_acc,max_fun_eval=100000000)

SCx=(result(1)+result(2))/2.0d0/2.0d0/pi/2.0d0/pi/2.0d0/pi
SCy=(result(3)+result(4))/2.0d0/2.0d0/pi/2.0d0/pi/2.0d0/pi
SCz=(result(5)+result(6))/2.0d0/2.0d0/pi/2.0d0/pi/2.0d0/pi
end subroutine FullSC_lead_bar3D

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

function Full_SC_lead_Function(k,m)

use params
use energypar
use GF

real*8,intent(in)  :: k(:)
integer,intent(in) :: m
real*8             :: Full_SC_Lead_Function(m)
complex*16         :: G_L01(2,2),G_R01(2,2),G_L10(2,2),G_R10(2,2)
complex*16         :: JJL(2,2),JJR(2,2),Mt(2,2)

```

```

if (V_par<0) then

if (k(3).GE.(e_up-6.0d0*abs(t_up))) then

call G_cpl_ST(k(3),V_par,gamma_par,N_par,p_par,p_par+1,k(1),k(2),G_L01,G_R01)
call G_cpl_ST(k(3),V_par,gamma_par,N_par,p_par+1,p_par,k(1),k(2),G_L10,G_R10)
call Mt_cre(0.0d0,Mt)

JJL=matmul(Mt,G_L10-G_L01)
JJR=matmul(Mt,G_R10-G_R01)

else if ((k(3).LT.(e_up-6.0d0*abs(t_up))).AND.(k(3).GT.(e_up-6.0d0*abs(t_up)+V_par))) then

call G_cpl_ST(k(3),V_par,gamma_par,N_par,p_par,p_par+1,k(1),k(2),G_L01,G_R01)
call G_cpl_ST(k(3),V_par,gamma_par,N_par,p_par+1,p_par,k(1),k(2),G_L10,G_R10)
call Mt_cre(0.0d0,Mt)

JJL=0.0d0
JJR=matmul(Mt,G_R10-G_R01)

end if

else

call G_cpl_ST(k(3),V_par,gamma_par,N_par,p_par,p_par+1,k(1),k(2),G_L01,G_R01)
call G_cpl_ST(k(3),V_par,gamma_par,N_par,p_par+1,p_par,k(1),k(2),G_L10,G_R10)
call Mt_cre(0.0d0,Mt)

JJL=matmul(Mt,G_L10-G_L01)
JJR=matmul(Mt,G_R10-G_R01)

end if

Full_SC_lead_Function(1)=DREAL(JJL(1,2)+JJL(2,1)) !Q_xL
Full_SC_lead_Function(2)=DREAL(JJR(1,2)+JJR(2,1)) !Q_xR

Full_SC_lead_Function(3)=DREAL(qi*JJL(1,2)-qi*JJL(2,1)) !Q_yL
Full_SC_lead_Function(4)=DREAL(qi*JJR(1,2)-qi*JJR(2,1)) !Q_yR

Full_SC_lead_Function(5)=DREAL(JJL(1,1)-JJL(2,2)) !Q_zL
Full_SC_lead_Function(6)=DREAL(JJR(1,1)-JJR(2,2)) !Q_zR

end function Full_SC_lead_Function

subroutine FullSC_lead3D(Vin,gammain,Nin,pin,SCx,SCy,SCz)
use params
use energypar
USE nag_quad_md

integer,intent(in)      :: Nin,pin
real*8,intent(in)       :: Vin,gammain
real*8,intent(out)      :: SCx,SCy,SCz

```

```

integer,parameter :: m=6,n=3
real*8  :: a(n),b(n),rel_acc,abs_acc
real*8  :: result(m)

a(1) = -pi
a(2) = -pi

b(1) = pi
b(2) = pi

if (Vin>0) then
a(3)=e_up-6.0d0*abs(t_up)
b(3)=Intlimit+Vin
else
a(3)=e_up-6.0d0*abs(t_up)+Vin
b(3)=Intlimit
end if

rel_acc=relacc
abs_acc=absacc
V_par=Vin
N_par=Nin
p_par=pin
gamma_par=gammain

CALL nag_quad_md_rect_mintg(Full_SC_lead_Function,a,b,result,&
                             rel_acc=rel_acc,abs_acc=abs_acc,max_fun_eval=100000000)

SCx=(result(1)+result(2))/2.0d0/2.0d0/pi/2.0d0/pi/2.0d0/pi
SCy=(result(3)+result(4))/2.0d0/2.0d0/pi/2.0d0/pi/2.0d0/pi
SCz=(result(5)+result(6))/2.0d0/2.0d0/pi/2.0d0/pi/2.0d0/pi
end subroutine FullSC_lead3D

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! NE magnetization in the Lead

function Full_M_lead_Function(k,m)

use params
use energypar
use GF

real*8,intent(in)  :: k(:)
integer,intent(in) :: m
real*8             :: Full_M_Lead_Function(m)
complex*16         :: G_L00(2,2),G_R00(2,2)

if (V_par<0) then

if (k(3).GE.(e_up-6.0d0*abs(t_up))) then

call G_cpl_ST(k(3),V_par,gamma_par,N_par,p_par,p_par,k(1),k(2),G_L00,G_R00)

```

```

else if ((k(3).LT.(e_up-6.0d0*abs(t_up))).AND.(k(3).GT.(e_up-6.0d0*abs(t_up)+V_par))) then
call G_cpl_ST(k(3),V_par,gamma_par,N_par,p_par,p_par,k(1),k(2),G_L00,G_R00)

G_L00=0.0d0

end if

else

call G_cpl_ST(k(3),V_par,gamma_par,N_par,p_par,p_par,k(1),k(2),G_L00,G_R00)

end if

Full_M_lead_Function(1)=DREAL(qi*(G_L00(1,2)+G_L00(2,1))) !M_xL
Full_M_lead_Function(2)=DREAL(qi*(G_R00(1,2)+G_R00(2,1))) !M_xR

Full_M_lead_Function(3)=DREAL(G_L00(2,1)-G_L00(1,2)) !M_yL
Full_M_lead_Function(4)=DREAL(G_R00(2,1)-G_R00(1,2)) !M_yR

Full_M_lead_Function(5)=DREAL(qi*(G_L00(1,1)-G_L00(2,2))) !M_zL
Full_M_lead_Function(6)=DREAL(qi*(G_R00(1,1)-G_R00(2,2))) !M_zR

end function Full_M_lead_Function

subroutine FullM_lead3D(Vin,gamma_in,Nin,pin,Mx,My,Mz)
use params
use energypar
USE nag_quad_md

integer,intent(in)      :: Nin,pin
real*8,intent(in)      :: Vin,gamma_in
real*8,intent(out)     :: Mx,My,Mz

integer,parameter :: m=6,n=3
real*8  :: a(n),b(n),rel_acc,abs_acc
real*8  :: result(m)

a(1) = -pi
a(2) = -pi

b(1) = pi
b(2) = pi

if (Vin>0) then
a(3)=e_up-6.0d0*abs(t_up)
b(3)=e_up+Vin
else
a(3)=e_up-6.0d0*abs(t_up)+Vin
b(3)=Intlimit
end if

rel_acc=relacc
abs_acc=absacc

```

```

V_par=Vin
N_par=Nin
p_par=pin
gamma_par=gammain

CALL nag_quad_md_rect_mintg(Full_M_lead_Function,a,b,result,&
                             rel_acc=rel_acc,abs_acc=abs_acc,max_fun_eval=100000000)

Mx=(result(1)+result(2))/2.0d0/pi/2.0d0/pi/2.0d0/pi
My=(result(3)+result(4))/2.0d0/pi/2.0d0/pi/2.0d0/pi
Mz=(result(5)+result(6))/2.0d0/pi/2.0d0/pi/2.0d0/pi
end subroutine FullM_lead3D

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

function Full_Current_Function(k,m)

use params
use energypar
use GF

real*8,intent(in)  :: k(:)
integer,intent(in) :: m
real*8             :: Full_Current_Function(m)
complex*16         :: G_L1(2,2),G_R1(2,2),G_L2(2,2),G_R2(2,2)
complex*16         :: Cint(2,2),Mt(2,2)

call G_cpl_ST(k(3),V_par,gamma_par,N_par,p_par+1,p_par,k(1),k(2),G_L1,G_R1)
call G_cpl_ST(k(3),V_par,gamma_par,N_par,p_par,p_par+1,k(1),k(2),G_L2,G_R2)
call Mt_cre(0.0d0,Mt)

Cint=-2.0d0*matmul(G_L1+G_R1-G_L2-G_R2,Mt)

Full_Current_Function(1)=DREAL(Cint(1,1)) !Iup
Full_Current_Function(2)=DREAL(Cint(2,2)) !Idown

end function Full_Current_Function

subroutine Current3D(Vin,gammain,Nin,pin,Iup,Idown)
use params
use energypar
USE nag_quad_md

integer,intent(in)      :: Nin,pin
real*8,intent(in)      :: Vin,gammain
real*8,intent(out)     :: Iup,Idown

integer,parameter :: m=2,n=3
real*8  :: a(n),b(n),rel_acc,abs_acc
real*8  :: result(m)

a(1) = -pi
a(2) = -pi

```

```

b(1) = pi
b(2) = pi

if (Vin>0) then
a(3)=-Intlimit
b(3)=Intlimit+Vin
else
a(3)=-Intlimit+Vin
b(3)=Intlimit
end if

rel_acc=relacc
abs_acc=absacc
V_par=Vin
N_par=Nin
p_par=pin
gamma_par=gammain

CALL nag_quad_md_rect_mintg(Full_Current_Function,a,b,result,&
                             rel_acc=rel_acc,abs_acc=abs_acc,max_fun_eval=100000000)

Iup=result(1)/2.0d0/pi/2.0d0/pi/2.0d0/pi
Idown=result(2)/2.0d0/pi/2.0d0/pi/2.0d0/pi

end subroutine Current3D

end module Int_2Dnew
module GF
contains

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!-----
! Infinite Lead Green Functions
!-----
!----- UP-UP -----

complex*16 function g_inf_up_up(energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2)

! Retarded up_up green function between two sites (x1,x2) for an infinite lead.
!
! Parameters defined in module 'params'
!
! t_up    spin up electron hopping between nearest neighbors sites
! t_down  spin down electron hopping between nearest neighbors sites
!
! e_up    spin up electron on-site energy
! e_down  spin down electron on-site energy
!
! energy  electron energy
! V       the voltage drop

```



```

! gamma   angle
! x1,x2   site number
!
use params

implicit none

real*8,intent(in)      :: energy,gamma,V
complex*16             :: dup,ddw
complex*16             :: nup,ndw
integer,intent(in)    :: x1,x2
real*8                 :: e_up1,e_down1,t_up1,t_down1,theta1,theta2,delta
complex*16             :: energy1

energy1=dcmplx(energy,delta)
e_up1=e_up+2.d0*t_up*(cos(theta1)+cos(theta2))
e_down1=e_down+2.d0*t_down*(cos(theta1)+cos(theta2))
t_up1=t_up
t_down1=t_down

dup=sqrt(dcmplx(4.0D0*t_up1**2.0D0-(energy1-e_up1-V)**2.0D0))
ddw=sqrt(dcmplx(4.0D0*t_down1**2.0D0-(energy1-e_down1-V)**2.0D0))
nup=(energy1-e_up1-V)/(2.0D0*t_up1)-qi*sign(1.0D0,t_up)*sqrt(dcmplx(1.0D0-
((energy1-e_up1-V)/(2.0D0*t_up1))**2.0D0))
ndw=(energy1-e_down1-V)/(2.0D0*t_down1)-qi*sign(1.0D0,t_down)*sqrt(dcmplx(1.0D0-
((energy1-e_down1-V)/(2.0D0*t_down1))**2.0D0))

g_inf_up_up=(-qi/2.0D0)*((1.0D0+cos(gamma))*nup**abs(x1-x2)/
dup+(1.0D0-cos(gamma))*ndw**abs(x1-x2)/ddw)

end function g_inf_up_up

!----- UP-DOWN -----
complex*16 function g_inf_up_down(energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2)

use params

implicit none

real*8,intent(in)      :: energy,gamma,V
complex*16             :: dup,ddw
complex*16             :: nup,ndw
integer,intent(in)    :: x1,x2
real*8                 :: e_up1,e_down1,t_up1,t_down1,theta1,theta2,delta
complex*16             :: energy1

energy1=dcmplx(energy,delta)
e_up1=e_up+2.d0*t_up*(cos(theta1)+cos(theta2))
e_down1=e_down+2.d0*t_down*(cos(theta1)+cos(theta2))
t_up1=t_up
t_down1=t_down

```

```

dup=sqrt (dcmplx(4.0D0*t_up1**2.0D0-(energy1-e_up1-V)**2.0D0))
ddw=sqrt (dcmplx(4.0D0*t_down1**2.0D0-(energy1-e_down1-V)**2.0D0))
nup=(energy1-e_up1-V)/(2.0D0*t_up1)-qi*sign(1.0D0,t_up)*sqrt (dcmplx(1.0D0-
((energy1-e_up1-V)/(2.0D0*t_up1))**2.0D0))
ndw=(energy1-e_down1-V)/(2.0D0*t_down1)-qi*sign(1.0D0,t_down)*sqrt (dcmplx(1.0D0-
((energy1-e_down1-V)/(2.0D0*t_down1))**2.0D0))

```

```

g_inf_up_down=(-qi*sin(gamma)/2.0D0)*(nup**abs(x1-x2)/dup-ndw**abs(x1-x2)/ddw)

```

```

end function g_inf_up_down

```

```

!----- DOWN-UP -----

```

```

complex*16 function g_inf_down_up(energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2)

```

```

implicit none

```

```

real*8,intent(in)      :: energy,gamma,V,theta1,theta2
integer,intent(in)    :: x1,x2

```

```

g_inf_down_up=g_inf_up_down(energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2)

```

```

end function g_inf_down_up

```

```

!----- DOWN_DOWN -----

```

```

complex*16 function g_inf_down_down(energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2)

```

```

use params

```

```

implicit none

```

```

real*8,intent(in)      :: energy,gamma,V
complex*16             :: dup,ddw
complex*16             :: nup,ndw
integer,intent(in)    :: x1,x2
real*8                 :: e_up1,e_down1,t_up1,t_down1,theta1,theta2,delta
complex*16             :: energy1

```

```

energy1=dcmplx(energy,delta)
e_up1=e_up+2.d0*t_up*(cos(theta1)+cos(theta2))
e_down1=e_down+2.d0*t_down*(cos(theta1)+cos(theta2))
t_up1=t_up
t_down1=t_down

```

```

dup=sqrt (dcmplx(4.0D0*t_up1**2.0D0-(energy1-e_up1-V)**2.0D0))
ddw=sqrt (dcmplx(4.0D0*t_down1**2.0D0-(energy1-e_down1-V)**2.0D0))
nup=(energy1-e_up1-V)/(2.0D0*t_up1)-qi*sign(1.0D0,t_up)*sqrt (dcmplx(1.0D0-

```

```

((energy1-e_up1-V)/(2.0D0*t_up1)**2.0D0)
ndw=(energy1-e_down1-V)/(2.0D0*t_down1)-qi*sign(1.0D0,t_down)*sqrt(dcmplx(1.0D0-
((energy1-e_down1-V)/(2.0D0*t_down1)**2.0D0))

g_inf_down_down=(-qi/2.0D0)*((1.0D0-cos(gamma))*nup**abs(x1-x2)/
dup+(1.0D0+cos(gamma))*ndw**abs(x1-x2)/ddw)

end function g_inf_down_down

!-----
! Matrix representations of green's functions
!-----

subroutine Mg_inf_cre(energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2,Mg_inf)

!this subroutine calculates the matrix form of
!green's fuction for the the infinite lead

complex*16,intent(out) ::Mg_inf(2,2)
real*8,intent(in)      ::energy,gamma,V,theta1,theta2
integer,intent(in)     ::x1,x2

Mg_inf(1,1)=g_inf_up_up(energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2)
Mg_inf(1,2)=g_inf_up_down(energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2)
Mg_inf(2,1)=g_inf_down_up(energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2)
Mg_inf(2,2)=g_inf_down_down(energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2)

end subroutine Mg_inf_cre

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!-----
! Bulk Green Function for the isolated seminfinite lead
!-----
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!

subroutine Mg_seminf_blk_cre(energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2,Mg_seminf_blk)

! this subroutine calculates the isolated seminfinite lead green's function
! from point x1 to a point x2
! we coupled two semiinfiinte to have infinite and go back to get seminfinite
! for left lead we call it with gammaLeft and V=0
! for righth lead we call it with gammaRight and V
! the first point is 0 and so on

use matrix

!USE NAG_MAT_INV, ONLY : NAG_GEN_MAT_INV

```

```

complex*16,intent(out) ::Mg_seminf_blk(2,2)
real*8,intent(in)      ::energy,gamma,V,theta1,theta2
integer,intent(in)     ::x1,x2

complex*16             :: use1(2,2)=0,use2(2,2)=0,use3(2,2)=0,use4(2,2)=0
complex*16             :: use5(2,2)=0,use6(2,2)=0,use7(2,2)=0,use8(2,2)=0

call Mg_inf_cre(energy,V,gamma,x1,0,theta1,theta2,use1)
call Mg_inf_cre(energy,V,gamma,x1,-1,theta1,theta2,use2)
call Mg_inf_cre(energy,V,gamma,-8,-1,theta1,theta2,use3)

!here we puted -8 but it can be any negative number since we refer to left side

!call NAG_GEN_MAT_INV(use3)
call inverse(use3)

call Mg_inf_cre(energy,V,gamma,-8,0,theta1,theta2,use4)

use5=use1-matmul(matmul(use2,use3),use4)

call Mg_inf_cre(energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2,use6)
call Mt_cre(gamma,use7)
call Mg_inf_cre(energy,V,gamma,-1,x2,theta1,theta2,use8)

Mg_seminf_blk=use6-matmul(matmul(use5,use7),use8)

end subroutine Mg_seminf_blk_cre

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!-----
! END END Bulk Green Function for the isolated seminfinite lead
!-----
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!-----
!----- HOPING MATRIX -----
!-----

!----- Hoping in bulk material -----

subroutine Mt_cre(gamma,Mt)

!this subroutine gives the matrix for the hopping

use params

complex*16,intent(out)      :: Mt(2,2)
real*8,intent(in)          :: gamma

real*8                      :: t_up_up,t_down_down,t_up_down,t_down_up

t_up_up=(t_up*(1+cos(gamma))+t_down*(1-cos(gamma)))/2
t_down_down=(t_up*(1-cos(gamma))+t_down*(1+cos(gamma)))/2
t_up_down=(t_up-t_down)*sin(gamma)/2
t_down_up=t_up_down

```

```

Mt(1,1)=t_up_up
Mt(1,2)=t_up_down
Mt(2,1)=t_down_up
Mt(2,2)=t_down_down

end subroutine Mt_cre
!-----
!----- Coupling Hoping matrix -----
!-----
subroutine Mt_cpl_cre(gamma,Mt_cpl)

! this subroutine gives the matrix for the hopping between the leads and the barriers
! left hoping matrix metal to barrier gamma non 0
! right hoping matrix barrier to metal gamma 0
use params

complex*16,intent(out)          :: Mt_cpl(2,2)
real*8,intent(in)              :: gamma

Mt_cpl(1,1)=t_cpl_up*(1.0+cos(gamma))+t_cpl_down*(1.0-cos(gamma))
Mt_cpl(1,2)=sin(gamma)*(t_cpl_up-t_cpl_down)
Mt_cpl(2,1)=sin(gamma)*(t_cpl_up-t_cpl_down)
Mt_cpl(2,2)=t_cpl_up*(1.0-cos(gamma))+t_cpl_down*(1.0+cos(gamma))
Mt_cpl=0.5*Mt_cpl

end subroutine Mt_cpl_cre
!-----
!----- Self Energy matrix -----
!-----

subroutine MSelf_Energy(Energy,V,gamma,thetal,theta2,S)

! this subroutine gives the matrix for the self energy

real*8,intent(in)          :: Energy,V,gamma,thetal,theta2
complex*16                 :: Mt(2,2),g_int(2,2)
complex*16,intent(out)    :: S(2,2)

!we calculate the hoping matrices

call Mt_cpl_cre(gamma,Mt)

! we calculate the green function at the interface
call Mg_seminf_blk_cre(energy,V,gamma,0,0,thetal,theta2,g_int)

S=matmul(matmul(Mt,g_int),Mt)

end subroutine MSelf_Energy

!----- End Self Energy -----
!----- START Keldysh Green Functions -----
!-----

```

```

!----- Isolated Lead Keldysh Green Function -----

subroutine F_iso(Energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2,FMR)
! this subroutine calculates the Isolated right Lead
! Keldysh Green Function from point x1 to x2
! for left lead we have only the interface keldysh green function x1=x2=0
! for left lead we have V=0 gamma=0
! for right lead we can have any combination we want

use params

real*8,intent(in)           :: Energy,V,gamma,theta1,theta2
integer,intent(in)         :: x1,x2
complex*16,intent(out)     :: FMR(2,2)
complex*16                 :: grr(2,2),gra(2,2)

!first calculate the retarded G.F. for the lead

call Mg_seminf_blk_cre(Energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2,grr)

!then we need the advanced G.F. which is the conjugate of the retarded

call Mg_seminf_blk_cre(Energy,V,gamma,x2,x1,theta1,theta2,gra)
gra=conjg(gra)
gra=transpose(gra)

FMR=(1.0D0-2.0D0*FermiD(Energy-V))*(grr-gra)

end subroutine F_iso

!----- END Right isolated Lead Keldysh -----
!----- Isolated -+ Green Function -----

subroutine gmp_iso(Energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2,gmp)
! this subroutine calculates the Isolated minus plus
! Green Function from point x1 to x2
! for left lead we have only the interface keldysh green function x1=x2=0
! for left lead we have V=0 gamma=0
! for right lead we can have any combination we want

real*8,intent(in)           :: Energy,V,gamma,theta1,theta2
integer,intent(in)         :: x1,x2
complex*16,intent(out)     :: gmp(2,2)
complex*16                 :: grr(2,2),gra(2,2)

!first calculate the retarded G.F. for the lead

call Mg_seminf_blk_cre(Energy,V,gamma,x1,x2,theta1,theta2,grr)

!then we need the advanced G.F. which is the conjugate of the retarded

call Mg_seminf_blk_cre(Energy,V,gamma,x2,x1,theta1,theta2,gra)
gra=conjg(gra)

```

```

gra=transpose(gra)

gmp=-FermiD(Energy-V)*(grr-gra)

end subroutine gmp_iso

!-----
!---  coupled green minus plus function for spin torque  -----
!-----
! inside the right FM lead the Gmp NEGF.

subroutine G_cpl_ST(Energy,V,gamma,N,x1,x2,theta1,theta2,GmpL,GmpR)
use params
use matrix

real*8,intent(in)           :: Energy,V,gamma,theta1,theta2
integer,intent(in)         :: N,x1,x2
complex*16,intent(out)     :: GmpL(2,2),GmpR(2,2)

complex*16                 :: Gaa_r(2,2),Gab_r(2,2),Gba_r(2,2),Gbb_r(2,2),Gaa_a(2,2),Gab_a(2,2),G
complex*16                 :: Ga_alpha_a(2,2),Gb_alpha_a(2,2)
complex*16                 :: Mt_cpl(2,2),Mtp_cpl(2,2)
complex*16                 :: g_alpha_alpha(2,2),g_alphap_alphap(2,2)
,g_lambdap_alphap(2,2),g_alphap_mup(2,2),mmmm(2,2)
complex*16                 :: gmp_alpha_alpha(2,2),gmp_alphap_alphap(2,2)
,gmp_alphap_mup(2,2)
complex*16                 :: gmp_lambdap_mup(2,2),gmp_lambdap_alphap(2,2)

real*8,Dimension(N,N)     :: Mg_clu_iso
complex*16                 :: g_iso_aa(2,2),g_iso_ab(2,2),g_iso_ba(2,2),g_iso_bb(2,2)
complex*16                 :: DD(2,2),help1(2,2),help2(2,2),help3(2,2),help4(2,2)

! we first calculate the green's functions for the isolated barrier

call Mg_clu(Energy,N,V,theta1,theta2,Mg_clu_iso)
g_iso_aa=Mg_clu_iso(1,1)*Unitmat(2)
g_iso_ab=Mg_clu_iso(1,N)*Unitmat(2)
g_iso_ba=Mg_clu_iso(N,1)*Unitmat(2)
g_iso_bb=Mg_clu_iso(N,N)*Unitmat(2)

!we calculate the GF for the coupled cluster

call G_cpl(Energy,V,gamma,N,theta1,theta2,Gaa_r,Gab_r,Gba_r,Gbb_r)

!we need the advanced GF
Gbb_a=conjg(Gbb_r)
Gbb_a=transpose(Gbb_a)
Gab_a=conjg(Gba_r)
Gab_a=transpose(Gab_a)
Gba_a=conjg(Gab_r)
Gba_a=transpose(Gba_a)

call Mt_cpl_cre(gamma,Mt_cpl)
call Mt_cpl_cre(0.0D0,Mtp_cpl)

```

```

!we calculate the interface green function for the left lead
call Mg_seminf_blk_cre(Energy,0.0D0,gamma,0,0,theta1,theta2,g_alpha_alpha)

!we calculate the interface green function for the right lead

call Mg_seminf_blk_cre(Energy,V,0.0D0,0,0,theta1,theta2,g_alphap_alphap)

call Mg_seminf_blk_cre(Energy,V,0.0D0,x1,0,theta1,theta2,g_lambdap_alphap)
call Mg_seminf_blk_cre(Energy,V,0.0D0,0,x2,theta1,theta2,g_alphap_mup)

!we call the keldysh GF for the left lead interface

call gmp_iso(Energy,0.0D0,gamma,0,0,theta1,theta2,gmp_alpha_alpha)

!we call the keldysh GF for the right lead interface

call gmp_iso(Energy,V,0.0D0,0,0,theta1,theta2,gmp_alphap_alphap)

call gmp_iso(Energy,V,0.0D0,0,x2,theta1,theta2,gmp_alphap_mup)
call gmp_iso(Energy,V,0.0D0,x1,x2,theta1,theta2,gmp_lambdap_mup)
call gmp_iso(Energy,V,0.0D0,x1,0,theta1,theta2,gmp_lambdap_alphap)

help1=Unitmat(2)-matmul(matmul(matmul(g_iso_aa,Mt_cpl),g_alpha_alpha),Mt_cpl)
call inverse(help1)

DD=Unitmat(2)-matmul(matmul(matmul(g_iso_bb,Mtp_cpl),g_alphap_alphap),Mtp_cpl)-&
matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(g_iso_ba,Mt_cpl),g_alpha_alpha)&
,Mt_cpl),help1),g_iso_ab),Mtp_cpl),g_alphap_alphap),Mtp_cpl)

call inverse(DD)

help2=matmul(matmul(matmul(matmul(g_alpha_alpha,Mt_cpl),help1),g_iso_aa),Mt_cpl)
+Unitmat(2)

GmpL=matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(&
matmul(matmul(matmul(g_lambdap_alphap,Mtp_cpl)&
,DD),g_iso_ba),Mt_cpl),help2),gmp_alpha_alpha),Mt_cpl)&
,Gab_a),Mtp_cpl),conjg(g_alphap_mup))

help3=matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(g_iso_ba,Mt_cpl),g_alpha_alpha)&
,Mt_cpl),help1),g_iso_ab)+g_iso_bb

help4=gmp_alphap_mup+matmul(matmul(matmul(matmul(gmp_alphap_alphap,Mtp_cpl)&
,Gbb_a),Mtp_cpl),conjg(g_alphap_mup))

GmpR=gmp_lambdap_mup+matmul(matmul(matmul(matmul(gmp_lambdap_alphap,Mtp_cpl)&
,Gbb_a),Mtp_cpl),conjg(g_alphap_mup))+matmul(matmul(matmul(&
matmul(matmul(g_lambdap_alphap,&
Mtp_cpl),DD),help3),Mtp_cpl),help4)

end subroutine G_cpl_ST

```



```

!---*-----
!---*----- Coupled Keldysh Functions -----
!-----

real*8 Function FermiD(Energy) result (fd)
implicit none

!this function calculates the fermi distribution

real*8,intent(in)  :: Energy
real*8             :: fd

fd=1.0/(DExp(Energy/0.026D0)+1.0D0)

end Function FermiD

REAL*8 FUNCTION G_clu_zerobias(Energy,i,j,N,theta1,theta2) RESULT (G_c0)

! This function calculates the green function of isolated cluster
! for zero V bias, using an analytical formula
USE params

real*8,intent(in)      :: Energy,theta1,theta2
integer,intent(in)    :: i,j,N
real*8                :: G_c0,e_clu1,t_clu1
complex*16            :: ka

e_clu1=e_clu+2.D0*t_clu*(cos(theta1)+cos(theta2))
t_clu1=t_clu

IF (abs(Energy-e_clu1)>6.0D0*abs(t_clu1)) THEN

ka=(Energy-e_clu1)/(2.0D0*t_clu1)
ka=pi/2.0D0+qi*LOG(qi*ka+SQRT(1.0D0-ka**2))

IF (i>j) THEN

G_c0=(sin(ka*j)*sin(ka*(N+1-i)))/(t_clu1*sin(ka)*sin(ka*(N+1)))

ELSE

G_c0=(sin(ka*i)*sin(ka*(N+1-j)))/(t_clu1*sin(ka)*sin(ka*(N+1)))

END IF
ELSE
write(*,*) 'This energy range is not in the gap of the barrier'

```

```

END IF
END FUNCTION G_clu_zerobias

!-----
!creates a NxN matrix containing the zero bias green's functions for the cluster
!-----
Subroutine Mg_clu_zerobias(Energy,N,theta1,theta2,MG0)
real*8,intent(in)      :: Energy,theta1,theta2
integer,intent(in)     :: N
integer                :: i,j

real*8,Dimension(N,N) :: MG0

do i=1,N
  do j=1,N
    MG0(i,j)=G_clu_zerobias(Energy,i,j,N,theta1,theta2)
  end do
end do

end subroutine Mg_clu_zerobias

!-----

Subroutine Mg_clu(Energy,N,V,theta1,theta2,Mg)

! This function calculates the green function(matrix) of isolated cluster
! under applied V bias, in a recursive way lowering the bias for a site at the time
! N :number of sites constructing the cluster
! k is the recursive variable usally we want a value for k=N
! Mg(i,j) for i,j the indexes in the green's function

real*8,intent(in)      :: Energy,V,theta1,theta2
integer,intent(in)     :: N
integer                :: i,j,k
real                   :: dV
real*8,intent(out),Dimension(N,N) :: Mg
real*8,Dimension(N,N) :: Mg0

call Mg_clu_zerobias(Energy,N,theta1,theta2,Mg0)

do k=2,N

dV=V*(k-1)/(N-1)

do i=1,N
do j=1,N

Mg(i,j)=Mg0(i,j)+Mg0(i,k)*dV*Mg0(k,j)/(1.0D0-dV*Mg0(k,k))

end do
end do

```

```

Mg0=Mg

end do
end subroutine Mg_clu

!-----
!----- END CLUSTER -----
!-----

!-----
!----- Retarded Green's Functions for the coupled barrier - leads -----
!-----

Subroutine G_cpl(Energy,V,gamma,N,theta1,theta2,Gaa,Gab,Gba,Gbb)
! the Gaa,Gab,Gba,Gbb are the retarded green's functions inside the barrier
! after coupling to the leads
! a,b the interface positions
! a the first barrier point
! b the last barrier point

use params
use matrix

real*8,intent(in)                :: Energy,gamma,V,theta1,theta2
complex*16,intent(out)           :: Gaa(2,2),Gab(2,2),Gba(2,2),Gbb(2,2)

integer,intent(in)               :: N
real*8,Dimension(N,N)           :: Mg_clu_iso

complex*16      :: g_iso_aa(2,2),g_iso_ab(2,2),g_iso_ba(2,2),g_iso_bb(2,2)
complex*16      :: S_L(2,2),S_R(2,2)
complex*16      :: a1(4,4),x1(4,2),b1(4,2),a2(4,4),x2(4,2),b2(4,2),aa2(4,4)

! we first calculate the green's functions for the isolated barrier
call Mg_clu(Energy,N,V,theta1,theta2,Mg_clu_iso)
g_iso_aa=Mg_clu_iso(1,1)*Unitmat(2)
g_iso_ab=Mg_clu_iso(1,N)*Unitmat(2)
g_iso_ba=Mg_clu_iso(N,1)*Unitmat(2)
g_iso_bb=Mg_clu_iso(N,N)*Unitmat(2)

!FIND THE SELF ENERGY FOR THE LEFT LEAD

call MSelf_Energy(Energy,0.0D0,gamma,theta1,theta2,S_L)

!FIND THE SELF ENERGY FOR THE Right LEAD

call MSelf_Energy(Energy,V,0.0D0,theta1,theta2,S_R)

!we construct the systems to solve

a1(1:2,1:2)=Unitmat(2)-matmul(g_iso_aa,S_L)
a1(1:2,3:4)=-matmul(g_iso_ab,S_R)
a1(3:4,1:2)=-matmul(g_iso_ba,S_L)
a1(3:4,3:4)=Unitmat(2)-matmul(g_iso_bb,S_R)

```

```

b1(1:2,1:2)=g_iso_aa
b1(3:4,1:2)=g_iso_ba
call inverse(a1)
x1=matmul(a1,b1)

Gaa=x1(1:2,1:2)
Gba=x1(3:4,1:2)
a2(1:2,1:2)=Unitmat(2)-matmul(g_iso_aa,S_L)
a2(1:2,3:4)=-matmul(g_iso_ab,S_R)
a2(3:4,1:2)=-matmul(g_iso_ba,S_L)
a2(3:4,3:4)=Unitmat(2)-matmul(g_iso_bb,S_R)
b2(1:2,1:2)=g_iso_ab
b2(3:4,1:2)=g_iso_bb

aa2=a2
call inverse(a2)

x2=matmul(a2,b2)

Gab=x2(1:2,1:2)
Gbb=x2(3:4,1:2)
end subroutine G_cpl

!-----
!----- Retarded Green's Functions inside the barrier coupled with leads -----
!-----

Subroutine G_cpl_inside(Energy,V,gamma,N,p,q,thetal,theta2,G)

! the G is the retarded green's functions inside the barrier
! after coupling to the leads

use params
use matrix

real*8,intent(in)                :: Energy,gamma,V,thetal,theta2
complex*16,intent(out)           :: G(2,2)
complex*16                       :: Gaa(2,2),Gab(2,2),Gba(2,2),Gbb(2,2)
complex*16                       :: DD(2,2),help1(2,2),help2(2,2),help3(2,2),help4(2,2)

integer,intent(in)               :: N,p,q
real*8,Dimension(N,N)           :: Mg_clu_iso

complex*16                       :: g_iso_aa(2,2),g_iso_ab(2,2),g_iso_ba(2,2),g_iso_bb(2,2)
complex*16                       :: g_iso_pa(2,2),g_iso_pb(2,2),g_iso_aq(2,2),g_iso_bq(2,2),g_iso_pq(2,2)
complex*16                       :: S_L(2,2),S_R(2,2)

! we first calculate the green's functions for the isolated barrier

call Mg_clu(Energy,N,V,thetal,theta2,Mg_clu_iso)

g_iso_aa=Mg_clu_iso(1,1)*Unitmat(2)
g_iso_ab=Mg_clu_iso(1,N)*Unitmat(2)
g_iso_ba=Mg_clu_iso(N,1)*Unitmat(2)

```

```

g_iso_bb=Mg_clu_iso(N,N)*Unitmat(2)
g_iso_pa=Mg_clu_iso(p,1)*Unitmat(2)
g_iso_pb=Mg_clu_iso(p,N)*Unitmat(2)
g_iso_aq=Mg_clu_iso(1,q)*Unitmat(2)
g_iso_bq=Mg_clu_iso(N,q)*Unitmat(2)
g_iso_pq=Mg_clu_iso(p,q)*Unitmat(2)

!FIND THE SELF ENERGY FOR THE LEFT LEAD

call MSelf_Energy(Energy,0.0D0,gamma,theta1,theta2,S_L)

!FIND THE SELF ENERGY FOR THE Right LEAD

call MSelf_Energy(Energy,V,0.0D0,theta1,theta2,S_R)
help1=Unitmat(2)-matmul(g_iso_aa,S_L)
call inverse(help1)

DD=Unitmat(2)-matmul(g_iso_bb,S_R)-matmul(matmul(matmul(matmul(g_iso_ba,S_L),help1),g_iso_ab),S_R)

call inverse(DD)

help2=g_iso_bq+matmul(matmul(matmul(g_iso_ba,S_L),help1),g_iso_aq)
help3=matmul(DD,help2)
help4=matmul(matmul(matmul(g_iso_pa,S_L),help1),g_iso_ab)+g_iso_pb

G=g_iso_pq+matmul(matmul(matmul(g_iso_pa,S_L),help1),g_iso_aq)+matmul(matmul(help4,S_R),help3)

end subroutine G_cpl_inside
!-----
!----- Retarded Green's Functions between the barrier and the leads -----
!-----
Subroutine G_cpl_lead_bar(Energy,V,gamma,N,lambdap,l,theta1,theta2,G_lambdap_l)
! this routine gives the retarded green's functions between the barrier and the leads
! where the first index is in the right lead and the second index is inside the barrier
use params
use matrix

real*8,intent(in)                :: Energy,gamma,V,theta1,theta2
complex*16,intent(out)           :: G_lambdap_l(2,2)
integer,intent(in)               :: N,l,lambdap
complex*16                       :: Mtp_cpl(2,2)
complex*16                       :: g_lambdap_alphap(2,2),G_ins_b1(2,2)

call G_cpl_inside(Energy,V,gamma,N,N,l,theta1,theta2,G_ins_b1)
call Mt_cpl_cre(0.0D0,Mtp_cpl)
call Mg_seminf_blk_cre(Energy,V,0.0D0,lambdap,0,theta1,theta2,g_lambdap_alphap)

!G_lambdap_l=matmul(matmul(g_lambdap_alphap,Mtp_cpl),G_ins_b1)

G_lambdap_l=matmul(g_lambdap_alphap,Mtp_cpl)
G_lambdap_l=matmul(G_lambdap_l,G_ins_b1)

end subroutine G_cpl_lead_bar

```

```

!-----
!----- Retarded Green's Functions between the barrier and the leads -----
!-----
Subroutine G_cpl_bar_lead(Energy,V,gamma,N,l,mup,theta1,theta2,G_l_mup)

! this routine gives the retarded green's functions between the barrier and the leads
! where the first index is inside the barrier and the second index is in the right lead

use params
use matrix

real*8,intent(in)           :: Energy,gamma,V,theta1,theta2
complex*16,intent(out)      :: G_l_mup(2,2)
integer,intent(in)         :: N,l,mup
complex*16                  :: Mtp_cpl(2,2)
complex*16                  :: g_alphap_mup(2,2),G_ins_lb(2,2)

call G_cpl_inside(Energy,V,gamma,N,l,N,theta1,theta2,G_ins_lb)
call Mt_cpl_cre(0.0D0,Mtp_cpl)
call Mg_seminf_blk_cre(Energy,V,0.0D0,0,mup,theta1,theta2,g_alphap_mup)

!G_l_mup=matmul(matmul(G_ins_lb,Mtp_cpl),g_alphap_mup)

G_l_mup=matmul(G_ins_lb,Mtp_cpl)
G_l_mup=matmul(G_l_mup,g_alphap_mup)

end subroutine G_cpl_bar_lead
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! this routine gives the Keldysh (minus-plus)
! Green functions between the barrier and the leads
! where the first index is inside the barrier
! and the second index is in the right lead

subroutine G_mp_bar_lead(Energy,V,gamma,N,l,mup,theta1,theta2,G_mpL,G_mpR)
use params
use matrix

real*8,intent(in)           :: Energy,V,gamma,theta1,theta2
integer,intent(in)         :: N,l,mup
complex*16,intent(out)     :: G_mpL(2,2),G_mpR(2,2)
real*8,Dimension(N,N)     :: Mg_clu_iso
complex*16                  :: G_mup_a(2,2),G_a_mup_a(2,2),GmpL(2,2),GmpR(2,2)
complex*16                  :: Ga_alpha_a(2,2),Gb_alpha_a(2,2)
complex*16                  :: Mt_cpl(2,2),Mtp_cpl(2,2)
complex*16                  :: g_alpha_alpha(2,2),gmp_alpha_alpha(2,2)
complex*16                  :: g_iso_aa(2,2),g_iso_ab(2,2)
complex*16                  :: g_iso_la(2,2),g_iso_lb(2,2)
complex*16                  :: help1(2,2),help2(2,2),help3(2,2),help4(2,2)

! we first calculate the green's functions for the isolated barrier

call Mg_clu(Energy,N,V,theta1,theta2,Mg_clu_iso)
g_iso_aa=Mg_clu_iso(1,1)*Unitmat(2)
g_iso_ab=Mg_clu_iso(1,N)*Unitmat(2)
g_iso_la=Mg_clu_iso(1,1)*Unitmat(2)

```

```

g_iso_lb=Mg_clu_iso(1,N)*Unitmat(2)

!we calculate the GF between the barrier and the right lead

call G_cpl_lead_bar(Energy,V,gamma,N,mup,1,theta1,theta2,G_mup_a)

!we need the advanced GF
G_a_mup_a=conjg(G_mup_a)
G_a_mup_a=transpose(G_a_mup_a)

call Mt_cpl_cre(gamma,Mt_cpl)
call Mt_cpl_cre(0.0D0,Mtp_cpl)

!we calculate the interface green function for the left lead
call Mg_seminf_blk_cre(Energy,0.0D0,gamma,0,0,theta1,theta2,g_alpha_alpha)

!we call the keldysh GF for the left lead interface

call gmp_iso(Energy,0.0D0,gamma,0,0,theta1,theta2,gmp_alpha_alpha)

!we call the Keldysh GF in the right lead

call G_cpl_ST(Energy,V,gamma,N,0,mup,theta1,theta2,GmpL,GmpR)

help1=Unitmat(2)-matmul(matmul(matmul(g_iso_aa,Mt_cpl),g_alpha_alpha),Mt_cpl)
call inverse(help1)

help2=matmul(matmul(matmul(matmul(g_iso_la,Mt_cpl),g_alpha_alpha),Mt_cpl),help1)

help3=matmul(help2,g_iso_ab)+g_iso_lb

help4=matmul(help3,Mtp_cpl)

G_mpl=matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(help2,g_iso_aa),Mt_cpl),
gmp_alpha_alpha),Mt_cpl),G_a_mup_a)+
& matmul(matmul(matmul(matmul(g_iso_la,Mt_cpl),gmp_alpha_alpha),
Mt_cpl),G_a_mup_a)+matmul(help4,GmpL)

G_mpr=matmul(help4,GmpR)

end subroutine G_mp_bar_lead

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! this routine gives the Keldysh (minus-plus)
! Green functions between the barrier and the lead!
! where the first index is in the right lead
! and the second index is in the barrier !!!!!!!!!!!!!!!

subroutine G_mp_lead_bar(Energy,V,gamma,N,lambdap,1,theta1,theta2,G_mpl,G_mpr)
use params
use matrix

real*8,intent(in)          :: Energy,V,gamma,theta1,theta2
integer,intent(in)        :: N,1,lambdap

```

```

complex*16,intent(out)      :: G_mpL(2,2),G_mpR(2,2)
real*8,Dimension(N,N)     :: Mg_clu_iso
complex*16                 :: Gal(2,2),Gbl(2,2),Gla(2,2),Glb(2,2)
complex*16                 :: Ga_alpha_a(2,2),Gb_alpha_a(2,2)
complex*16                 :: Mt_cpl(2,2),Mtp_cpl(2,2)
complex*16                 :: g_alpha_alpha(2,2),gmp_alpha_alpha(2,2)
complex*16                 :: g_alphap_alphap(2,2),gmp_alphap_alphap(2,2)
complex*16                 :: g_iso_aa(2,2),g_iso_ab(2,2),g_iso_ba(2,2),g_iso_bb(2,2)
complex*16                 :: g_iso_la(2,2),g_iso_lb(2,2)
,g_lambdap_alphap(2,2),gmp_lambdap_alphap(2,2)
complex*16                 :: D1(2,2),D2(2,2),help0(2,2)
,help1(2,2),help2(2,2),help3(2,2),help4(2,2)
complex*16                 :: help1_inv(2,2),help2_inv(2,2)

! we first calculate the green's functions for the isolated barrier

call Mg_clu(Energy,N,V,theta1,theta2,Mg_clu_iso)
g_iso_aa=Mg_clu_iso(1,1)*Unitmat(2)
g_iso_ab=Mg_clu_iso(1,N)*Unitmat(2)
g_iso_ba=Mg_clu_iso(N,1)*Unitmat(2)
g_iso_bb=Mg_clu_iso(N,N)*Unitmat(2)
g_iso_la=Mg_clu_iso(1,1)*Unitmat(2)
g_iso_lb=Mg_clu_iso(1,N)*Unitmat(2)

!we calculate the advanced GF between inside the barrier

call G_cpl_inside(Energy,V,gamma,N,1,1,theta1,theta2,Gla)
call G_cpl_inside(Energy,V,gamma,N,1,N,theta1,theta2,Glb)

Gal=conjg(Gla)
Gal=transpose(Gal)
Gbl=conjg(Glb)
Gbl=transpose(Gbl)

call Mt_cpl_cre(gamma,Mt_cpl)
call Mt_cpl_cre(0.0D0,Mtp_cpl)

!we calculate the interface green function for the left lead
call Mg_seminf_blk_cre(Energy,0.0D0,gamma,0,0,theta1,theta2,g_alpha_alpha)
call Mg_seminf_blk_cre(Energy,V,0.0D0,0,0,theta1,theta2,g_alphap_alphap)
call Mg_seminf_blk_cre(Energy,V,0.0D0,lambdap,0,theta1,theta2,g_lambdap_alphap)

!we call the keldysh GF for the left lead interface

call gmp_iso(Energy,0.0D0,gamma,0,0,theta1,theta2,gmp_alpha_alpha)
call gmp_iso(Energy,V,0.0D0,0,0,theta1,theta2,gmp_alphap_alphap)
call gmp_iso(Energy,V,0.0D0,lambdap,0,theta1,theta2,gmp_lambdap_alphap)

help0=matmul(g_lambdap_alphap,Mtp_cpl)

help1_inv=Unitmat(2)-matmul(matmul(matmul(g_alpha_alpha,Mt_cpl),g_iso_aa),Mt_cpl)

help1=help1_inv

```



```

call inverse(help1_inv)

help2_inv=Unitmat(2)-matmul(matmul(matmul(g_alphap_alphap,Mtp_cpl),g_iso_bb),Mtp_cpl)

help2=help2_inv

call inverse(help2_inv)

help3=matmul(matmul(matmul(g_alpha_alpha,Mt_cpl),g_iso_ab),Mtp_cpl)

help4=matmul(matmul(matmul(g_alphap_alphap,Mtp_cpl),g_iso_ba),Mt_cpl)

D1=help1-matmul(matmul(help3,help2_inv),help4)

call inverse(D1)

D2=help2-matmul(matmul(help4,help1_inv),help3)

call inverse(D2)

G_mpL=matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(help0,g_iso_ba),Mt_cpl),D1)
,gmp_alpha_alpha),Mt_cpl),Gal)+&
matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(help0
,g_iso_bb),Mtp_cpl),D2),&
g_alphap_alphap),Mtp_cpl),g_iso_ba),Mt_cpl),help1_inv),gmp_alpha_alpha),Mt_cpl),Gal)

G_mpR=matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(help0,g_iso_bb),Mtp_cpl),D2)
,gmp_alphap_alphap),Mtp_cpl),Gbl)+&
matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(help0
,g_iso_ba),Mt_cpl),D1),&
g_alpha_alpha),Mt_cpl),g_iso_ab),Mtp_cpl),help2_inv),gmp_alphap_alphap),Mtp_cpl),Gbl)+&
matmul(matmul(gmp_lambdap_alphap,Mtp_cpl),Gbl)

end subroutine G_mp_lead_bar

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
! this routine gives the diagonal Keldysh (minus-plus) Green functions inside the barrier!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
subroutine G_mp_inside(Energy,V,gamma,N,l,theta1,theta2,G_mpL,G_mpR)
use params
use matrix

real*8,intent(in)           :: Energy,V,gamma,theta1,theta2
integer,intent(in)         :: N,l
complex*16,intent(out)     :: G_mpL(2,2),G_mpR(2,2)
real*8,Dimension(N,N)     :: Mg_clu_iso
complex*16                 :: Gal(2,2),Gbl(2,2),Gla(2,2),Glb(2,2)
complex*16                 :: Ga_alpha_a(2,2),Gb_alpha_a(2,2)
complex*16                 :: Mt_cpl(2,2),Mtp_cpl(2,2)
complex*16                 :: g_alpha_alpha(2,2),gmp_alpha_alpha(2,2)
complex*16                 :: g_alphap_alphap(2,2),gmp_alphap_alphap(2,2)
complex*16                 :: g_iso_aa(2,2),g_iso_ab(2,2),g_iso_ba(2,2),g_iso_bb(2,2)
complex*16                 :: g_iso_la(2,2),g_iso_lb(2,2)
complex*16                 :: D1(2,2),D2(2,2),help1(2,2),help2(2,2),help3(2,2),help4(2,2)
complex*16                 :: help1_inv(2,2),help2_inv(2,2)

```

```

! we first calculate the green's functions for the isolated barrier

call Mg_clu(Energy,N,V,theta1,theta2,Mg_clu_iso)
g_iso_aa=Mg_clu_iso(1,1)*Unitmat(2)
g_iso_ab=Mg_clu_iso(1,N)*Unitmat(2)
g_iso_ba=Mg_clu_iso(N,1)*Unitmat(2)
g_iso_bb=Mg_clu_iso(N,N)*Unitmat(2)
g_iso_la=Mg_clu_iso(1,1)*Unitmat(2)
g_iso_lb=Mg_clu_iso(1,N)*Unitmat(2)

!we calculate the advanced GF between inside the barrier

call G_cpl_inside(Energy,V,gamma,N,1,1,theta1,theta2,Gla)
call G_cpl_inside(Energy,V,gamma,N,1,N,theta1,theta2,Glb)

Gal=conjg(Gla)
Gal=transpose(Gal)
Gbl=conjg(Glb)
Gbl=transpose(Gbl)

call Mt_cpl_cre(gamma,Mt_cpl)
call Mt_cpl_cre(0.0D0,Mtp_cpl)

!we calculate the interface green function for the left lead
call Mg_seminf_blk_cre(Energy,0.0D0,gamma,0,0,theta1,theta2,g_alpha_alpha)
call Mg_seminf_blk_cre(Energy,V,0.0D0,0,0,theta1,theta2,g_alphap_alphap)

!we call the keldysh GF for the left lead interface

call gmp_iso(Energy,0.0D0,gamma,0,0,theta1,theta2,gmp_alpha_alpha)
call gmp_iso(Energy,V,0.0D0,0,0,theta1,theta2,gmp_alphap_alphap)

help1_inv=Unitmat(2)-matmul(matmul(matmul(g_alpha_alpha,Mt_cpl),g_iso_aa),Mt_cpl)

help1=help1_inv

call inverse(help1_inv)

help2_inv=Unitmat(2)-matmul(matmul(matmul(g_alphap_alphap,Mtp_cpl),g_iso_bb),Mtp_cpl)

help2=help2_inv

call inverse(help2_inv)

help3=matmul(matmul(matmul(g_alpha_alpha,Mt_cpl),g_iso_ab),Mtp_cpl)

help4=matmul(matmul(matmul(g_alphap_alphap,Mtp_cpl),g_iso_ba),Mt_cpl)

D1=help1-matmul(matmul(help3,help2_inv),help4)

call inverse(D1)

D2=help2-matmul(matmul(help4,help1_inv),help3)

```

```
call inverse(D2)

G_mpL=matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(g_iso_la,Mt_cpl),D1),gmp_alpha_alpha),Mt_cpl)
,Gal)+&
matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(g_iso_lb,Mtp_cpl),D2),help4),help1_inv)
,gmp_alpha_alpha),Mt_cpl),Gal)

G_mpR=matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(g_iso_lb,Mtp_cpl),D2),gmp_alphap_alphap),Mtp_cpl)
,Gbl)+&
matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(matmul(g_iso_la,Mt_cpl),D1),help3),help2_inv)
,gmp_alphap_alphap),Mtp_cpl),Gbl)

end subroutine G_mp_inside
!----- END COUPLED -----
end module
```

Βιβλιογραφία

- [1] J.C. Slonczewski. *Phys. Rev. B*, 39:6995, 1989.
- [2] J.C. Slonczewski, *J. Magn. Magn. Mat.*, 159:L1 1996.
- [3] L. Berger. *Phys. Rev. B*, 54:9353, 1996.
- [4] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* 61, 2472 (1988) ; G. Binasch, P. Grunberg, F.Saurenbach, and W. Zinn, *Phys. Rev. B* 39, 4828 (1989); J. Barnas, A. Fuss, R. E. Camley, P. Grunberg, and W. Zinn, *Phys. Rev. B*, 42, 8110 (1990).
- [5] J. S. Moodera, L. R. Kinder, T. M. Wong, and R. Meservey, *Phys. Rev. Lett.* 74, 3273 (1995).
- [6] M. Tsoi, A. G. M. Jansen, J. Bass, W.-C. Chiang, M. Seck, V. Tsoi, and P. Wyder, *Nature (London)* 406, 46 (1998); E. B. Myers, D. C. Ralph, J. A. Katine, R. N. Louie, and R. A. Buhrman, *Science* 285, 867 (1999); J. E. Wegrowe, D. Kelly, T. Truong, Ph. Guittienne, and J. Ph. Ansermet, *Europhys. Lett.* 56, 748 (2001).
- [7] J.A. Katine, F.J. Albert, R.A. Buhrman, E.B. Myers, and D.C. Ralph. *Phys. Rev. Lett.*, 84:3149, 2000.
- [8] J. Grollier, V. Cros, A. Hamzic, J. M. George, H. Jaffres, A. Fert, G. Faini, J. Ben Youssef, and H. Legall, *Appl. Phys. Lett.* 78, 3663 (2001); J. Z. Sun, D. J. Monsma, D. W. Abraham, M. J. Rooks, and R. H. Koch, *ibid.* 81, 2202 (2002); S. Urazhdin, N. O. Birge, W. P. Pratt, and J. Bass, *Appl. Phys. Lett.* 84, 1516 (2004).
- [9] E.B. Myers, D.C. Ralph, J.A. Katine, F.J. Albert, R.A. Buhrman, *J. Appl. Phys.* 87, 5502 (May 2000)
- [10] W.H. Butler, X.-G. Zhang, T.C. Schulthess, and J.M. MacLaren. *Phys. Rev. B*, 63:054416, 2001.
- [11] A. Driskill-Smith, Non-Volatile Memories Workshop (2010).
- [12] S.S.P. Parkin, C. Kaiser, A. Panchula, P.M. Rice, B. Hughes, M. Samant, and S.-H. Yang. *Nat. Matter.*, 3:862, 2004.
- [13] Y. Huai, F. Albert, P. Nguyen, M. Pakala, and T. Valet. *Appl. Phys. Lett.*, 84:3118, 2004.
- [14] G.D. Fuchs, N.C. Emley, I.N. Krivorotov, P.M. Braganca, E.M. Ryan, S.I. Kiselev, J.C. Sankey, D.C. Ralph, R.A. Buhrman, and J.A. Katine. *Appl. Phys. Lett.*, 85:1205, 2004.
- [15] E. Chen, D. Apalkov, Z. Diao, A. Driskill-Smith, D. Druist, D. Lottis, V Nikitin, X. Tang, S. Watts, S. Wang, S. Wolf, A. Ghosh, J. Lu, S. Poon, M. Stan, W. Butler, S. Gupta, C. Mewes, T. Mewes, and P. Visscher, *IEEE Trans. on Magnetics* 46, 6, 1873 (2010).
- [16] M. Hosomi, H. Yamagishi, Z. Yamamoto, K. Bessho, Y. Higo, K. Yamane, H. Yamada, M. Shoji, H. Hachino, C. Fukumoto, H. Nagao, and H. Kano. *IEDM Technical Digest. IEEE International*, page 459, 2005.
- [17] T. Kawahara, R. Takemura, K. Miura, J. Hayakawa, S. Ikeda, Y. Lee, R. Sasaki, Y. Ito, T. Meguro, F. Matsukura, H. Takahashi, H. Matsuoka, *ISSCC Tech. Dig.*, 480 (2007).
- [18] Everspin technologies, Inc (2012). Everspin debuts first Spin-Torque MRAM for high performance storage systems [Press Release]. Retrieved from <http://everspin.com/>
- [19] S. Yuasa, T. Nagahama, Y. Suzuki, and K. Ando. *Nat. Matter.*, 3:868, 2004.

- [20] S. Parkin, Jiang Xin, C. Kaiser, A. Panchula, K. Roche, and M. Samant. *Proceedings of the IEEE*, 91:661, 2003.
- [21] J.M. Daughton. *J. Appl. Phys.*, 81:3758, 1997.
- [22] Y.M. Lee, J. Hayakawa, S. Ikeda, F. Matsukura, and H. Ohno. *Appl. Phys. Lett.*, 90:212507, 2007.
- [23] J. Mathon and A. Umerski. *Phys. Rev. B*, 63:220403(R), 2001.
- [24] J. Hayakawa, K. Ito, S. Kokado, M. Ichimura, A. Sakuma, M. Sugiyama, H. Asano, and M. Matsui. *J. Appl. Phys.*, 91:8792, 2002.
- [25] Dexin Wang, Cathy Nordman, James M. Daughton, Zhenghong Qian, and Jonathon Fink. *IEEE Transactions on Magnetics*, 40:2269, 2004.
- [26] H. Boeve, E. Girgis, J. Schelten, J. De Boeck, and G. Borghs. *Appl. Phys. Lett.*, 76:1048, 2000.
- [27] Manish Sharma, Shan X. Wang, and Janice H. Nickel. *Phys. Rev. Lett.*, 82(3):616-619, Jan 1999.
- [28] S. O. Valenzuela, D. J. Monsma, C. M. Marcus, V. Narayanamurti, and M. Tinkham. *Phys. Rev. Lett.*, 94:196601, 2005.
- [29] C. Tiusan, J. Faure-Vincent, C. Bellouard, M. Hehn, E. Jouguelet, and A. Schuhl. *Phys. Rev. Lett.*, 93:106602, 2004.
- [30] S. Zhang, P.M. Levy, A. Marley, and S. S. Parkin. *Phys. Rev. Lett.*, 79:3744, 1997.
- [31] J. S. Moodera, J. Nowak, and Rene J.M. van de Veerdonk. *Phys. Rev. Lett.*, 80:2941, 1998.
- [32] J. Zhang and R. M. White. *J. Appl. Phys.*, 83:6512, 1998.
- [33] Fei fei Li, Zheng zhong Li, Ming wen Xiao, Jun Du, Wang Xu, An Hu, and John Q. Xiao. *J. Appl. Phys.*, 95:7243, 2004.
- [34] Christian Heiliger, Peter Zahn, Bogdan Yu. Yavorsky, and Ingrida Mertig. *Phys. Rev. B*, 72:180406, 2005.
- [35] Christian Heiliger, Peter Zahn, and Ingrid Mertig. *Journal of Magn. and Magn. Mat.*, 316:478, 2007.
- [36] J.C. Slonczewski. *Phys. Rev. B*, 71:024411, 2005.
- [37] I. Theodonis, N. Kioussis, A. Kalitsov, M. Chshiev, and W. H. Butler. *Phys. Rev. Lett.*, 97:237205, 2006.
- [38] P.M. Levy and A. Fert. *Phys. Rev. Lett.*, 97:097205, 2006.
- [39] M. Wilczynski, J. Barnas, and R. Swirkowicz. *Phys. Rev. B*, 77:054434, 2008.
- [40] Jiang Xiao, Gerrit E.W. Bauer, and Arne Brataas. *Phys. Rev. B*, 77:224419, 2008.
- [41] Christian Heiliger and M.D. Stiles. *Phys. Rev. Lett.*, 100:186805, 2008.
- [42] A. Manchon, N. Ryzhanova, A. Vedyayev, M. Chshiev, and B. Dieny. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 20:145208, 2008.
- [43] M. Tsoi, A.G. Jansen, J. Bass, W.-C Chiang, M. Seck, V. Tsoi, and P. Wyder. *Phys. Rev. Lett.*, 81:493, 1998.
- [44] J. C. Sankey, Y.-T. Cui, J. Z. Sun, J. Slonczweski, R. A. Buhrman, and D. C. Ralph. *Nature Physics*, 4:67, 2008.

-
- [45] H. Kubota, A. Fukushima, K. Yakushiji, T. Nagahama, S. Yuasa, K. Ando, H. Maehara, Y. Nagamine, K. Tsunekawa, D. Djayaprawira, N. Watanabe, and Y. Suzuki. *Nature Physics*, 4:37, 2008.
- [46] S. Petit, C. Baraduc, C. Thirion, U. Ebels, Y. Liu, M. Li, P. Wang, and B. Dieny. *Phys. Rev. Lett.*, 98:077203, 2007.
- [47] Z. Li, S. Zhang, Z. Diao, Y. Ding, X. Tang, D. M. Apalkov, Z. Yang, K. Kawabata, and Y. Huai. *Phys. Rev. Lett.*, 100:246602, 2008.
- [48] S.I. Kiselev, J. C. Sankey, I. N. Krivorotov, N. C. Emley, R. J. Schoelkopf, R. A. Buhrman, and D. C. Ralph. *Nature*, 425:380, 2003.
- [49] S. Kaka, M. R. Pufall, W. H. Rippard, T. J. Silva, S. E. Russek, and J. A. Katine. *Nature*, 437:389, 2005.
- [50] F.B. Manchoff, N. D. Rizzo, B. N. Engel, and S. Tehrani. *Nature*, 437:393, 2005.
- [51] M. Chshiev, I. Theodonis, A. Kalitsov, N. Kioussis, and W. H. Butler. *IEEE Trans. Mag.*, 44:2543, 2008.
- [52] J.A. Katine and Eric F. Fullerton. *J. Magn. Magn. Mat.*, 320:1217, 2008.
- [53] Paul M. Haney, Christian Heiliger, and Mark D. Stiles. *Physical Review B*, 79:054405, 2009.
- [54] C. Caroli, R. Combescot, P. Nozieres, and D. Saint-James. *J. Phys. C: Solid St. Phys.*, 4:916, 1971.
- [55] E. M. Lifshitz and L. P. Pitaevskii. *Physical Kinetics, Course of Theoretical Physics*, volume 10. Pergamon and Oxford, 1981.
- [56] M. Chshiev, A. Kalitsov, I. Theodonis, N. Kioussis, and W. H. Butler. *Phys. Rev. B* 79:174416, 2009.
- [57] M.D. Stiles and A. Zangwill. *Phys. Rev. B*, 66:014407, 2002.
- [58] D. M. Edwards, F. Federici, J. Mathon, and A. Umerski. *Phys. Rev. B*, 71:054407, 2005.
- [59] A. Brataas, G. E.W. Bauer, and P. J. Kelly. *Phys. Rep.*, 427:157, 2006.
- [60] A. Kalitsov, I. Theodonis, N. Kioussis, M. Chshiev, W. H. Butler, and A. Vedyayev. *J. Appl. Phys.*, 99:08G501, 2006.
- [61] M. Stamenova, Maria S. Sanvito, and T. N. Todorov. *Phys. Rev. B*, 72:134407, 2005.
- [62] S. Zhang and Z. Li. *Phys. Rev. Lett.*, 93:127204, 2004.
- [63] A.M. Deac, Hitoshi Kubota Akio Fukushima, Hiroki Maehara, Yoshishige Suzuki, Shinji Yuasa, Yoshinori Nagamine, Koji Tsunekawa, David D. Djayaprawira, and Naoki Watanabe. *Nat. Phys.*, 4:803, 2008.
- [64] W. F. Brinkman, R. C. Dynes, and J. M. Rowell. *Journal of Applied Physics*, 41:1915, 1970.
- [65] K.D. Belashchenko, E. Y. Tsymbal, M. van Schilfgaarde, D. A. Stewart, I.I. Oleinik, and S.S. Jaswal. *Phys. Rev. B*, 69:174408, 2004.
- [66] X.-G. Zhang and W. H. Butler. *J. Phys.: Cond. Matter*, 15:R1603, 2003.
- [67] Terrilyn M. Wong J. S. Moodera, Lisa R. Kinder and R. Meservey. *Phys. Rev. Lett.*, 74:3273, 1995.
- [68] H. Kubota Y. Ando Sung-Jin Ahn, T. Kato and T. Miyazaki. *Appl. Phys. Lett.*, 86:102506, 2005.
- [69] I. Žutić , J. Fabian, S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* , 76:323, 2004.
- [70] J.C. Slonczewski, *Phys. Rev. B*, 39:6995, 1989;

- [71] S. Zhang, P.M. Levy and A. Fert, *Phys. Rev. Lett.*, 88: 236601 2002.
- [72] M.D. Stiles and J. Miltat, in *Spin Dynamics in Confined Magnetic Structures III*(Springer, Berlin, 2006) p. 225.
- [73] A. A. Tulapurkar, Y. Suzuki, A. Fukushima, H. Kubota, H. Maehara, K. Tsunekawa, D. D. Djayaprawira, N. Watanabe, and S. Yuasa, *Nature (London)*, 438:339, 2005.
- [74] J. C. Sankey, , P. M. Braganca, A. G. F. Garcia, I. N. Krivorotov, R. A. Buhrman, and D. C. Ralph, *Phys. Rev. Lett.*, 96:227601, 2006.
- [75] G. D. Fuchs, J. A. Katine, S. I. Kiselev, D. Mauri, K. S. Wooley, D. C. Ralph, and R. A. Buhrman, *Phys. Rev. Lett.*, 96:186603, 2006.
- [76] S. Urazhdin, H. Kurt, M. AlHajDarwish, Norman O. Birge, W. P. Pratt, Jr., and J. Bass, *J. Appl. Phys.*, 97:10C701, 2005.
- [77] Y. Huai, F. J. Albert, P. Nguyen, M. Pakala, and T. Valet, *Appl. Phys. Lett.*, 84:3118, 2004.
- [78] A. G. Petukhov, A. N. Chantis, and D. O. Demchenko, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 107205 (2002).
- [79] Z.-Y. Lu, X.-G. Zhang, and S.T. Pantelides, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 207210 (2005).
- [80] Z.-M. Zeng, X.-F. Han, W.-S. Zhan, Y. Wang, Z. Zhang, and S.Zhang, *Phys. Rev. B* **72**, 054419 (2005).
- [81] T. Nozaki, N. Tezuka, and K. Inomata, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 027208 (2006) .
- [82] K. Yakushiji, F. Ernult, H. Imamura, K. Yamane, S. Mitani, K. Takanashi, S. Takahashi, S. Maekawa and H. Fujimori, *Nat. Matter.* **4**, 57 (2005).
- [83] J. Hong, R.Q. Wu, R.B. Muniz, J. Magn. *Magn. Mater.* **270**, 298 (2004).
- [84] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [85] I. Theodonis, Nicholas Kioussis, Alan Kalitsov, Mairbek Chshiev, and W. H. Butler, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 237205 (2006).
- [86] E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics* (Springer-Verlag, Berlin, 1983).
- [87] M. Braun, J. König and J. Martinek, *Phys. Rev. B* **70**, 195345 (2004).
- [88] J. König and J. Martinek *Phys. Rev. Lett.* **90**, 166602 (2003).
- [89] S. O. Demokritov *J. Phys.D: Appl. Phys.* **31** 925 (1998).
- [90] J. d'Albuquerque e Castro , M.S. Ferreira, and R. B. Muniz *Phys. Rev. B*, **49**, 16062 (1994).
- [91] J. C. Slonczewski *J. Appl. Phys.* **73**, 105957 (1993);*J. Magn. Magn. Mater.* **150**, 13 (1995).
- [92] C. Heide, R. J. Elliot, and N. S. Wingreen, *Phys. Rev. B* **59**, 4287 (1999); C-Y You, and S. D. Bader, *J. Magn. Magn. Mater.* **195**, 488 (1999).
- [93] I. Theodonis, A. Kalitsov, and N. Kioussis, *Phys. Rev. B* **76**, 224406 (2007).
- [94] Yoshishige Suzuki and Hitoshi Kubota (Spin Torques in Magnetic Tunnel Junctions.) in *Handbook of Spin Transport and Magnetism* (2011)

