



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΔΠΜΣ ΦΥΣΙΚΗ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΕΣ
ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

ΜΕΛΕΤΗ ΔΙΟΔΟΥ $FM/FI/NM$
ΜΕ ΤΗΝ ΜΕΘΟΔΟ ΤΩΝ
ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΔΙΑΦΟΡΩΝ

Ι. ΠΑΝΤΕΛΟΠΟΥΛΟΣ

Επιβλέπων καθηγητής
Κ. ΠΑΡΑΣΚΕΥΑΪΔΗΣ

ΝΟΕΜΒΡΙΟΣ 2010

Περίληψη

Η παρούσα μεταπτυχιακή διπλωματική εργασία αναφέρεται στην μελέτη μιας μαγνητικής διόδου του τύπου *FM/FI/NM* με την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Το κύριο χαρακτηριστικό μιας τέτοιας διόδου είναι το φαινόμενο *spinfiltering*, ο διαχωρισμός, λόγω της ύπαρξης μαγνητικού πεδίου ή και θερμοκρασίας μικρότερης της θερμοκρασίας μετάβασης, των καταστάσεων των ηλεκτρονίων ανάλογα με την διεύθυνση του σπιν. Η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών είναι μια προσεγγιστική μέθοδος που επιτρέπει την μοντελοποίηση υπο μορφή κώδικα της διόδου και χρησιμοποιείται για την μελέτη αυτής και την εξαγωγή συμπερασμάτων.

Το Κεφάλαιο 1 αποτελεί μια εισαγωγή στην θεωρία της στερεάς κατάστασης της ύλης. Περιγράφει τα δύο επικρατέστερα μοντέλα αλληλεπίδρασης των ηλεκτρονίων με την ύλη, το μοντέλο των ελεύθερων ηλεκτρονίων και το μοντέλο του ισχυρού δεσμού και κάποιες απλές εφαρμογές αυτών. Η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών προσεγγίζει το μοντέλο του ισχυρού δεσμού.

Το Κεφάλαιο 2 παρουσιάζει αναλυτικά το φαινόμενο *spinfiltering*. Αναφέρεται στην κύρια φυσική του ερμηνεία, στην δόμη των βασικών υλικών που εμφανίζουν το φαινόμενο αυτό, στα παρατηρούμενα μεγέθη εξαιτίας αυτού καθ'ώς και στις εναλλακτικές ερμηνείες που το αποδίδονται. Επιπλέον παρουσιάζει τις τεχνολογικές εφαρμογές που έχουν προκύψει ή και θα προκύψουν βασιζόμενες σε αυτό.

Το κεφάλαιο 3 αποτελεί την εισαγωγή στην μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών με την παρουσίαση της ατομικής θεώρησης της ηλεκτρικής αντίστασης, ενώ το Κεφάλαιο 4 περιγράφει αναλυτικά την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών για απλά φυσικά προβλήματα.

Το Κεφάλαιο 5 γενικεύει την μέθοδο αυτή σε πιο σύνθετα φυσικά προβλήματα, όπως αυτά των στερεών και περιγράφει τα αποτελέσματα της εφαρμογής της μεθόδου. Στο δεύτερο μέρος του κεφαλαίου αυτού παρουσιάζεται η χρήση της συνάρτησης *Green*, που είναι απόρροια της μεθόδου, για την μελέτη ενός πραγματικού συστήματος και τον υπολογισμό χρήσιμων προς μελέτη ποσοτήτων.

Το Κεφάλαιο 6 είναι η εφαρμογή της μεθόδου πάνω στην συγκεκριμένη δίοδο που μελετάμε. Αρχικά παρουσιάζεται ο φορμαλισμός του φυσικού προβλήματος, στην συνέχεια περιγράφεται το μοντέλο που προκύπτει από την μέθοδο και πάνω σε αυτό πραγματοποιείται η μελέτη σχετικά με τις διάφορες παραμέτρους. Τέλος παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της μελέτης και τα συμπεράσματα που προέκυψαν από αυτήν.

Abstract

The subject of this master thesis is the study of a magnetic tunnel junction, FM/FI/NM, with the use of the finite differences method. The main characteristic of such junctions is that they are subjected to the spin filter phenomenon, that is the splitting of the density of states of the electrons based on their spin orientation, due to the presence of magnetic field or under a certain temperature. The method of finite differences is a numerical method that helps us to model the physical problem in code form so that it can be used to the study of the junction and the extraction of conclusions.

In Chapter 1 an introduction to the theory of solid state matter is made. The basic principles of the free electron model and the tight binding model are described. The finite differences method is an approximation to the latter model.

In Chapter 2 the spin filter phenomenon is presented. It refers to the main interpretation of the phenomenon, to the structure of the basic materials that are used to study it and also to the observable physical quantities due to it and the alternative interpretations of it. Furthermore it presents the main technological applications from now to the future.

In Chapter 3 an introduction is made to the finite differences method by introducing the atomic view of conductivity, meanwhile in Chapter 4 the method is described for simple problems.

In Chapter 5 the method is generalized to more complex problems such as in solids and presents the results of the use of the method. In its second part, the Green's function method is presented for the study of an real system and the computation of useful quantities.

In Chapter 6 the application of the method is presented on the under study junction. The first part refers to the formalism of the problem while the second part refers to the actual model that results from the method's application. In the last part the results of the study and the conclusion that are extracted from the study are presented.

Περιεχόμενα

1	<u>ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΘΕΩΡΙΑΣ</u>	4
1.1	<u>Μοντέλο των ελεύθερων ηλεκτρονίων</u>	4
1.1.1	<u>Ενεργειακά επίπεδα σε μία διάσταση</u>	4
1.1.2	<u>Ενεργειακά επίπεδα σε τρεις διαστάσεις</u>	6
1.2	<u>ΜΟΝΤΕΛΟ ΙΣΧΥΡΟΥ ΔΕΣΜΟΥ</u>	9
1.2.1	<u>Γενικός φορμαλισμός</u>	10
1.2.2	<u>Εφαρμογή για ένα ατομικό τροχιακό τυπου s</u>	13
1.2.3	<u>Γενικά χαρακτηριστικά της προσέγγισης ισχυρού δεσμού</u>	15
2	<u>Φαινόμενο Spin Filter</u>	17
2.1	<u>Εισαγωγή</u>	17
2.2	<u>Φαινόμενο φιλτραρίσματος σπιν (Spin Filtering)</u>	18
2.2.1	<u>Δομή των χαλκογενιδίων του Eu</u>	20
2.2.2	<u>Παρατηρούμενα μεγέθη</u>	21
2.2.3	<u>Εναλλακτικές προσεγγίσεις</u>	25
2.3	<u>Τεχνολογικές Εφαρμογές - Spintronics</u>	27
2.3.1	<u>Εισαγωγή</u>	27
2.3.2	<u>Μαγνητικές Μνήμες -MRAM</u>	27
2.3.3	<u>Σπιν Τρανζίστορ - SFET</u>	30
2.3.4	<u>Κβατνικοί Υπολογιστές -qubit</u>	31

3	<u>Ατομική θεώρηση της αντίστασης</u>	33
3.1	<u>Εισαγωγή</u>	33
4	<u>Μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών</u>	41
4.1	<u>Εισαγωγή</u>	41
4.2	<u>Μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών</u>	41
4.2.1	<u>Σωματίδιο σε κουτί</u>	43
4.2.2	<u>Σωματίδιο σε 3D κουτί</u>	47
4.3	<u>Δομές Ζώνης</u>	47
4.3.1	<u>Μονοδιάστατο στερεό</u>	48
4.3.2	<u>Γενίκευση αποτελεσμάτων</u>	50
4.4	<u>Κβάντωση των διαστάσεων</u>	53
4.4.1	<u>Πυκνότητα καταστάσεων</u>	54
5	<u>Διεύρυνση ενεργειακών επιπέδων</u>	58
5.1	<u>Ανοιχτά συστήματα</u>	58
5.2	<u>Τοπική πυκνότητα των καταστάσεων</u>	63
5.3	<u>Χρόνος Ζωής</u>	67
5.4	<u>Υπολογισμός συντελεστή μετάδοσης</u>	71
6	<u>Μελέτη μαγνητικής διόδου FM/FI/NM</u>	74
6.1	<u>Εισαγωγή</u>	74
6.1.1	<u>Μοντέλο και φορμαλισμός</u>	74
6.2	<u>Εφαρμογή της μεθόδου των πεπερασμένων διαφορών</u>	76
6.2.1	<u>Υπολογισμος ρευμάτων με την χρήση της συνάρτησης <i>Green</i></u>	81
6.3	<u>Μελέτη διόδου FM/FI/NM</u>	83
6.3.1	<u>Μελέτη ρευμάτων σπιν</u>	84

6.3.2	<u>Μελέτη της μαγνητοαντίστασης <i>TMR</i></u>	86
6.4	<u>Συμπεράσματα</u>	96
A'	Κώδικας <i>MATLAB</i>	99

Κεφάλαιο 1

ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΘΕΩΡΙΑΣ

1.1 Μοντέλο των ελεύθερων ηλεκτρονίων

Το μοντέλο των ελεύθερων ηλεκτρονίων (*free electron approximation*) αποτελεί μία προσέγγιση για την κατανόηση των φυσικών ιδιοτήτων των μετάλλων και όχι μόνο. Η προσέγγιση αυτή αναπτύχθηκε πριν την ανακάλυψη της Κβαντικής Μηχανικής με συνέπεια τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας να θεωρούνται ελεύθερα σωματίδια που υπακούν στους νόμους της Κλασικής Μηχανικής, του Ηλεκτρομαγνητισμού και της Κλασικής Στατιστικής Boltzmann. Σύμφωνα με το μοντέλο αυτό τα ηλεκτρόνια μέσα σε ένα μέταλλο θεωρούνται ότι είναι τελείως ελεύθερα να κινηθούν υπό την επίδραση του πεδίου που δημιουργεί το περιοδικό πλέγμα των ιόντων του μετάλλου χωρίς να σχεδάζονται από τους πυρήνες των ιόντων, αλλά και του πεδίου που δημιουργείται από τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας θεωρώντας αμελητέες τις οπίες σχεδάσεις συμβαίνουν μεταξύ των ηλεκτρονίων. Η δυναμική ενέργεια των ηλεκτρονίων θα πρέπει να είναι περιοδική ανάλογα με την περίοδο του πλέγματος όμως με την παραπάνω προσέγγιση το περιοδικό δυναμικό μέσα στα μέταλλα αντικαθίστανται από ένα σταθερό δυναμικό ίσο με το μηδέν. Επομένως τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας είναι δυνατόν να θεωρηθούν ότι αποτελούν ένα αέριο ελευθερών ηλεκτρονίων (*free electron Fermi gas*) που βρίσκεται περιορισμένο μέσα σε ένα κουτι με τις διαστάσεις του υπο μελέτη δείγματος. Τα σωματίδια στο αέριο αυτό κινούνται σε ένα πλαίσιο που είναι θετικά φορτισμένο και συγκρατεί το αέριο των σωματιδίων εξασφαλίζοντας την ουδετερότητα του δείγματος. Το θετικό πλαίσιο προέρχεται από τα θετικά ιόντα που θεωρούνται ομοιόμορφα κατανεμημένα με αποτέλεσμα η δύναμη που ασκείται σε κάθε ηλεκτρόνιο από το πλαίσιο να είναι μηδέν.

1.1.1 Ενεργειακά επίπεδα σε μία διάσταση

Ας θεωρήσουμε ένα αέριο ελεύθερων ηλεκτρονίων σε μία διάσταση, λαμβάνοντας υπόψη την κβαντική θεωρία και την απαγορευτική αρχή του Pauli. Ένα ηλεκτρόνιο μάζας m βρίσκεται περιορισμένο σε ένα μήκος L από φράγματα απείρου ύψους.

Η κυματοσυνάρτηση $\psi_n(x)$ του ηλεκτρονίου είναι μια λύση της εξίσωσης Schrödinger με την προϋπόθεση ότι η δυναμική ενέργεια είναι μηδέν,

$$H\psi_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_n}{dx^2} = E_n\psi_n \quad (1.1)$$

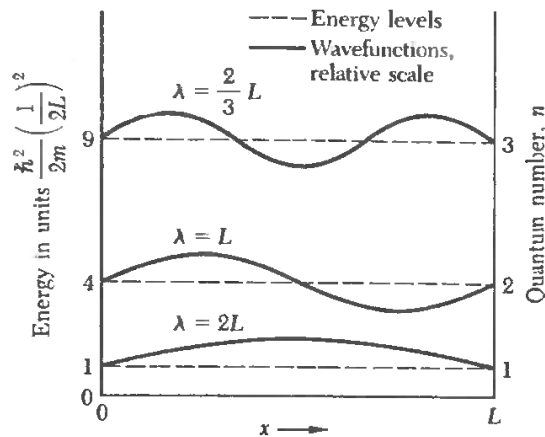
όπου $p = -i\hbar d/dx$ είναι ο τελεστής της ορμής, $H = p^2/2m$ ο χαμιλτονιανός τελεστής και E_n είναι η ενέργεια του ηλεκτρονίου στο τροχιακό. Ο όρος τροχιακό υπόδηλώνει μια λύση της κυματικής εξίσωσης για ένα σύστημα με ένα μόνο ηλεκτρόνιο, επιτρέποντας τον διαχωρισμό μεταξύ μιας ακριβούς κβαντικής κατάστασης ενός συστήματος N ηλεκτρονίων και μιας προσεγγιστικής κβαντικής κατάστασης που κατασκευάζουμε με την τοποθέτηση N ηλεκτρονίων σε N διαφορετικά τροχιάκα. Το μοντέλο των τροχιακών είναι ακριβές μόνο όταν δεν υπάρχουν αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ηλεκτρονίων.

Οι συνοριακές συνθήκες όπως επιβάλλονται από τα άπειρης δυναμικής ενέργειας φράγματα είναι $\psi_n(0) = 0$, $\psi_n(L) = 0$. Αυτές ικανοποιούνται από μια κυματοσυνάρτηση ημιτονοειδούς μορφής με έναν ακέραιο αριθμό n μισών μήκων κύματος μεταξύ 0 και L :

$$\psi_n = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_n} x\right), \frac{1}{2}n\lambda_n = L \quad (1.2)$$

όπου A είναι μια σταθερά κανονικοποίησης. Αντικαθιστώντας την μορφή της λύσης στην εξίσωση Schrödinger βρίσκουμε για την τιμή της ενέργειας E_n

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \quad (1.3)$$



Σχήμα 1.1: ενεργειακά επίπεδα και μορφή κυματοσυνάρτησης

Σύμφωνα με την απαγορευτική αρχή του Pauli δυό ηλεκτρόνια δεν μπορούν να έχουν ίδιους κβαντικούς αριθμούς. Σε ένα στερεό οι κβαντικοί αριθμοί των ηλεκτρονιακών τροχιακών αγωγιμότητας είναι n και m_s , όπου n είναι ένας θετικός ακέραιος και ο μαγνητικός κβαντικός

αριθμός $m_s = \pm \frac{1}{2}$ σύμφωνα με την διεύθυνση του σπιν. Ένα ζεύγος τροχιακών χαρακτηρίζομενο απο τον κβαντικό αριθμό n μπορεί να έχει μέχρι δύο ηλεκτρόνια, ένα με σπιν πάνω \uparrow και ένα με σπιν κάτω \downarrow . Περισσότερα από ένα τροχιακά είναι δυνατόν να έχουν την ίδια ενέργεια και ο αριθμός όσων τροχιακών έχουν αυτήν την ιδιότητα λέγεται βαθμός εκφυλισμού.

Ας ορίσουμε n_F ως το πιο υψηλό από τα πλήρως συμπληρωμένα ενεργειακα επίπεδα, με την προϋπόθεση ότι η συμπλήρωση έχει ξεκινήσει από τα χαμηλότερα επίπεδα ($n = 1$) και συνεχίζεται με την συμπλήρωση με ηλεκτρόνια των υψηλότερων επιπέδων μέχρι την στιγμή που θα έχουν τοποθετηθεί όλα τα N ηλεκτρόνια. Η συνθήκη $2n_F = N$ καθορίζει το n_F , την τιμή του κβαντικού αριθμού n για το υψηλότερο συμπληρωμένο επίπεδο.

Η ενέργεια Fermi E_F ορίζεται ως η ενέργεια του πιο υψηλού συμπληρωμένου επιπέδου στην βασική κατάσταση (ground state) του συστήματος των N ηλεκτρονίων και σε μια διάσταση είναι ίση με

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n_F \pi}{L} \right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N \pi}{2L} \right)^2 \quad (1.4)$$

1.1.2 Ενεργειακά επίπεδα σε τρεις διαστάσεις

Η εξίσωση Schrödinger για ένα ελεύθερο σωματίδιο σε τρεις διαστάσεις είναι

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial z^2} \right) \psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (1.5)$$

Ο περιορισμός του ηλεκτρονίου από την έλξη των ιόντων σε έναν όγκο V εκφράζεται απο τις συνοριακές συνθήκες στις οποίες υπακούει η παραπάνω εξίσωση. Η επιλογή των συνοριακών συνθηκών εξαρτάται απο την φύση και την περιοχή ενδιαφέροντος του υπο μελέτη προβλήματος. Η απλούστερη περίπτωση είναι να θεωρήσουμε οτι το ηλεκτρόνιο βρίσκεται περιορισμένο σε ένα ορθογώνιο κούτι διαστάσεων L και όγκου $V = L^3$. Σε αντιστοιχία με την περίπτωση του μονοδιάστατου προβλήματος, μπορούμε να υποθέσουμε ότι κάθε έδρα του κύβου ενώνεται με την αντίθετη από αυτη έδρα με τρόπο τέτοιο, ώστε αν ένα ηλεκτρόνιο βρέθει στην επιφάνεια μιας έδρας να μην ανακλάται πίσω, αλλά να αφήνει το μεταλλο και ταυτόχρονα να επανεισέρχεται σε αυτο από την αντίθετη πλευρά. Η αναλυτική έκφραση των συνοριακών αυτων συνθηκών είναι

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z + L) &= \psi(x, y, z) \\ \psi(x, y + L, z) &= \psi(x, y, z) \\ \psi(x + L, y, z) &= \psi(x, y, z) \end{aligned} \quad (1.6)$$

Οι συνοριακές συνθήκες που εκφράζονται με την παραπάνω εξίσωση είναι γνωστές ως συνοριακές συνθήκες Born-van Karman ή περιοδικές. Η κυματοσυνάρτηση που ικανοποιεί την εξίσωση Schrödinger και τις συνοριακές συνθήκες έχει την μορφή

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \quad (1.7)$$

Οι συνοριακές συνθήκες επιβάλλουν διακριτές τιμές του \mathbf{k} , που είναι και οι κβαντικοί αριθμοί του προβλήματος μαζί με τον κβαντικό αριθμό m_s για την διεύθυνση του σπιν, αφού ικανοποιούνται μόνο αν

$$e^{ik_x L} = e^{ik_y L} = e^{ik_z L} = 1 \quad (1.8)$$

Ισχύει $e^z = 1$ αν και μόνο αν $z = 2\pi n$ όπου n ακέραιος, επομένως οι συνιστώσες του διανύσματος κύματος πρέπει να είναι της μορφής

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L}, k_y = \frac{2\pi n_y}{L}, k_z = \frac{2\pi n_z}{L}, \text{ όπου } n_x, n_y, n_z \text{ ακέραιοι} \quad (1.9)$$

Η ενέργεια ενός τροχιακού με κυματόνυσμα \mathbf{k} είναι

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (1.10)$$

Το μέγεθος του κυματόνυσματος σχετίζεται με το μήκος κύματος από την σχέση De Broglie $k = 2\pi/\lambda$. Η σημασία του κυματόνυσματος \mathbf{k} γίνεται φανερή αν θυμηθούμε ότι η κυματοσυνάρτηση $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ είναι ιδιοκατάσταση του τελεστή της ορμής

$$\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\hbar}{i} \nabla \quad (1.11)$$

με ιδιοτιμή $\mathbf{r} = \hbar \mathbf{k}$ αφού

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \hbar \mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (1.12)$$

Από την στιγμή που ένα σωματίδιο σε μια ιδιοκατάσταση ενός τελεστή έχει συγκεκριμένη τιμή του αντίστοιχου παρατηρούμενου μεγέθους, την ιδιοτιμή, ένα ηλεκτρόνιο με κυματοσυνάρτηση $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ έχει πεπερασμένη ορμή ανάλογη του \mathbf{k}

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \quad (1.13)$$

και ταχύτητα $\mathbf{v} = m\mathbf{p}$

$$\mathbf{v} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \quad (1.14)$$

Επομένως είναι δυνατόν να γραφτεί στην γνωστή κλασική μορφή

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2} m v^2 \quad (1.15)$$

Τα κατηλλημένα τροχιακά της θεμελιώδους κατάστασης ενός συστήματος N ελεύθερων ηλεκτρονίων μπορούν να αναπαρασταθούν ως σημεία μέσα σε μια σφαίρα στον χώρο \mathbf{k} . Η ενέργεια στην επιφάνεια της σφαίρας είναι η ενέργεια Fermi, τα κυματόνυσμα στην επιφάνεια Fermi έχουν μέτρο k_F τέτοιο ώστε

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 \quad (1.16)$$

Από την εξίσωση (1.9) παρατηρούμε ότι στο στοιχείο όγκου $2\pi/L$ του χώρου k αντιστοιχεί μία διακριτή τριπλέτα κβαντικών αριθμών k_x, k_y, k_z . Επομένως σε μία σφαίρα όγκου $4\pi k_F^3/3$ ο συνολικός αριθμός των τροχιακών είναι

$$2 \frac{4\pi k_F^3/3}{(2\pi/L)^3} = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3 = N \quad (1.17)$$

όπου ο παράγοντας 2 προέρχεται από τις δύο επιτρεπτές τιμές του κβαντικού αριθμού m_s για κάθε επιτρεπόμενη τιμή του k . Τότε

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{1/3} \quad (1.18)$$

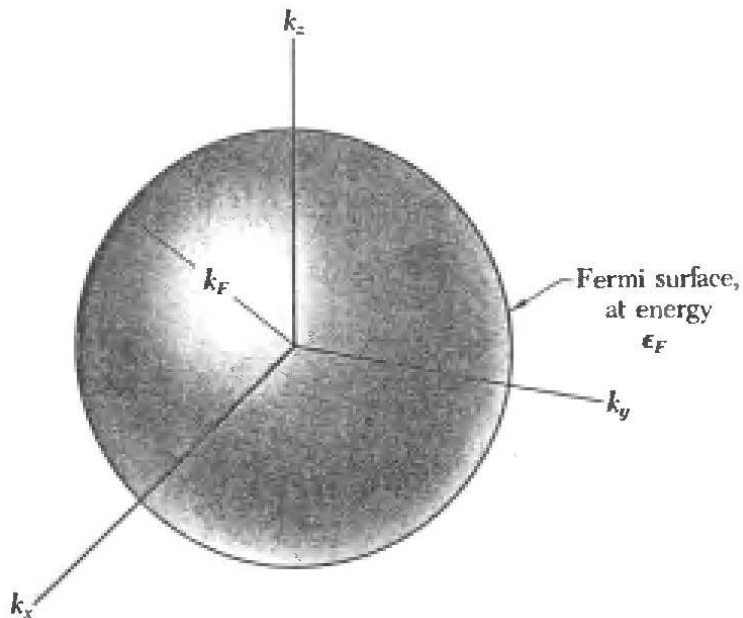
που εξαρτάται μόνο από την συγκέντρωση των σωματιδίων. Αντικαθιστώντας στην σχέση (1.10) έχουμε

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{2/3} \quad (1.19)$$

ενώ για την ταχύτητα v_F στην επιφάνεια Fermi έχουμε

$$v_F = \left(\frac{\hbar k_F}{m}\right) = \left(\frac{\hbar}{m}\right) \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{1/3} \quad (1.20)$$

σε σχέση με την συγκέντρωση ηλεκτρονίων N/V .



Σχήμα 1.2: Σφαίρα Fermi στο χώρο k

Με βάση τα προηγούμενα ορίζεται η πυκνότητα των καταστάσεων (density of states) ως ο αριθμός των τροχιακών ανα μονάδα ενέργειας $D(E)$. Ο συνολικός αριθμός τροχιακών με ενέργεια $\leq E$ είναι

$$N = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{3/2} \quad (1.21)$$

έτσι ώστε η πυκνότητα των καταστάσεων να είναι

$$D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} \quad (1.22)$$

Η τελευταία σχέση απλοποιείται θεωρώντας $\ln N = \frac{3}{2} \ln E + \text{σταθερά}$, και $\frac{dN}{N} = \frac{3}{2} \frac{dE}{E}$ επομένως

$$D(E) \equiv \frac{dN}{dE} = \frac{3N}{2E} \quad (1.23)$$

1.2 ΜΟΝΤΕΛΟ ΙΣΧΥΡΟΥ ΔΕΣΜΟΥ

Στην προηγούμενη ενότητα τα ενεργειακά επίπεδα σε ένα μέταλλο υπολογίστηκαν θεωρώντας ένα αέριο σχεδόν ελεύθερων ηλεκτρονίων αγωγιμότητας με ασθενή ή μηδενική αλληλεπίδραση από το περιοδικό δυναμικό των ιόντων. Σε αυτήν την ενότητα θα παρουσιαστεί ο ίδιος υπολογισμός θεωρώντας το στερεό (μέταλλο ή ημιαγωγός) σαν μια συλλογή ασθενώς αλληλεπιδρώντων ουδετέρων ατόμων.

Ας θεωρήσουμε ένα κρυσταλλικό πλέγμα ατόμων ενός στερεού με 1s, 2s, 2p, 3s ατομικά τροχιακά και με πλεγματική σταθερά της τάξης μεγέθους εκατοστών (cm) αντί για angstroms (Å). Όλα τα ηλεκτρόνια θα βρίσκονται σε ατομικά τροχιακά εντοπισμένα σε πλεγματικά σημεία. Συρικνώνοντας το τεχνητό αυτό πλέγμα σε διαστάσεις παραπλήσιες μιας πραγματικής πλεγματικής σταθεράς ενός μετάλλου είναι αναγκαίος ο επαναπροσδιορισμός των ενεργειακών επιπέδων του αρχικά απομονωμένου συστήματος. Η επικάλυψη των 1s κυματοσυναρτήσεων μεταξύ δύο σημείων του πλέγματος είναι αμελητέα ενώ αντιστοίχως μικρή μπορεί να θεωρηθεί και η επικάλυψη των 2s και 2p τροχιακών. Όμως για τα τροχιακά 3s είναι ουσιώδης και η εικόνα τους πρέπει να προσεγγιστεί με μια διαφορετική μέθοδο.

Η προσέγγιση ισχυρού δεσμού (tight-binding approximation) ή μέθοδος LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals) αναφέρεται στην περίπτωση που η επικάλυψη των ατομικών τροχιακών είναι αρκετά ισχυρή ώστε να απαιτούνται διορθώσεις στην εικόνα των απομονωμένων ατόμων χωρίς όμως να καταστρέφει την ατομική περιγραφή του συστήματος. Η προσέγγιση αυτή γίνεται πολύ χρήσιμη για την περιγραφή ενεργειακών ζωνών που προέρχονται από ημισυμπληρωμένα d -τροχιακά και για την περιγραφή της ηλεκτρονιακής δομής των μονωτών. Επιπλέον λειτουργεί και σαν συμπλήρωμα του μοντέλου των ελεύθερων ηλεκτρονίων επιτρέποντας μια συμφιλίωση μεταξύ της εικόνας των εντοπισμένων ατομικών τροχιακών από την μία και αυτής των επιπέδων κυμάτων των ελευθέρων ηλεκτρονίων.

1.2.1 Γενικός φορμαλισμός

Ας υποθέσουμε ότι καθώς πλησιάζουν τα πλεγματικά σημεία μεταξύ τους η χαμιλτονιανή H όλου του περιοδικού κρυστάλλου μπορεί να προσεγγιστεί από την χαμιλτονιανή H_{at} ενός μόνο ατόμου τοποθετημένου σε ένα πλεγματικό σημείο. Επιπλέον ας υποθέσουμε τα δέσμια επίπεδα της H_{at} είναι καλώς εντοπισμένα, εαν δηλαδή η ψ_n είναι ένα δέσμιο επίπεδο της H_{at} ενός ατόμου στο πλέγμα και άρα ικανοποιεί

$$H_{at}\psi_n = E_n\psi_n \quad (1.24)$$

θα πρέπει η $\psi_n(\mathbf{r})$ να είναι πολύ μικρή όταν το r υπερβαίνει μια απόσταση της τάξης της πλεγματικής σταθεράς.

Στην περίπτωση που η χαμιλτονιανή του κρυστάλλου αρχίζει να διαφοροποιείται από την H_{at} μόνο για αποστάσεις από $\mathbf{r}=\mathbf{0}$ που ξεπερνούν το εύρος της $\psi_n(\mathbf{r})$, η κυματοσυνάρτηση $\psi_n(\mathbf{r})$ είναι μια εξαιρετική προσέγγιση μιας κατάστασης στάσιμου κύματος της κρυσταλλικής χαμιλτονιανής, με ιδιοτιμή E_n . Το ίδιο θα ισχύει και για τις κυματοσυναρτήσεις $\psi_n(\mathbf{r}-\mathbf{R})$ για όλα τα \mathbf{R} σε ένα πλέγμα *Bravais*, αφού η χαμιλτονιανή έχει την περιοδικότητα του πλέγματος.

Ο υπολογισμός των διορθώσεων σε αυτήν την περίπτωση γίνεται γράφοντας την χαμιλτονιανή

$$H = H_{at} + \Delta U(\mathbf{r}) \quad (1.25)$$

όπου $\Delta U(\mathbf{r})$ περιέχει όλες τις διορθώσεις των ατομικών δυναμικών που απαιτούνται για να παράξουν το πλήρες περιοδικό δυναμικό του κρυστάλλου. Εάν η $\psi_n(\mathbf{r})$ ικανοποιεί την εξίσωση (1.24) τότε θα ικανοποιεί και την εξίσωση (1.25), με την προϋπόθεση ότι η $\Delta U(\mathbf{r})$ εξαφανίζεται όπου δεν υπάρχει η $\psi_n(\mathbf{r})$. Σε αυτήν την περίπτωση κάθε ατόμικο τροχιακό $\psi_n(\mathbf{r})$ θα συνεισφέρει N επίπεδα στο περιοδικό δυναμικό, με κυματοσυναρτήσεις $\psi_n(\mathbf{r}-\mathbf{R})$ για κάθε ένα από τα N σημεία \mathbf{R} στο πλέγμα. Επομένως πρέπει να βρεθούν N γραμμικοί συνδυασμοί των παραπάνω κυματοσυναρτήσεων που να ικανοποιούν την εξίσωση Bloch

$$\psi(\mathbf{r}-\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}) \quad (1.26)$$

Οι N γραμμικοί συνδυασμοί που απαιτούνται είναι

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_n(\mathbf{r}-\mathbf{R}) \quad (1.27)$$

όπου το \mathbf{k} κυμαίνεται στις N τιμές της πρώτης ζώνης *Brillouin* που ικανοποιεί τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες *Born – vonKarman*. Η εξίσωση (1.26) ικανοποιείται αφού

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}+\mathbf{R}) &= \sum_{\mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}'}\psi_n(\mathbf{r}+\mathbf{R}-\mathbf{R}') \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \left[\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}'-\mathbf{R}}\psi_n(\mathbf{r}-(\mathbf{R}'-\mathbf{R})) \right] \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \left[\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\bar{\mathbf{R}}}\psi_n(\mathbf{r}-(\bar{\mathbf{R}})) \right] \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (1.28)$$

Άρα οι κυματοσυναρτήσεις της μορφής (1.27) ικανοποιούν την συνθήκη *Bloch* ενώ εξακολουθούν να δείχνουν τον ατομικό χαρακτήρα των επιπέδων. Οι ενεργειακές ζώνες όμως που εξάγονται με αυτόν τον τρόπο δεν εμπεριέχουν δομή σχετική με την τιμή του \mathbf{k} , αν $E_n(\mathbf{k})$ είναι η ενέργεια του ατομικού επιπέδου τότε $E_n(\mathbf{k}) = E_n$. Για την αποφυγή αυτής της ατέλειας πρέπει να θεωρήσουμε μια πιο ρεαλιστική προσέγγιση, ότι η $\psi_n(\mathbf{r})$ γίνεται μικρή αλλά όχι ακριβώς μηδέν, πριν το $\Delta U(\mathbf{r})$ γίνει υπολογίσιμο. Η παραδοχή αυτή υποδεικνύει ότι η λύση της πλήρους κρυσταλλικής εξίσωσης Schrödinger πρέπει να έχει την γενική μορφή

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \phi(\mathbf{r}-\mathbf{R}) \quad (1.29)$$

αλλά με την συνάρτηση $\phi(\mathbf{r})$ όχι απαραίτητα μια ατομική κατάσταση στάσιμου κύματος, αλλά μια κατάσταση που θα καθοριστεί με περαιτέρω υπολογισμούς. Εάν το γινόμενο $\Delta U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$ είναι όχι μηδέν αλλά εξαιρετικά μικρό, τότε μπορούμε να υποθέσουμε ότι η συνάρτηση $\phi(\mathbf{r})$ να είναι πολύ κοντά στην ατομική κυματοσυνάρτηση $\psi(\mathbf{r})$ ή σε κυματοσυναρτήσεις με τις οποίες η $\psi(\mathbf{r})$ είναι εκφυλισμένη. Η συνάρτηση λοιπόν $\phi(\mathbf{r})$ μπορεί να γραφεί ως ένας γραμμικός συνδυασμός ενός σχετικά μικρού αριθμού εντοπισμένων ατομικών κυματοσυναρτήσεων

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_n b_n \psi_n(\mathbf{r}) \quad (1.30)$$

Εαν πολλαπλασιάσουμε την κρυσταλλική εξίσωση Schrödinger

$$H\psi(\mathbf{r}) = (H_{at} + \Delta U(\mathbf{r}))\psi(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k})\psi(\mathbf{r}) \quad (1.31)$$

με την κυματοσυνάρτηση $\psi_m^*(\mathbf{r})$ και ολοκληρώσουμε για όλα τα \mathbf{r} χρησιμοποιώντας το γεγονός ότι

$$\int \psi_m^*(\mathbf{r}) H_{at} \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int (H_{at} \psi_m(\mathbf{r}))^* \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = E_m \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (1.32)$$

βρίσκουμε ότι

$$(E(\mathbf{k}) - E_m) \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (1.33)$$

Αντικαθιστώντας τις (1.29),(1.30) στην τελευταία σχέση και χρησιμοποιώντας την σχέση ορθοκανονικότητας

$$\int \psi_m^*(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{nm} \quad (1.34)$$

καταλήγουμε στην εξίσωση των ιδιοτιμών που καθορίζει τους συντελεστες $b_n(\mathbf{k})$ και τις ενέργειες Bloch $E(\mathbf{k})$:

$$\begin{aligned}
(E(\mathbf{k}) - E_m)b_m &= -(E(\mathbf{k}) - E_m) \sum_n \left(\sum_{R \neq 0} \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}-\mathbf{R}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} d\mathbf{r} \right) b_n \\
&+ \sum_n \left(\int \psi_m^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right) b_n \\
&+ \sum_n \left(\sum_{R \neq 0} \int \psi_m^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r}-\mathbf{R}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} d\mathbf{r} \right) b_n
\end{aligned} \tag{1.35}$$

Ο πρώτος όρος του δεξιού μέλους της εξίσωσης ιδιοτιμών περιέχει όρους της μορφής

$$\int \psi_m^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}-\mathbf{R}) d\mathbf{r} \tag{1.36}$$

Με βάση την αρχική υπόθεση των καλώς εντοπισμένων ατομικών επιπέδων ο όρος αυτός είναι μικρός σε σχέση με την μονάδα. Επιπροσθέτως και ο τρίτος όρος του αθροίσματος είναι αντίστοιχα μικρός αφού περιέχει γινόμενα δύο ατομικών συναρτήσεων τοποθετημένες σε διαφορετικά σημεία. Τέλος υποθέτουμε ότι και ο δεύτερος όρος είναι μικρός επειδή περιμένουμε οι κυματοσυναρτήσεις να γίνονται μικρές σε αποστάσεις αρκετά μεγάλες για το περιοδικό δυναμικό να αποκλίνει σημαντικά από το ατομικό δυναμικό. Συνεπώς ολόκληρο το δεξί μέρος της σχέσης (1.36) και επομένως και το αριστερό $(E(\mathbf{k}) - E_m)b_m$ είναι πάντα μικρά. Αυτό είναι πιθανό όταν η διαφορά $E(\mathbf{k}) - E_m$ είναι μικρή και ο όρος b_m δεν είναι και το αντίστροφο. Γι' αυτόν τον λόγο η ενέργεια $E(\mathbf{k})$ πρέπει να είναι παραπλήσια της ενέργειας ενός ατομικού επιπέδου, ως υποθέσουμε E_o , και όλοι οι συντελεστές b_m , εκτός από αυτούς που αναφέρονται στο συγκεκριμένο τροχιακό και σε τροχιακά εκφυλισμένα ως προς την ενέργεια με αυτό, να είναι μικροί :

$$E(\mathbf{k}) \approx E_o, b_m \approx 0, \text{ εκτός αν } E_m \approx E_o \tag{1.37}$$

Με αυτόν τον τρόπο μπορούν να προσδιοριστούν τα ενεργειακά επίπεδα σε ένα κρύσταλλο με μεγαλύτερη ακρίβεια, χρησιμοποιώντας την (1.37) για τον υπολογισμό του δεξιού μέλους της (1.35) αθροίζοντας μόνο για εκείνα τα επίπεδα με ενέργειες εκφυλισμένες ή παραπλήσιες με την E_o . Εάν το ατομικό επίπεδο 0, ένα επίπεδο s είναι μη εκφυλισμένο, τότε με αυτήν την προσέγγιση η εξίσωση (1.35) καταλήγει σε μία μοναδική εξίσωση δίνοντας μια σαφή έκφραση για την ζώνη που δημιουργείται από αυτό το επίπεδο (αναφερόμενη και ως s -band). Εάν ενδιαφερόμαστε για ζώνες που δημιουργούνται από ένα τροχιακό τύπου p , το οποίο είναι τριπλά εκφυλισμένο, η εξίσωση ιδιοτιμών δίνει ένα σετ τριών ομογενών εξισώσεων, οι ιδιοτιμές των οποίων καθορίζουν την μορφή της ενέργειας $E(\mathbf{k})$ για τις τρεις ζώνες p και οι συντελεστές $b(\mathbf{k})$ δίνουν τον κατάλληλο γραμμικό συνδυασμό των τροχιακών p σχηματίζοντας με αυτόν τον τρόπο τις συναρτήσεις ϕ για τις διάφορες τιμές του \mathbf{k} στην ζώνη Brillouin.

1.2.2 Εφαρμογή για ένα ατομικό τροχιακό τυπου s

Ας εξετάσουμε την περίπτωση ενός ατομικού s τροχιακού. Στην περίπτωση αυτή όλοι οι υπόλοιποι συντελεστές b_m θα είναι μηδέν εκτός από αυτόν που αντιστοιχεί στο συγκεκριμένο τροχιακό. Από την εξίσωση (1.35) προκύπτει ότι η ενεργειακή δόμη της s ζώνης δίνεται από την σχέση

$$E(\mathbf{k}) = E_s - \frac{\beta - \sum \gamma(\mathbf{R})e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}}{1 + \sum \alpha(\mathbf{R})e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}} \quad (1.38)$$

όπου E_s είναι η ενέργεια του ατομικού τροχιακού s , και

$$\beta = - \int d\mathbf{r} \Delta U(\mathbf{r}) \|\phi(\mathbf{r})\|^2 \quad (1.39)$$

$$\alpha(\mathbf{R}) = \int d\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}-\mathbf{R}) \quad (1.40)$$

$$\gamma(\mathbf{R}) = - \int d\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}-\mathbf{R}) \quad (1.41)$$

Οι συντελεστές αυτοί μπορούν να πάρουν πιο απλοποιημένη μορφή αν ληφθούν υπόψη συγκεκριμένες συμμετρίες. Η κυματοσυνάρτηση ϕ είναι ένα s τροχιακό, άρα η $\phi(\mathbf{r})$ είναι πραγματική και εξαρτάται μόνο από το μέγεθος \mathbf{r} . Από αυτό συνεπάγεται ότι $\alpha(\mathbf{R}) = \alpha(-\mathbf{R})$. Αυτό μαζί με την συμμετρία αντιστροφής του πλέγματος *Bravais*, που επιβάλλει $\Delta U(-\mathbf{r}) = \Delta U(\mathbf{r})$ συντελούν στο γεγονός ότι $\gamma(-\mathbf{R}) = \gamma(\mathbf{R})$. Επιπλέον αν αγνοήσουμε τους όρους που περιέχουν το α στον παρονομαστή, επειδή η συνεισφορά τους στις διορθώσεις του αριθμητή είναι αμελητέες, και δεχθούμε ότι μόνο οι πλησιέστεροι γείτονες παρουσιάζουν σημαντική επικάλυψη των τροχιακών, η σχέση διασποράς μπορεί να γραφτεί

$$E(\mathbf{k}) = E_s - \beta - \sum_{n,n} \gamma(\mathbf{R}) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) \quad (1.42)$$

με το άθροισμα να περιλαμβάνει εκείνα τα \mathbf{R} στο πλέγμα *Bravais* που συνδέουν το συγκεκριμένο σημείο με του κοντινότερους γείτονες του.

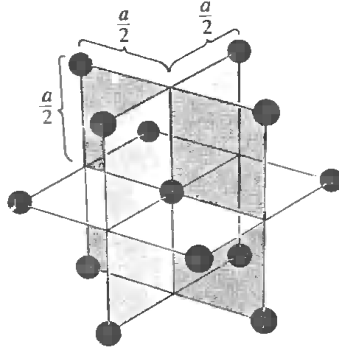
Ας θεωρήσουμε ένα εδροκεντρωμένο κυβικό κρύσταλλο (*fcc*). Οι 12 πλησιέστεροι γείτονες βρίσκονται στο πλεγματοσφαιρικό σημείο με διανύσματα θέσης \mathbf{R} ως προς μια αρχή

$$\mathbf{R} = \frac{a}{2}(\pm 1, \pm 1, 0), \frac{a}{2}(\pm 1, 0, \pm 1), \frac{a}{2}(0, \pm 1, \pm 1) \quad (1.43)$$

Εάν $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ οι αντίστοιχες τιμές του γινομένου $\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}$ είναι

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} = \frac{a}{2}(\pm k_i, k_j), i, j = x, y; y, z; z, x. \quad (1.44)$$

Σε αυτήν την περίπτωση το $\Delta U(\mathbf{r}) = \Delta(x, y, z)$ έχει την πλήρη συμμετρία του κρυστάλλου και για αυτόν τον λόγο δεν επηρεάζεται από τις μεταθέσεις και τις αλλαγές προσήμου των ορισμάτων του. Προσθέτοντας το γεγονός ότι για ένα s τροχιακό η κυματοσυνάρτηση $\phi(\mathbf{r})$ εξαρτάται μόνο από την τιμή του μεγεθους \mathbf{r} καταλήγουμε πως ο όρος $\gamma(\mathbf{R})$ είναι ο ίδιος και για τους 12 γείτονες και τα αντίστοιχα διανύσματα θέσης.



Σχήμα 1.3: Οι 12 πλησιέστεροι γείτονες σε έναν *fcc* κρύσταλλο

Άρα η σχέση διασποράς μπορεί να γραφτεί

$$E(\mathbf{k}) = E_s - \beta - 4\gamma(\cos \frac{1}{2}k_x a \cos \frac{1}{2}k_y a + \cos \frac{1}{2}k_y a \cos \frac{1}{2}k_z a + \cos \frac{1}{2}k_z a \cos \frac{1}{2}k_x a) \quad (1.45)$$

όπου

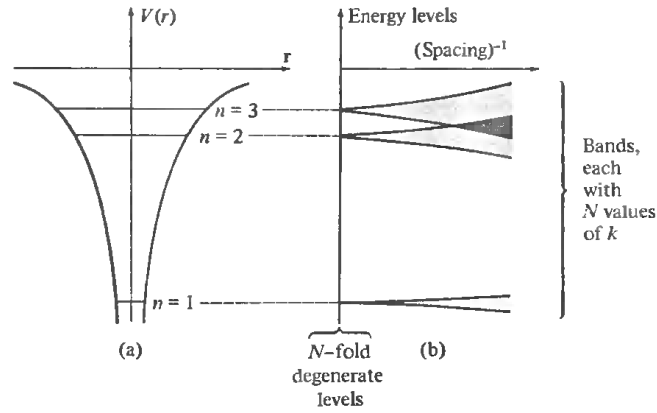
$$\gamma = - \int d\mathbf{r} \phi^*(x, y, z) \Delta U(x, y, z) \phi(x - \frac{1}{2}a, y - \frac{1}{2}a, z) \quad (1.46)$$

Η παραπάνω σχέση προέκυψε από την θεωρία ενός μόνου τροχιακού για κάθε άτομο, ενώ ο αριθμός των τροχιακών ανα ζώνη που αντιστοιχεί σε ένα μη εκφυλισμένο ατομικό επίπεδο είναι $2N$ για N άτομα. Οι αντίστοιχες σχέσεις διασποράς για το χωροκεντρομένο (*bcc*) κυβικό πλέγμα με 8 κοντινότερους γείτονες και για το απλό κυβικό πλέγμα (*sc*) με 4 κοντινότερους γείτονες είναι

$$E(\mathbf{k}) = E_s - \beta - 8\gamma \cos \frac{1}{2}k_x a \cos \frac{1}{2}k_y a \cos \frac{1}{2}k_z a, (bcc) \quad (1.47)$$

$$E(\mathbf{k}) = E_s - \beta - 2\gamma(\cos \frac{1}{2}k_x a + \cos \frac{1}{2}k_y a + \cos \frac{1}{2}k_z a), (sc) \quad (1.48)$$

Οι εξισώσεις (1.46-48) αποκαλύπτουν τα χαρακτηριστικά γνωρίσματα της προσέγγισης ισχυρού δεσμού (TB) : το εύρος ζώνης, το πλάτος μεταξύ της μέγιστης και της ελάχιστης ενέργειας στην ζώνη, είναι ανάλογο το ολοκληρώματος επικάλυψης γ . Γι'αυτόν τον λόγο οι TB ζώνες είναι στενές και όσο μικρότερη είναι η επικάλυψη τόσο πιο στενή είναι η ζώνη. Στο όριο που εξαφανίζεται αυτή εξαφανίζεται και το εύρος ζώνης και η ζώνη γίνεται N φορές εκφυλισμένη, αντιστοιχώντας στην ακραία περίπτωση όπου το ηλεκτρόνιο απλά κατοικεί σε οποιοδήποτε από τα N απομονωμένα άτομα. Η εξάρτηση του εύρους ζώνης από το ολοκλήρωμα επικάλυψης φαίνεται στο σχήμα 1.4



Σχήμα 1.4: a) μη εκφυλισμένα ενεργειακά επίπεδα σε ατομικό κρυσταλλικό δυναμικό b) εκφυλισμένα ενεργειακά επίπεδα σε περιοδικό κρυσταλλικό δυναμικό

1.2.3 Γενικά χαρακτηριστικά της προσέγγισης ισχυρού δεσμού

1.Ανάλογα το ατομικό επίπεδο για το οποίο εφαρμόζεται η προσεγγιστική αυτή μέθοδος προκύπτει και των αντιστοίχων διαστάσεων μοναδικής λύσης πρόβλημα. Για τα p τροχιακά προκύπτει ένα 3×3 πρόβλημα ενώ για τα d τροχιακά ένα 5×5 πρόβλημα

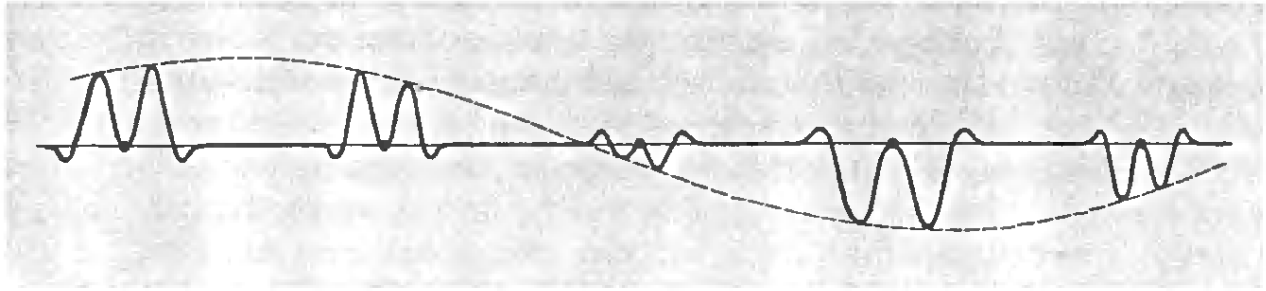
2. Το πιο γενικό χαρακτηριστικό της μεθόδου είναι η σχέση μεταξύ του εύρος ζώνης και των ολοκληρωμάτων επικάλυψης

$$\gamma_{i,j}(\mathbf{R}) = - \int d\mathbf{r} \phi_i^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}-\mathbf{R}) \quad (1.49)$$

Αν οι συντελεστές $\gamma_{i,j}$ είναι μικροί τότε είναι στενό και το εύρος ζώνης. Επομένως σε ένα στερεό οι ζώνες χαμηλότερης ενέργειας είναι πολύ στενες ενώ διευρύνονται με την αύξηση της ενέργειας σε σημείο που στα μέταλλα οι υψηλότερες ζώνες να έχουν εύρος της τάξης της ατομικής σταθεράς με συνέπεια την μη αξιοπιστία της μεθόδου για αυτές.

3.Οι κυματοσυναρτήσεις που προκύπτουν με την εφαρμογή της μεθόδου αν και κατασκευάζονται από εντοπισμένα ατομικά τροχιακά ϕ , εξαιτίας του παράγοντα φάσης $e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}$ τα ηλεκτρόνια έχουν ίση πιθανότητα να βρεθούν σε κάθε σημείο-κελί του κρυστάλλου. Καθώς το $e\mathbf{r}$ μεταβάλλεται απο κελί σε κελί, μια ημιτονοειδής μεταβολή επιβάλλεται στα πλάτη $Re\psi$ και $Im\psi$ της κυματοσυνάρτησης.

4.Η μέση ταχύτητα ενός ηλεκτρονίου σε ένα επίπεδο Bloch με κυματόνυσμα \mathbf{k} και ενέργεια $E(\mathbf{k})$ είναι $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = (1/\hbar)\partial E/\partial \mathbf{k}$. Αν η ενέργεια είναι ανεξάρτητη του \mathbf{k} ο όρος $\partial E/\partial \mathbf{k}$ είναι μηδέν και τα ηλεκτρόνια βρίσκονται συνδεδεμένα στα ξεχωριστά άτομα. Εάν υπάρχει μη μηδενικό ολοκλήρωμα επικάλυψης τότε η $E(\mathbf{k})$ δεν θα είναι σταθερή σε όλη την ζώνη. Μία μικρή μεταβολή της ενέργειας συνεπάγεται μη μηδενική τιμή του παράγοντα $\partial E/\partial \mathbf{k}$ άρα και μη μηδενική μέση ταχύτητα. Ελαττώνοντας το ολοκλήρωμα μειώνεται η ταχύτητα αλλά δεν εξαφανίζεται η κίνηση των ηλεκτρονίων στο πλέγμα.



Σχήμα 1.5: Χωρική διακύμανση του πραγματικού(ή του φανταστικού) μέρους μια κυματοσυνάρτησης της μεθόδου ισχυρού δεσμού

5. Για μία πιο ολοκληρωμένη προσέγγιση θα πρέπει να λαμβάνεται υπόψη και η σύζευξη σπιν-τροχιάς. Αυτό επιτυγχάνεται με τον συνυπολογισμό στον όρο $\Delta U(\mathbf{r})$ την αλληλεπίδραση μεταξύ του σπιν του ηλεκτρονίου και του ηλεκτρικού πεδίου όλων των ιόντων εκτός αυτού που αρχικά ανήκε το ηλεκτρόνιο, ενσωματώνοντας την με αυτόν τον τρόπο στην ατομική χαμιλτονιανή. Με αυτήν την θεώρηση η προσέγγιση ενός s τροχιακού χρειάζεται πλέον έναν γραμμικό συνδυασμό δύο επιπέδων με την ίδια τροχιακή κυματοσυνάρτηση και δύο διαφορετικές τιμές σπιν. Η προσέγγιση για ένα d τροχιακό μετατρέπεται από ένα 5×5 σε ένα 10×10 πρόβλημα προσδιορισμού [1, 2].

Κεφάλαιο 2

Φαινόμενο Spin Filter

2.1 Εισαγωγή

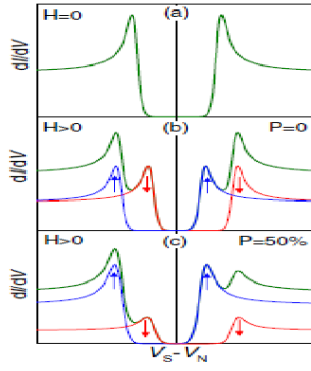
Το φαινόμενο σήραγγας (tunneling) παρόλο που είναι από τα πιο παλιά κβαντομηχανικά φαινόμενα, συνεχίζει και αποτελεί το επίκεντρο πλούσιας έρευνας. Η μελέτη της υπεραγωγιμότητας αποτέλεσε την απαρχή της συγκέντρωσης του ενδιαφέροντος του επιστημονικού κοσμου πάνω στο φαινόμενο σήραγγας. Η θεωρία της υπεραγωγιμότητας (*BCS*), περιγράφει τους υπεραγωγίμους φορείς ρεύματος ως ζεύγη ηλεκτρονίων, χαρακτηριζόμενα απο καταστάσεις με αντίθετες ορμές και αντίθετα σπιν ($+k \uparrow, -k \downarrow$) [3, 4, 5]. Ένα αξιωματικό πείραμα ήταν η παρατήρηση του διαχωρισμού των καταστάσεων των σπιν (*spinsplitting*) σε ημισωματιδιακές καταστάσεις υπό την επίδραση μαγνητικού πεδίου, για μια δομή σήραγγας (*tunnel junction*) $Al/Al_2O_3/Ag$ όπως φαίνεται στο Σχ.2.1 .

Ο διαχωρισμός των σπιν της πυκνότητας των υπεραγωγίμων καταστάσεων του Al ήταν η πρώτη καταγραφή του φαινομένου διέλευσης πολωμένων σπιν λόγω φαινομένου σήραγγας. Το υπεραγωγίμο υλικό Al λειτουργεί σαν ανιχνευτής για τα ηλεκτρόνια σήραγγας από το σιδηρομαγνητικό ηλεκτρόδιο (FM) στην δομή $Al/Al_2O_3/FM$. Η διατήρηση του σπιν του ηλεκτρονίου σε μια διαδικασία διέλευσης σήραγγας είναι σημαντική για την παρατήρηση της πόλωσης σπιν P η οποία ορίζεται [6, 7, 8]

$$P = \frac{[N_{\uparrow}(E_F) - N_{\downarrow}(E_F)]}{[N_{\uparrow}(E_F) + N_{\downarrow}(E_F)]} \quad (2.1)$$

όπου $N_{\uparrow}(E_F)$ και $N_{\downarrow}(E_F)$ είναι ο αριθμός της πλειοψηφίας και της μειοψηφίας αντίστοιχα για τα σπιν των ηλεκτρονίων στο ρεύμα σήραγγας κοντα στην ενέργεια E_F .

Στο σχήμα 2.1 φαίνονται το ενεργειακό χάρμα της υπεραγωγιμότητας του Al , ο διαχωρισμός λόγω φαινομένου Zeeman των καταστάσεων εξαιτίας του παράλληλου μαγνητικού πεδίου, όπου θεωρούνται αμελητέες οι σχεδάσεις σπιν-τροχιακών. Οι καταστάσεις με μαγνητικές ορμές παράλληλες με το εφαρμοζόμενο πεδίο βρίσκονται σε χαμηλότερη ενέργεια $-\mu_B H$ και αυτές με αντιπαράλληλες ορμές βρίσκονται σε υψηλότερη ενέργεια $+\mu_B H$. Η τεχνική αυτή χρησιμοποιείται για την παραγωγή σχεδόν πλήρως πολωμένων ρευμάτων σπιν και των δύο κατευθύνσεων. Όταν το ενα ηλεκτρόδιο είναι σιδηρομαγνητικό υλικό η ανισότητα στις πυκνότητες



Σχήμα 2.1: a) Διάγραμμα αγωγιμότητας-τάσης για επαφή υπεραγωγού/μονωτή/μετάλλου σε μηδενικό μαγνητικό πεδίο. Το υπεραγωγίμο χάσμα είναι κεντραρισμένο στο $V = 0$. Παρατηρούνται δύο κορυφές όταν εφαρμόζεται τάση b) Διάγραμμα με την εφαρμογή μαγνητικού πεδίου όπου διακρίνονται τέσσερις κορυφές λόγω του διαχωρισμού των καταστάσεων σπιν λόγω του φαινομένου Zeeman c) Η καμπύλη αγωγιμότητας γίνεται ασύμμετρη σε περίπτωση σιδηρομαγνητικού ηλεκτροδίου λόγω του διαφορετικού πληθυσμού των ηλεκτρονίων με σπιν πάνω και σπιν κάτω.

των καταστάσεων σπιν \uparrow και σπιν \downarrow εισάγει μια ασυμμετρία στις καμπύλες αγωγιμότητας. Αυτή η παρατηρούμενη ασυμμετρία αποτελεί την βάση του φαινομένου σήραγγας πολωμένων σπιν (spin-polarized tunnelin SPT) με την χρήση ηλεκτροδίων σιδηρομαγνητικών ιδιοτήτων.

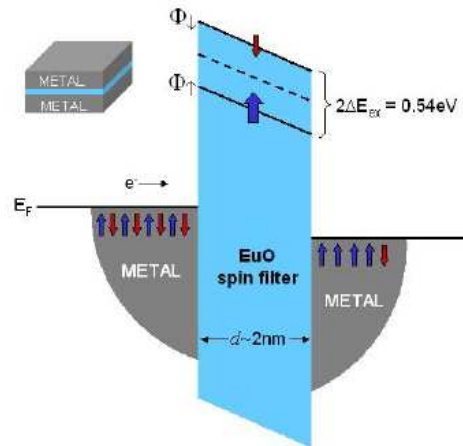
2.2 Φαινόμενο φιλτραρίσματος σπιν (Spin Filtering)

Σε αντίθεση με τις συμβατικές δόμες για την παρατήρηση του φαινομένου *SPT*, οι οποίες χρησιμοποιούν ένα σιδηρομαγνητικό μέταλλο ως πηγή για την παραγωγή ηλεκτρονίων με πολωμένο σπιν, μια πρωτοποριακή προσέγγιση , λεγόμενη και φαινόμενο φιλτραρίσματος σπιν (spin filter effect) είναι η χρησιμοποίηση ενός σιδηρομαγνητικού υλικού ως φράγμα διέλευσης για την δημιουργία πολωμένου ρεύματος. Σε ένα τέτοιο φράγμα, όταν αυτό βρίσκεται σε κατάσταση μαγνήτισης, η ζώνη αγωγιμότητας διαχωρίζεται. Έτσι δημιουργούνται δύο διαφορετικά ύψη φράγματος, ένα χαμηλότερο για τα σπιν \uparrow ηλεκτρόνια (Φ_{\uparrow} και ένα υψηλότερο για τα ηλεκτρόνια με σπιν \downarrow (Φ_{\downarrow} . Κατά την διαδικασία διέλευσης το σπιν διατηρείται[9] και για ένα δεδομένο πάχος φράγματος η πυκνότητα του ρεύματος λόγω φαινομένου σήραγγας εξαρτάται εκθετικά απο το αντίστοιχο ύψος του φράγματος[10, 11] :

$$J_{\uparrow(\downarrow)} \propto \exp(-\Phi_{\uparrow(\downarrow)}^{1/2} d) \quad (2.2)$$

Για αυτόν τον λόγο, ακόμα και με την παραμικρή διαφορά μεταξύ των υψών των φραγμάτων, η πιθανότητα διέλευσης για τα ηλεκτρόνια με σπιν \uparrow είναι πολύ μεγαλύτερη από αυτήν για τα ηλεκτρόνια με σπιν \downarrow , με συνέπεια την πόλωση του σπιν για το ρεύμα διέλευσης :

$$P = \frac{J_{\uparrow} - J_{\downarrow}}{J_{\uparrow} + J_{\downarrow}} \quad (2.3)$$



Σχήμα 2.2: Απεικόνιση του φαινομένου spin filter όπου ηλεκτρόνια με τυχαία προσανατολισμένο σπιν διέρχονται από διαφορετικούς υψους φραγμάτων αναλογα με την διεύθυνση σπιν παράγοντας υψηλά πολωμένο ρεύμα

Το μέγεθος του διαχωρισμού της ζώνης αγωγιμότητας (exchange splitting) ΔE_{ex} για τα υλικά που χρησιμοποιούνται σαν φίλτρα σπιν είναι πολύ ουσιώδες γιατί είναι δυνατόν θεωρητικά να εμποδίσει τελείως την διέλευση των σπιν \downarrow ηλεκτρονίων οδηγώντας σε πλήρως πολωμένα ρεύματα $P = 1$. Ο πίνακας (2.1) καταγράφει τα υλικά που χρησιμοποιούνται για την μελέτη του φαινομένου SF και τα χαρακτηριστικά τους.

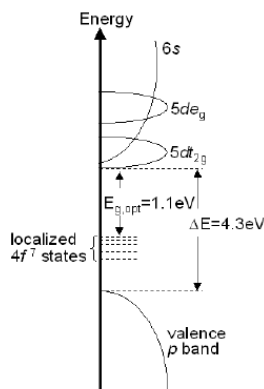
Material	Magnetic behaviour	T_C (K)	Moment (μ_B)	Structure, a (nm)	E_g (eV)	$2\Delta E_{ex}$ (eV)	P (%)
EuO	FM	69.3	7.9	Fcc, 0.514	1.12	0.54	29
EuS	FM	16.6	7.9	Fcc, 0.596	1.65	0.36	86
EuSe	AFM	4.6	7.9	Fcc, 0.619	1.80		100
BiMnO ₃	FM	105	3.6	Perovskite			22
NiFe ₂ O ₄	Ferri-M	850	2	Spinel	1.2		22
CoFe ₂ O ₄	Ferri-M	796	3	Spinel	0.57		

Πίνακας 2.1: Πίνακας υλικών SF [12]

Από τον πίνακα (2.1) παρατηρούμε οτι τα υλικά που κυρίως χρησιμοποιούνται ως φίλτρα σπιν είναι τα χαλκογενίδια του Eu . Τα υλικά αυτά δεν είναι τα μοναδικά που χρησιμοποιούνται ούτε και τα πλέον υποσχόμενα απο την άποψη των φυσικών χαρακτηριστικών τους, είναι όμως πιο εύκολα στην επεξεργασία και στην κατασκευή δομών υπο μελέτη.

2.2.1 Δομή των χαλκογενιδίων του Eu

Οι ηλεκτρικές, μαγνητικές και οπτικές ιδιότητες των χαλκογενιδίων του Eu σε συμπαγή,κρυσταλλική και σε μορφή λεπτών φιλμ, έχουν μελετηθεί διεξοδικά στις δεκαετίες του '60 και του '70.



Σχήμα 2.3: Ηλεκτρονιακή δομή τυπικού χαλκογενιδίου EuO

Τα χαλκογενίδια του ευρωπίου είναι ιδανικοί σιδηρομαγνήτες τύπου Heisenberg με θεωρητικά μεγάλη μαγνητική ορμή $\mu_B \sqrt{J(J-1)} = 7.9\mu_B$ τιμη που συμφωνεί με πειραματικά δεδομένα. Η ηλεκτρονιακή δομή και το μέγεθος του διαχωρισμού λόγω σπιν έχουν επαληθευθεί με οπτικές μελέτες. Η μαγνητική ορμή πηγάζει απο τις ημισυμπληρωμένες $4f^7$ καταστασεις που βρίσκονται εντοπισμένες στο ενεργειακό χάσμα μεταξύ της ζώνης σθένους και της ζώνης αγωγιμότητας. Το χάσμα μεταξύ αυτων των $4f^7$ και των $5d_{t_{2g}}$ καταστάσεων στον πυθμένα της ζώνης αγωγιμότητας ορίζουν το οπτικό χάσμα[13, 14].

Για θερμοκρασίες $T > T_c$, η ζώνη αγωγιμότητας δεν είναι πολωμένη. Όταν το υλικό ψύχεται κάτω απο την θερμοκρασία Curie ο σιδηρομαγνητικός χαρακτήρας των $4f^7$ καταστάσεων αναγκάζει την ζώνη αγωγιμότητας να διαχωριστεί σε δυο ενεργειακά επίπεδα, το ενα με χαμηλότερη ενέργεια κατα την ποσότητα ΔE_{ex} και το δεύτερο με υψηλότερη ενέργεια κατα την ίδια ποσότητα. Ο εκφυλισμός λόγω σπιν αίρεται, τα σπιν \uparrow καταλαμβάνουν το χαμηλότερο ενεργειακό επίπεδο ενώ τα σπιν \downarrow το υψηλότερο. Ο διαχωρισμός αυτός της ζώνης αγωγιμότητας προκαλεί μια μείωση του χάσματος μεταξύ των $4f^7$ και της ζώνης αγωγιμότητας γεγονός που παρατηρείται οπτικά με μια ερυθρά μετακίνηση της ακμής απορρόφησης.

Η ενέργεια ανταλλαγής δίνεται απο την σχέση :

$$H_{exch} = 2\Delta E_{ex} = 2J_c \sum \vec{s} \cdot \vec{S} \quad (2.4)$$

όπου \vec{s} είναι το σπιν ενός ηλεκτρονίου αγωγιμότητας, \vec{S} των σπιν των γειτονικών ιόντων Eu^{2+} και J_c η χωροεξαρτώμενη σταθερά ανταλλαγής μεταξύ του σπιν των ιόντων και του σπιν του ηλεκτρονίου.

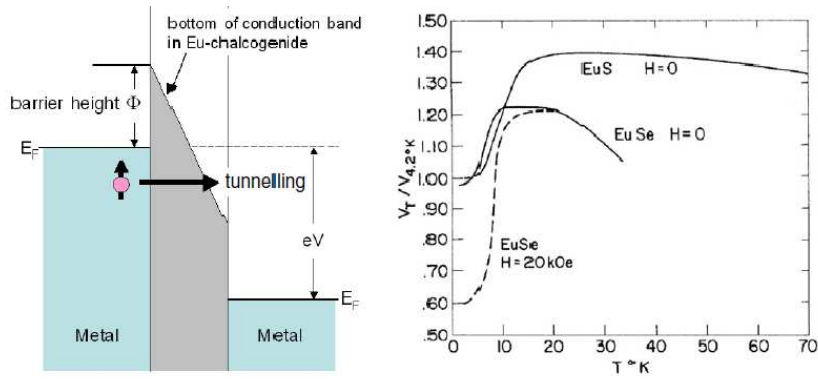
Η ενίσχυση-ντοπάρισμα του υλικού με ιόντα σπάνιων γαιών Gd,La,Ho αυξάνει την θερμοκρασία μετάβασης στην σιδηρομαγνητική φάση επειδή αντικαθιστούνται δισθενή ιόντα Eu^{2+} με τρισθενή. Όμως η ενέργεια ανταλλαγής των εμφυτευμένων ιόντων μειώνεται όσο αυξάνεται η συγκέντρωση αυτών με συνεπεία η αύξηση της θερμοκρασίας μετάβασης να έχει ένα μέγιστο για μια δεδομένη συγκέντρωση εμφυτευμάτων.

2.2.2 Παρατηρούμενα μεγέθη

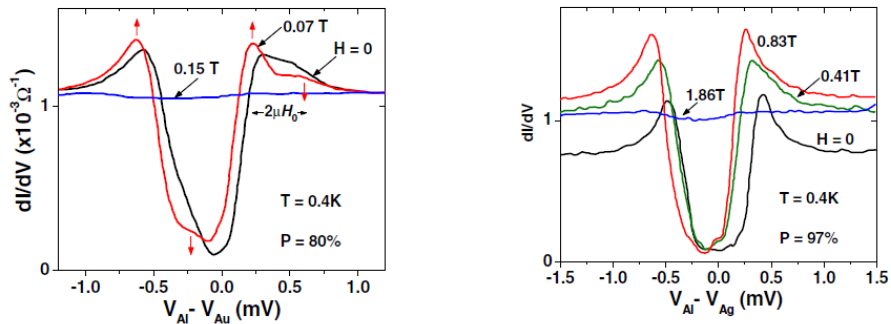
Εξάρτηση θερμοκρασίας τάσης

Τα πρώτα πειράματα χάρη στα οποία παρατηρήθηκε και μελετήθηκε το φαινόμενο *spin filtering* πραγματοποιήθηκαν από τους *Esaki et al* [15]. Σε αυτά τα πειράματα χρησιμοποιήθηκαν δομές λεπτών υμενίων χαλκογενιδίων του *Eu*, τοποθετημένα ανάμεσα σε δύο μεταλλικά φύλλα είτε από *Au* είτε από *Al*. Το φαινόμενο διέλευσης ηλεκτρονίων από το φράγμα δυναμικού μεταξύ του μετάλλου και του χαλκογενιδίου παρουσιάζεται στο δεξί τμήμα του σχήματος 2.4. Το φράγμα δυναμικού σχηματίζεται από την ενεργειακή διαφορά του επιπέδου *Fermi* του μετάλλου και του πυθμένα της ζώνης αγωγιμότητας του χαλκογενιδίου. Η μελετούμενη εξάρτηση της χαρακτηριστικής καμπύλης $I-V$ των δομών αυτών από την θερμοκρασία, έδειξε μία σημαντική πτώση τάσης μετρούμενης υπό σταθερό ρεύμα. Η πτώση τάσης προκύπτει από τον διαχωρισμό της ζώνης αγωγιμότητας χαμηλώνοντας με αυτόν τον τρόπο το ύψος του φράγματος. Η εφαρμογή μαγνητικού πεδίου προκαλεί μεγαλύτερη πτώση τάσης σε θερμοκρασίες ελαφρώς μεγαλύτερες από την θερμοκρασία μετάβασης όπως φαίνεται στο αριστερό τμήμα του σχήματος 2.4. Η πόλωση του σπιν δεν ποσοτικοποιήθηκε σε αυτά τα πειράματα αλλά αποτέλεσε έμμεση ένδειξη της ύπαρξης του φαινομένου. Παρόμοια συμπεριφορά σχετικά με την αντίσταση των δόμων αυτών παρατηρείται για όλα τα χαλκογενίδια του *Eu* που χρησιμοποιούνται σε αυτές τις δομές.

Ακολούθως οι χαρακτηριστικές ιδιότητες "φιλτραρίσματος σπιν" που παρουσιάζουν τα υλικά αυτά όταν χρησιμοποιούνται ως φράγματα διέλευσης μελετήθηκαν και αποδείχθηκαν με απευθείας μετρήσεις της πόλωσης του σπιν με την τεχνική *Meservey-Tedrow*, όπου ένα υπεραγωγίμο ηλεκτρόδιο *Al* χρησιμοποιήθηκε για να ανιχνεύσει των σπιν των διερχόμενων ηλεκτρονίων. Ο βαθμός πόλωσης του σπιν για το ρεύμα διέλευσης υπολογίζεται από την μετρούμενη δυναμική αγωγιμότητα σήραγγας (dI/dV) σε ένα εύρος λίγων milivolt του επιπέδου *Fermi* (Σχημα 2.5)



Σχήμα 2.4: Εξάρτηση χαρακτηριστικής καμπύλης I-V από την θερμοκρασία με εφαρμογή μαγνητικού πεδίου.



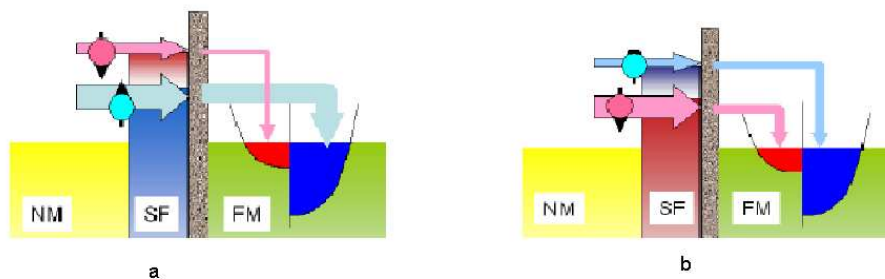
Σχήμα 2.5: Χαρακτηριστική καμπύλη αγωμότητας-τάσης για δομές $Ag/EuS(EuSe)/Al$ με εφαρμογή μαγνητικού πεδίου. Τα βέλη δείχνουν τον προσανατολισμό του σπιν και τον διαχωρισμό των καταστάσεων πυκνότητας (DOS) λόγω του φαινομένου Zeeman.

Μαγνητοαντίσταση (TMR)

Ένας εναλλακτικός τρόπος παρατήρησης του φαινομένου φιλτραρίσματος σπιν, είναι η μέτρηση της μαγνητοαντίστασης λόγω του φαινομένου σήραγγας (tunnel magnetoresistance TMR) σε ημιμαγνητικές δομές (quasimagnetic tunnel junction QMTJ). Οι δομές αυτές χρησιμοποιούν υλικά με την ιδιότητα του φίλτρου σπιν ως το φράγμα διέλευσης μεταξύ ενός κανονικού (μη μαγνητικού) ηλεκτροδίου (NM) και ενός σιδηρομαγνητικού ηλεκτροδίου γνωστής πόλωσης (P_{FM}), η απόδοση του φίλτρου σπιν υπολογίζεται απο την μέτρηση της μαγνητοαντίστασης (TMR) με την χρήση του τύπου της φόρμουλας Julliere [16]:

$$TMR = \frac{\Delta R}{R} = \frac{2P_{FM}P_{SF}}{1 + P_{FM}P_{SF}} \quad (2.5)$$

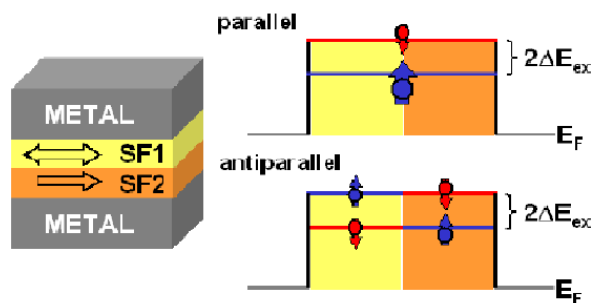
Η αντίσταση (R_j) της δομής εξαρτάται απο τον σχετικό προσανατολισμό της μαγνήτισης του φράγματος-φίλτρου σπιν και του σιδηρομαγνητικού ηλεκτροδίου, χαμηλή αντίσταση για παράλληλο προσανατολισμό και υψηλή για αντιπαράλληλο προσανατολισμό. Για την παρατήρηση και καταγραφή της μαγνητοαντίστασης και την ποσοτικοποίηση της απόδοσης του φίλτρου σπιν είναι απαραίτητο τα δύο ηλεκτρόδια να είναι αυστηρώς διαχωρισμένα για να αποφεύγεται η μαγνητική σύζευξη μεταξύ τους και επιπλέον να είναι δυνατός ο ανεξάρτητος καθορισμός των μαγνητικών τους προσανατολισμών.



Σχήμα 2.6: α) Χαμηλή αντίσταση για παράλληλο προσανατολισμό μαγνητίσεων β) Υψηλή αντίσταση για αντιπαράλληλο προσανατολισμό. Σε μερικές δομές χρησιμοποιείται και ένα πολύ λεπτό μη μαγνητικό στρώμα μεταξύ των δύο ηλεκτροδίων για την αποφυγή της μαγνητικής σύζευξης.

Επιπλέον της απλής δομής που παρουσιάστηκε παραπάνω υπάρχει και η θεωρητική εργασία των Worledge et Geballe [17] που προβλέπει μια μαγνητοαντίσταση της τάξης μεγέθους 10^5

σε μια δομή μέταλλο/φίλτρο σπιν 1/φίλτρο σπιν 2/μέταλλο, που ονομάζεται διπλό φίλτρο σπιν. Όταν τα δύο φίλτρα μαγνητίζονται παράλληλα το ένα με το άλλο τα ηλεκτρόνια με σπιν πάνω συναντούν ένα χαμηλού ύψους φράγμα ενώ τα ηλεκτρόνια με σπιν κάτω συναντούν ένα υψηλού ύψους φράγμα. Αυτό έχει σαν συνέπεια την ύπαρξη ρεύματος ισχυρά πολωμένου σπιν πάνω. Όταν τα δύο φίλτρα έχουν αντιπαράλληλους μαγνητικούς προσανατολισμούς, τα σπιν πάνω και σπιν κάτω ύψη φράγματος δεν συμπίπτουν, ετσι διέρχεται ελάχιστο ρεύμα. Η ανεξάρτητη εναλλαγή των μαγνητίσεων των φίλτρων επιτυγχάνεται με την χρήση υλικών με διαφορετικές και καλώς διαχωρισμένες παραμένουσες μαγνητίσεις, έτσι ώστε το ένα φίλτρο να είναι σταθερά σε έναν μαγνητικό προσανατολισμό, ενώ το δεύτερο να είναι ελεύθερο να αλλάζει με την εφαρμογή μαγνητικού πεδίου. Σύμφωνα με αυτό το μοντέλο η εκθετική εξάρτηση του ρεύματος σήραγγας μπορεί να οδηγήσει σε εξαιρετικά μεγάλες τιμές της μαγνητοαντίστασης αλλάζοντας τις σχετικές μαγνητίσεις των δύο φίλτρων. Όμως με την χρήση δύο φίλτρων αυξάνεται και η αντίσταση (R_j) η οποία εξαρτάται εκθετικά με το πάχος του φράγματος οδηγώντας σε ένα επιπρόσθετο φράγμα δυναμικού, ενώ γίνεται ακόμα πιο πολύπλοκη η αποφυγή της μαγνητικής συζεύξης μεταξύ των δύο σιδηρομαγνητικών φίλτρων για να είναι διακριτοί και πραγματοποιήσιμοι ο παράλληλος και αντιπαράλληλος προσανατολισμός.



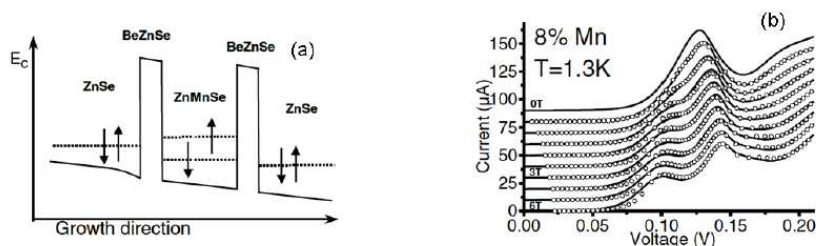
Σχήμα 2.7: Διπλό φίλτρο σπιν με την μαγνήτιση του ενός σπιν φίλτρου να είναι ελεύθερη να αλλάζει διεύθυνση με την εφαρμογή πεδίου, ενώ του δεύτερου να είναι αυστηρώς καθορισμένη

2.2.3 Εναλλακτικές προσεγγίσεις

Κβαντικά πηγάδια

Το φαινόμενο των καταστάσεων κβαντικών πηγαδιών (QW) διαχωρισμένου σπιν σε ένα υλικό, μπορεί να αποτελέσει μία διαφορετική προσέγγιση του φαινομένου spin filtering . Σε ένα σιδηρομαγνητικό υλικό, τα ενεργειακά επίπεδα των κβαντικών πηγαδιών QW εξαρτώνται από το σπιν εξαιτίας της ενέργειας ανταλλαγής διαχωρισμού, τα ενεργειακά επίπεδα των QW καταστάσεων για τα σπιν πάνω ηλεκτρόνια θα είναι επομένως διαφορετικά από αυτά των σπιν κάτω ηλεκτρονίων. Ο διαχωρισμός των καταστάσεων παρέχει την δυνατότητα επιλογής μιας συντονισμένης κατάστασης για κάθε σπιν εφαρμόζοντας την κατάλληλη τάση.

Ένα μόντελο που ακολουθεί αυτήν την προσέγγιση προτάθηκε από τους Slobodskyy et al[18] το 2003. Αποτελούταν από μια δόμη διπλού φράγματος από ZnSe/ZnBeSe/ZnMnSe/ZnBeSe/ZnSe στην οποία κύριο χαρακτηριστικό μελέτης ήταν η χαρακτηριστική καμπύλη ρεύματος-τάσης.



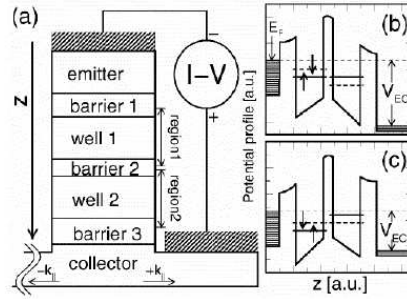
Σχήμα 2.8: a) Σχηματική απεικόνιση των ενεργειακών ζωνών για μια συντονισμένη δόμη με εφαρμογή τάσης b) Χαρακτηριστική καμπύλη ρεύματος-τάσης με την εφαρμογή μαγνητικού πεδίου

Τα στρώματα ZnBeSe είναι τα φράγματα διέλευσης ενώ οι καταστάσεις κβαντικών πηγαδιών σχηματίζονται στο στρώμα ZnMnSe , το οποίο αν και δεν είναι σιδηρομαγνητικό υλικό εμφανίζει πολύ μεγάλο διαχωρισμό Zeeman των καταστάσεων αυτών υπό την επίδραση μαγνητικού πεδίου. Το μέγεθος του διαχωρισμού ελέγχεται από την ένταση του εφαρμοζόμενου πεδίου. Από την χαρακτηριστική καμπύλη ρεύματος-τάσης, σε μηδενικό πεδίο παρατηρήθηκε μια ευρεία κορυφή συντονισμού στα 0.12V. Η κορυφή αυτή χωρίζεται σε δύο κορυφές με την εφαρμογή πεδίου και το εύρος του διαχωρισμού αυξάνει με την ένταση του πεδίου, αντιστοιχώντας σε διαχωρισμό λόγω του φαινομένου Zeeman . Κάθε μία από τις κορυφές είναι

δυνατόν να αποδοθεί σε σπιν πάνω και σπιν κάτω ενεργειακές καταστάσεις μέσα στο πηγάδι. Υπό αυτές τις συνθήκες είναι εφικτή η επιλογή του επιθυμητού ρεύματος σπιν εφαρμόζοντας την κατάλληλη τάση στην δομή.

Φαινόμενο Rashba

Μία εντελώς διαφορετική προσέγγιση, ένα φίλτρο σπιν το οποίο δεν χρησιμοποιεί μαγνητικά υλικά, προτάθηκε από τους Koga et al [;]. Σύμφωνα με το μοντέλο αυτό, η επίδραση της σύζευξης σπιν-τροχιάς λόγω του φαινομένου Rashba αναμένεται να προκαλέσει διαχωρισμό λόγω σπιν στα ενεργειακά επίπεδα του πηγαδιού.



Σχήμα 2.9: a) Σχηματική απεικόνιση της προτεινόμενης συσκευής φίλτρου σπιν b), c) Προφίλ δυναμικού για την ζώνη αγωγιμότητας της συσκευής. Οι συνεχείς και οι διακοπτόμενες γραμμές αντιστοιχούν στις καταστάσεις κβαντικού πηγαδιού QW των σπιν πάνω και σπιν κάτω ηλεκτρονίων.

Η χαμιλτονιανή εξίσωση του συστήματος σε μία διάσταση μπορεί να γραφτεί:

$$\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*(z)} + U_{\uparrow,\downarrow}^{eff}(k_{||}, z) = E_z, \quad (2.6)$$

$$U_{\uparrow,\downarrow}^{eff}(k_{||}, z) = \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m^*(z)} \pm \alpha(z)k_{||} + U_0(z) - Ek_{||}$$

όπου m^* είναι η ενεργός μάζα του ηλεκτρονίου, ο z -άξονας είναι κάθετος στο φράγμα διέλευσης, $k_{||}$ είναι η παράλληλη συνιστώσα της ορμής και $\alpha(z)$ είναι η σταθερά Rashba στην θέση z . Το πρόσημο της σταθεράς αντιστοιχεί στην χαμιλτονιανή για τα σπιν πάνω και σπιν κάτω ηλεκτρόνια. Η χαμιλτονιανή αυτή καταλήγει σε ενεργειακά επίπεδα των καταστάσεων του

κβαντικού πηγαδιού που εξαρτώνται από το σπιν, γι'αυτόν τον λόγο είναι δυνατόν να επιτευχθεί επιλεκτικότητα του ρεύματος διέλευσης.

Οι δυο αυτές εναλλακτικές προσεγγίσεις του φαινομένου φιλταρίσματος σπιν με την χρήση κβαντικών πηγαδιών έχουν ορισμένα ελκυστικά χαρακτηριστικά, όπως την επιλογή του σπιν με την εφαρμογή τάσης και τον έλεγχο της τάσης μέσω του εύρους των κβαντικών πηγαδιών της συσκευής.

2.3 Τεχνολογικές Εφαρμογές - Spintronics

2.3.1 Εισαγωγή

Η ραγδαία πρόοδος της επιστήμης και της τεχνολογίας για την κατασκευή διαρκώς μικρότερων διαστάσεων ολοκληρωμένων κυκλωμάτων έχει οδηγήσει στην προσέγγιση της τάξης μεγέθους των νανομέτρων. Η κλίμακα αυτή αναδεικνύει την κυματική συμπεριφορά των ηλεκτρονίων, δημιουργώντας την ανάγκη ανάπτυξης συσκευών οι οποίες θα εκμεταλλεύονται τις ιδιαιτερότητες του κβαντικού κόσμου και θα εξασφαλίζουν μοναδικά πλεονεκτήματα σε σχέση με τις ήδη υπάρχουσες τεχνολογίες.

Μια τέτοια ιδιότητα της κβαντικής φύσης του ηλεκτρονίου είναι το σπιν, το οποίο σχετίζεται στενά με τις μαγνητικές ιδιότητες. Οι συσκευές που στηρίζονται στις ιδιότητες του σπιν για να λειτουργήσουν αποτελούν τον κλάδο των spintronics από την σύντηξη των λέξεων spin και electronics . Ο όρος spintronics συχνά αναφέρεται και ως spinelectronics και "magneto-electronics" αν και η ύπαρξη μαγνητικού πεδίου ή/και μαγνητικού υλικού δεν είναι πάντα απαραίτητη για τον χειρισμό και έλεγχο του σπιν. Με τον όρο σπιν αναφερόμαστε είτε στην ιδιοπεριστροφή ενός ηλεκτρονίου, είτε στην μέση ιδιοπεριστροφή ενός συνόλου ηλεκτρονίων που εκφράζεται από την μαγνήτιση. Ο έλεγχος του σπιν αναφέρεται στον έλεγχο του πληθυσμού και της φάσης του σπιν σε ένα σύνολο σωματιδίων και στον σύμφωνο χειρισμό ενός συστήματος με ένα ή λίγα σπιν. Ο στόχος των τεχνολογιών spintronics είναι η κατανόηση της αλληλεπίδρασης μεταξύ των σπιν των σωματιδίων σε περιβάλλοντα στερεάς κατάστασης και η κατασκευή χρήσιμων συσκευών με την χρησιμοποίηση της κατανόησης αυτής. Βασικά πεδία έρευνας είναι η μεταφορά του σπιν, η δυναμική και η χαλάρωση του σπιν σε ηλεκτρονικές συσκευές[19].

2.3.2 Μαγνητικές Μνήμες -MRAM

Η πιο εξελιγμένη εφαρμογή των spintronics αυτήν την στιγμή, είναι οι τεχνολογίες αποθήκευσης με μαγνητικές μνήμες τυχαίας προσπέλασης (MRAM). Η μνήμη MRAM διατηρεί την αρχική της κατάσταση (τα δεδομένα που περιέχει) ακόμη και αν σταματήσει η ηλεκτρική τροφοδοσία της σε αντίθεση με τους σημερινούς τύπους μνήμης. Επίσης έχει ταχύτατους ρυθμούς ανάγνωσης και επανεγγραφής που ξεπερνάνε κατά πολύ τις σημερινές συμβατικές μνήμες RAM .

Τα κύρια μέρη στις σημερινές κεφαλές ανάγνωσης των σκληρών δίσκων καθώς και στις μνήμες MRAM , κατασκευάζονται από σιδηρομαγνητικά μεταλλικά κράμματα. Τέτοιες συσκευές με βάση τα μέταλλα αποτελούν την πρώτη και πιο ώριμη από τις τρεις κατηγορίες των σπιντρονικών συσκευών. Μια δεύτερη κατηγορία αποτελούν οι συσκευές στις οποίες ρεύματα με πολωμένο σπιν ρέουν μέσα σε ημιαγωγούς. Το να πετύχουμε στην πράξη σπιντρονικές εφαρμογές, θα μας επιτρέψει να έχουμε μια πλούσια γκάμα από ήδη υπάρχουσες μικροηλεκτρονικές συσκευές σε μια εναλλακτική μορφή με παραπάνω δυνατότητες εκμεταλλευόμενοι το σπιν. Επίσης θα αναπτυχθούν και άλλες συσκευές που θα εκμεταλλεύονται τις υψηλής ποιότητας οπτικές ιδιότητες των ημιαγωγών και την ικανότητά τους να ενισχύουν τόσο τα οπτικά όσο και τα ηλεκτρικά σήματα. Ως παραδείγματα μπορούν να αναφερθούν πολύ γρήγοροι διακόπτες και πλήρως προγραμματιζόμενοι σπιντρονικοί μικροεπεξεργαστές. Η νέα αυτή λεωφόρος εφαρμογών περιλαμβάνει μια νέα τάξη πολυλειτουργικών ηλεκτρονικών που συνδυάζουν λογική, αποθήκευση και επικοινωνία σε ένα μοναδικό τσιπ.

Σ' ένα συνηθισμένο ηλεκτρικό κύκλωμα, τα σπιν κατευθύνονται προς τυχαίες κατευθύνσεις και δεν παίζουν ρόλο στην αντίσταση ενός σύρματος ή στην ενίσχυση ενός κυκλώματος από τρανζίστορ. Οι σπιντρονικές συσκευές αντίθετα, στηρίζονται στις διαφορές κατά την κίνηση των ηλεκτρονίων με σπιν προς τα επάνω, από αυτά με σπιν προς τα κάτω. Σ' έναν σιδηρομαγνήτη, όπως ο σίδηρος ή το κοβάλτιο, τα σπιν μερικών ηλεκτρονίων σε γειτονικά άτομα τείνουν να ευθυγραμμισθούν. Σ' ένα ισχυρά μαγνητισμένο κομμάτι σιδήρου, η ευθυγράμμιση επεκτείνεται στο μεγαλύτερο μέρος του μετάλλου. Όταν ένα ρεύμα περάσει από τον σιδηρομαγνήτη, τα ηλεκτρόνια με το ένα είδος κατεύθυνσης του σπιν τείνουν να εμποδισθούν. Το αποτέλεσμα είναι μια πόλωση των σπιν του ρεύματος, κατά την οποία όλα τα σπιν των ηλεκτρονίων προσανατολίζονται προς την κατεύθυνση εύκολης διέλευσης.

Ένας σιδηρομαγνήτης μπορεί ακόμη να επηρεάσει τη ροή ενός ρεύματος διαμέσω κάποιου διπλανού μη μαγνητικού μετάλλου. Για παράδειγμα, οι σημερινές κεφαλές ανάγνωσης στους σκληρούς δίσκους των υπολογιστών, χρησιμοποιούν τη λεγόμενη βαλβίδα σπιν spin valve . Σε αυτή, ένα στρώμα μη μαγνητικού μετάλλου βρίσκεται ανάμεσα από δύο άλλα σιδηρομαγνητικά στρώματα, σαν το τυρί και τα ψωμιά στο σάντουιτς αντίστοιχα. Η μαγνήτιση του πρώτου σιδηρομαγνητικού στρώματος είναι σταθερή, ενώ του δεύτερου σιδηρομαγνητικού στρώματος μπορεί να αλλάζει διεύθυνση με την εφαρμογή μαγνητικού πεδίου.

Η κεφαλή ανάγνωσης αποτελείται από ένα σιδηρομαγνητικό στρώμα σταθερής μαγνήτισης συνοδευόμενο από ένα στρώμα μη μαγνητικού υλικού. Τα δεδομένα "1" και "0" στον σκληρό δίσκο αντιστοιχούν σε μαγνητικές περιοχές του δίσκου οι οποίες είναι μαγνητισμένες σε παράλληλη και αντιπαράλληλη διεύθυνση ως προς την μαγνήτιση του σταθερού στρώματος της κεφαλής αντίστοιχα. Στην παράλληλη περίπτωση, τα ηλεκτρόνια που έχουν σπιν προσανατολισμένο στην προτιμητέα διεύθυνση των μαγνητίσεων κυκλοφορούν με ευκολία μέσα στον αγωγό ενώ τα ηλεκτρόνια με σπιν αντίθετο εμποδίζονται. Στην αντιπαράλληλη περίπτωση, όλα τα ηλεκτρόνια εμποδίζονται. Οι μεταβολές που προκύπτουν στο ρεύμα επιτρέπουν στις κεφαλές να ανιχνεύουν ασθενή πεδία, έτσι ώστε τα δεδομένα μπορούν να αποθηκεύονται με χρήση πιο πυκνών μαγνητικών εγγραφών στο δίσκο, αυξάνοντας έτσι την αποθηκευτική δυνατότητα.

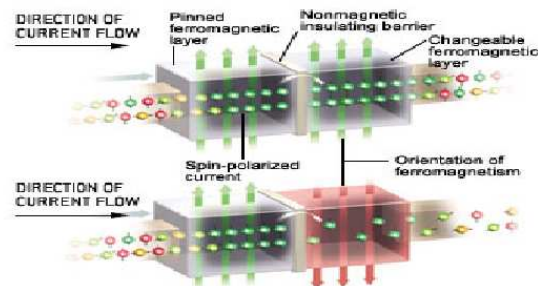
Επαφές μαγνητικής σήραγγας - MJT

Μια άλλη συσκευή με τρία στρώματα, η επαφή μαγνητικής σήραγγας(MJT), έχει ένα λεπτό μονωτικό στρώμα μεταξύ δύο μεταλλικών σιδηρομαγνητών(Βλέπε Σχ. 2.10). Και εδώ το ένα

από τα δύο σιδηρομαγνητικά στρώματα έχει σταθερή μαγνήτιση ενώ στο άλλο σιδηρομαγνητικό στρώμα η μαγνήτιση μπορεί να μεταβάλεται με την εφαρμογή μαγνητικού πεδίου. Το ρεύμα περνάει από την συσκευή με την διαδικασία της χβαντικής σήραγγας: Ένας μικρός αριθμός ηλεκτρονίων καταφέρνει και υπερπηδά τον φραγμό του μονωτή. Το ρεύμα αυτό εμποδίζεται όταν τα δύο σιδηρομαγνητικά στρώματα έχουν αντίθετους προσανατολισμούς μαγνήτισης, ενώ επιτρέπεται η διέλευσή του όταν οι προσανατολισμοί των μαγνητίσεων είναι όμοιοι.

Οι επαφές μαγνητικής σήραγγας αποτελούν τη βάση των MRAM τσιπ που αναφέρθηκαν πριν. Κάθε επαφή μπορεί ν' αποθηκεύσει ένα bit πληροφορίας με τον προσανατολισμό του στρώματος μεταβλητής μαγνήτισης. Το στρώμα αυτό κρατάει τη μαγνητική του κατάσταση άσχετα αν υπάρχει ηλεκτρική τροφοδοσία ή όχι, τουλάχιστον μέχρι να ξαναγράψουμε σ' αυτό με την θέλησή μας.

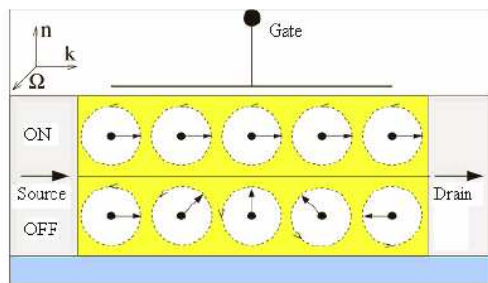
Ενώ οι σπιντρονικές συσκευές μετάλλων που μόλις περιγράφηκαν μας προσφέρουν νέους τρόπους αποθήκευσης πληροφοριών, οι σπιντρονικές συσκευές ημιαγωγών μπορούν να προσφέρουν ακόμη περισσότερες δυνατότητες. Επειδή οι συμβατικοί ημιαγωγοί δεν είναι σιδηρομαγνητικοί, κάποιος μπορεί ν' αναρωτηθεί πως οι σπιντρονικές συσκευές ημιαγωγών μπορούν να λειτουργήσουν. Μια λύση περιλαμβάνει ένα σιδηρομαγνητικό μέταλλο να στέλνει ένα ρεύμα με πολωμένα σπιν μέσα σ' ένα ημιαγωγό.



Σχήμα 2.10: Επαφή μαγνητικής σήραγγας, Εικόνα από SLIMFILMS,MOTOROLA

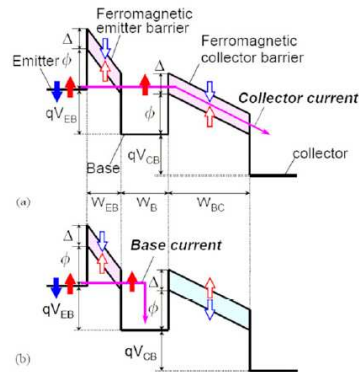
2.3.3 Σπιν Τρανζίστορ - SFET

Το 1990 οι Supriyo Datta και Biswajit A. Das [20], πρότειναν ένα σχέδιο για ένα τρανζίστορ πεδίου με πολωμένα σπιν, ή σε συντομία σπιν FET . Σ' ένα συμβατικό τρανζίστορ FET , ένας στενός δίαυλος από ημιαγώγιμο υλικό βρίσκεται μεταξύ 2 ηλεκτροδίων που ονομάζονται πηγή και συλλέκτης. Όταν εφαρμοστεί κάποια τάση στο ηλεκτρόδιο της πύλης, το οποίο βρίσκεται πάνω από τον δίαυλο, το δημιουργούμενο ηλεκτρικό πεδίο οδηγεί τα ηλεκτρόνια έξω από τον δίαυλο μετατρέποντας τον δίαυλο σε μονωτή, ελέγχοντας έτσι την λειτουργία *ON/OFF*. Το σπιν FET τρανζίστορ των Datta και Das , έχει πηγή και συλλέκτη από σιδηρομαγνητικό υλικό που λειτουργούν ως μέσα εισαγωγής και ανίχνευσης του σπιν του ηλεκτρονίου. Η πηγή εισάγει ηλεκτρόνια με σπιν παράλληλο στην διεύθυνση μεταφοράς. Τα ηλεκτρόνια όσο μεταφέρονται μέσω του καναλιού διατηρούν το σπιν τους το οποίο ανιχνεύεται όταν φτάνουν στον συλλέκτη. Αυτό σημαίνει σε μια απλοποιημένη εικόνα ότι τα ηλεκτρόνια είτε μπορούν να εισέλθουν στον συλλέκτη αν έχουν τον ίδιο προσανατολισμό σπιν με αυτόν (κατάσταση *ON*) είτε να σκεδασθούν μακριά (κατάσταση *OFF*). Ο ρόλος της πύλης είναι να παράγει ένα ενεργό μαγνητικό πεδίο στην κατεύθυνση Ω του σχήματος 2.11. Έτσι μεταβάλλοντας την τάση της πύλης είναι δυνατή η επιλογή της διεύθυνσης του πεδίου να είναι παράλληλη ή αντιπαράλληλη ή σε οποιαδήποτε ενδιάμεση κατάσταση σε σχέση με την διεύθυνση του σπιν ελέγχοντας με αυτόν τον τρόπο την διέλευση του ρεύματος.



Σχήμα 2.11: Σχηματική απεικόνιση του προτεινόμενου SFET από τους Datta-Das [20]

Οι Sugahara και Tanaka [21] πρότειναν ένα θεωρητικό μοντέλο ενός ημιαγωγικού τρανζιστόρ που χρησιμοποιεί φίλτρο σπιν (*SFT*). Η συσκευή αυτή αποτελείται από μη μαγνητικούς ημιαγωγούς για εκπομπό, βάση και συλλέκτη χωρισμένους από δυό φίλτρα σπιν-φράγματα διέλευσης. Το φράγμα του εκπομπού φιλτράρει τα σπιν καθώς αυτά διέρχονται λόγω φαινομένου σήραγγας από τον εκπομπό στην βάση όταν εφαρμόζεται τάση, επιτρέποντας μόνο στα ηλεκτρόνια με σπιν πάνω να περάσουν. Το φράγμα του συλλέκτη λειτουργεί σαν αναλυτής σπιν για τα πολωμένα σπιν που διέρχονται από την βάση. Το εύρος της βάσης πρέπει να είναι μικρότερο από το μήκος ανάκλασης του σπιν. Όταν τα δυό φίλτρα είναι μαγνητισμένα με παράλληλους προσανατολισμούς τα ηλεκτρόνια με σπιν πάνω που εισέρχονται στην βάση μπορούν να βρεθούν στον συλλέκτη λόγω φαινομένου σήραγγας, επειδή συναντούν χαμηλότερο ύψος φράγματος, με συνέπεια την ανίχνευση υψηλά πολωμένου ρεύματος. Στην αντίθετη περίπτωση της αντιπαράλληλης μαγνητίσης τα ηλεκτρόνια δεν είναι δυνατόν να περάσουν το φράγμα του συλλέκτη και δεν ανιχνεύεται ρεύμα σε αυτόν. Επομένως η σχετική μαγνητίση των δυό φίλτρων καθορίζει την απόδοση ενός *SFT* οδηγώντας σε υψηλες τιμές μαγνητοαντίστασης.

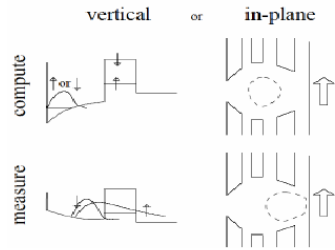


Σχήμα 2.12: Σχηματική απεικόνιση του προτεινόμενου *SFT* από τους Sugahara-Tanaka [21] *a)* παράλληλη μαγνητίση *b)* αντιπαράλληλη μαγνητίση

2.3.4 Κβαντικοί Υπολογιστές -qubit

Πολλοί από τους κβαντικούς υπολογιστές που έχουν προταθεί μέχρι τώρα χρησιμοποιούν το σπιν σαν την βασική μονάδα κβαντικής πληροφορίας ή αλλιώς qubit . Υπάρχουν θεωρητικές προτάσεις για την χρήση φίλτρων σπιν σαν ένα εναλλακτικό τρόπο για να επιτευχθεί ο κβαντικός υπολογιστής όπως φαίνεται στο ακόλουθο σχήμα 2.13.

Σε αυτήν την περίπτωση το φαινόμενο του φιλταρίσματος του σπιν επιτρέπει την κβαντική μέτρηση του qubit που υλοποιείται από την κατάσταση του σπιν ενός ηλεκτρονίου σε μια κβαντική τελεία (quantum dot). Η συσχέτιση της κυματοσυνάρτησης του ηλεκτρονίου από μια κβαντική τελεία στην γειτονική της πραγματοποιείται λόγω φαινομένου σήραγγας διαμέσω



Σχήμα 2.13: Σχηματική απεικόνιση μιας κβαντικής μέτρησης με την χρήση φίλτρου σπιν [22]

φράγματος φιλτραρίσματος σπιν. Το ενεργειακό επίπεδο του παγιδευμένου ηλεκτρονίου καθορίζεται από την εφαρμοζόμενη τάση πύλης, επιτρέποντας του να περάσει από ένα φράγμα τοποθετημένο πίσω από μια κβαντική τελεία. Εάν το φράγμα είναι μαγνητικό τότε η πιθανότητα διέλευσης του ηλεκτρονίου εξαρτάται από τον σχετικό μαγνητικό προσανατολισμό του σπιν του ως προς τον μαγνητικό προσανατολισμό της μαγνήτισης του φράγματος. Επομένως το σπιν του παγιδευμένου ηλεκτρονίου μπορεί να αναγνωστεί, ανάλογα με τον αν περνάει το φράγμα ή όχι, επιτρέποντας την μέτρηση της κατάστασης κάθε qubit ξεχωριστά και αξιόπιστα με ηλεκτρικά μέσα. Αυτός είναι ένας απλός τρόπος με τον οποίο η πληροφορία του σπιν μετατρέπεται σε πληροφορία φορτιού αν και υπάρχουν πολλά υλικά και παραμέτροι που πρέπει ακόμα να διερευνηθούν μέχρις ότου επιτευχθεί ο σκοπός αυτός.

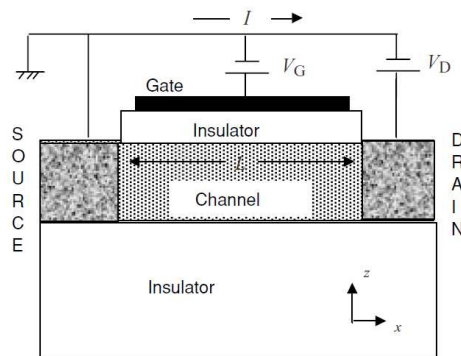
Κεφάλαιο 3

Ατομική θεώρηση της αντίστασης

3.1 Εισαγωγή

Σε προηγούμενο κεφάλαιο έγινε αναφορά σε συσκευές, θεωρητικά προτεινόμενες ή και τεχνολογικά εφαρμόσιμες οι λειτουργίες των οποίων και τα παρατηρούμενα μεγέθη καθορίζονται και χαρακτηρίζονται από τις βασικές αρχές της μακροσκοπικής φυσικής. Στο παρών κεφάλαιο θα ακολουθηθεί η αντίστροφη πορεία, θα γίνει δηλαδή μια προσπάθεια περιγραφής και μοντελοποίησης των ηλεκτρικών ιδιοτήτων συσκευών που αναφέρονται σε ατομική κλίμακα. Η προσέγγιση αυτή ονομάζεται από προσέγγιση από "κάτω προς τα πάνω"(bottom-up) σε αντίθεση με την καθιερωμένη προσέγγιση από "πάνω προς τα κάτω"(top-down).

Η προσέγγιση αυτή χαρακτηρίζεται από μία γενική δόμη συσκευής, μία απλή εκδόχη ενός νανοτρανζίστορ όπως φαίνεται στο σχήμα 3.1.



Σχήμα 3.1: Απεικόνιση ενός τρανζίστορ εκπομπής πεδίου (FET) σε νανοκλίμακα

Η συσκευή αποτελείται από ένα ημιαγωγίμο κανάλι χωρισμένο απο την μεταλλική πύλη με ένα λεπτό μονώτικο στρώμα. Οι περιοχές εκπομπός και βάση(sourge, drain) είναι δυο φύλλα επαφής τα οποία έχουν υψηλή αγωγιμότητα. Η αντίσταση του καναλιού καθορίζει το ρεύμα που ρέει απο τον εκπομπό στην βάση όταν εφαρμοστεί μια τάση μεταξύ αυτών. Η τάση που εφαρμόζεται στην πύλη ελέγχει την ηλεκτρονική πυκνότητα στο κανάλι και επομένως την αντίσταση του.

Διάγραμμα ενεργειακών επιπέδων

Η μοντελοποίηση της ροής του ρεύματος ξεκινάει απο τον σχεδιασμό του διαγράμματος των ενεργειακών επιπέδων σε ισορροπία και τον εντοπισμό του ηλεκτροχημικού δυναμικού μ ή της ενέργειας Fermi που καθορίζεται από τις επαφές εκπομπού και βάσης. Υποθέτουμε ότι οι περιοχές επαφής έχουν συνεχή κατανομή καταστάσεων, υπόθεση ρεαλιστική εάν είναι μεταλλικές. Οι επιτρεπτές καταστάσεις είναι κατηλλημένες μεχρι κάποια ενέργεια μ η οποία μπορεί να εντοπιστεί με πειράματα φωτοεκπομπής από το έργο εξόδου που ορίζεται ως η ελάχιστη ενέργεια που χρειάζεται ένα φωτόνιο για να εξέλθει από ένα μέταλλό, και δίνει πληροφορίες για την θέση του επιπέδου Fermi.

Αν οι περιοχές επαφής είναι συνδεδεμένες με το καναλι με μηδενική εφαρμογή τάσης, τότε τα ηλεκτρόνια ρέουν από και προς την συσκευή φέρνοντας σε ισορροπία το σύστημα με ένα κοινό ηλεκτροχημικό δυναμικό μ . Στην κατάσταση ισορροπίας ο μέσος(ανά μονάδα χρόνου) αριθμός ηλεκτρονίων για κάθε ενέργεια δεν είναι ακέραιος αλλά δίνεται απο την κατανομή Fermi

$$f_0(E - \mu) = \frac{1}{1 + \exp(E - \mu)/k_B T} \quad (3.1)$$

όπου k_B είναι η σταθερά Boltzman και T είναι η θερμοκρασία του υλικού. Το γινόμενο $k_B T$ έχει διαστάσεις ενέργειας και σε θερμοκρασία δωματίου ισούται με $k_B T \simeq 0.026 eV$.

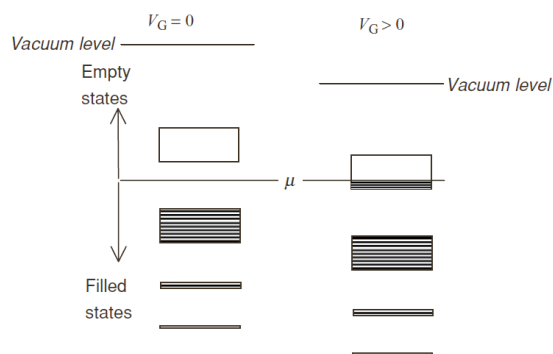
Ενεργειακά επίπεδα χαμηλότερα απο μ είναι πάντα γεμάτα ώστε $f_0 = 1$ ενώ επίπεδα που βρίσκονται υψηλότερα είναι πάντα άδεια με $f_0 = 0$. Επίπεδα που βρίσκονται σε ένα εύρος λίγων $k_B T$ είναι περιστασιακά γεμάτα και περιστασιακά άδεια ώστε ο μέσος αριθμός των ηλεκτρονίων να είναι $0 \leq f_0 \leq 1$.

Η αγωγιμότητα εξάρταται απο την διαθεσιμότητα καταστάσεων γύρω απο $E = \mu$, χωρίς να έχει σημασία αν οι καταστάσεις αυτές είναι γεμάτες(τρανζίστορ τύπου p) ή κενές (τρανζίστορ τύπου n). Ας υποθέσουμε ότι στις δύο επαφές μία θετική τάση V_D η οποία χαμηλώνει τα ενεργειακά επίπεδα στην βάση σε σχέση με τον εκπομπό και τα διατηρεί σε διακριτά ηλεκτροχημικά δυναμικά μ_1, μ_2 αντίστοιχα, διαχωρισμένα από qV_D

$$\mu_1 - \mu_2 = qV_D \quad (3.2)$$

δημιουργώντας δύο διαφορετικές κατανομές Fermi

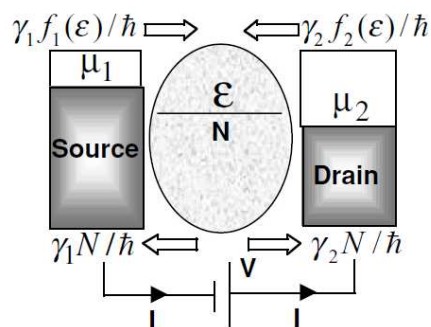
$$\begin{aligned} f_1(E) &= \frac{1}{1 + \exp[(E - \mu_1)/k_B T]} = f_0(E - \mu_1) \\ f_2(E) &= \frac{1}{1 + \exp[(E - \mu_2)/k_B T]} = f_0(E - \mu_2) \end{aligned} \quad (3.3)$$



Σχήμα 3.2: Επιτρεπτά ενεργειακά επίπεδα που μπορούν να είναι κατηλλημένα σε ένα κανάλι

Κάθε επαφή προσπαθεί να φέρει το κανάλι σε ισορροπία με αυτήν. Ο εκπομπός συνεχίζει να προσφέρει ηλεκτρόνια στο κανάλι ενώ η βάση συνεχίζει να αντλεί ηλεκτρόνια από το κανάλι με συνέπεια η συνολική συσκευή να είσερχεται σε μια ενδιάμεση κατάσταση μη ισορροπίας μεταξύ των δυο επαφών.

Ρεύμα σε ένα ενεργειακό επίπεδο



Σχήμα 3.3: Ροή των ηλεκτρονίων από και προς ένα κανάλι ενός ενεργειακού επιπέδου

Αν υποθέσουμε ότι στο κανάλι τα ηλεκτρόνια μπορούν να έχουν μόνο μία ενέργεια ϵ η οποία βρίσκεται ανάμεσα στα ηλεκτροχημικά δυναμικά των δύο επαφών μ_1 και μ_2 . Τότε ο εκπομπός θα ήθελε $f_1(\epsilon)$ ηλεκτρόνια να καταλαμβάνουν την ενέργεια ϵ ενώ η βάση θα ήθελε $f_2(\epsilon)$ ηλεκτρόνια αντίστοιχα, όπου f_1 και f_2 είναι οι παραπάνω κατανομές των επαφών. Ο πραγματικός αριθμός των ηλεκτρονίων θα είναι N κάτι ανάμεσα σε $f_1(\epsilon)$ και $f_2(\epsilon)$. Η απόλυτη ροή φορτίου

(ρεύμα) I_1 ανάμεσα στον εκπομπό και το κανάλι είναι ανάλογη του $(f_1 - N)$ όπου έχουμε παραλήψει το ε για λόγους απλότητας, οπότε

$$I_1 = \frac{q\gamma_1}{\hbar}(f_1(E) - N) \quad (3.4)$$

όπου q είναι το φορτίο ανά ηλεκτρόνιο. Η αντίστοιχη ροή στην βάση αντίστοιχα είναι

$$I_2 = \frac{q\gamma_2}{\hbar}(f_2(E) - N) \quad (3.5)$$

Οι σταθερές $q\gamma_1/\hbar$ και $q\gamma_2/\hbar$ είναι οι ρυθμοί με τους οποίους ένα ηλεκτρόνιο που αρχικά βρισκόταν στον επίπεδο E είναι δυνατόν να βρεθεί σε μία από τις δύο επαφές αντίστοιχα.

Σε μία σταθερή κατάσταση δεν υπάρχει ροή από και προς το κανάλι, επομένως $I_1 + I_2 = 0$ οπότε με αντικατάσταση προκύπτει

$$N = \frac{\gamma_1 f_1 + \gamma_2 f_2}{\gamma_1 + \gamma_2} \quad (3.6)$$

Αντικαθιστώντας το αποτέλεσμα αυτό σε μια από τις σχέσεις για τα ρεύματα, προκύπτει η έκφραση του ρεύματος σταθερής κατάστασης ανα διεύθυνση σπιν

$$I = I_1 = -I_2 = \frac{q}{\hbar} \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} [f_1(E) - f_2(E)] \quad (3.7)$$

Απο την τελευταία σχέση εξάγονται ορισμένα χρήσιμα συμπεράσματα. Πρώτα παρατηρούμε ότι δεν είναι δυνατή η ύπαρξη ροής αν $f_1(E) = f_2(E)$. Επίσης ένα επίπεδο που βρίσκεται χαμηλότερα και από τα δυο ηλεκτροχημικά δυναμικά θα έχει $f_1(E) = f_2(E) = 1$ και δεν θα συνεισφέρει στο ρεύμα, όπως και ένα επίπεδο που βρίσκεται υψηλότερα και έχει $f_1(E) = f_2(E) = 0$. Μόνο εκείνα τα επίπεδα που βρίσκονται στο εύρος λίγων $k_B T$ όπου ισχύει $f_1(E) \neq f_2(E) = 0$ συνεισφέρουν στην ροή του ρεύματος μεταξύ των δυο επαφών.

Κβάντωση της αγωγιμότητας

Ας θεωρήσουμε μία συσκευή στην οποία εφαρμόζεται μια μικρή τάση με συνέπεια τον διαχωρισμό των ηλεκτροχημικών δυναμικών των δυο επαφών. Από την σχέση 3.7 και με την υπόθεση ότι $\mu_1 > \varepsilon > \mu_2$ και χαμηλή θερμοκρασία ώστε $f_1 \equiv f_0(\varepsilon - \mu_1) \approx 1$ και $f_2 \equiv f_0(\varepsilon - \mu_2) \approx 0$ μπορούμε να γράψουμε :

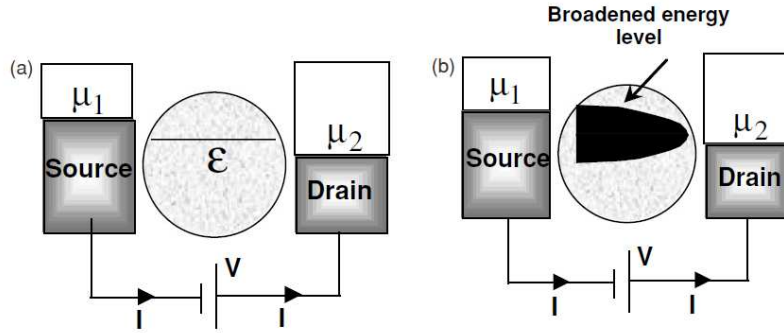
$$I = \frac{q}{\hbar} \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} = \frac{q\gamma_1}{2\hbar} \text{ αν } \gamma_1 = \gamma_2 \quad (3.8)$$

Η παραπάνω σχέση είναι λανθασμένη γιατί δεν λαμβάνει υπόψη της την διεύρυνση του επιπέδου ε που προέρχεται από την σύζευξη του καναλιού με τις επαφές. Η σύζευξη αναγκάζει το ενεργειακό επίπεδο να "απλωθεί" μεταξύ των μ_1, μ_2 . Το πραγματικό ρεύμα είναι μειωμένο σε σχέση με αυτό που περιγράφει η σχέση 3.8 κατά ένα παράγοντα $(\mu_1 - \mu_2)/C\gamma_1$ ο οποίος αντιπροσωπεύει το τμήμα εκείνο του ενεργειακού επιπέδου που "απλώθηκε" στο διάστημα $(\mu_1 - \mu_2) = qV_D$, ενώ ο παράγοντας $C\gamma_1$ είναι το ενεργό εύρος του καναλιού όπου C είναι μια αριθμητική σταθερά. Οπότε η ορθή σχέση είναι:

$$I = \frac{q\gamma_1 qV_D}{2\hbar C\gamma_1} \rightarrow G = \frac{I}{V_D} = \frac{q^2}{2C\hbar} \quad (3.9)$$

φανερώνοντας ότι η αγωγιμότητα πλησιάζει μία σταθερή τιμή ανεξάρτητη από το πόσο ισχυρά είναι συνδεδεμένες οι επαφές.

Πριν από την σύζευξη του καναλιού με τις επαφές η πυκνότητα των καταστάσεων και στις τρεις περιοχές έχει την μορφή του παρακάτω σχήματος



Σχήμα 3.4: Ενεργειακά επίπεδα πριν και μετά την σύζευξη επαφών-καναλιού

Υπάρχει ένα μόνο επίπεδο στο κανάλι και μία συνεχής κατανομή των καταστάσεων στις επαφές. Με την σύζευξη οι καταστάσεις αλλοιώνονται, το επίπεδο του καναλιού χάνει ένα τμήμα του καθώς αυτό διαχέεται στις επαφές ενώ κερδίζει και τμήμα από τα επίπεδα των επαφών με την αντίστροφη διαδικασία. Από την στιγμή που η απώλεια συμβαίνει σε μία καθορισμένη ενέργεια ενώ το κέρδος σε ένα εύρος ενεργειών, η συνολική επίδραση είναι μια διεύρυνση της πυκνότητας των καταστάσεων στο κανάλι από την αρχική του στενή μορφή σε μια πιο διαπλατισμένη μορφή. Η διευρυμένη πυκνότητα καταστάσεων μπορεί να έχει οποιαδήποτε μορφή αλλά η απλούστερη περιγραφή της είναι μια κατανομή Lorentz με κέντρο την ενέργεια του επιπέδου ϵ :

$$D_{\epsilon}(E) = \frac{\gamma/2\pi}{(E - \epsilon)^2 + (\gamma/2)^2} \quad (3.10)$$

όπου γ είναι η διεύρυνση σε μονάδες ενέργειας της κατάστασης. Για $\gamma \rightarrow 0$ η παραπάνω συνάρτηση Lorentz δίνει σωστά συνάρτηση δέλτα

Από την στιγμή που η σύζευξη με τις επαφές διευρύνει το διακριτό ενεργειακό επίπεδο σε μία συνεχή πυκνότητα καταστάσεων που δίνεται από την σχέση 3.10 η έκφραση 3.7 για το ρεύμα πρέπει να τροποποιηθεί ολοκληρώνοντας ως προς την κατανομή των καταστάσεων $D_{\epsilon}(E)dE$:

$$I = \frac{q}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE D_{\epsilon}(E) \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} [f_1(E) - f_2(E)] \quad (3.11)$$

Σε χαμηλές θερμοκρασίες μπορούμε να γράψουμε $f_1(E) - f_2(E) = 1$ αν $\mu_1 > E > \mu_2$ αλλιώς $f_1(E) - f_2(E) = 0$ έτσι ώστε το ρεύμα να δίνεται απο το την σχέση

$$I = \frac{q}{\hbar} \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} \int_{\mu_2}^{\mu_1} dE D_\varepsilon(E) \quad (3.12)$$

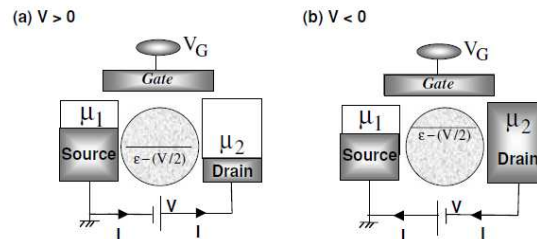
Εάν η τάση είναι αρκετά μικρή μπορούμε να υποθέσουμε ότι η πυκνότητα των καταστάσεων είναι σταθερή στο εύρος $\mu_1 > E > \mu_2$ και να χρησιμοποιήσουμε την σχέση 3.10 για να γράψουμε

$$I = \frac{q}{\hbar} \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} (\mu_1 - \mu_2) \frac{\gamma_1 + \gamma_2 / 2\pi}{(\varepsilon - \mu)^2 + (\gamma_1 + \gamma_2 / 2)^2} \quad (3.13)$$

Προφίλ δυναμικού

Στην προηγούμενη παράγραφο είδαμε πως με την εφαρμογή τάσης μεταξύ των δυο επαφών τα ηλεκτροχημικά δυναμικά χωρίζονται από $\mu_1 - \mu_2 = qV$. Ανάλογα τον τρόπο με τον οποίο το ενεργειακό επίπεδο ε επηρεάζεται απο την εφαρμοζόμενη τάση προκύπτουν διαφορετικές επιλογές.

Αν αγνοήσουμε την πύλη, τότε το δυναμικό στο κανάλι ενδέχεται να βρίσκεται στην μέση μεταξύ των επαφών, $\varepsilon \rightarrow \varepsilon - (V/2)$ όπως φαίνεται στο ακόλουθο σχήμα ανάλογα με το πρόσημο της τάσης



Σχήμα 3.5: Διάγραμμα ενεργειακών επιπέδων για θετικές και αρνητικές τιμές τάσης

Για μία μικρών διαστάσεων συσκευή η επίδραση του δυναμικού U είναι η αύξηση της πυκνότητας των καταστάσεων σε ενέργεια και μπορεί να συμπεριφθεί στις εξισώσεις υπολογισμού του

αριθμού των ηλεκτρονίων και του ρεύματος με άμεσο τρόπο

$$I = \frac{q}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE D_{\varepsilon}(E - U) \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} [f_1(E) - f_2(E)] \quad (3.14)$$

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} dE D_{\varepsilon}(E - U) \frac{\gamma_1 f_1(E) + \gamma_2 f_2(E)}{\gamma_1 + \gamma_2} \quad (3.15)$$

ενώ για τα ρεύματα σε κάθε επαφή μπορούμε να γράψουμε

$$I_1 = \frac{q}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE \gamma_1 [D_{\varepsilon}(E - U) f_1 - n(E)] \quad (3.16)$$

$$I_2 = \frac{q}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE \gamma_2 [D_{\varepsilon}(E - U) f_2 - n(E)] \quad (3.17)$$

$$\text{όπου } n(E) = D_{\varepsilon}(E - U) \left(\frac{\gamma_1}{\gamma_1 f_1(E)} + \frac{\gamma_2}{\gamma} f_2(E) \right) \quad (3.18)$$

Σε στάσιμη κατάσταση το άθροισμα των δυο ρεύματων ισούται με μηδέν

$$I = \frac{q}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE \bar{T}(E) [f_1(E) - f_2(E)] \quad (3.19)$$

όπου

$$\bar{T}(E) = D_{\varepsilon}(E - U) 2\pi \gamma_1 \gamma_2 / \gamma \quad (3.20)$$

είναι ο συντελεστής μεταφοράς.

Αγωγοί με πολλά ενεργειακά επίπεδα

Ένα γενικότερο μοντέλο που περιλαμβάνει n ενεργειακά επίπεδα απαιτεί την αντικατάσταση των μεγεθών και ποσοτήτων που έχουν ήδη αναφερθεί από τους αντίστοιχους πίνακες διαστάσεων $n \times n$

$$E \rightarrow [H]$$

$$\gamma_{1,2} \rightarrow [\Gamma_{1,2}]$$

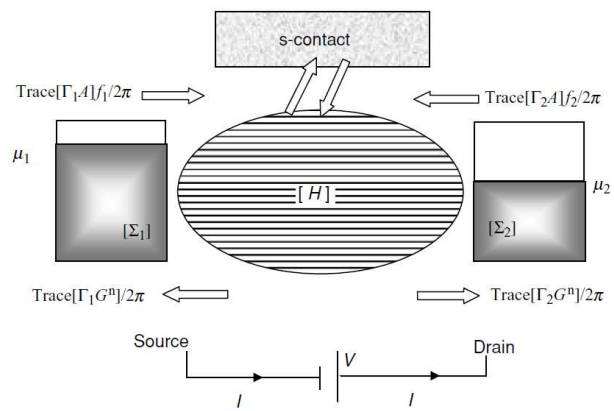
$$2\pi D(E) \rightarrow [A(E)]$$

$$2\pi n(E) \rightarrow [G^n(E)]$$

$$U \rightarrow [U]$$

$$N \rightarrow [\rho] = \int (dE/2\pi) [G^n]$$

Στην πραγματικότητα η επίδραση των επαφών περιγράφεται από έναν πίνακα 'ιδιοενέργειας' $[S_{1,2}(E)]$ το αντισυμμετρικό κομμάτι του οποίου είναι ο πίνακας διεύρυνσης $\Gamma_{1,2} = i[\Sigma_{1,2} - \Sigma_{1,2}^{\dagger}]$. Όλες οι ποσότητες και τα μεγέθη που ενδιαφέρουν μπορούν να υπολογιστούν από αυτούς τους πίνακες που προκύπτουν με την εφαρμογή της μεθόδου των πεπερασμένων διαφορών.



Σχήμα 3.6: Σχηματική αναπαράσταση της αντικατάστασης των μεγεθών ενδιαφέροντος από πίνακες

Κεφάλαιο 4

Μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών

4.1 Εισαγωγή

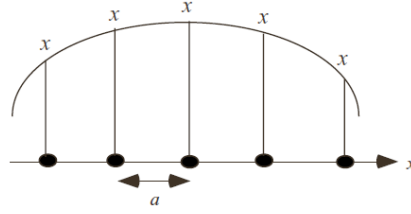
Σε προηγούμενο κεφάλαιο αναπτύξαμε την ατομική θεώρηση για την αγωγιμότητα και καταλήξαμε πως για την περιγραφή ενός γενικότερου μοντέλου n ενεργειακών επιπέδων απαιτείται η αντικατάσταση των μεγεθών και ποσοτήτων από πίνακες ανάλογων διαστάσεων. Στο κεφάλαιο αυτό θα γίνει η παρουσίαση μια προσεγγιστικής μεθόδου για την μετατροπή μιας διαφορικής εξίσωσης σε μια εξίσωση πινάκων. Η μέθοδος αυτή ονόμαζεται μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών.

4.2 Μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών

Η εξίσωση Schrödinger για το άτομο του Υδρογόνου μπορεί να επίλυθει με αναλυτικές μεθόδους, όμως τα περισσότερα από τα πρακτικά προβλήματα απαιτούν μια υπολογιστική μέθοδο. Ένα κοινό γνώρισμα όλων των υπολογιστικών μεθόδων είναι η χρήση κάποιου τεχνάσματος για την μετατροπή της κυματοσυνάρτησης σε διάνυσμα στηλης, του διαφορικού τελεστή σε πίνακα ετσι ώστε η εξίσωση Schrödinger να μετατραπεί από μια διαφορική εξίσωση σε μια εξίσωση πινάκων.

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{r}, t) &\Rightarrow \psi(t) \\ H_{op} &\Rightarrow [H] \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = H_{op} \Psi(\vec{r}, t) &\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} \psi(t) = [H] \psi(t)\end{aligned}\tag{4.1}$$

Η μετατροπή αυτή μπορεί να γίνει με πολλούς τρόπους, ένας από τους πιο απλούς είναι η επιλογή ενός διακριτού πλέγματος. Ας θεωρήσουμε μια μόνο διάσταση και ας διακριτοποιήσουμε την μεταβλητή θέσης x σε ένα πλέγμα όπως φαίνεται στο ακόλουθο σχήμα $x_n = na$



Σχήμα 4.1: Σχηματική αναπαράσταση μιας συνεχούς συνάρτησης από τις τιμές της σε ένα σύνολο σημείων διακριτού πλέγματος

Με την επιλογή του πλέγματος είναι δυνατή η αναπαράσταση της κυματοσυνάρτησης $\Psi(x, t)$ με ένα διάνυσμα στήλη $[\psi_1(t)\psi_2(t)\dots]^T$, όπου ο εκθέτης T δηλώνει αναστροφή, που περιέχει τις τιμές της γύρω από τα πλεγματικά σημεία την χρονική στιγμή t . Αν αγνοήσουμε την μεταβλητή του χρόνου μπορούμε να γράψουμε

$$\{\psi_1\psi_2\dots\} = \{\Psi(x_1)\Psi(x_2)\dots\} \quad (4.2)$$

Η αναπαράσταση αυτή γίνεται ακριβής στο όριο $a \rightarrow 0$, αλλά παραμένει ακριβής όσο το a είναι μικρότερο από την χωρική διακύμανση της κυματοσυνάρτησης Ψ .

Το επόμενο βήμα είναι να βρούμε την αναπαράσταση σε μορφή πίνακα του χαμιλτονιανού τελεστή

$$H_{op} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \quad (4.3)$$

Ο τρόπος με το οποίο πραγματώνεται αυτή η μετατροπή μιας διαφορικής εξίσωσης σε μια εξίσωση διαφορών λέγεται μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών

$$\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right)_{x=x_n} \rightarrow \frac{1}{a} [\Psi(x_{n+1}) - 2\Psi(x_n) + \Psi(x_{n-1})] \quad (4.4)$$

και

$$U(x)\Psi(x) \rightarrow U(x_n)\Psi(x_n) \quad (4.5)$$

Η τεχνική αυτή μας επιτρέπει να γράψουμε (λαμβάνοντας υπόψη ότι $t_0 \equiv \hbar^2/2ma^2$ και $U_n \equiv U(x_n)$)

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\psi_n}{dt} &= [H_{op}]_{x=x_n} = (U_n + 2t_0)\psi_n - t_0\psi_{n-1} - t_0\psi_{n+1} \\ &= \sum_m [(U_n + 2t_0)\delta_{n,m} - t_0\delta_{n,m+1} - t_0\delta_{n,m-1}] \psi_m \end{aligned} \quad (4.6)$$

όπου $\delta_{n,m}$ είναι το δέλτα του Kronecker $\delta_{n,m} = 1$ αν $n = m$ αλλιώς $\delta_{n,m} = 0$ αν $n \neq m$. Η παραπάνω εξίσωση μπορεί να γραφεί σαν μία εξίσωση πινάκων :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \{\psi(t)\} = [H]\{\psi(t)\} \quad (4.7)$$

Τα στοιχεία του πίνακα της χαμιλτονιανής δίνονται απο την σχέση

$$H_{n,m} = [U_n + 2t_0]\delta_{n,m} - t_0\delta_{n,m+1} - t_0\delta_{n,m-1} \quad (4.8)$$

Ο πίνακας που αναπαριστά την χαμιλτονιανή θα έχει την μορφή

$H =$	1	2	...	$N - 1$	N
1	$2t_0 + U_1$	$-t_0$...	0	0
2	$-t_0$	$2t_0 + U_2$...	0	0
...
$N - 1$	0	0	...	$2t_0 + U_{N-1}$	$-t_0$
N	0	0	...	$-t_0$	$2t_0 + U_N$

Για μια δεδομένη συνάρτηση δυναμικού $U(x)$ και με την κατάλληλη σταθερά πλέγματος α η κατασκευή του παραπάνω πίνακα είναι δυνατή.

Ιδιοτιμές και ιδιοδιανύσματα

Το επόμενο στάδιο είναι η εύρεση των ιδιοτιμών E_α και ιδιοδιανυσμάτων $\{\alpha\}$ του πίνακα $[H]$:

$$[H]\{\alpha\} = E_\alpha\{\alpha\} \quad (4.9)$$

Χρησιμοποιώντας την παραπάνω εξίσωση μπορούμε να δείξουμε ότι η κυματοσυνάρτηση $\{\psi(t)\} = e^{-iE_\alpha t/\hbar}\{\alpha\}$ ικανοποιεί την εξίσωση 1.19 η οποία είναι γραμμική επομένως λύση της θα είναι και κάθε γραμμικός συνδυασμός της $\{\psi(t)\}$

$$\{\psi(t)\} = \sum_{\alpha} C_{\alpha} e^{-iE_{\alpha} t/\hbar} \{\alpha\} \quad (4.10)$$

Η τελευταία μορφή είναι πλήρης, δηλαδή κάθε λύση της 1.19 μπορεί να γραφτεί σε αυτήν την μορφή. Με μια δεδομένη αρχική κατάσταση είναι δυνατός ο υπολογισμός των συντελεστών C_{α} .

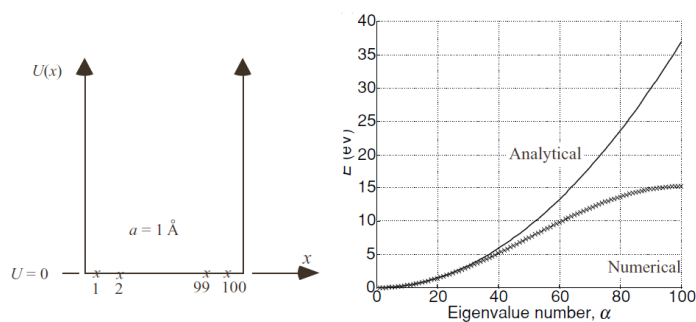
4.2.1 Σωματίδιο σε κουτί

Σε αυτό τμήμα θα παρουσιάσουμε μία απλή εφαρμογή της μεθόδου για το πρόβλημα του σωματιδίου σε ένα κουτί που έχει περιγραφεί σε προηγούμενη υποενότητα. Το δυναμικό μέσα στο κουτί είναι σταθερό και το κουτί περιορίζεται απο δυό απείρως υψηλά φράγματα στα σημεία $x = 0$ και $x = L$. Η αναλυτική λύση του προβλήματος δίνεται απο τις ιδιοσυναρτήσεις $\phi_{\alpha}(x) \sim \sin(k_{\alpha}x)$ όπου $k_{\alpha} = \alpha\pi/L$, $\alpha = 1, 2, \dots$ και τις ιδιοενέργειες $E_{\alpha} = \hbar^2 k_{\alpha}^2 / 2m$.

Μια υπολογιστική λύση του ίδιου προβλήματος βρίσκεται με την επιλογή ενός διακριτού πλέγματος 100 σημείων και γράφοντας εναν 100×100 πίνακα $[H]$ με $U_n = 0$:

$H =$	1	2	...	99	100
1	$2t_0$	$-t_0$...	0	0
2	$-t_0$	$2t_0$...	0	0
...
99	0	0	...	$2t_0$	$-t_0$
100	0	0	...	$-t_0$	$2t_0$

Με την χρήση υπολογιστικών πακέτων όπως το MATLAB, ο υπολογισμός των ιδιοτιμών και των αντίστοιχων ιδιοδιανυσμάτων είναι εύκολος. Στο συγκεκριμένο πρόβλημα το αποτέλεσμα είναι 100 ιδιοτιμές όσα και τα πλεγμιακά σημεία που ακολουθούν την αναλυτική έκφραση $E_\alpha = \hbar^2 \pi^2 \alpha^2 / 2mL^2$ με $L = 101\alpha$ ικανοποιητικά για χαμηλές ενέργειες αλλά αποκλίνουν σημαντικά σε υψηλότερες.



Σχήμα 4.2: Ενεργειακά επίπεδα για ένα σωματίδιο σε κουτί υπολογισμένα για ένα διακριτο πλέγμα 100 σημείων

Η προσεγγιστική μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right)_{x=x_n} \rightarrow t_0 [\Psi(x_{n+1}) - 2\Psi(x_n) + \Psi(x_{n-1}))]$$

είναι ακριβής μόνο εάν η κυματοσυνάρτηση Ψ μεταβάλλεται αργά σε ένα μήκος κλίμακας α . Εάν αντικαταστήσουμε $\Psi \sim \sin(k_\alpha x)$ προκύπτει:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right)_{x=x_n} = t_0 (k_\alpha \alpha)^2 \Psi(x_n)$$

ενώ

$$t_0 [\Psi(x_{n+1}) - 2\Psi(x_n) + \Psi(x_{n-1}))] = 2t_0 (1 - \cos k_\alpha \alpha) \Psi(x_n)$$

Παρατηρούμε πως το αναλυτικό αποτέλεσμα $E_\alpha = t_0 (\pi \alpha / L)^2$ ακολουθεί μια παραβολική συνάρτηση ενώ το υπολογιστικό $E_\alpha = 2t_0 [1 - \cos(\alpha \pi a / L)]$ μια συνημιτονοειδή. Τα δυο αποτελέσματα είναι ίσα μόνο αν $k_\alpha \alpha = \alpha \pi a / L$ ετσι ώστε $\cos(k_\alpha \alpha) \approx 1 - (k_\alpha^2 \alpha^2 / 2)$.

Κανονικοποίηση

Στην αναλυτική προσέγγιση η κανονικοποίηση των κυματοσυναρτήσεων δίνεται από την σχέση

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\phi_{\alpha}(x)|^2 = 1$$

ενώ στην υπολογιστική μέθοδο πρέπει να ικανοποιείται η σχέση

$$\sum_{n=1}^N |\phi_{\alpha}(x_n)|^2 = 1$$

Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα παρατηρούμε ότι διαφέρουν κατά την σταθερά πλέγματος α

$$\begin{aligned} \text{Αναλυτικό αποτέλεσμα} &\rightarrow \text{Υπολογιστικό αποτέλεσμα} \\ |\phi_{\alpha}(x)|^2 = (2/L) \sin^2(k_{\alpha}x) &\rightarrow |\phi_{\alpha}(x_n)|^2 = (2\alpha/L) \sin^2(k_{\alpha}x) \end{aligned}$$

Συνοριακές Συνθήκες

Από αυστηρή μαθηματική άποψη ο πίνακας $[H]$ είναι απείρως μεγάλος, αλλά στην πράξη είναι δυνατόν να περικοπεί σε έναν περιορισμένο αριθμό N σημείων. Αυτό συνεπάγεται ότι στα δύο άκρα αντικαθιστούμε τον όρο

$$-t_0\psi_0 + (2t_0 + U_1\psi_1 - t_0\psi_2$$

με

$$(2t_0 + U_1)\psi_1 - t_0\psi_2$$

και

$$-t_0\psi_{N-1} + (2t_0 + U_N\psi_N - t_0\psi_{N+1})$$

με

$$-t_0\psi_{N-1} + (2t_0 + U_N\psi_N)$$

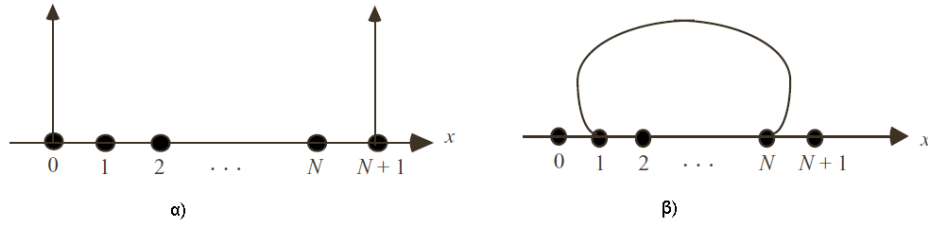
.

Στην πραγματικότητα θέτουμε τις τιμές των ψ_0 και ψ_{N+1} ίσες με μηδέν. Αυτή η συνοριακή συνθήκη είναι κατάλληλη αν το δυναμικό είναι απείρως μεγάλο στα σημεία 0 και $N+1$.

Μια άλλη συνοριακή συνθήκη που χρησιμοποιείται συχνά είναι η περιοδική όπου υποθέτουμε ότι το τελευταίο σημείο ενώνεται ξανά με το αρχικό ώστε να μην υπάρχουν άκρα.

Μαθηματικά οι περιοδικές συνοριακές συνθήκες υλοποιούνται τροποποιώντας τον πίνακα της χαμιλτονιανής σε

$H =$	1	2	...	99	100
1	$2t_0$	$-t_0$...	$-t_0$	0
2	$-t_0$	$2t_0$...	0	0
...
99	0	0	...	$2t_0$	$-t_0$
100	$-t_0$	0	...	$-t_0$	$2t_0$



Σχήμα 4.3: Συνοριακές συνθήκες α) απείρου δυναμικού β) περιοδικού τύπου χωρίς άκρα

Σε σύγκριση με τις συνοριακές συνθήκες απείρου φράγματος παρατηρούμε πως οι μόνες διαφορές είναι στα στοιχεία $H(1,100)$ και $H(100,1)$. Οι κυματοσυναρτήσεις δίνονται σε αυτήν την περίπτωση από $\phi_\alpha x \sim \sin(k_\alpha x)$ και $\cos(k_\alpha x)$ όπου $k_\alpha = \alpha 2\pi/L, \alpha = 1, 2, \dots$

Οι τιμές χωρίζονται από $2\pi/L$ αντί για π/L , επομένως υπάρχουν οι μισές επιτρεπτές τιμές αλλά σε κάθε τιμή αντιστοιχεί μια ημιτονοειδής και μια συνημιτονοειδής συνάρτηση οι οποίες μπορούν να γραφούν και σε συμπυκνωμένη μορφή $e^{ik_\alpha x} = \cos(k_\alpha x) + i \sin(k_\alpha x)$ και $e^{-ik_\alpha x} = \cos(k_\alpha x) - i \sin(k_\alpha x)$

Αριθμός ιδιοτιμών

Η υπολογιστική μέθοδος λύσης παράγει έναν περιορισμένο αριθμό ιδιοτιμών σε αντίθεση με την αναλυτική μέθοδο. Αυτό είναι αναμενόμενο απο την στίγμα που οι ιδιοτιμές αντιστοιχούν σε έναν πεπερασμένο πίνακα. Η αιτία είναι οτι για ένα διακριτό πλέγμα οι κυματοσυναρτήσεις $\sin(k_\alpha x)$ και $\sin([k_\alpha + (2\pi/\alpha)]x)$ αντιπροσωπεύουν την ίδια κατάσταση αφού σε κάθε σημείο $x_n = n\alpha$,

$$\sin(k_\alpha x_n) = \sin([k_\alpha + (2\pi/\alpha)]x_n)$$

Δεν είναι ίσες μεταξύ δυό πλεγματικών σημείων και γι'αυτό αντιπροσωπεύουν διακριτές καταστάσεις σε μια μη διακριτή αναπαράσταση. Όμως με την επιλογή του διακριτού πλέγματος τιμές του k_α που διαφέρουν κατα $2\pi/\alpha$ αναπαριστούν όμοιες καταστάσεις και μόνο τιμές του $k_\alpha \alpha$ σε ένα εύρος 2π οδηγούν σε ανεξάρτητες λύσεις. Το πιο σύνηθες είναι να περιορίζονται οι τιμές του $k_\alpha \alpha$ σε ένα εύρος γνωστό και ως πρώτη ζώνη Brillouin .

$$\text{περιοδικές συνοριακές συνθήκες } -\pi < k_\alpha \alpha \leq +\pi$$

και

$$\text{συνοριακές συνθήκες απείρου φράγματος } 0 < k_\alpha \alpha \leq +\pi$$

4.2.2 Σωματίδιο σε 3D κουτί

Η μέθοδος που περιγράφηκε στην προηγούμενη ενότητα μπορεί να εφαρμοστεί και σε περισσότερες από μια διαστάσεις. Τα διαγώνια στοιχεία του πίνακα $[H]$ της χαμιλτονιανής ισούνται με t_0 τον αριθμό των πλησιέστερων γειτόνων (2 σε μια διάσταση, 4 σε δυο διαστάσεις, 6 σε τρεις διαστάσεις) προσθέτοντας το δυναμικό $U(\vec{r})$ υπολογισμένο στο αντίστοιχο πλεγματοειδές σημείο, ενώ τα μη διάγωνα στοιχεία είναι ίσα με $-t_0$ για γειτονικά σημεία του πλέγματος.

$$\begin{aligned} H_{nm} &= vt_0 \\ &= -t_0 \\ &= 0 \end{aligned} \quad (4.11)$$

Καθώς αυξάνονται οι διαστάσεις εμφανίζονται δυσκολίες σχετικές με το μέγεθος του πίνακα της χαμιλτονιανής. Ενώ για ένα μονοδιάστατο πρόβλημα απαιτείται ένας πίνακας διαστάσεων 100×100 για το αντίστοιχο τρισδιάστατο πρόβλημα χρειάζεται ένας πίνακας διαστάσεων $10^6 \times 10^6$. Οι δυσκολίες αίρονται με την προϋπόθεση να είναι δυνατός ο χωρισμός των μεταβλητών. Σε αυτήν την περίπτωση αντιμετωπίζουμε τρία μονοδιάστατα προβλήματα σε αντίθεση με ένα γιγαντιαίο τρισδιάστατο. Αυτό είναι δυνατόν εάν το δυναμικό μπορεί να χωριστεί σε x -, y - και z - εξαρτώμενα τμήματα:

$$U(\vec{r}) = U_x(x) + U_y(y) + U_z(z) \quad (4.12)$$

Η κυματοσυνάρτηση μπορεί να γραφεί υπό μορφή γινομένου

$$\Psi(\vec{r}) = X(x)Y(y)Z(z)$$

όπου κάθε μια από τις συναρτήσεις $X(x)$, $Y(y)$ και $Z(z)$ υπολογίζονται λύνοντας μια ξεχωριστή μονοδιάστατη εξίσωση Schrödinger

$$\begin{aligned} E_x X(x) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U_x(x)\right) X(x) \\ E_y Y(y) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + U_y(y)\right) Y(y) \\ E_z Z(z) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + U_z(z)\right) Z(z) \end{aligned} \quad (4.13)$$

Η ολική ενέργεια είναι ίση με το άθροισμα των ενεργειών που σχετίζονται με κάθε μια από τις τρεις διαστάσεις: $E = E_x + E_y + E_z$.

4.3 Δομές Ζώνης

Στο προηγούμενο κεφάλαιο αναπτύξαμε την μέθοδο με την οποία μπορεί μια διαφορική εξίσωση να μετατραπεί σε μία εξίσωση πίνακων καθώς και την αναπαράσταση υπό μορφή πίνακα του χαμιλτονιανού τελεστή, η διαγωνιοποίηση του οποίου καταλήγει στην εύρεση των ιδιοτιμών

του προβλήματος. Σε αυτό το κεφάλαιο θα περιγράψουμε τον υπολογισμό της δομής των ενεργειακών ζωνών με την επίλυση μια εξλισωσης ιδιοτιμών πίνακα της μορφής

$$E(\phi_0) = [h(\vec{k})](\phi_0)$$

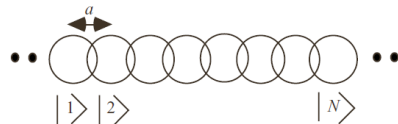
όπου

$$[h(\vec{k})] = \sum_m [H_{nm}] e^{i\vec{k}(\vec{d}_m - \vec{d}_n)}$$

Ο πίνακας $[h(\vec{k})]$ είναι μεγέθους $b \times b$ όπου b είναι ο αριθμός των τροχιακών που χρησιμοποιούνται σαν βάση αναπαράστασης ενός σημείου του πλέγματος. Η άθροιση ως προς m περιλαμβάνει όλα τα γειτονικά σημεία του πλέγματος (και το ίδιο) με τα οποία το σημείο n έχει κάποια επικάλυψη, δηλαδή το στοιχείο H_{nm} είναι μη μηδενικό. Το άθροισμα υπολογίζεται διαλέγοντας ένα οποιοδήποτε σημείο n και το αποτέλεσμα θα είναι το ίδιο εξαιτίας της περιοδικότητας του πλέγματος. Η δομή των ζωνών σχεδιάζεται με την εύρεση των ιδιοτιμών του $b \times b$ πίνακα $[h(\vec{k})]$ για κάθε τιμή του \vec{k} και έχει b κλάδους, έναν για κάθε ιδιοτιμή.

4.3.1 Μονοδιάστατο στερεό

Ας θεωρήσουμε ένα μονοδιάστατο στερεό αποτελούμενο από N άτομα όπως αυτό του παρακάτω σχήματος



Σχήμα 4.4: Ένα μονοδιάστατο στερεό

Αν θεωρήσουμε ένα τροχιακό για κάθε άτομο μπορούμε να γράψουμε έναν $N \times N$ πίνακα για την χαμιλτονιανή όπου τα διαγώνια στοιχεία χαρακτηρίζονται με δείκτη ss χωρίς απαραίτητα το τροχιακό να είναι τύπου s και με χρήση περιοδικών συνοριακών συνθηκών

$$\begin{array}{l}
H = \\
|1\rangle \\
|2\rangle \\
\dots \\
|N-1\rangle \\
|N\rangle
\end{array}
\begin{array}{cccccc}
|1\rangle & |2\rangle & \dots & |N-1\rangle & |N\rangle \\
E_0 & E_{ss} & \dots & 0 & E_{ss} \\
E_{ss} & E_0 & \dots & 0 & 0 \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
0 & 0 & \dots & E_0 & E_{ss} \\
E_{ss} & 0 & \dots & E_{ss} & E_0
\end{array}$$

Με την χρήση αριθμητικών μεθόδων υπολογισμού βρίσκουμε ότι οι ιδιοτιμές μπορούν να γραφτούν στην μορφή

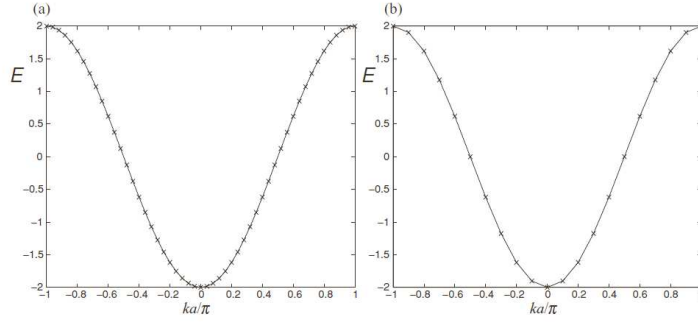
$$E_\alpha = E_0 + 2E_{ss} \cos(k_\alpha \alpha), k_\alpha \alpha = \alpha 2\pi/N \quad (4.14)$$

Οι τιμές του $k_\alpha \alpha$ ορίζονται από $-\pi$ ως $+\pi$ και απέχουν κατά $2\pi/N$. Για μεγάλες τιμές του N οι ιδιοτιμές βρίσκονται κοντά η μια στην άλλη ενώ για μικρές τιμές απέχουν περισσότερο. Εξ'αίτιας της περιοδικότητας, η εξίσωση πίνακα $E(\psi) = [H](\psi)$ αποτελείται από ένα σύνολο N ομοίων εξισώσεων που μπορούν να γραφτούν στην μορφή

$$E\psi_n = E_0\psi_n + E_{ss}\psi_{n-1} + E_{ss}\psi_{n+1} \quad (4.15)$$

Το σύνολο των εξισώσεων επιλύεται αναλυτικά από

$$\psi_n = \psi_0 e^{ikn\alpha} \quad (4.16)$$



Σχήμα 4.5: Διάγραμμα Ενέργειας- ka/π με $E_0 = 0$ και $E_{ss} = 1$ για a) $N=100$ και b) $N=20$

Αντικαθιστώντας την τελευταία εξίσωση στην προηγούμενη και απλοποιώντας τον κοινό παράγοντα $\exp(ikn\alpha)$ προκύπτει

$$E\psi_0 = E_0\psi_0 + E_{ss}E^{-ik\alpha}\psi_0 + E_{ss}e^{ik\alpha}\psi_0$$

επομένως $E = E_0 + 2E_{ss} \cos(k\alpha)$ Το πεπερασμένο εύρος του πλέγματος $N\alpha$ οδηγεί σε διακριτές επιτρεπτές τιμές του k ενώ η διακριτότητα του πλέγματος επιβάλλει πεπερασμένο εύρος στις επιτρεπτές τιμές. Ο αριθμός των επιτρεπτών τιμών του k $(2\pi/\alpha)(2\pi/N\alpha) = N$ είναι ακριβώς ο αριθμός των σημείων του πλέγματος. Αυτό εξασφαλίζει ότι και ο αριθμός των ιδιοτιμών θα είναι ίσος με το μέγεθος του πίνακα $[H]$ που καθορίζεται από τον αριθμό των πλεγματικών σημείων.

4.3.2 Γενίκευση αποτελεσμάτων

Η διαδικασία που περιγράφηκε στην προηγούμενη ενότητα για τον υπολογισμό της δομής των ενεργειακών ζώνων μπορεί να γενικευτεί για οποιοδήποτε περιοδικό στερεό με αυθαίρετο αριθμό συναρτήσεων βάσης-τροχιακών ανά δομική μονάδα. Ας θεωρήσουμε μια δομική μονάδα n συνδεδεμένη με τις m γειτονικές μονάδες αυτής με ένα πίνακα $[H_{nm}]$ μεγέθος $b \times b$, b ο αριθμός των συναρτήσεων-διανυσμάτων βάσης ανά μονάδα.

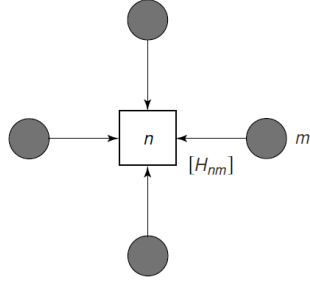
Η εξίσωση πινάκων γράφεται σε αυτήν την περίπτωση

$$\sum_m [H_{nm}] \{\phi(m)\} = E \{\phi(n)\} \quad (4.17)$$

όπου $\{\phi(m)\}$ είναι ένα $b \times 1$ διάνυσμα στήλη που δηλώνει την κυματοσυνάρτηση στην μονάδα m

Το σύνολο αυτών των εξισώσεων μπορεί να επιλυθεί με την χρήση της σχέσης

$$\{\phi(m)\} = \{\phi_0\} \exp(i \vec{k} \cdot \vec{d}_m) \quad (4.18)$$



Σχήμα 4.6: Σχηματική αναπαράσταση μιας δομικής μονάδας n συνδεδεμένης με τις m γειτονικές της μέσω ενός πίνακα $[H_{nm}]$

με την προϋπόθεση η εξίσωση πινάκων να ισχύει για κάθε μονάδα n . Αντικαθιστώντας την τελευταία σχέση στην εξίσωση πινάκων προκύπτει

$$E\{\phi_0\} = [h(\vec{k})]\{\phi_0\} \quad (4.19)$$

με

$$[h(\vec{k})] = \sum_m [H_{nm}] e^{i\vec{k} \cdot (\vec{d}_m - \vec{d}_n)} \quad (4.20)$$

ανεξάρτητα απο ποιά μονάδα n υπολογίζεται το άθροισμα

Επιτρεπτές τιμές του k

Σε σχέση με το μονοδιάστατο παράδειγμα, οι επιτρεπτές τιμές για ένα στερεό στις δυό διαστάσεις με ορθογώνιο ή κυβικό πλέγμα μπορούν να γραφούν

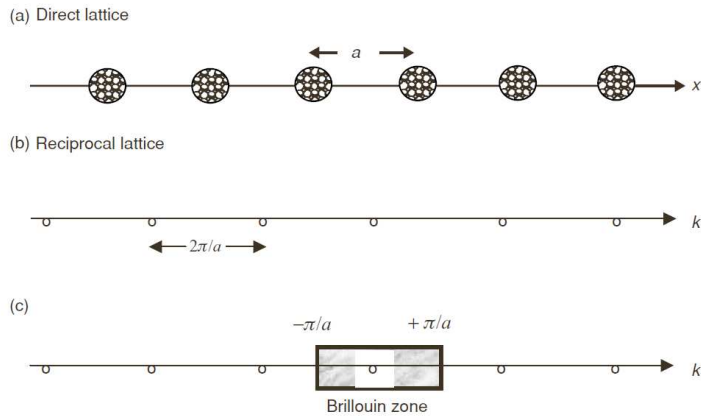
$$[\vec{k}]_{nm} = \hat{x}(m2\pi/M\alpha) + \hat{y}(n2\pi/N\beta) \quad (4.21)$$

όπου (m, n) είναι ένα ζεύγος κεραίων ενώ M, N αναπαριστούν τον αριθμό των διμικτών μονάδων που βρίσκονται κατα μήκος των $x-, y-$ διευθύνσεων αντίστοιχα. Επιπλέον ορίζοντας $\vec{L}_1 = \hat{x}M\alpha, \vec{L}_2 = \hat{y}N\beta$ υπολογίζουμε

$$\begin{aligned} \vec{k} \cdot \vec{L}_1 &= m2\pi \rightarrow k_x = m2\pi/M\alpha \\ \vec{k} \cdot \vec{L}_2 &= n2\pi \rightarrow k_y = n2\pi/N\beta \end{aligned}$$

Ζώνη Brillouin

Στην περίπτωση του μονοδιάστατου προβλήματος είδαμε πως για ένα σύνολο σημείων που χωρίζονται από a έχει ένα μετασχηματισμό Fourier αποτελούμενο απο σημεία που απέχουν μεταξύ τους $2\pi/a$. Η ζώνη Brillouin κατασκευάζεται γύρω απο το σημείο $k = 0$ συνδέοντας το με γειτονικά σημεία στο αντίστροφο πλέγμα και σχεδιάζοντας τις μεσοκαθέτους αυτών.

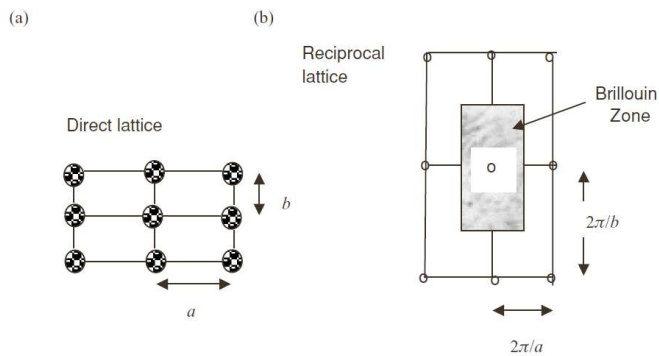


Σχήμα 4.7: a) Ευθύ πλέγμα, b) Αντίστροφο πλέγμα, c) Ζώνη Brillouin

Παρόμοια για ένα δυδιάστατο πλέγμα κατασκευάζουμε το αντίστροφο πλέγμα και μετά την πρώτη ζώνη Brillouin σχεδιάζοντας τις μεσοκαθέτους των γραμμών που ενώνουν το σημείο $\vec{k} = (0,0)$ με τα γειτονικά σημεία στο αντίστροφο πλέγμα. Η ζώνη Brillouin ορίζει τις επιτρεπτές τιμές του \vec{k}

$$-\pi \leq k_x a < +\pi$$

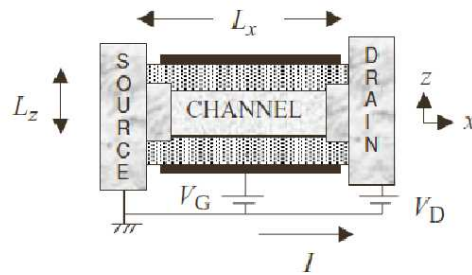
$$-\pi \leq k_y b < +\pi$$



Σχήμα 4.8: a) Ευθύ πλέγμα, b) Αντίστροφο πλέγμα, και η ζώνη Brillouin

4.4 Κβάντωση των διαστάσεων

Στην προηγούμενη ενότητα περιγράψαμε μια μέθοδο καταγραφής των ενεργειακών επιπέδων ενός ομογενούς περιοδικού στερεού με όρους του κυματανύσματος \vec{k} όπου τα ηλεκτρόνια κινούνται ελεύθερα και στις τρεις διαστάσεις. Ας θεωρήσουμε μια δομή τρανζίστορ αποτελούμενη από δύο συμμετρικά ηλεκτρόδια πύλης ως προς το καναλί όπως αυτό του ακόλουθου σχήματος



Σχήμα 4.9: Σχηματική αναπαράσταση ενός νανο-τρανζίστορ εκπομπής πεδίου (nano – scaleFET) με δύο πύλες

Σε ένα ομογενές στερεό τα ενεργειακά επίπεδα κατηγοριοποιούνται ως $E_b(k_x, k_y, k_z)$ όπου ο δείκτης b αναφέρεται στις διαφορετικές ζώνες. Σε μια δομή τρανζίστορ όπως αυτή του παραπάνω σχήματος τα ηλεκτρόνια είναι ελεύθερα να κινηθούν μόνο στο $x - y$ επίπεδο. Ο υπολογισμός των ενεργειακών επιπέδων γίνεται με βάση την γνώση των επιπέδων του ομογενούς στερεού, θεωρώντας τον περιορισμό ως προς τον z άξονα ως ένα δακτύλιο περιφέρειας L_z , ώστε οι περιοδικές συνοριακές συνθήκες να προειρίζουν τις επιτρεπτές τιμές του k_z σε ένα τραχύ πλέγμα που χαρακτηρίζεται από $k_z = p2\pi/L_z$

$$E_{b,p} \approx E_b(k_x, k_y, k_z = p2\pi/L_z)$$

όπου ο πρόσθετος δείκτης p ονομάζεται δείκτης υποζώνης. Η προσέγγιση αυτή δίνει καλά αποτελέσματα για νανοδομές δακτυλίου όπως οι νανωσώληνες άνθρακα, όμως για τις περισσότερες χαμηλοδιάστατες δομές οι συνοριακές συνθήκες προσομοιάζουν περισσότερο με αυτές των απείων φραγμάτων δυναμικού περιορίζοντας τις επιτρεπτές τιμές του \vec{k} σε ένα τραχύ πλέγμα που χαρακτηρίζεται από $k_z = p\pi/L_z$ και έχει ενεργειακά επίπεδα

$$E_{b,p} \approx E_b(k_x, k_y, k_z = p\pi/L_z)$$

Ας υποθέσουμε ότι η σχέση διασποράς των ενεργειακών επιπέδων περιγράφεται από την παραβολική σχέση

$$E(\vec{k}) \approx E_c + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m_c} \text{ Συμπαγές στερεό} \quad (4.22)$$

όπου E_c, m_c είναι σταθερές ανάλογες του προβλήματος. Ο περιορισμός ως προς τον άξονα z δημιουργεί υποζώνες χαρακτηρισμένες με δείκτη p τέτοιες ώστε

$$E_p(k_x, k_y) \approx E_c + p^2 \varepsilon_z + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m_c} \text{ Κβαντικό πηγάδι} \quad (4.23)$$

Περιορίζοντας περαιτέρω τις διαστάσεις κατά τον άξονα y έχουμε

$$E_{n,p}(k_x) \approx E_c + n^2 \varepsilon_y + p^2 \varepsilon_z + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_c} \text{ Κβαντικό νήμα} \quad (4.24)$$

όπου ε_y αντιστοιχεί στην διάσταση y . Τέλος για τις δομές που περιορίζουν την κίνηση των ηλεκτρονίων και στις τρεις διαστάσεις καταλήγοντας σε διακριτά επίπεδα παρόμοια με αυτά των απομονωμένων ατόμων ισχύει

$$E_{m,n,p} \approx E_c + \frac{m^2 \hbar^2 \pi^2}{2m_c L_x^2} + \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2m_c L_y^2} + \frac{p^2 \hbar^2 \pi^2}{2m_c L_z^2} \quad (4.25)$$

4.4.1 Πυκνότητα καταστάσεων

Η πυκνότητα των καταστάσεων (Density of States DOS) δείχνει τον αριθμό των ιδιοκαταστάσεων την ενέργεια να μονάδα ενεργειακού εύρους και εξαρτάται από την σχέση διασποράς $E(\vec{k})$

$$E(\vec{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} \quad (4.26)$$

Η διαδικασία υπολογισμού της πυκνότητας των καταστάσεων είναι η θεώρηση ενός ορθογωνίου κουτιού μεγέθους $L_x L_y L_z$ με περιοδικές συνθήκες σε όλες τις διαστάσεις

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} \nu_x, k_y = \frac{2\pi}{L_y} \nu_y, k_z = \frac{2\pi}{L_z} \nu_z \quad (4.27)$$

όπου ν_x, ν_y, ν_z είναι ακέραιοι. Στην συνέχεια υποθέτουμε πως το κουτί είναι αρκετά μεγάλο ώστε οι επιτρεπτές τιμές να είναι συνεχείς και η άθροιση ως προς κάθε δείκτη να μπορεί να αντικατασταθεί με ολοκληρώματα

$$\sum_{k_x} \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_x}{2\pi/L_x}, \sum_{k_y} \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_y}{2\pi/L_y}, \sum_{k_z} \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z}{2\pi/L_z} \quad (4.28)$$

Οι επιτρεπτές καταστάσεις στον χώρο k κατανέμονται με πυκνότητα της τάξης $(L/2\pi)$ ανα μονάδα k σε κάθε k διάσταση. Ο συνολικός αριθμός των επιτρεπτών καταστάσεων $N(k)$ μέχρι μια ορισμένη μέγιστη τιμή δίνεται απο τις σχέσεις

$$\begin{aligned}\frac{L}{2\pi}2k &= \frac{kL}{\pi}, L \equiv L_x, 1D \\ \frac{L_x L_y}{4\pi^2}\pi k^2 &= \frac{k^2 S}{4\pi}, S \equiv L_x L_y, 2D \\ \frac{L_x L_y L_z}{8\pi^3} \frac{4\pi k^3}{3} &= \frac{k^3 \Omega}{6\pi^2}, \Omega \equiv L_x L_y L_z, 3D\end{aligned}$$

Χρησιμοποιώντας την σχέση διασποράς της ενέργειας μετατρέπεται ο συνολικός αριθμός επιτρεπτών καταστάσεων $N(k)$ σε $N(E)$ δείχνοντας τον αριθμό των καταστάσεων με ενέργεια μικρότερη απο E . Η παράγωγος της συνάρτησης αυτής μα δίνει την πυκνότητα των καταστάσεων

$$D(E) = \frac{d}{dE}N(E) \quad (4.29)$$

Τα αποτελέσματα για την αντίστοιχει χβάνβτωση των διαστάσεων παρουσιάζονται στον ακόλουθο πίνακα

1D	2D	3D
$N(k) = \frac{L}{2\pi}2k = \frac{kL}{\pi}$	$\frac{S}{4\pi^2}\pi k^2 = \frac{k^2 S}{4\pi}$	$\frac{\Omega}{8\pi^3} \frac{4\pi k^3}{3} = \frac{k^3 \Omega}{6\pi^2}$
$N(E) = \frac{L[2m_c(E - E_c)]^{1/2}}{\pi\hbar}$	$\frac{S 2m_c (E - E_c)}{4\pi\hbar^2}$	$\frac{\Omega[2m_c(E - E_c)]^{3/2}}{6\pi^2\hbar^3}$
$D(E) = \frac{m_c L}{\pi\hbar} \left(\frac{1}{2m_c (E - E_c)} \right)^{1/2}$	$\frac{S m_c}{2\pi\hbar^2}$	$\frac{\Omega m_c}{2\pi^2\hbar^3} [2m_c (E - E_c)]^{1/2}$

Σχήμα 4.10: Περίληψη των αποτελεσμάτων για τον υπολογισμό των DOS σε 1D, 2D, 3D διαστάσεις για ισοτροπική σχέση διασποράς, τα διαγράμματα έχουν σχεδιαστεί για $m_c = m_e$ και για ένα σπιν[23]

η παραβολική σχέση διασποράς $E(k)$ δημιουργεί πυκνότητες καταστάσεων που εξαρτώνται σαν $E^{-1/2}$ για μια διάσταση, E^0 για $2D$ και $E^{1/2}$ σε τρεις διαστάσεις. Για διαστάσεις μικρότερες των τριών τα στοιχεία του πίνακα παρουσιάζουν την πυκνότητα μίας μόνο υποζώνης. Η πλήρης έκφραση προκύπτει από την άθροιση σε όλες τις υποζώνες, για παράδειγμα σε ένα κβαντικό πηγάδι $2D$ ισχύει

$$E_p(k_x, k_y) \approx E_c + p^2 \varepsilon_z + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m_c}$$

και η πυκνότητα των καταστάσεων δίνεται από την σχέση

$$D(E) = \frac{m_c S}{2\pi \hbar^2} \sum_p \vartheta(E - E_c - p^2 \varepsilon_z) \quad (4.30)$$

Γενική έκφραση υπολογισμού DOS

Σε ένα σύστημα με ιδιοκαταστάσεις που χαρακτηρίζονται από έναν δείκτη α ο συνολικός αριθμός των καταστάσεων με ενέργεια μικρότερη από E είναι

$$N_T = \sum_{\alpha} \vartheta(E - \varepsilon_{\alpha}) \quad (4.31)$$

όπου $\vartheta(E)$ είναι η μοναδιαία συνάρτηση βήματος ίση με μηδέν για $E < 0$. Η παράγωγος της συνάρτησης βήματος είναι η συνάρτηση δέλτα έτσι ώστε

$$D(E) \equiv \frac{d}{dE} N_T(E) = \sum_{\alpha} \delta(E - \varepsilon_{\alpha}) \quad (4.32)$$

Η τελευταία σχέση αναπαριστά μια ακολουθία από κορυφές αντί για μία συνεχή συνάρτηση. Η έκφραση για την πυκνότητα των καταστάσεων δίνεται από την σχέση αυτή με την αντικατάσταση του αθροίσματος από ολοκλήρωμα. Για παράδειγμα εάν

$$E(\vec{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

τότε

$$\begin{aligned} D(E) &= \sum_{\vec{k}} \delta(E - \varepsilon_{\vec{k}}) \\ &= \sum_{k_x} \sum_{k_y} \sum_{k_z} \delta\left(E - E_c - \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m^*}\right) \end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας τις αθροίσεις με ολοκληρώματα προκύπτει

$$\begin{aligned} D(E) &= \frac{\Omega}{8\pi^3} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x dk_y dk_z \delta\left(E - E_c - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right) \\ &= \frac{\Omega}{8\pi^3} \int_{-\infty}^{\infty} 4\pi k^2 dk \delta\left(E - E_c - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right) \\ &= \frac{\Omega}{2\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{m^* dE}{\hbar^2} \frac{\sqrt{2m^*(E - E_c)}}{\hbar} \delta\left(E - E_c - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right) \\ &= \frac{\Omega m^*}{2\pi^2 \hbar^3} [2m^*(E - E_c)]^{1/2} \end{aligned}$$

Η πραγματική αξία της τελευταίας σχέσης είναι ότι έχει γενική ισχύ ανεξάρτητα από την σχέση διασποράς.

Διαχωρίσιμα προβλήματα

Εάν υποθέσουμε ότι έχουμε ένα $2D$ πρόβλημα που μπορεί να διαχωριστεί σε x -, y - συνιστώσες έτσι ώστε η συνολική ενέργεια να είναι το άθροισμα των δύο συνιστωσών

$$\varepsilon(n, m) = \varepsilon_x(n) + \varepsilon_y(m) \quad (4.33)$$

Σε αυτήν την περίπτωση μπορούμε να ορίσουμε δύο πυκνότητες καταστάσεων μια $x - DOS$ και μια $y - DOS$

$$D_x(E) = \sum_n \delta[E - \varepsilon_x(n)] \quad (4.34)$$

$$D_y(E) = \sum_m \delta[E - \varepsilon_y(m)] \quad (4.35)$$

Η ολική πυκνότητα των καταστάσεων δίνεται από την σχέση

$$D(E) = \sum_n \sum_m \delta[E - \varepsilon_x(n) - \varepsilon_y(m)] \quad (4.36)$$

και υπό μορφή συνέλιξης ολοκληρωμάτων

$$D(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dE' D_x(E') D_y(E - E') \quad (4.37)$$

Κεφάλαιο 5

Διεύρυνση ενεργειακών επιπέδων

5.1 Ανοιχτά συστήματα

Σε προηγούμενο κεφάλαιο είδαμε πως για να υπάρχει ροή ρεύματος απαιτείται ένα κανάλι συνδεδεμένο με δυο επαφές που δεν βρίσκονται σε ισορροπία μεταξύ του και έχουν δυο διαφορετικά ηλεκτροχημικά δυναμικά. Η μια επαφή γενίζει συνεχώς το κανάλι ενώ η άλλη το αδειάζει συνεχώς απο ηλεκτρόνια δημιουργώντας μια καθαρή ροή ρεύματος απο την μια επαφή στην άλλη. Σε αυτό το κεφάλαιο θα περιγράψουμε την κβαντική θεώρηση του προβλήματος.

Ας θεωρήσουμε ένα σύστημα με μια μόνο επαφή όπως αυτό του ακόλουθου σχήματος. Το κανάλι έρχεται σε ισορροπία με την επαφή και δεν υπάρχει ροή ρεύματος υπο σταθερές συνθήκες.

Εαν το κανάλι είναι αποσυνδεδεμένο απο την επαφή υπακούει στην εξίσωση

$$E\psi = \underbrace{(E_c + 2t_0)}_{H\psi}\psi$$

Μόλις συνδεθεί με την επαφή η εξίσωση αυτή τροποποιείται σε

$$E\psi = (E_c + 2t_0)\psi - t_0\Phi_{-1} \quad (5.1)$$

όπου οι κυματοσυναρτήσεις Φ_n της επαφής ικανοποιούν ένα άπειρο σύνολο εξισώσεων ($n <$)

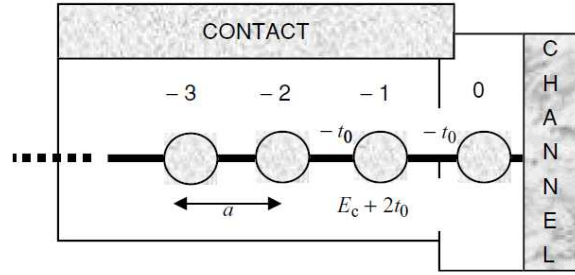
$$E\Phi_n = -t_0\Phi_{n-1} + (E_c + 2t_0)\Phi_n - t_0\Phi_{n+1} \quad (5.2)$$

Απο την στιγμή που όλες οι εξισώσεις σε αυτό το άπειρο σύνολο έχουν την ίδια μορφή μπορούμε να γράψουμε τις λύσεις με την μορφή επίπεδων κυμάτων. Υποθέτοντας τοι η λύση αποτελείται από ένα προσπίπτον κύμα από την επαφή και ένα ανακλώμενο απο το κανάλι έχουμε

$$\Phi_n = B \exp(+ikn\alpha) + C \exp(-ikn\alpha) \quad (5.3)$$

όπου

$$E = E_c + 2t_0(1 - \cos k\alpha) \quad (5.4)$$



Σχήμα 5.1: Ένα ημιάπειρο καλώδιο με μία επαφή. Το σημείο 0 θεωρείται σαν το κανάλι ενώ τα υπόλοιπα σαν την επαφή

Χρησιμοποιώντας την 8.4 εξίσωση γράφουμε

$$\psi \equiv \Phi_0 = B + C$$

και

$$\Phi_{-1} = B \exp(-ik\alpha) + C \exp(+ik\alpha) \quad (5.5)$$

έτσι ώστε

$$\Phi_{-1} = \psi \exp(+ik\alpha) + B[\exp(-ik\alpha) - \exp(+ik\alpha)] \quad (5.6)$$

Αντικαθιστώντας στην 8.2 έχουμε

$$E\psi = \underbrace{(E_c + 2t_0)\psi}_{H\psi} - \underbrace{t_0 \exp(+ik\alpha)\psi}_{\Sigma\psi} + \underbrace{t_0 B[\exp(+ik\alpha) - \exp(-ik\alpha)]}_S \quad (5.7)$$

Η τελευταία σχέση έχει την μορφή

$$E\{\psi\} = [H + \Sigma]\{\psi\} + \{S\} \quad (5.8)$$

με

$$\Sigma = -t_0 \exp(+ik\alpha) \quad (5.9)$$

και

$$S = it_0 2B \sin k\alpha \quad (5.10)$$

Ο όρος Σ είναι ο όρος της ιδιοενέργειας, δεν είναι ερμιτιανός και είναι ανεξάρτητος των σταθερών B, C της κυματοσυνάρτησης της επαφής. Αναπαριστά το γεγονός ότι οι κυματοσυναρτήσεις του καναλιού μπορούν να βρεθούν στην επαφή. Ο όρος S αναπαριστά την διέγερση του καναλιού από την επαφή και είναι ανάλογος του B .

Γενικός φορμαλισμός

Ας θεωρήσουμε ένα κανάλι χωρίς ηλεκτρόνια που δεν είναι συνδεδεμένο με την επαφή. Τα ηλεκτρόνια στην επαφή έχουν κυματοσυναρτήσεις $\{\Phi_R\}$ που υπακούν την εξίσωση Schrödinger για μία απομονωμένη επαφή

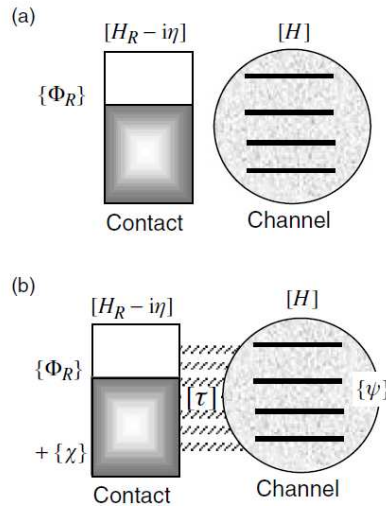
$$[EI_R - H_R]\{\Phi_R\} = \{0\}$$

όπου H_R είναι η χαμιλτονιανή για την επαφή και $[I_R]$ είναι ο μοναδιαίος πίνακας ίδιου μεγέθους με την χαμιλτονιανή

Αν τροποποιήσουμε την εξίσωση κατα τρόπο

$$[EI_R - H_R + i\eta]\{\Phi_R\} = \{S_R\} \quad (5.11)$$

όπου $[h] = 0^+[I_R]$ είναι μια απειροελάχιστη ποσότητα επί τον μοναδιαίο πίνακα και αντιπροσωπεύει την εξαγωγή των ηλεκτρονίων από την επαφή ενώ ο όρος S_R αναπαριστά την επανεισαγωγή των ηλεκτρονίων από εξωτερικές πηγές ώστε να διατηρείται η επαφή σε σταθερό ηλεκτροχημικό δυναμικό.



Σχήμα 5.2: a) Κανάλι χωρίς ηλεκτρόνια και αποσυνδεδεμένο από την επαφή b) Σύνδεση καναλιού-επαφής και διάχυση των κυματοσυναρτήσεων της επαφής στο κανάλι με αντίδραση το σχεδαζόμενο κύμα $\{\chi\}$ στην επαφή

Η μετάβαση από την εξίσωση Schrödinger στην εξίσωση 8.8 αντιπροσωπεύει μια θεμελιώδη διαφορά οπτικής γωνίας: Ε δεν είναι πλέον μια ιδιοενέργεια αλλά μια ανεξάρτητη μεταβλητή που αναπαριστά την ενέργεια διέγερσης από τις εξωτερικές πηγές. Με την εξίσωση Schrödinger οι $\{\Phi_R\}$ είναι αναγκαστικά οι μη μηδενικές ιδιοσυναρτήσεις της $[H_R]$ μόνο όταν η ενέργεια Ε αντιστοιχεί σε μία από τις ιδιοενέργειες της $[H_R]$. Από την άλλη μεριά οι $\{\Phi_R\}$ είναι μη μηδενικές για όλες τις ενέργειες με κορυφές γύρω από τις ιδιοενέργειες της $[H_R]$, η οξύτητα των οποίων εξαρτάται από την απειροελάχιστη ποσότητα 0^+ .

Με την σύνδεση του καναλιού με την επαφή οι κυματοσυναρτήσεις αυτής διαχέονται και γίνονται μια κυματοσυνάρτηση $\{\psi\}$ στην συσκευή πλέον κανάλι-επαφή η οποία με την σειρά της παράγει σκεδαζόμενα κύματα $\{\chi\}$. Η ολική κυματοσυνάρτηση θα ικανοποιεί την σύνθετη εξίσωση Schrödinger για το σύστημα κανάλι-επαφή που μπορεί να γραφεί υπο μορφή

$$\begin{pmatrix} EI_R - H_R + \eta & -\tau^+ \\ -\tau & EI - H \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_R + \chi \\ \psi \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} S_R \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (5.12)$$

όπου $[H]$ είναι η χαμιλτονιανή της συσκευής. Οι όροι που εμφανίζονται στην εξίσωση δεν είναι αριθμοί αλλά πίνακες διαφόρων διαστάσεων

$$\begin{aligned} [H_R], [I_R], [\eta] &: (R \times R) \\ [H], [I] &: (d \times d) \\ [\tau] &: (d \times R), [\tau^+] : (R \times d) \end{aligned}$$

ή διανύσματα στήλες

$$\begin{aligned} \{\Phi_R\}, \{\chi\}, \{S_R\} &: (R \times 1) \\ \{\psi\} &: (d \times 1) \end{aligned}$$

Με απαλοιφή του όρου $\{S_R\}$ από την εξίσωση πινάκων προκύπτει ότι

$$[EI_R - H_R + \eta]\{\chi\} - [\tau^+]\{\psi\} = \{0\}$$

Με την χρήση άλγεβρας πινάκων μπορούμε να εκφράσουμε τον όρο $\{\chi\}$ ως προς τον όρο $\{\psi\}$ από την πρώτη εξίσωση

$$\{\chi\} = G_R \tau^+ \{\psi\}$$

όπου

$$G_R \equiv [EI_R - H_R + \eta]^{-1} \quad (5.13)$$

και

$$[\eta] = 0^+[I_R]$$

Αντικαθιστώντας στην δεύτερη εξίσωση έχουμε

$$[EI - H - \Sigma]\{\psi\} = \{S\} \quad (5.14)$$

όπου

$$\Sigma \equiv \tau G_R \tau^+, S \equiv \tau \Phi_R \quad (5.15)$$

Η ποσότητα G_R αντιπροσωπεύει μια ιδιότητα της απομονωμένης επαφής αφού περιέχει μόνο την χαμιλτονιανή επαφής και ονομάζεται συνάρτηση *Green* της επαφής.

Υπολογισμός των Σ και S

Ο πίνακας που αντιστοιχεί στην συνάρτηση *Green* G_R είναι διαστάσεων $(R \times R)$, ο πίνακας $[\tau]$ είναι διαστάσεων $(d \times R)$ και συνδέεται με r στοιχεία της επιφάνειας μεταξύ της επαφής και του καναλιού. Επομένως είναι δυνατόν να τον περιορίσουμε σε έναν $(d \times r)$ πίνακα και να γράψουμε

$$\Sigma_{(d \times d)} \equiv \tau_{(d \times r)} g_{R(r \times r)} \tau_{(r \times d)}^+ \quad (5.16)$$

και

$$S_{(d \times 1)} \equiv \tau_{(d \times r)} \phi_{R(r \times 1)} \quad (5.17)$$

όπου η επιφανειακή συνάρτηση *Green* g_R αντιπροσωπεύει ένα $(r \times r)$ υποσύνολο της πλήρους συνάρτησης *Green* που περιλαμβάνει μόνο r σημεία της επιφάνειας και η $\{\phi_R\}$ αναπαριστά ένα $(r \times 1)$ υποσύνολο των κυματοσυναρτήσεων $\{\Phi_R\}$ της επαφής. Για το παράδειγμα που αναλύθηκε στην προηγούμενη ενότητα ισχύει

$$\tau = -t_0, \phi_R = -i2B \sin k\alpha \quad (5.18)$$

και

$$g_R = -(1/t_0) \exp(ik\alpha) \quad (5.19)$$

Ένας άλλος τρόπος υπολογισμού των Σ και S είναι η χρήση της αναπαράστασης των ιδιοκαταστάσεων της επαφής έτσι ώστε η χαμιλτονιανή της επαφής να είναι διαγώνιος πίνακας και η συνάρτηση *Green* μπορεί να γραφτεί με όρους των ιδιοτιμών ε_n της H_R

$$[G_R(E)] = \begin{bmatrix} \frac{1}{E - \varepsilon_1 + i0^+} & 0 & \dots \\ 0 & \frac{1}{E - \varepsilon_2 + i0^+} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (5.20)$$

Σε αυτήν την αναπαράσταση ο πίνακας σύζευξης $[\tau]$ δεν μπορεί να περιοριστεί σε χαμηλότερες διαστάσεις και θα πρέπει να υπολογιστούν άπειρα αθροίσματα σε όλες τις ιδιοκαταστάσεις της επαφής

$$\Sigma_{i,j}(E) = \sum_n \frac{[\tau]_{in} [\tau^+]_{nj}}{E - \varepsilon_n + i0^+} \quad (5.21)$$

$$S_i(E) \equiv \sum_n [\tau]_{in} \{\Phi_R\}_n \quad (5.22)$$

5.2 Τοπική πυκνότητα των καταστάσεων

Στην προηγούμενη ενότητα περιγράψαμε πως η σύνδεση του καναλιού με την επαφή μπορεί να περιγραφεί από μια τροποποιημένη εξίσωση Schrödinger της μορφής $E\{\psi\} = [H + \Sigma]\{\psi\} + \{S\}$ όπου $\{S\}$ αναπαριστά την διέγερση από την επαφή και ο όρος της ιδιοενέργειας Σ αναπαριστά την τροποποίηση στο κανάλι λόγω της σύζευξης. Σε αντίθεση με τον πίνακα της χαμιλτονιανής $[H]$ ο πίνακας $[H + \Sigma]$ έχει μιγαδικές ιδιοτιμές και το φανταστικό κομμάτι των ιδιοτιμών αυτών διευρύνει την πυκνότητα των καταστάσεων και προσδιορίζει έναν πεπερασμένο χρόνο ζωής σε αυτές τις καταστάσεις.

Ας θεωρήσουμε ένα σύνθετο σύστημα συσκευής αποτελούμενο από το κανάλι και την επαφή. Η πυκνότητα των καταστάσεων σε ένα τέτοιο σύστημα με ένα σύνολο ιδιοτιμών ε_α δίνεται από την σχέση

$$D(E) = \sum_{\alpha} \delta(E - \varepsilon_{\alpha}) \quad (5.23)$$

Για τον υπολογισμό της τοπικής πυκνότητας καταστάσεων στο κανάλι χρειάζεται να ληφθεί υπόψη και το τμήμα της κυματοσυνάρτησης που παραμένει στο κανάλι μετά την σύνδεση με την επαφή

$$D(d; E) = \sum_{\alpha} |\phi_{\alpha}(d)|^2 \delta(E - \varepsilon_{\alpha})$$

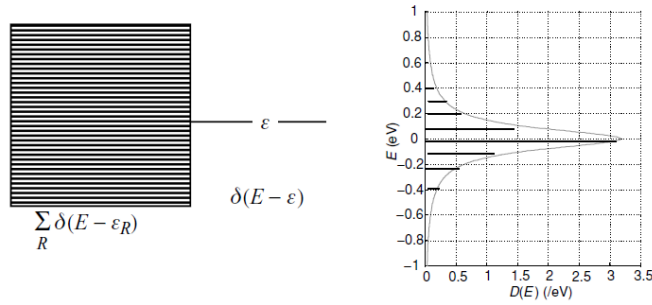
Ας υποθέσουμε ότι η συσκευή με ένα ενεργειακό επίπεδο είναι αποσυνδεδεμένη από την δεξαμενή-επαφή η οποία έχει ένα πυκνό σύνολο ενεργειακών επιπέδων ε_R . Η ολική πυκνότητα των καταστάσεων δίνεται από την σχέση

$$D(E) = \sum_{\alpha} \delta(E - \varepsilon_{\alpha}) = \delta(E - \varepsilon) + \sum_{\alpha} \delta(E - \varepsilon_{\alpha})$$

ενώ η τοπική πυκνότητα των καταστάσεων στο κανάλι από την σχέση

$$D(d; E) = \sum_{\alpha} |\phi_{\alpha}(d)|^2 \delta(E - \varepsilon_{\alpha}) = \delta(E - \varepsilon)$$

αφού οι καταστάσεις της δεξαμενής έχουν κυματοσυναρτήσεις με μηδενικό πλάτος μέσα στο κανάλι. Με την σύνδεση δεξαμενής καναλιού δεν θα υπάρχει πλέον ένα μόνο επίπεδο με την κυματοσυνάρτηση του στο κανάλι αλλά θα υπάρχουν πολλές γειτονικές καταστάσεις με τμήματα των κυματοσυναρτήσεων να παραμένουν στο κανάλι. Κοιτάζοντας την τοπική πυκνότητα των καταστάσεων παρατηρούμε μια σειρά από ενεργειακά επίπεδα με κυμαινόμενα ύψη που αντιστοιχούν στο κομμάτι της τετραγωνισμένης κυματοσυνάρτησης που παραμένει στο κανάλι



Σχήμα 5.3: Κανάλι με ένα ενεργειακό επίπεδο συνδεδεμένο με δεξαμένη πυκνών ενεργειακών επιπέδων. Με την σύνδεση καναλιού-επαφής μια ειρά από επίπεδα κυμαινόμενου ύψους παραμένουν στο κανάλι.

Γενικότερα ορίζουμε μία τοπική πυκνότητα καταστάσεων (*LDOS*), $D(\vec{r}; E)$ η οποία μετράει την συνεισφορά κάθε επιπέδου από το τετράγωνο της κυματοσυνάρτησης του στη θέση r

$$D(\vec{r}; E) = \sum_{\alpha} |\Phi_{\alpha}(\vec{r})|^2 \delta(E - \varepsilon_{\alpha}) \quad (5.24)$$

η οποία μπορεί να θεωρηθεί σαν το διαγώνιο στοιχείο (διαμερισμένο κατά 2π) μιας πιο γενικής έννοιας που ονομάζεται συνάρτηση φάσματος [$A(E)$]:

$$A(\vec{r}, \vec{r}'; E) = 2\pi \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}(\vec{r}) \delta(E - \varepsilon_{\alpha}) \phi_{\alpha}^*(\vec{r}') \quad (5.25)$$

όπως η ηλεκτρονική πυκνότητα

$$n(\vec{r}) = \sum_{\alpha} |\phi_{\alpha}(\vec{r})|^2 f_o(\varepsilon_{\alpha} - \mu) \quad (5.26)$$

μπορεί να θεωρηθεί ως το διαγώνιο στοιχείο του πίνακα πυκνότητας

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}') \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}(\vec{r}) f_o(\varepsilon_{\alpha} - \mu) \phi_{\alpha}^*(\vec{r}') \quad (5.27)$$

Στην αναπαράσταση του πραγματικού χώρου μπορούμε να γράψουμε την συνάρτηση φάσματος στην μορφή

$$[A(E)] = 2\pi \delta(E[I] - [H]) \quad (5.28)$$

Χρησιμοποιώντας τις ιδιοκαταστάσεις της χαμιλτονιανής H σαν βάση ο $[H]$ είναι διαγώνιος

$$[H] = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \varepsilon_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \varepsilon_3 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (5.29)$$

το ίδιο ισχύει και για τον πίνακα της συνάρτησης φάσματος $[A(E)]$

$$[A(E)] = 2\pi \begin{bmatrix} \delta(E - \varepsilon_1) & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \delta(E - \varepsilon_2) & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \delta(E - \varepsilon_3) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (5.30)$$

Η ολική πυκνότητα των καταστάσεων δίνεται από το ίχνος της φασματικής συνάρτησης $[A]$ διαιρούμενο με 2π και είναι ανεξάρτητο από την αναπαράσταση βάσης

$$D(E) = \frac{1}{2\pi} \text{Trace}[A(E)] = \sum_{\alpha} \delta(E - \varepsilon_{\alpha}) \quad (5.31)$$

Κανόνας άθροισης

Ο συνολικός αριθμός των καταστάσεων σε κάθε σημείο αν ολοκληρώσουμε ως προς την ενέργεια είναι ένα. Ξεκινώντας από μια συσκευή με ένα επίπεδο και συνδέοντας το με μία δεξαμενή, το επίπεδο αυτό θα διευρυνθεί σε μία σειρά επιπέδων κυμαινόμενης ισχύος αναπαριστώντας το γεγονός ότι η κυματοσυνάρτηση για κάθε επίπεδο συνεισφέρει με διαφορετικό τρόπο στην συσκευή. Αθροίζοντας όλες τις συνεισφορές το σύνολο θα πρέπει να είναι το ίδιο με το αρχικό επίπεδο.

Ο κανόνας άθροισης διατυπώνεται ως εξής

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE D(\vec{r}; E) = 1$$

Στη αναπαράσταση του πραγματικού χώρου γράφεται

$$\frac{dE}{2\pi} [A(E)] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (5.32)$$

αφού $\int_{-\infty}^{\infty} dE \delta(E - \varepsilon) = 1$ Το σημαντικό είναι ότι αυτή η ποσότητα θα είναι όμοια σε κάθε αναπαράσταση.

Συνάρτηση Green

Για τον υπολογισμό της συνάρτησης φάσματος είναι χρήσιμη η ταυτότητα

$$\begin{aligned} 2\pi\delta(E - \varepsilon_{\alpha}) &= \left[\frac{2\eta}{(E - \varepsilon_{\alpha})^2 + \eta^2} \right]_{\eta \rightarrow 0^+} \\ &= i \left[\frac{1}{E - \varepsilon_{\alpha} + i0^+} - \frac{1}{E - \varepsilon_{\alpha} - i0^+} \right] \end{aligned}$$

για να γράψουμε

$$2\pi\delta(EI - H) = i \{ [(E + i0^+)I - H]^{-1} - [(E - i0^+)I - H]^{-1} \} \quad (5.33)$$

όπου 0^+ υποδηλώνει μια θετική απειροελάχιστη ποσότητα. Ορίζοντας το καθυστερημένο τμήμα της συνάρτησης Green ως

$$G(E) = [(E + i0^+)I - H]^{-1} \quad (5.34)$$

και το προχωρημένο τμήμα ως

$$G^+(E) = [(E - i0^+)I - H]^{-1} \quad (5.35)$$

μπορούμε να γράψουμε την φασματική συνάρτηση εξαρτώμενη από τις συναρτήσεις Green

$$A(E) = i[G(E) - G^+(E)] \quad (5.36)$$

Πίνακας πυκνότητας

Αφού ορίσαμε την φασματική συνάρτηση $A(E)$ μπορούμε να εκφράσουμε και τον πίνακα πυκνότητας ως συνάρτηση αυτής. Ξεκινώντας από την σχέση [rho] = $f_o([H] - \mu[I])$ έχουμε

$$\begin{aligned} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_o(E - \mu) \delta([EI - H]) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi} f_o(E - \mu) [A(E)] \end{aligned}$$

με τη σημείωση ότι $[A(E)]/2\pi$ είναι η έκφραση υπό μορφή πίνακα της πυκνότητας των καταστάσεων $D(E)$. Η αντίστοιχη έκφραση για τον αριθμό των ηλεκτρονίων είναι

$$N = \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_o(E - \mu) D(E)$$

η οποία δηλώνει πως ο αριθμός των ηλεκτρονίων υπολογίζεται πολλαπλασιάζοντας τον αριθμό των καταστάσεων $D(E)dE$ με την πιθανότητα f_o να είναι κατειλημμένες και αθροίζοντας την συνεισφορά από όλες τις ενέργειες.

Πίνακας αυτο-ενέργειας

Η συνολική έκφραση για την συνάρτηση Green μπορεί να γραφεί στην μορφή

$$\bar{G} = \begin{bmatrix} G & G_{dR} \\ G_{Rd} & G_{RR} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (E + i0^+)I - H & -\tau \\ -\tau^+ & (E + i0^+)I - H_R \end{bmatrix}^{-1} \quad (5.37)$$

Η δύναμη αυτής της μεθόδου όπως εκφράζεται με την παραπάνω σχέση είναι ότι χρησιμοποιώντας άλγεβρα πινάκων μπορούμε να υπολογίσουμε οποιοδήποτε στοιχείο του πίνακα της συνάρτησης Green .

Η ιδιότητα των πινάκων που χρησιμοποιούμε είναι ότι αν

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}^{-1} \quad (5.38)$$

τότε

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} \quad (5.39)$$

έτσι ώστε $Aa + Bc = I$ και $Ca + Dc = 0 \rightarrow c = -D^{-1}Ca$. Επομένως

$$a = (A - BD^{-1}C)^{-1} \quad (5.40)$$

Εφαρμόζοντας την ιδιότητα αυτή για την συνάρτηση Green και κάνοντας τις κατάλληλες αντικαταστάσεις έχουμε

$$G = [(E + i0^+)I - H - \tau G_R \tau^+]^{-1}$$

$$\text{όπου } G_R = [(E + i0^+)I - H_R]^{-1}$$

αποτέλεσμα που μπορεί να γραφεί και ως

$$G = [(E + i0^+)I - H - \Sigma(E)]^{-1} \quad (5.41)$$

Η ιδιότητα αυτή χρησιμοποιείται συχνά για την εύρεση του αντιστρόφου πίνακα μεγάλων διαστάσεων με την διαμέριση του σε μικρότερους πίνακες. Μας επιτρέπει δηλαδή να υπολογίσουμε τον πίνακα $[G]$ αντιστρέφοντας έναν $(d \times d)$ πίνακα αντί για τον ολόκληρο $(d + R) \times (d + R)$ πίνακα.

5.3 Χρόνος Ζωής

Στην προηγούμενη ενότητα η συνάρτηση Green χρησιμοποιήθηκε σαν ένας εύκολος τρόπος υπολογισμού της συνάρτησης φάσματος βασισμένος στην μαθηματική ιδιότητα

$$2\pi\delta(EI - H) = i\{[(E + i0^+)I - H]^{-1} - [(E - i0^+)I - H]^{-1}\}$$

$$A(E) = i[G(E) - G^+(E)]$$

Όμως η συνάρτηση Green έχει και φυσική σημασία η οποία είναι η αυθόρμητη απόκριση στην εξίσωση Schrödinger. Χρησιμοποιώντας τις ιδιοκαταστάσεις της χαμιλτονιανής H σαν βάση ο πίνακας της συνάρτησης Green είναι διαγώνιος

$$[G(E)] = \begin{bmatrix} \frac{1}{E - \varepsilon_1 + i0^+} & 0 & \dots \\ 0 & \frac{1}{E - \varepsilon_2} + i0^+ & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (5.42)$$

Αν θεωρήσουμε τον μετασχηματισμό Fourier της $G(E)$ που ορίζεται ως εξής

$$[\tilde{G}^R](t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi\hbar} e^{+iEt/\hbar} [G(E)]$$

ο οποίος είναι επίσης διαγώνιος

$$[\tilde{G}^R](t) = \frac{-i}{\hbar} \vartheta(t) e^{-0^+ t} \begin{bmatrix} \exp(-i\varepsilon_1 t/\hbar) & 0 & \dots \\ 0 & \exp(-i\varepsilon_2 t/\hbar) & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (5.43)$$

Η απόδειξη αλλά και η ισχύς της τελευταίας σχέσης επαληθεύεται με τον αντίστροφο μετασχηματισμό

$$\begin{aligned} [G(E)] &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{+iEt/\hbar} [\tilde{G}^R(t)] \\ &= \frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{+iEt/\hbar} \vartheta(t) e^{-i\varepsilon t/\hbar} e^{-0^+ t} \\ &= \frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{+i(E-\varepsilon)t/\hbar} e^{0^+ t} = \frac{1}{E - \varepsilon + i0^+} \end{aligned} \quad (5.44)$$

Τα διαγώνια στοιχεία του πίνακα ικανοποιούν την σχέση

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_\alpha \right) \tilde{G}_{\alpha\alpha}^R(t) = \delta(t)$$

επομένως μπορούμε να γράψουμε

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - [H] \right) [\tilde{G}^R](t) = [I] \delta(t) \quad (5.45)$$

ερμηνεύοντας την $\tilde{G}^R(t)$ σαν την αυθόρμητη απόκριση της εξίσωσης Schrödinger

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - [H] \right) \{ \Psi(t) \} = 0 \quad (5.46)$$

Το (n, m) στοιχείο του πίνακα $\tilde{G}_{nm}^R(t)$ μας δίνει το n -οστό στοιχείο της κυματοσυνάρτησης εάν το σύστημα υποστεί διέγερση στο m -οστό στοιχείο του.

Από μαθηματικής άποψης αποδεικνύεται ότι και η προχωρημένη συνάρτηση Green για την οποία ισχύει

$$[\tilde{G}^A](t) = [\tilde{G}^R](t)^* \quad (5.47)$$

ικανοποιεί την εξίσωση

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - [H] \right) [\tilde{G}^A](t) = [I] \delta(t) \quad (5.48)$$

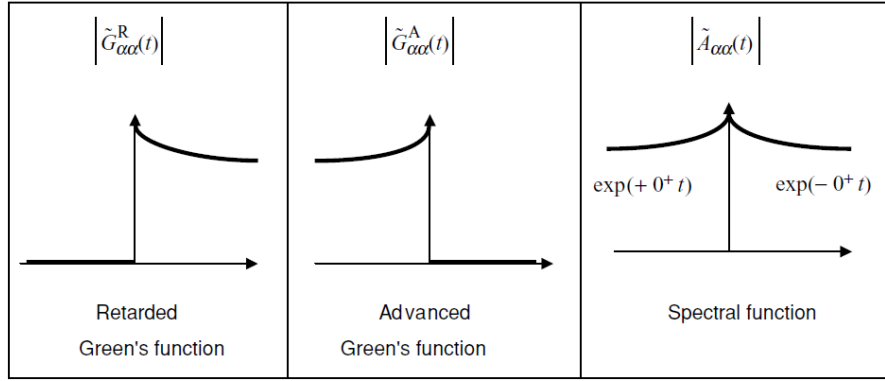
αλλά είναι μηδέν για όλους τους χρόνους μετά από $t = 0$.

Η συνάρτηση φάσματος είναι ανάλογη των δύο τμημάτων της συνάρτησης Green

$$\tilde{A}_{\alpha\alpha}^R(t) = i[\tilde{G}_{\alpha\alpha}^R - \tilde{G}_{\alpha\alpha}^A]$$

και επειδή αυτά ικανοποιούν την ίδια διαφορική εξίσωση η φασματική συνάρτηση θα ικανοποιεί την ομογενή διαφορική εξίσωση χωρίς την διέγερση και χωρίς ασυνέχειες

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - [H] \right) [\tilde{A}(t)] = [0]$$



Σχήμα 5.4: Διάγραμμα των τμημάτων της συνάρτησης Green και της φασματικής συνάρτησης στο πεδίο του χρόνου

Φυσική σημασία της αυτο-ενέργειας

Σε προηγούμενες ενότητες είδαμε πως η αυτο-ενέργεια μπορεί να υπολογιστεί από τις ιδιότητες της επιφάνειας της δεξαμενής και τον όρο σύζευξης της συσκευής με την δεξαμενή

$$\Sigma(E) = \tau g_R(E) \tau^+$$

και ότι η συνάρτηση Green στο πεδίο του χρόνου θεωρείται ως η απόκριση της εξίσωσης Schrödinger. Με παρόμοιο τρόπο μπορούμε να γράψουμε μία εξίσωση και για το τμήμα της συνάρτησης Green που αναφέρεται στην συσκευή

$$G = [(E + i0^+)I - H - \Sigma(E)]^{-1}$$

Εάν η αυτο-ενέργεια είναι ανεξάρτητη της ενέργειας τότε προκύπτει

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - [H] - [\Sigma] \right) [\tilde{G}^R(t)] = [I]\delta(t) \quad (5.49)$$

ενώ αν ληφθεί υπόψη η ενεργειακή εξάρτηση έχουμε

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - [H] - \right) [\tilde{G}^R(t)] - \int dt' [\Sigma(t-t')] [\tilde{G}^R(t')] = [I]\delta(t) \quad (5.50)$$

Ας θεωρήσουμε ένα απλό παράδειγμα μιας μικρής συσκευής με ένα μόνο ενεργειακό επίπεδο ε τέτοιο ώστε οι όροι $[H]$ και $[S]$ να είναι αριθμοί και όχι πίνακες. Η εξίσωση είναι

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon - [\Sigma] \right) \tilde{G}^R(t) = \delta(t)$$

Η λύση της εξίσωσης αυτής είναι

$$\tilde{G}^R(t) = -\frac{i}{\hbar} e^{-i(\varepsilon+\Sigma)t/\hbar} \vartheta(t)$$

η οποία μας δείχνει την απόκριση σε μια διέγερση στην συσκευή την χρονική στιγμή $t = 0$. Μπορούμε να γράψουμε την λύση στην μορφή

$$\tilde{G}^R(t) = -\frac{i}{\hbar} e^{-i(\varepsilon')\hbar} e^{-\gamma t/2\hbar} \vartheta(t) \quad (5.51)$$

όπου

$$\varepsilon' = \varepsilon + \text{Re}\Sigma, \gamma = -2\text{Im}\Sigma \quad (5.52)$$

Το πραγματικό μέρος της αυτο-ενέργειας προκαλεί μια αύξηση της ενέργειας της συσκευής από ε σε ε' ενώ το φανταστικό μέρος προσδιορίζει στις ιδιοκαταστάσεις έναν χρόνο ζωής, με το πλάτος της κυματοσυνάρτησης να εκφράζει πως μειώνεται η πιθανότητα με τον χρόνο μετά της αρχική διέγερση

$$|\tilde{G}^R(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \vartheta(t) \exp(-\gamma t\hbar)$$

Ο χρόνος ζωής των καταστάσεων είναι

$$\frac{1}{\tau} = -\frac{\gamma}{\hbar} = -\frac{2\text{Im}\Sigma}{\hbar} \quad (5.53)$$

Το φανταστικό μέρος της αυτο-ενέργειας είναι ίσο με την διεύρυνση της πυκνότητας των καταστάσεων. Απο τον μετασχηματισμό Fourier της συνάρτησης Green προκύπτει ότι

$$G(E) = \frac{1}{E - \varepsilon' + i\gamma/2}$$

έτσι ώστε

$$\frac{A(E)}{2\pi} = D(E) = i \left(\frac{1}{E - \varepsilon' + i\gamma/2} - \frac{1}{E - \varepsilon' - i\gamma/2} \right) = \frac{\gamma}{(E - \varepsilon')^2 + (\gamma/2)^2}$$

δείχνοντας πως η τοπική πυκνότητα των καταστάσεων *LDOS* της συσκευής διευρύνεται από ένα μόνο επίπεδο σε μια Λορεντζιανή καμπύλη πλάτους γ ίση με το διπλάσιο του φανταστικού μέρους της αυτο-ενέργειας.

Γνωρίζοντας το φανταστικό μέρος είναι δυνατός ο υπολογισμός του πραγματικού μέρους με την βοήθεια μια βασικής αρχής ανεξάρτητης από το είδος του προβλήματος. Η βασική αρχή είναι ότι το πραγματικό και το φανταστικό κομμάτι πρέπει να είναι μετασχηματισμοί Hilbert το ένα του άλλου

$$\text{Re}\Sigma(E) = -\frac{1}{\pi} \int dE' \frac{\text{Im}\Sigma(E')}{E - E'} = \text{Im}\Sigma(E) \otimes \left(-\frac{1}{\pi E} \right) \quad (5.54)$$

έτσι ώστε η αυτο-ενέργεια να μπορεί να γραφεί στην μορφή

$$\Sigma(E) = [\text{Re}\Sigma(E)] + i[\text{Im}\Sigma(E)] = i\text{Im}\Sigma(E) \otimes \left(\delta(E) + \frac{i}{\pi E} \right) \quad (5.55)$$

Η αρχή αυτή εφαρμόζεται σε κάθε συνάρτηση που ο μετασχηματισμός Fourier είναι μηδεν για την χρονική στιγμή $t < 0$

Πίνακας διεύρυνσης

Στην γενικότερη περίπτωση η αυτο-ενέργεια είναι ένας πίνακας του οποίου το αντι-ερμιτιανό κομμάτι μπορεί να οριστεί ως ο πίνακας διεύρυνσης $\Gamma(E)$

$$\Gamma(E) = i[\Sigma(E) - \Sigma^+(E)] \quad (5.56)$$

Το τμήμα αυτό της αυτο-ενέργειας είναι υπεύθυνο για την διεύρυνση των επιπέδων ενώ το ερμιτιανό τμήμα

$$\Sigma_H(E) = \frac{1}{2}[\Sigma(E) + \Sigma^+(E)]$$

μπορεί να θεωρηθεί και ως μια διόρθωση στην χαμιλτονιανή H . Συνολικά μπορούμε να γράψουμε

$$H + \Sigma(E) = [H + \Sigma_H(E)] - \frac{i\Gamma(E)}{2}$$

5.4 Υπολογισμός συντελεστή μετάδοσης

Στο κεφάλαιο 3 περιγράψαμε ένα απλοϊκό μοντέλο για την ροή του ρεύματος αποτελούμενο από ένα κανάλι με ένα ενεργειακό επίπεδο που επικοινωνεί με δύο επαφές και στην συνέχεια το γενικεύσαμε με την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών για συσκευές με πολλαπλά ενεργειακά επίπεδα όπου οι ποσότητες ενδιαφέροντος αναπαριστούνται με την μορφή πινάκων αντί για αριθμούς, ενώ στο παρόν κεφάλαιο είδαμε πως με την βοήθεια και τον υπολογισμό της συνάρτησης Green μπορούμε να υπολογίσουμε τον πίνακα της φασματικής συνάρτησης A την αναπαράσταση πίνακα της πυκνότητας των καταστάσεων. Σε αυτήν την ενότητα θα δούμε πως από τα παραπάνω μπορούμε να υπολογίσουμε τον συντελεστή μετάδοσης μιας συσκευής και στην συνέχεια το ηλεκτρικό ρεύμα που την διαρρέει με την εφαρμογή εξωτερικής τάσης.

Ας υποθέσουμε ένα κανάλι με δύο επαφές, αρχικά μη συνδεδεμένες με αυτό. Οι κυματοσυναρτήσεις των ηλεκτρονίων σε αυτές θα ικανοποιούν την εξίσωση Schrödinger για τις απομονωμένες επαφές

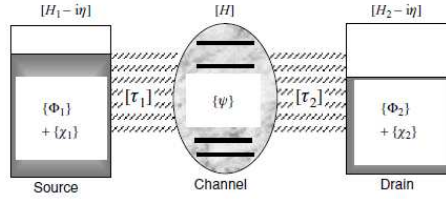
$$[EI - H_1 + i\eta]\{\Phi_1\} = \{S_1\} \quad \text{και} \quad [EI - H_2 + i\eta]\{\Phi_2\} = \{S_2\}$$

Συνδέοντας τις δύο επαφές η ολική κυματοσυνάρτηση θα πρέπει να ικανοποιεί την σύνθετη εξίσωση Schrödinger του συστήματος

$$\begin{bmatrix} EI - H_1 + i\eta & -\tau_1^+ & 0 \\ -\tau_1^+ & EI - H & -\tau_2 \\ 0 & -\tau_2^+ & EI - H_1 + i\eta \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_1 + \chi_1 \\ \psi \\ \Phi_2 + \chi_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} S_1 \\ 0 \\ S_2 \end{Bmatrix} \quad (5.57)$$

όπου H είναι η χαμιλτονιανή του καναλιού. Χρησιμοποιώντας άλγεβρα πινάκων προκύπτει από την πρώτη και την τελευταία σειρά

$$\{\chi_1\} = G_1\tau_1^+\{\psi\} \quad \text{και} \quad \{\chi_2\} = G_2\tau_2^+\{\psi\} \quad (5.58)$$



Σχήμα 5.5: Σχηματική αναπαράσταση ενός καναλιού με δύο επαφές

όπου

$$G_1 = [EI - H_1 + i\eta] \quad \text{και} \quad G_2 = [EI - H_2 + i\eta] \quad (5.59)$$

είναι οι συναρτήσεις Green των απομονωμένων επαφών. Χρησιμοποιώντας τις τελευταίες δύο εξισώσεις για την απαλοιφή των όρων $\{\chi_1\}, \{\chi_2\}$ προκύπτει ότι

$$[EI - H - \Sigma_1 - \Sigma_2]\{\psi\} = \{S\} \quad (5.60)$$

με

$$\Sigma_1 = \tau_1 G_1 \tau_1^+ \quad \text{και} \quad \Sigma_2 = \tau_2 G_2 \tau_2^+ \quad (5.61)$$

να είναι οι πίνακες αυτοενέργειας. Οι αντίστοιχοι πίνακες διεύρυνσης Γ είναι

$$\Gamma_1 = \tau_1 A_1 \tau_1^+ \quad \text{και} \quad \Gamma_2 = \tau_2 A_2 \tau_2^+ \quad (5.62)$$

όπου $A_1 = i[G_1 - G_1^+], A_2 = i[G_2 - G_2^+]$ είναι οι φασματικές συναρτήσεις των δύο επαφών. Στην συνέχεια ορίζοντας την συνάρτηση Green για το κανάλι

$$G \equiv [EI - H - \Sigma_1 - \Sigma_2]^{-1} \quad (5.63)$$

και

$$G^n = G \Sigma^{in} G^+ \quad (5.64)$$

όπου

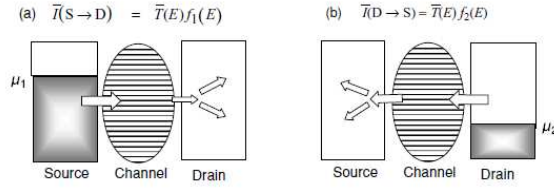
$$\Sigma^{in} = [\Gamma_1] f_1 + [\Gamma_2] f_2 \quad (5.65)$$

είναι μια συνάρτηση που εκφάζει την αλληλεπίδραση των ηλεκτρονίων του καναλιού εξαιτίας της σύνδεσης με τις επαφές, καταλήγουμε στην σχέση[23]

$$[G^n] = [A_1] f_1 + [A_2] f_2 \quad (5.66)$$

με

$$A_1 = G \Gamma_1 G^+ \quad \text{και} \quad A_2 = G \Gamma_2 G^+$$



Σχήμα 5.6: Σχηματική αναπαράσταση της ροής του ρεύματος μεταξύ των δύο επαφών

να είναι οι μερικές φασματικές συναρτήσεις για κάθε επαφή[23].

Η ροή του ρεύματος στην συσκευή μπορεί να αναπαρασταθεί απο δυο αντικρουόμενες ροές μεταξύ των δύο επαφών

Ο συντελεστής μετάδοσης (*transmissioncoefficient*) για κάθε επαφή ορίζεται

$$\begin{aligned} \bar{T}_{12}(E) &\equiv \text{Trace}[\Gamma_1 A_2] \\ \bar{T}_{21}(E) &\equiv \text{Trace}[\Gamma_2 A_1] \end{aligned} \quad (5.67)$$

Αποδεικνύεται ότι $\text{Trace}[\Gamma_1 A_2] = \text{Trace}[\Gamma_1 G \Gamma G^+] = \text{Trace}[\Gamma G^+ \Gamma_1 G]$ [24] για κάθε επαφή επομένως ο συντελεστής μετάδοσης είναι

$$\bar{T}(E) \equiv \text{Trace}[\Gamma_1 A_2] = \text{Trace}[\Gamma_2 A_1] = \text{Trace}[\Gamma_1 G \Gamma_2 G^+] = \text{Trace}[\Gamma_2 G \Gamma_1 G^+] \quad (5.68)$$

Έχοντας υπολογίσει τον συντελεστή μεταφοράς το συνολικό ρεύμα που διαρρέει την συσκευή είναι

$$I = (q/h) \int_{-\infty}^{\infty} dE \bar{T}(E) [f_1(E) - f_2(E)] \quad (5.69)$$

Κεφάλαιο 6

Μελέτη μαγνητικής διόδου $FM/FI/NM$

6.1 Εισαγωγή

Στα προηγούμενα κεφάλαια έγινε η περιγραφή της μεθόδου με την οποία ένα φυσικό πρόβλημα μπορεί να αναπαρασταθεί και να επιλυθεί με την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών, την χρήση πινάκων και την βοήθεια της συνάρτησης Green . Σε αυτό το κεφάλαιο θα παρουσιαστεί η εφαρμογή των παραπάνω τεχνικών επίλυσης φυσικών προβλημάτων για την μελέτη μιας μαγνητικής διόδου αποτελούμενης από ένα σιδηρομαγνητικό υλικό (FM), ένα μονωτικό υλικό με μαγνητικές ιδιότητες (FI) και ένα μη μαγνητικό μεταλλικό υλικό, καθώς και τα αποτελέσματα της μελέτης αυτής. Συγκεκριμένα θα μελετηθούν η εξάρτηση των ρευμάτων ανάλογα την διεύθυνση του σπιν και της μαγνήτισης από το πάχος του φράγματος. Κυρίαρχο στοιχείο της παρούσας μελέτης είναι η εξάρτηση της μαγνητοαντίστασης (TMR) από την εξωτερικά εφαρμοζόμενη τάση, το ύψος του φράγματος δυναμικού, την ένταση του φαινομένου spin filtering , τόσο στο σιδηρομαγνητικό υλικό όσο και στο μονωτικό υλικό-φράγμα, όπως επίσης και από το πάχος του μονωτικού υλικού.

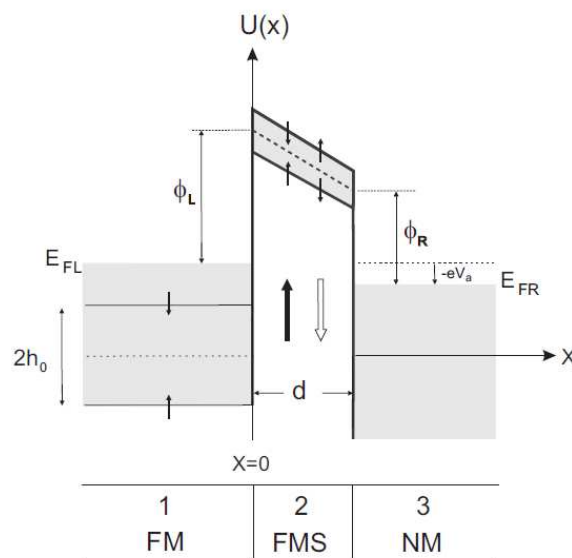
6.1.1 Μοντέλο και φορμαλισμός

Το φαινόμενο της μαγνητοαντίστασης σε μαγνητικές διόδους παρατηρήθηκε αρχικά σε δομές που αποτελούνταν από δύο σιδηρομαγνήτες χωρισμένους από έναν μονωτή ή και ημιαγωγό[16]. Η εμφάνιση της μαγνητοαντίστασης σε αυτές τις δομές ερμηνεύεται από ένα μοντέλο μιας ενεργής μάζας στο οποίο η ενεργειακή ζώνη που αντιστοιχεί στην ενέργεια Fermi των σιδηρομαγνητών χωρίζεται σε δύο ξεχωριστές ζώνες ανάλογα την εσωτερική μαγνήτιση του υλικού κάτω από μια συγκεκριμένη θερμοκρασία μετάβασης T_C , θερμοκρασία Curie, με την κάθε κατάσταση να χαρακτηρίζεται από διεύθυνση σπιν πάνω και σπιν με διαφορετική πυκνότητα καταστάσεων. Όταν η μαγνήτιση των ηλεκτροδίων των δύο σιδηρομαγνητών είναι παράλληλη τα ηλεκτρόνια με διεύθυνση σπιν πάνω διέρχονται εξαιτίας του φαινομένου σήραγγας από μια ζώνη με μεγαλύτερη πυκνότητα καταστάσεων (majority band) σε μια αντίστοιχης πυκνότητας καταστάσεων ζώνη

ενώ τα ηλεκτρόνια με αντίθετη διεύθυνση σπιν διέρχονται από μια ζώνη με μικρότερη πυκνότητα καταστάσεων σε μια αντίστοιχη ζώνη (minority band). Στην αντίθετη περίπτωση όπου οι μαγνητισείς είναι με αντιπαράλληλη κατεύθυνση συμβαίνει η αντίστροφη διαδικασία, ηλεκτρόνια που προέρχονται από ζώνες πλειοψηφίας διέρχονται μέσω του φράγματος και καταλήγουν σε ζώνες μειοψηφίας. Η αλλαγή στον προσανατολισμό των μαγνητίσεων δημιουργεί μια αλλαγή στην αγωγιμότητα που είναι η παρατηρούμενη μαγνητοαντίσταση [25, 9].

Η αντικατάσταση του δεύτερου σιδηρομαγνητικού υλικού από ένα μεταλλικό υλικό και του μονωτικού υλικού από ένα υλικό με μαγνητικές ιδιότητες προσδίδει στην δόμη η οποία πλέον είναι του τύπου $FM/FMS/NM$ και τα χαρακτηριστικά μιας *spinfiltering* διόδου με την έννοια ότι το υλικό του φράγματος δημιουργεί δυό εξαρτώμενα απο την διεύθυνση του σπιν φράγματα διέλευσης. Ένα ηλεκτρόνιο με προσανατολισμό σπιν παράλληλο (ή αντιπαράλληλο) στον προσανατολισμό της μαγνήτισης του φράγματος θα διέλθει από ένα χαμηλότερο (ή υψηλότερο) φράγμα. Αυτό έχει ως συνεπεία την μεγαλύτερη(ή μικρότερη) πιθανότητα διέλευσης απο το φράγμα και επομένως και την αλλαγή της αγωγιμότητας της διόδου.

Η παρούσα μελέτη αναφέρεται σε μαγνητικές διόδους του τύπου $FM/FMS/NM$ όπου το δεύτερο σιδηρομαγνητικό ηλεκτρόδιο έχει αντικατασταθεί από ένα ηλεκτρόδιο μη μαγνητικού υλικού, με την εφαρμογή συνεχούς τάσης V_a όπως φαίνεται στο ακόλουθο σχήμα όπου ϕ_L, ϕ_R είναι τα ύψη αριστερά και δεξιά απο το μαγνητικό φράγμα μετρούμενα απο την ενέργεια Fermi του συστήματος.



Σχήμα 6.1: Σχηματικό διάγραμμα μιάς $FM/FMS/NM$ μαγνητικής διόδου με δυναμικό εξαρτώμενο απο το σπιν και τον μαγνητικό προσανατολισμό[26]

Για μια διόδο αποτελούμενη από ηλεκτρόδια διαφορετικού υλικού, η διαφορά στα ύψη των φραγμάτων στις διεπιφάνειες οδηγούν σε μία μη συμμετρική συμπεριφορά της χαρακτηριστικής καμπύλης ρεύματος-τάσης, με παράμετρο ασυμμετρίας $\Delta\phi = \phi_L - \phi_R$ για μηδενική εξωτερική τάση. Η χαμιλτονιανή εξίσωση που περιγράφει την διόδο είναι

$$H_x = -\frac{\hbar^2}{2m_j^*} \frac{d^2}{dx^2} + U_j(x) + V^\sigma - h(x) \cdot \sigma \quad (6.1)$$

όπου m_j^* ($j = 1 - 3$) είναι οι ενεργές μάζες των ηλεκτρονίων σε κάθε μία περιοχή και

$$U_j(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_L - (\Delta\phi + eV_\alpha) \frac{x}{d}, & 0 \leq x \leq d, \\ -eV_\alpha, & x > d \end{cases} \quad (6.2)$$

είναι το εξαρτώμενο από την απόσταση δυναμικό, $U(L) = \mu + \phi_L$ είναι το ύψος του φράγματος στην διεπιφάνεια σιδηρομαγνήτη-φράγματος, μ είναι η ενέργεια *Fermi* του συστήματος και d είναι το πλάτος του φράγματος. Ο όρος V^σ αναφέρεται στο εξαρτώμενο από το σπιν δυναμικό το οποίο εκφράζει την ενέργεια σύζευξης μεταξύ των διερχόμενων ηλεκτρονίων και των εντοπισμένων καταστάσεων στο μαγνητικό φράγμα και μπορεί να γραφεί στην μορφή $V^\sigma = -I\sigma < S_z >$. Οι τιμές $\sigma = \pm 1$ αντιστοιχούν σε διεύθυνση σπιν \uparrow, \downarrow . Ο όρος $h(x) \cdot \sigma$ αναφέρεται στην εσωτερική ενέργεια ανταλλαγής στον σιδηρομαγνήτη όπου $h(x)$ είναι το μέσο μοριακό πεδίο και $|h| = h_0$

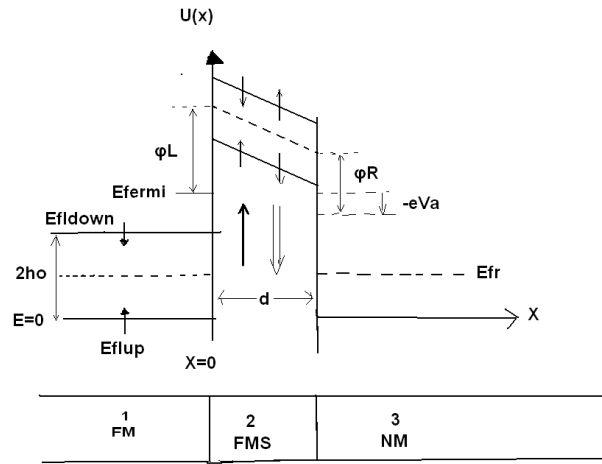
6.2 Εφαρμογή της μεθόδου των πεπερασμένων διαφορών

Οι εξισώσεις 6.1 και 6.2 που περιγράφουν την χαμιλτονιανή για την διόδο *FM/FMS/NM* είναι οι εξισώσεις στις οποίες θα εφαρμόσουμε την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών με την παραδοχή ότι σε όλες τις περιοχές της διόδου η ενεργή μάζα των ηλεκτρονίων παραμένει σταθερή και ότι η εξωτερική τάση εφαρμόζεται συμμετρικά στα άκρα της συσκευής.

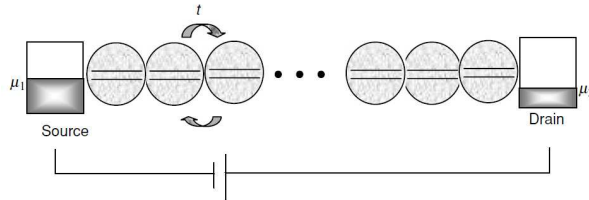
Το απλουστευμένο ενεργειακό διάγραμμα της διόδου φαίνεται στο ακόλουθο σχήμα

Αρχικά προσομοιώνουμε την διόδου με ένα κύκλωμα όπως αυτό της εικόνας 6.3 όπου οι δύο επαφές, το σιδηρομαγνητικό υλικό και το μη μαγνητικό υλικό χαρακτηρίζονται ως πηγή (*Source*) και απαγωγός (*Drain*) ενώ το μαγνητικό φράγμα θεωρείται ως μια συστοιχία μοναδιαίων κελιών στα άκρα της οποίας εφαρμόζεται η εξωτερική τάση.

Απο το ενεργειακό διάγραμμα (Σχήμα 6.2) προκύπτει πως η ενέργεια *Fermi* του συστήματος μετατοπίζεται κατά $V/2$ ενώ οι παράμετροι U_b, D μετρώνται από αυτήν. Η κατεύθυνση της μαγνήτισης στο τμήμα *FM* της συσκευής παραμένει σταθερή και προσανατολισμένη κατά την διεύθυνση $+z$, ενώ η αντίστοιχη διεύθυνση του σπιν στο φράγμα μπορεί να εναλλάσσεται μεταξύ των διευθύνσεων $+z, -z$ όπως φαίνεται και από τα βέλη. Οι διακεκομμένες γραμμές αναπαριστούν των πυθμένα της ζώνης αγωγιμότητας σε κάθε περιοχή για $T \geq T_c$ ενώ οι λεπτές γραμμές με τα βέλη αναπαριστούν τον πυθμένα της ζώνης αγωγιμότητας ανάλογα την διεύθυνση του σπιν για $T < T_c$. Το μηδέν της ενεργείας ορίζεται στον πυθμένα της ζώνης αγωγιμότητας για



Σχήμα 6.2: Ενεργειακό διάγραμμα για μια διάοδο $FM/FI/NM$ με την εφαρμογή θετικής τάσης

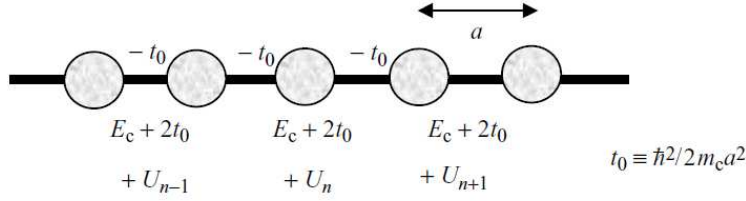


Σχήμα 6.3: Σχηματική αναπαράσταση με την μορφή κυκλώματος μιας μαγνητικής διάοδου $FM/FMS/NM$

τα ηλεκτρόνια με σπιν up στον αριστερό σιδηρομαγνήτη ενώ για το δεξιό τμήμα της συσκευής ο πυθμένας της ζώνης αγωγιμότητας του μετάλλου ορίζεται στο μέσο του $spinsplitting$, ho του αριστερού σιδηρομαγνήτη [18, 27].

Το επόμενο βήμα είναι η επιλογή ενός κατάλληλου πεπερασμένου διακριτού πλέγματος,κάθε σημείο του οποίου αναπαριστά μία τιμή της λύσης της χαμιλτονιανής εξίσωσης που χαρακτηρίζει την διάοδο. Η επιλογή της πλεγματικής σταθεράς, της απόστασης μεταξύ δύο σημείων του πλέγματος σχετίζεται με την ακρίβεια της προσεγγιστικής μεθόδου,η μέθοδος είναι πιο ακριβής όσο η σταθερά $\alpha \rightarrow 0$. Η ενέργεια αλληλεπίδρασης μεταξύ δύο σημείων του πλέγματος t_0 καθορίζεται από τη απόσταση του πλέγματος και την ενεργό μάζα των ηλεκτρονίων στην συσκευή $t_0 = \hbar^2/2m_c\alpha^2$ και για την παρούσα μελέτη παραμένει σταθερή.

Στην συνέχεια εφαρμόζουμε την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών σε κάθε τμήμα της διάοδου. Σκοπός είναι η μετατροπή της διαφορικής εξίσωσης κάθε περιοχής σε μια εξίσωση διαφορών.



Σχήμα 6.4: Σχηματική αναπαράσταση ενός πεπερασμένου διακριτού πλέγματος για κάθε τμήμα της συσκευής στο οποίο εφαρμόζεται η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών

Για το αριστερό τμήμα της συσκευής, το σιδηρομαγνητικό υλικό, η χαμιλτονιανή έχει την μορφή

$$H_x = -\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \frac{d^2}{dx^2} - h(x) \cdot \sigma \quad (6.3)$$

Η χρήση της μεθόδου στο τμήμα αυτό λαμβανοντας υπόψη την μορφή της χαμιλτονιανής (εξισώσεις 6.1, 6.2), την ύπαρξη δύο δυνατών καταστάσεων του σπιν αλλά και την σχέση διασποράς για την ενέργεια

$$E = E_{0,j} + 2t_0(1 - \cos(ka)) \quad (6.4)$$

δίνει ως αποτέλεσμα

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\psi_n}{dt} &= [H_x]_{x=x_n} = ((E_{01} + 2t_0 \cdot I) + (\frac{I - \sigma \cdot h_0}{2}))\psi_n - t_0\psi_{n-1} - t_0\psi_{n+1} \\ &= \sum_m [((E_{01} + 2t_0 \cdot I) + (\frac{I - \sigma \cdot h_0}{2}))\delta_{n,m} - t_0\delta_{n,m+1} - t_0\delta_{n,m-1}]\psi_m \end{aligned} \quad (6.5)$$

όπου I είναι ο μοναδιαίος 2×2 πίνακας, E_{01} είναι ο πυθμένος της ζώνης αγωγιμότητας για θερμοκρασία πάνω από την θερμοκρασία μετάβασης $T > T_C$, $\delta_{n,m}$ είναι το δέλτα του Kronecker $\delta_{n,m} = 1$ αν $n = m$ αλλιώς $\delta_{n,m} = 0$ αν $n \neq m$.

Η παραπάνω εξίσωση μπορεί να γραφεί σαν μία εξίσωση πινάκων :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \{\psi(t)\} = [H_x] \{\psi(t)\} \quad (6.6)$$

Τα στοιχεία του πίνακα της χαμιλτονιανής δίνονται απο την σχέση, σύμφωνα με το Κεφάλαιο 4

$$H_L(n, m) = [((E_{01} + 2t_0 \cdot I) + (\frac{I - \sigma \cdot h_0}{2}))\delta_{n,m} - t_0\delta_{n, m+1} - t_0\delta_{n, m-1}] \quad (6.7)$$

Απλοποιώντας την παραπάνω εξίσωση για τις δύο δυνατές τιμές του σπιν ορίζουμε $E_{01\uparrow} = E_{01} - h_0$ και $E_{01\downarrow} = E_{01} + h_0$ ο πίνακας που αναπαριστά την χαμιλτονιανή ενδεικτικά για τα δυο πρώτα σημεία του πεπερασμένου πλέγματος θα έχει την μορφή

$$H_L = \begin{array}{cccc} 2t_0 + E_{01\uparrow} & -t_0 & 0 & 0 \\ -t_0 & 2t_0 + E_{01\downarrow} & -t_0 & 0 \\ 0 & -t_0 & 2t_0 + E_{01\uparrow} & -t_0 \\ 0 & 0 & -t_0 & 2t_0 + E_{01\downarrow} \end{array}$$

Το κεντρικό τμήμα της συσκευής περιγράφεται απο την χαμιλτονιανή

$$H_x = -\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \frac{d^2}{dx^2} - U_L - (\Delta\phi + eV_\alpha) \frac{x}{d} + V^\sigma \quad (6.8)$$

Εφαρμόζοντας την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών σε αυτό το τμήμα με τις προϋποθέσεις που ισχύουν στο αριστερό τμήμα και χωρίς να λάβουμε υπόψη την πτώση τάσης μέσα στο φράγμα $(\Delta\phi + eV_\alpha) \frac{x}{d}$ προκύπτει

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\psi_n}{dt} &= [H_x]_{x=x_n} = ((E_{02} + U_L + 2t_0) \cdot I + (\frac{I + V^\sigma}{2}))\psi_n - t_0\psi_{n-1} - t_0\psi_{n+1} \\ &= \sum_m [((E_{02} + U_L + 2t_0) \cdot I + (\frac{I + V^\sigma}{2}))\delta_{n,m} - t_0\delta_{n,m+1} - t_0\delta_{n,m-1}]\psi_m \end{aligned} \quad (6.9)$$

όπου I είναι ο μοναδιαίος 2×2 πίνακας, E_{02} είναι ο πυθμένας της ζώνης αγωγιμότητας για θερμοκρασία πάνω από την θερμοκρασία μετάβασης $T > T_C$, και $V^\sigma = -c\sigma < S_z > = \pm\Delta$ είναι το εξαρτώμενο απο το σπιν δυναμικό.

Γράφοντας την τελευταία εξίσωση υπο μορφή πινάκων, τα στοιχεία του πίνακα της χαμιλτονιανής σε αυτό το τμήμα της συσκευής δίνονται απο την σχέση

$$H_C(n, m) = [((E_{02} + U_L + 2t_0) \cdot I + (\frac{I + |\Delta|}{2}))]\delta_{n,m} - t_0\delta_{n, m+1} - t_0\delta_{n, m-1} \quad (6.10)$$

Απλοποιώντας την παραπάνω εξίσωση για τις δύο δυνατές τιμές του σπιν ορίζουμε $E_{02\uparrow} = E_{01} - \Delta$ και $E_{02\downarrow} = E_{01} + \Delta$ ο πίνακας που αναπαριστά την χαμιλτονιανή ενδεικτικά για τα δυο πρώτα σημεία του πλέγματος θα έχει την μορφή

$$H_C = \begin{array}{cccc} 2t_0 + E_{02\uparrow} + U_L & -t_0 & 0 & 0 \\ -t_0 & 2t_0 + E_{02\downarrow} + U_L & -t_0 & 0 \\ 0 & -t_0 & 2t_0 + E_{02\uparrow} + U_L & -t_0 \\ 0 & 0 & -t_0 & 2t_0 + E_{02\downarrow} + U_L \end{array}$$

Στο δεξίο τμήμα της συσκευής, το μη μαγνητικό η χαμιλτονιανή είναι

$$H_x = -\frac{\hbar^2}{2m_j^*} \frac{d^2}{dx^2} - eV_\alpha \quad (6.11)$$

Ακολουθώντας την ίδια διαδικασία όπως και με τα υπόλοιπα δύο τμήματα της συσκευής, από την εφαρμογή μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών προκύπτει

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\psi_n}{dt} &= [H_x]_{x=x_n} = ((E_{03} - eV_\alpha + 2t_0) \cdot I)\psi_n - t_0\psi_{n-1} - t_0\psi_{n+1} \\ &= \sum_m [((E_{03} - eV_\alpha + 2t_0) \cdot I)\delta_{n,m} - t_0\delta_{n,m+1} - t_0\delta_{n,m-1}]\psi_m \end{aligned} \quad (6.12)$$

όπου I είναι ο μοναδιαίος 2×2 πίνακας, E_{03} είναι ο πυθμένος της ζώνης αγωγιμότητας του δεξιού μη μαγνητικού υλικού. Από την τελευταία εξίσωση σε μορφή πινάκων, τα στοιχεία του πίνακα της χαμιλτονιανής υπολογίζονται δίνονται από την σχέση

$$H_R(n, m) = [((E_{03} + 2t_0) \cdot I)]\delta_{n,m} - t_0\delta_{n, m+1} - t_0\delta_{n, m-1} \quad (6.13)$$

Ο πίνακας που αναπαριστά την χαμιλτονιανή ενδεικτικά για τα δυο πρώτα σημεία του πλέγματος θα έχει την μορφή

$$H_C = \begin{array}{cccc} 2t_0 + E_{03} & -t_0 & 0 & 0 \\ -t_0 & 2t_0 + E_{03} & -t_0 & 0 \\ 0 & -t_0 & 2t_0 + E_{03} & -t_0 \\ 0 & 0 & -t_0 & 2t_0 + E_{03} \end{array}$$

Με την εφαρμογή εξωτερικής τάσης τα στοιχεία των πινάκων σε κάθε τμήμα της συσκευής θα πρέπει να τροποποιηθούν καταλλήλως, στο αριστερό τμήμα για συμμετρικά εφαρμοζόμενη τάση θα πρέπει να προστεθεί σε κάθε διαγώνιο στοιχείο ο όρος $eV_\alpha/2$ που αντιπροσωπεύει την άνοδο των ενεργειακών επιπέδων λόγω της εφαρμογής της τάσης 6.2. Αντίστοιχα στο δεξίο κομμάτι θα πρέπει να αφαιρεθεί ο ίδιος όρος από κάθε διαγώνιο στοιχείο, επειδή σε εκείνο το τμήμα της συσκευής τα ενεργειακά επίπεδα του συστήματος μειώνονται εξαιτίας της τάσης. Στο κεντρικό τμήμα σύμφωνα με την μορφή του δυναμικού τάσης όπως αυτό περιγράφεται από την χαμιλτονιανή του συστήματος θα πρέπει η πτώση τάσης να πραγματοποιείται ανά σημείο του πλέγματος του φράγματος. Επομένως θα πρέπει κάθε διαγώνιο στοιχείο του πίνακα να συμπληρωθεί με τον όρο $eV_\alpha(\frac{1}{2} - \frac{i}{N+1})$ όπου N ο αριθμός των σημείων του φράγματος.

Οι εκφράσεις για το κάθε τμήμα της συσκευής είναι οι ακόλουθες[28]

$$H_L(n, m, E_{01}) = \begin{cases} ((E_{01} + 2t_0 + eV_\alpha/2) \cdot I + (\frac{I-\sigma \cdot \hbar_0}{2})) & n = m \\ -t_0 \cdot I & n, m \text{ πλησιέστεροι γείτονες} \\ 0, \text{ οπουδήποτε αλλού} \end{cases} \quad (6.14)$$

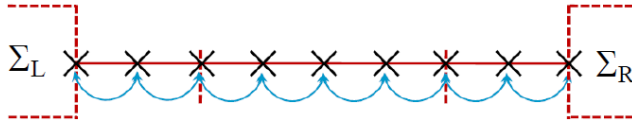
$$H_C(n, m, E_{02}) = \begin{cases} ((E_{02} + U_L + 2t_0 + eV_\alpha(\frac{1}{2} - \frac{i}{N+1})) \cdot I + (\frac{I+|\Delta|}{2})) & n = m \\ -t_0 \cdot I & n, m \text{ πλησιέστεροι γείτονες} \\ 0, \text{ οπουδήποτε αλλού} \end{cases} \quad (6.15)$$

και

$$H_R(n, m, E_{03}) = \begin{cases} ((E_{03} - eV_\alpha/2 + 2t_0) \cdot I) & n = m \\ -t_0 \cdot I & n, m \text{ πλησιέστεροι γείτονες} \\ 0, \text{ οπουδήποτε αλλού} \end{cases} \quad (6.16)$$

6.2.1 Υπολογισμος ρευμάτων με την χρήση της συνάρτησης *Green*

Στην ενότητα αυτή θα παρουσιάσουμε την εφαρμογή της μεθόδου για τον υπολογισμό των ρευμάτων που διαρρέουν την συσκευή με την χρήση της συνάρτησης *Green*. Αρχικά θεωρούμε πως το σύστημα περιγράφεται απο μια συνολική χαμιλτονιανή $H = H_L + H_C + H_R$ και πως για το ανοικτό σύστημα της διόδου που μελετάμε οι συνεισφορές των ηλεκτροδίων των επαφών αντιπροσωπεύονται απο τους πίνακες αυτοενέργειας Σ .



Σχήμα 6.5: Σχηματική αναπαράσταση της επίδρασης των επαφών μέσω των πινάκων αυτο-ενέργειας

Οι πίνακες αυτο-ενέργειας όπως περιγράψαμε στο Κεφάλαιο 5 [23, 24] ορίζονται ως

$$\Sigma \equiv \tau G_R \tau^\dagger \quad (6.17)$$

όπου ο όρος G_R αναφέρεται στην συνάρτηση *Green* της ημιάπειρης επαφής αφού περιέχει μόνο το τμήμα της χαμιλτονιανής που αντιστοιχεί στην επαφή και ονομάζεται συνάρτηση *Green* της επαφής.

Ο πίνακας που αντιστοιχεί στην συνάρτηση *Green* G_R είναι διαστάσεων $(R \times R)$ αφού έχουμε θεωρήσει ότι η αριστερή επαφή είναι ημιάπειρη, ο πίνακας $[\tau]$ είναι διαστάσεων $(d \times R)$ και συνδέεται με r στοιχεία της επιφάνειας μεταξύ της επαφής και του καναλιού. Επομένως είναι

δυνατόν να τον περιορίσουμε σε έναν $(d \times r)$ πίνακα [23, 24] και να γράψουμε

$$\Sigma_{(d \times d)} \equiv \tau_{(d \times r)} g_{R(r \times r)} \tau_{(r \times d)}^+ \quad (6.18)$$

$$(6.19)$$

όπου η επιφανειακή συνάρτηση *Green* g_R αντιπροσωπεύει ένα $(r \times r)$ υποσύνολο της πλήρους συνάρτησης *Green* της επαφής που περιλαμβάνει μόνο r σημεία της επιφάνειας. Για ένα μονοδιάστατο πρόβλημα ισχύει όπως είδαμε στο Κεφάλαιο 5

$$\tau = -t_0 \quad \text{και} \quad g_R = -(1/t_0) \exp(ik\alpha)$$

Λαμβάνοντας υπόψη τις δυο δυνατές καταστάσεις του σπιν ο πίνακας της αυτο-ενέργειας για την αριστερή επαφή είναι ένας 2×2 πίνακας με στοιχεία

$$\Sigma_L = \begin{bmatrix} -t_0 \exp(ik_L^\uparrow) \alpha & 0 \\ 0 & -t_0 \exp(ik_L^\downarrow) \alpha \end{bmatrix} \quad (6.20)$$

όπου οι όροι $k_L^\uparrow, k_L^\downarrow$ προέρχονται από την σχέση διασποράς της ενέργειας για την αριστερή επαφή[28]

$$k_L^\uparrow = \cos^{-1} \left(\frac{E - H_L}{2t_0} \right) \quad (6.21)$$

και

$$k_L^\downarrow = \cos^{-1} \left(\frac{E - H_L}{2t_0} \right) \quad (6.22)$$

Αντιστοιχες είναι και οι εκφράσεις για την δεξιά επαφή

$$\Sigma_R = \begin{bmatrix} -t_0 \exp(ik_R^\uparrow) \alpha & 0 \\ 0 & -t_0 \exp(ik_R^\downarrow) \alpha \end{bmatrix} \quad (6.23)$$

$$k_R^{\uparrow, \downarrow} = \cos^{-1} \left(\frac{E - H_R}{2t_0} \right) \quad (6.24)$$

Γνωρίζοντας την χαμιλτονιανή του συστήματος και τις εκφράσεις για τους πίνακες αυτο-ενέργειας $\Sigma_{L,R}$ είναι δυνατός ο υπολογισμός της συνάρτησης *Green* του συστήματος

$$G(E) = [E - H - \Sigma_L - \Sigma_R]^{-1}$$

Η συναρτήση *Green* του συστήματος εξαρτάται και από την σχετική διεύθυνση των μαγνητίσεων της αριστερής επαφής και του φράγματος. Επομένως για την παράλληλη και την αντιπαράλληλη διαμόρφωση $cf = par, apar = \uparrow, \downarrow$ των δύο μαγνητίσεων ορίζουμε τις αντίστοιχες συναρτήσεις *Green*

$$G_{cf}(E) = [E - H_{cf} - \Sigma_{L_{cf}} - \Sigma_{R_{cf}}]^{-1}$$

$$G_{cf}(E) = [E - H_{cf} - \Sigma_{L_{cf}} - \Sigma_{R_{cf}}]^{-1}$$

Οι όροι H_{par}, H_{apar} αναφέρονται στα στοιχεία της χαμιλτονιανής H ανάλογα με την διαμόρφωση των μαγνητίσεων ενώ οι όροι $\Sigma_{L_{par}}, \Sigma_{L_{apar}}$ είναι οι πίνακες αυτόενέργειας με μη μηδενικά

στοιχεία ανάλογα την μαγνήτιση.(εξίσωση 6.20) Με παρόμοιο τρόπο ορίζονται και οι πίνακες διεύρυνσης Γ ανάλογα την διαμόρφωση

$$\Gamma_{L_{cf},R_{cf}}(E) = \iota(\Sigma_{L_{cf},R_{cf}}(E) - \Sigma_{L_{cf},R_{cf}}^\dagger(E)) \quad (6.25)$$

και της φασματικής συνάρτησης

$$A = \iota(G_{cf} - G_{cf}^\dagger) = G_{cf}\Gamma_{L_{cf},R_{cf}}G_{cf}^\dagger \quad (6.26)$$

Απο την συνάρτηση Green και του πίνακες Γ είναι δυνατός ο υπολογισμός του συντελεστή μετάδοσης T

$$T_{cf}(E) = trace[\Gamma_{L_{cf}}G_{cf}\Gamma_{R_{cf}}G'_{cf}] = trace[\Gamma_{R_{cf}}G_{cf}\Gamma_{L_{cf}}G'_{cf}] \quad (6.27)$$

και τελικά ο υπολογισμός του ρεύματος που διαρρέει την δίοδο

$$I_{cf} = (q/h) \int_{-\infty}^{\infty} dE T_{cf}(E)(f_1(E) - f_2(E)) \quad (6.28)$$

Η αγωγιμότητα της συσκευής ορίζεται $G = \Sigma I_{cf}/V$ και της μαγνητοαντίστασης

$$TMR = \frac{G_{\uparrow\uparrow} - G_{\downarrow\downarrow}}{G_{\uparrow\uparrow}} \quad (6.29)$$

που είναι το κυρίαρχο στοιχείο στην παρούσα μελέτη [23, 24].

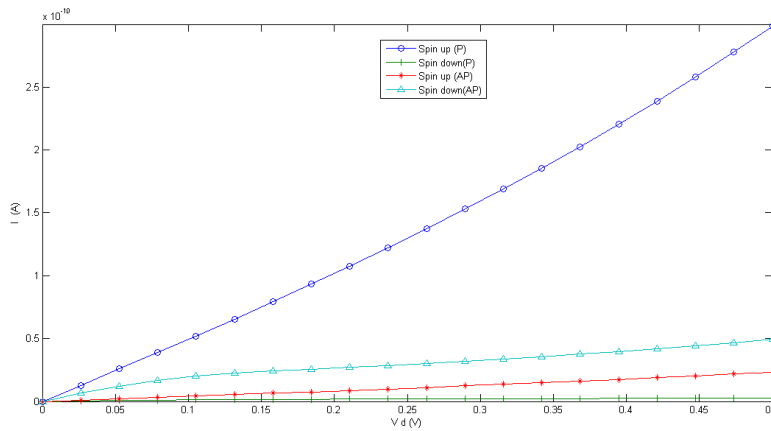
6.3 Μελέτη διόδου $FM/FI/NM$

Στην αμέσως προηγούμενη ενότητα παρουσιάσαμε την εφαρμογή της μεθόδου των πεπερασμένων διαφόρων για μία δίοδο του τύπου $FM/FMS/NM$. Σε αυτήν την ενότητα θα παρουσιάσουμε τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την μέθοδο αυτήν και την μοντελοποίηση με την μορφή του κώδικα του παραρτήματος στο υπολογιστικό πακέτο *MATLAB*. Η μελέτη αφορά μια ενεργή μάζα με τις ακόλουθες παραμέτρους:

- Ενέργεια *Fermi* του συστήματος σε ισορροπία, παράμετρος E_f
- Διαχωρισμός λόγω φαινομένου *SpinFiltering* τόσο στο τμήμα του σιδηρομαγνήτη FM , παράμετρος h_0 όσο και στο τμήμα του φράγματος FI , παράμετρος D
- Ύψος του φράγματος, παράμετρος Ub

6.3.1 Μελέτη ρευμάτων σπιν

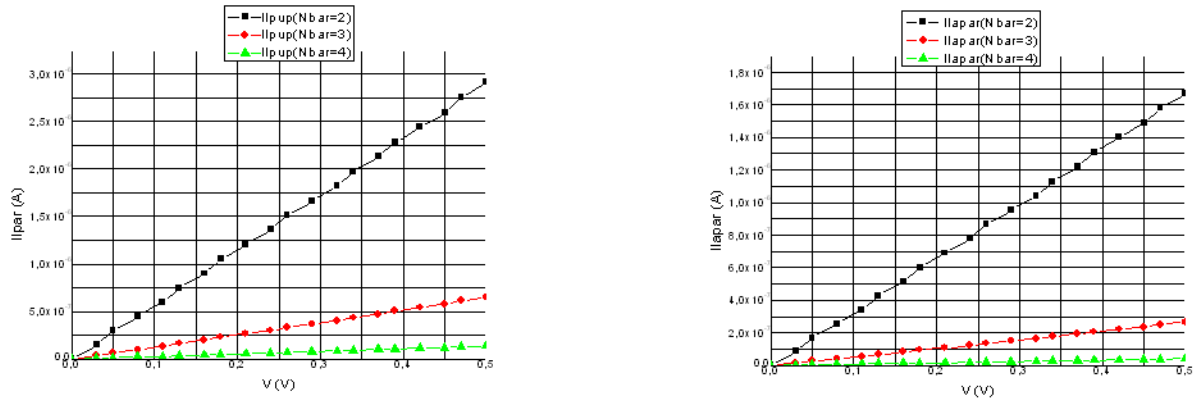
Αρχικά μελετήσαμε την συμπεριφορά των ρευμάτων σπιν σε σχέση με την εξωτερικά εφαρμοζόμενη τάση για μια τιμή της παραμέτρου h_0 [28]. Η ύπαρξη τεσσάρων μη μηδενικών ρευμάτων σπιν, δύο ανα διαμόρφωση των μαγνητίσεων μεταξύ του σιδηρομαγνήτη και του φράγματος πρόβλεπεται και απο παλαιότερα θεωρητικά μοντέλα όσο και από τον ορισμό του συντελεστή μετάδοσης και του ρεύματος που διαρρέει την συσκευή και είναι ένδειξη ότι η διόδος ανήκει στην κατηγορία των εν μέρει μαγνητικών διόδων και παρουσιάζει τόσο το φαινόμενο *spin filtering* όσο και την εμφάνιση μαγνητοαντίστασης υπο τάση [29, 12].



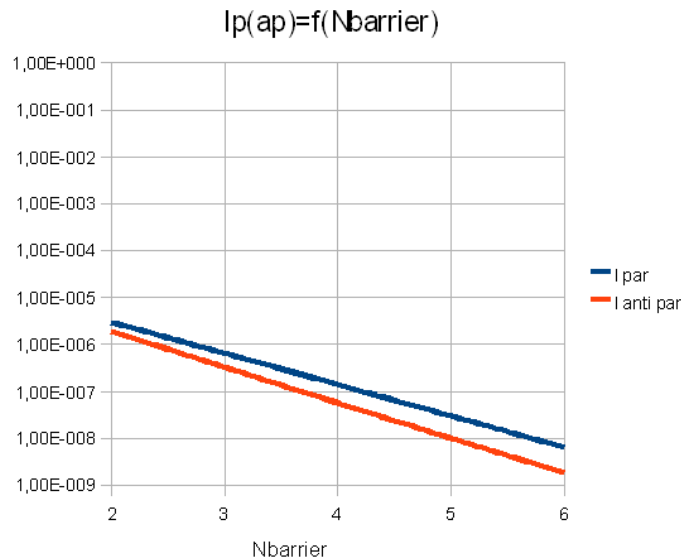
Σχήμα 6.6: Εξάρτηση των ρευμάτων σπιν από την εφαρμοζόμενη τάση υπολογισμένο για συγκεκριμένο πάχος φράγματος

Στην παράλληλη διαμόρφωση των μαγνητίσεων το ρεύμα λόγω φαινομένου σήραγγας που οφείλεται στα ηλεκτρόνια με σπιν πάνω είναι πολύ μεγαλύτερο από αυτό που οφείλεται στα ηλεκτρόνια με σπιν κάτω, ενώ στην αντιπαράλληλη διαμόρφωση η διαφορά μεταξύ των δύο καναλιών ρεύματος-σπιν αυξάνεται με αργούς ρυθμούς. Το γεγονός αυτό οφείλεται στο ότι το ρεύμα ανά διεύθυνση σπιν εξαρτάται από την πυκνότητα των καταστάσεων στον σιδηρομαγνήτη και το ύψος του φράγματος. Στην παράλληλη διαμόρφωση τα ηλεκτρόνια πλειοψηφίας (σπιν πάνω) διέρχονται από μικρότερου ύψους φράγμα σε σχέση με τα ηλεκτρόνια μειοψηφίας, ενώ το αντίθετο συμβαίνει στην περίπτωση της αντιπαράλληλης διαμόρφωσης των μαγνητίσεων. Επιπλέον παρατηρείται αύξηση της κλίσης των καμπυλών με την αύξηση της τάσης, εξαιτίας της μείωσης του ενεργού πλάτους του φράγματος. Για μικρές τιμές της τάσης το πλάτος του φράγματος δεν επηρεάζεται ενώ για μεγαλύτερες τιμές τάσης όπως φαίνεται και στο ενεργειακό διάγραμμα το πλάτος του φράγματος είναι μικρότερο με συνέπεια της αλλαγής στην κλίση της καμπύλης.

Στην συνέχεια για κάθε διαμόρφωση των μαγνητίσεων μελετήσαμε την εξάρτηση του ολικού ρεύματος σπιν ανά διαμόρφωση από το πάχος του φράγματος και παρατηρήσαμε την εκθετική πτώση των δύο ρευμάτων με την αύξηση του πλάτους του φράγματος, παρατήρηση απόλυτα σύμφωνη με την θεωρία [30, 10], αφού όσο μεγαλύτερο είναι το πλάτος του φράγματος τόσο μικρότερη είναι η πιθανότητα διέλευσης των ηλεκτρονίων λόγω του φαινομένου σήραγγας μέσα απο αυτό, επομένως και το ρεύμα που διαρρέει την συσκευή.



Σχήμα 6.7: Εξάρτηση των ρευμάτων σπιν απο το πλάτος του φράγματος



Σχήμα 6.8: Εξάρτηση των ρευμάτων σπιν απο το πλάτος του φράγματος σε λογαριθμική κλίμακα

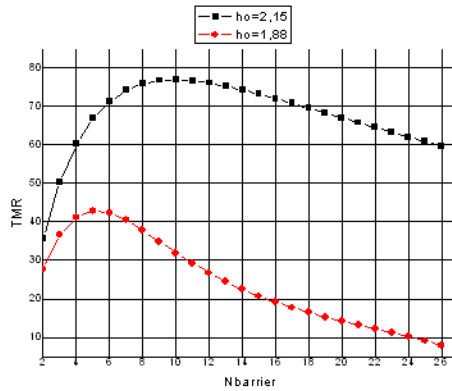
6.3.2 Μελέτη της μαγνητοαντίστασης TMR

Η μαγνητοαντίσταση όπως ορίστηκε στην ενότητα 6.2 είναι η αλλαγή στην αγωγιμότητα μιας συσκευής σε σχέση με τις αγωγιμότητες των δύο διαμορφώσεων των μαγνητικών προσανατολισμών μεταξύ της επαφής του σιδηρομαγνήτη και του σιδηρομαγνητικού φράγματος

$$TMR = \frac{G \uparrow\uparrow - G \uparrow\downarrow}{G \uparrow\uparrow}$$

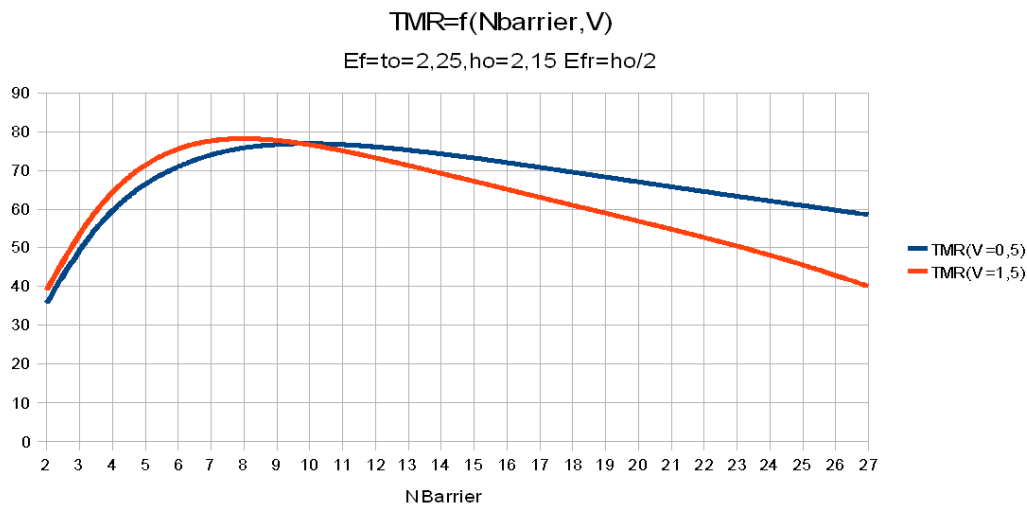
όπου $G \uparrow\uparrow$ είναι η αγωγιμότητα της παράλληλης διαμόρφωσης και $G \uparrow\downarrow$ η αντίστοιχη αγωγιμότητα της αντιπαράλληλης διαμόρφωσης. Αρχικά όπως και στην περίπτωση των ρευμάτων σπιν, μελετούμε την εξάρτηση της μαγνητοαντίστασης απο το πλάτος του φράγματός για τις δύο τιμές της παραμέτρου $h\phi$ [31, 26].

Από το διάγραμμα 6.9 και το ενεργειακό διάγραμμα της συσκευής παρατηρούμε πως για θερμοκρασία μικρότερη της θερμοκρασίας μετάβασης *Curie*, $T < T_c$, και για κάθετη πρόσπτωση των ηλεκτρονίων στο φράγμα, τα ηλεκτρόνια με ενέργειες πλησίον της ενέργειας *Fermi* είναι οι φορείς του μεγαλύτερου μέρους του ρεύματος. Επιπλέον σε αυτήν την θερμοκρασία τόσο η ενέργεια *Fermi* όσο και το ύψος του φράγματος είναι σταθερά. Επομένως με την αύξηση του πλάτους του φράγματος η αγωγιμότητα της παράλληλης διαμόρφωσης αυξάνει πιο γρήγορα σε σύγκριση με αυτήν της αντιπαράλληλης με αποτέλεσμα της αύξηση της παρατηρούμενης μαγνητοαντίστασης. Αυτό συμβαίνει μέχρι το πλάτος του φράγματος να πλησιάσει το μισό του μήκους κύματος των ηλεκτρονίων μέσα στο φράγμα, σημείο όπου και παρατηρείται η μέγιστη τιμή της μαγνητοαντίστασης. Μεγαλώνοντας περισσότερο το πλάτος του φράγματος η μαγνητοαντίσταση μειώνεται με σχεδόν εκθετικό ρυθμό.



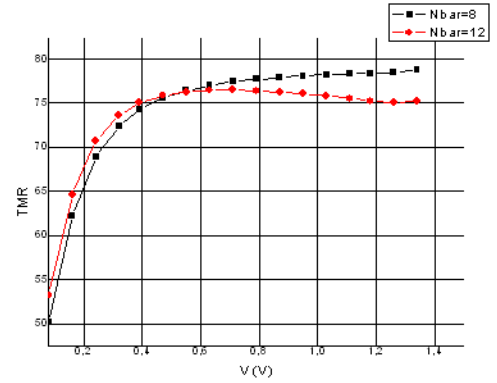
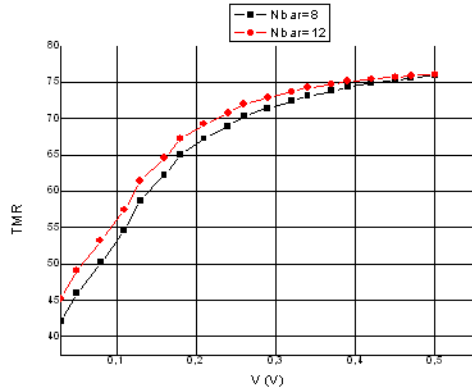
Σχήμα 6.9: Εξάρτηση της μαγνητοαντίστασης απο το πλάτος του φράγματος

Το επόμενο διάγραμμα αφορά την εξάρτηση της TMR απο την εφαρμοζόμενη τάση στα άκρα της συσκευής. Παρατηρούμε πως και για τις δύο τιμές τάσης η συμπεριφορά της μαγνητοαντίστασης είναι παρόμοια, εμφανίζονται και για τις δύο τιμές της τάσης οι κορυφές, οι οποίες δεν βρίσκονται στο ίδιο σημείο για το ίδιο πλάτος φράγματος. Το γεγονός αυτό ερμηνεύεται από την εξάρτηση της ενέργειας των ηλεκτρονίων από την εφαρμοζόμενη τάση (Σχέσεις 6.14-16).



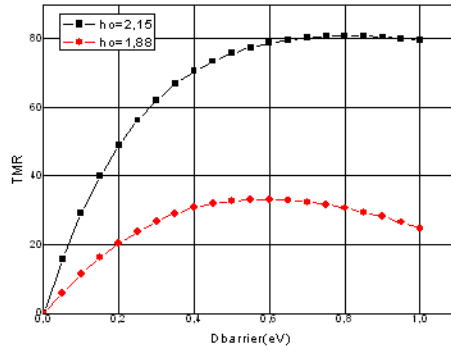
Σχήμα 6.10: Εξάρτηση της μαγνητοαντίστασης από το πλάτος του φράγματος και την τιμή της εξωτερικά εφαρμοζόμενης τάσης

Ολοκληρώνοντας το στάδιο αυτό της μελέτης παραθέτουμε την εξάρτηση της μαγνητοαντίστασης από την τάση για συγκεκριμένες τιμές πλάτους του φράγματος. Όπως φαίνεται από το διάγραμμα 6.11 η μαγνητοαντίσταση αυξάνει με την αύξηση της τάσης για μικρές τιμές ενώ μειώνεται για μεγαλύτερες τιμές της τάσης. Η μείωση αυτή δεν είναι παρόμοια για τα διαφορετικά πλάτη του φράγματος ως συνέπεια της ελάττωσης του ενεργού πλάτους του φραγμάτος. Σε χαμηλές τιμές τάσης η πιθανότητα διέλευσης ενός καναλιού σπιν είναι μεγαλύτερη από αυτήν του άλλου καναλιού ενώ για υψηλότερες τιμές το ενεργό πλάτος μειώνεται με συνέπεια την ταυτόχρονη αύξηση της πιθανότητας διέλευσης και για τα δύο κανάλια ρεύματος σπιν με αποτέλεσμα την μείωση της μαγνητοαντίστασης.



Σχήμα 6.11: Εξάρτηση της μαγνητοαντίστασης από την τιμή της εξωτερικά εφαρμοζόμενης τάσης για συγκεκριμένα πλάτη φράγματος

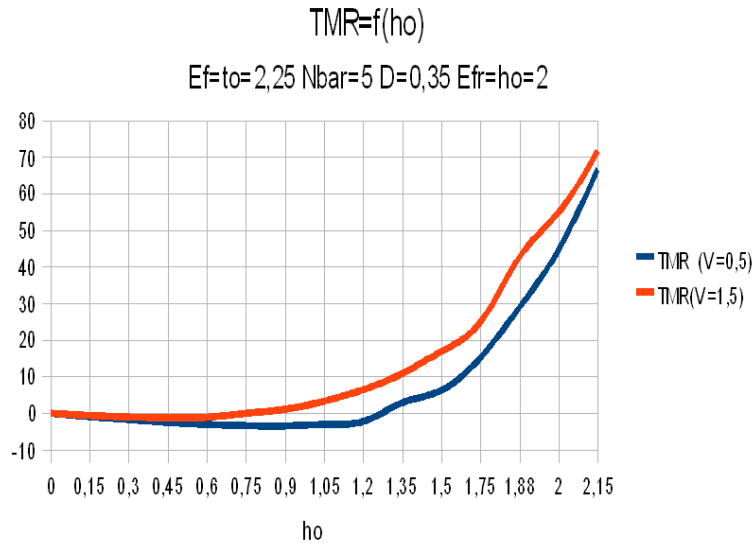
Οι παράμετροι με το μεγαλύτερο ενδιαφέρον σχετικά με την εξάρτηση της παρατηρούμενης μαγνητοαντίστασης από αυτούς είναι ο διαχωρισμός λόγω του φαινομένου *spin filtering* τόσο στην σιδηρομαγνητική επάφη όσο και στο φράγμα και το ύψος του φράγματος. Στο ακόλουθο διάγραμμα 6.12 παρουσιάζεται η εξάρτηση της παρατηρούμενης *TMR* από το *spin splitting, D* του φράγματος για σταθερή τιμή του *spin splitting, ho* του σιδηρομαγνήτη.



Σχήμα 6.12: Εξάρτηση της μαγνητοαντίστασης από την τιμή του $spin\ splitting D$ του φράγματος

Η ενίσχυση της μαγνητοαντίστασης με την αύξηση της τιμής του $spin\ splitting$ του φράγματος είναι σημαντική. Η αιτία της ενίσχυσης αυτής είναι ότι με την αυξανόμενη τιμή του $spin\ splitting$ η πιθανότητα διέλευσης των ηλεκτρονίων του καναλιού μειοψηφίας γίνεται πάρα πολύ μικρή με συνέπεια την διέλευση μόνο των φορέων ρεύματος του καναλιού πλειοψηφίας και την ύπαρξη στην συσκευή υψηλά πολωμένων ρεύματων. Το γεγονός αυτό έχει προβλεφθεί και από άλλα θεωρητικά μοντέλα [26, 29] αλλά και από πειραματικά δεδομένα [6, 8, 32].

Το επόμενο βήμα της μελέτης αφορά την εξάρτηση της μαγνητοαντίστασης από τον διαχωρισμό λόγω του φαινομένου *spin filtering* στην σιδηρομαγνητική επαφή. Στο ακόλουθο διάγραμμα 6.13 καταγράφεται η μεταβολή της *TMR* με την μεταβολή της παραμέτρου *ho* για σταθερή τιμή του *spin splitting* στο φράγμα για δύο τιμές εξωτερικής τάσης.

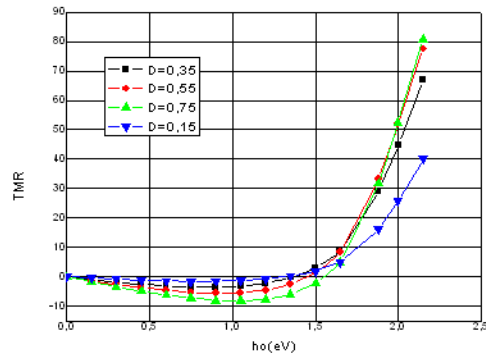


Σχήμα 6.13: Εξάρτηση της μαγνητοαντίστασης από την τιμή του *spin splitting* *ho* στην σιδηρομαγνητική επαφή

Παρατηρούμε πως υπάρχουν δύο διακριτές περιοχές του διαγράμματος, η πρώτη περιοχή αφορά τιμές της παραμέτρου $ho \leq 1.2$ και παρουσιάζει αρνητικές-μηδενικές τιμές της μαγνητοαντίστασης *TMR* ενώ η δεύτερη αφορά τιμές της παραμέτρου $ho \geq 1.2$ για τις οποίες η μαγνητοαντίσταση όχι μόνο δεν είναι μηδενική αλλά αυξάνει με υψηλό ρυθμό. Αρνητικές τιμές για την μαγνητοαντίσταση έχουν παρατηρηθεί πειραματικά [33] αλλά δεν έχουν, παρά τις προσπάθειες [29, 27] ερμηνευθεί πλήρως θεωρητικά. Σε μια προσπάθεια κατανόησης της παρατηρούμενης αυτής συμπεριφοράς μελετήσαμε ταυτόχρονα την εξάρτηση και από τις δύο παραμέτρους που καθορίζουν την ένταση του φαινομένου *spin filtering* τόσο στον σιδηρομαγνήτη, παράμετρος *ho* όσο και στο σιδηρομαγνητικό υλικό *D*.

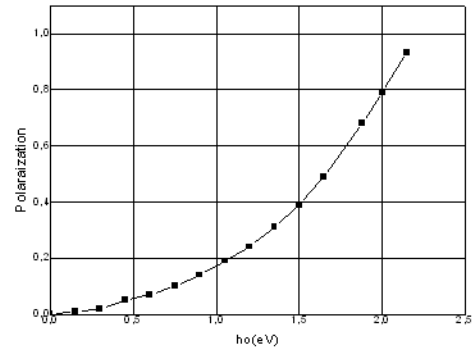
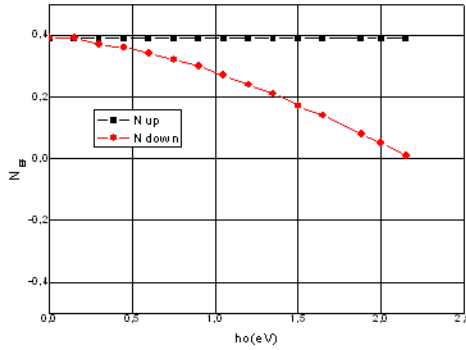
Από το διάγραμμα 6.14 παρατηρούμε πως με την αύξηση των τιμών της παραμέτρου *D* παρατηρείται αύξηση των απολύτων τιμών της μαγνητοαντίστασης χωρίς όμως να αλλάζει η συμπεριφορά στις δύο περιοχές ούτε να παρατηρείται κάποια αλλαγή προσήμου. Η παράμετρος *D* είναι σημαντικός παράγοντας για την παρατηρούμενη αύξηση στις τιμές της μαγνητοαντίστασης αλλά όχι ο καθοριστικός. Στο κεφάλαιο 2 είδαμε πως για τις ημιμαγνητικές διόδους όπως η συγκεκριμένη που μελετάμε η μαγνητοαντίσταση καθορίζεται από το γινόμενο δύο παραγόντων (εξίσωση 2.5)[9], της πόλωσης P_{SF} λόγω του μαγνητικού φράγματος και της πόλωσης P_{FM} του σιδηρομαγνήτη. Η πόλωση του φράγματος καθορίζεται από την πυκνότητα των καταστάσεων των σπιν των ηλεκτρονίων κοντά στην ενέργεια Fermi (εξίσωση 2.1) ενώ η πόλωση στο σιδηρομαγνήτη εξαρτάται από τον συντελεστή διέλευσης T για τιμές της ενέργειας κοντά στην ενέργεια Fermi

$$P_{FM} = \frac{T \uparrow - T \downarrow}{T \uparrow + T \downarrow} \quad (6.30)$$



Σχήμα 6.14: Εξάρτηση της μαγνητοαντίστασης απο τις τιμές των παραμέτρων $h\omega$, D

Από την σχέση 6.26 γνωρίζουμε την φασματική συνάρτηση για κάθε τμήμα της διόδου επομένως χρησιμοποιώντας τις σχέσεις 5.31,5.37 μπορέσαμε να υπολογίσουμε τις πυκνότητες των καταστάσεων για κάθε είδος ηλεκτρονίου και επομένως την πόλωση P_{SF} . Στα ακόλουθα διαγράμματα καταγράφεται η εξάρτηση των πυκνοτήτων καταστάσεων και της εμφανιζόμενης πόλωσης απο την παράμετρο $h\omega$.



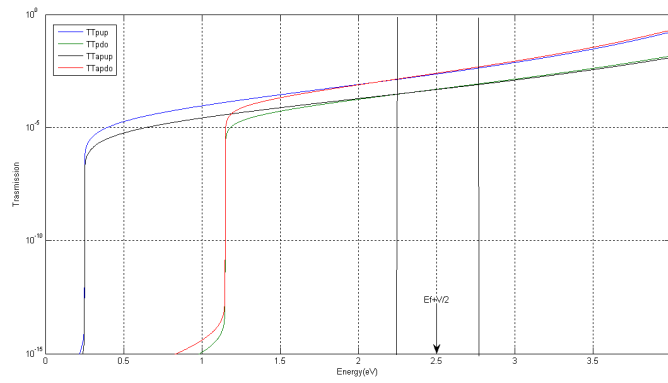
Σχήμα 6.15: a) Εξάρτηση της πυκνότητας των καταστάσεων από την παράμετρο ho b) Εξάρτηση της πόλωσης P_{SF} από την παράμετρο ho

Απο τα παραπάνω διαγράμματα παρατηρούμε πως με την αύξηση της παραμέτρου ho μειώνεται η πυκνότητα των καταστάσεων των ηλεκτρονίων με σπιν \downarrow γεγονός που οδηγεί στην αύξηση της τιμής της πόλωσης, ερμηνεύοντας την ενίσχυση της παρατηρούμενης μη αρνητικής μαγνητοαντίστασης αλλά όχι και τις αρνητικές τιμές αυτής.

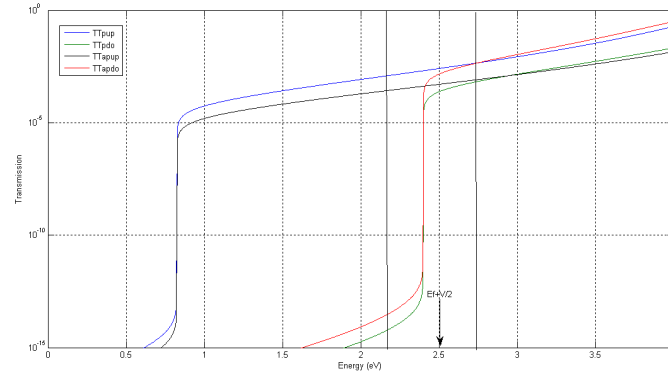
Ο λόγος για τον οποίο η μαγνητοαντίσταση εμφανίζει αρνητικές τιμές στην περιοχή τιμών της παραμέτρου ho είναι η εξάρτηση του συντελεστή μετάδοσης από την τιμή της παραμέτρου ho όπως φαίνεται στα ακόλουθα διαγράμματα 6.16,6.17 για τιμές της ενέργειας κοντά στην ενέργεια Fermi

Αναπτύσσοντας την σχέση 6.30 για τον αριθμητή έχουμε

$$T \uparrow - T \downarrow = TT_{pup} + TT_{pdo} - TT_{apup} - TT_{apdo}$$



Σχήμα 6.16: Εξάρτηση του συντελεστή μετάδοσης από την ενέργεια για $h\omega = 0.9$



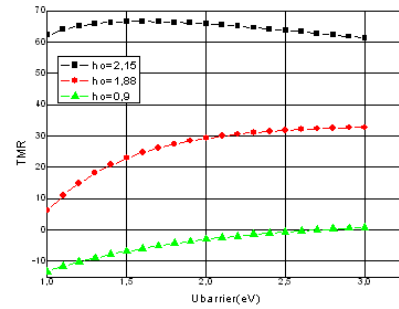
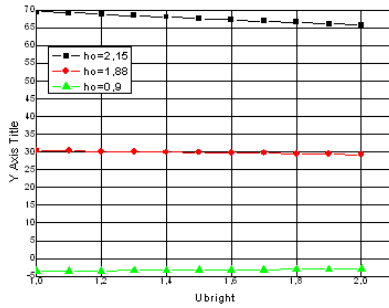
Σχήμα 6.17: Εξάρτηση του συντελεστή μετάδοσης από την ενέργεια $h\omega = 2.15$

Για μικρές τιμές της παραμέτρου, σε ένα στενό εύρος τιμών της ενέργειας γύρω από την ενέργεια Fermi παρατηρούμε πως οι συντελεστές μετάδοσης ανά σπιν και ανά διαμόρφωση έχουν ποιοτικά ίδιες τιμές, και μάλιστα με τις τιμές των συντελεστών μετάδοσης της αντιπαράλληλης διαμόρφωσης να είναι κατά τι μεγαλύτεροι από αυτούς της παράλληλης διαμόρφωσης με συνέπεια ο αριθμητής να είναι αρνητικός οδηγώντας σε αρνητικό πρόσημο τον όρο της πόλωσης P_{FM}

ερμηνεύοντας με αυτόν τον τρόπο της συμπεριφορά της μαγνητοαντίστασης για μικρές τιμές του $h\omega$. Για μεγαλύτερες τιμές της παραμέτρου αυτής η ουρά των συντελεστών μετάδοσης που αντιστοιχεί σε πολύ χαμηλές έως αμελητέες τιμές αυτών μετατοπίζεται δεξιότερα κατά $h\omega$ βρίσκεται μετά από μια τιμή κατωφλίου μέσα στο παράθυρο ενδιαφέροντος των τιμών της ενέργειας. Σε αυτήν την περίπτωση οι τιμές των αντιπαράλληλων συντελεστών είναι χαμηλότερες από αυτές των παράλληλων συντελεστών και σε συνδυασμό με την ενίσχυση που προέρχεται από το μαγνητικό φράγμα εξηγούν την απότομη άνοδο της μαγνητοαντίστασης για μεγάλες τιμές της παραμέτρου $h\omega$.

Τελευταία παράμετρος της οποίας την επίδραση πάνω στην παρατηρούμενη μαγνητοαντίσταση μελετήσαμε, είναι το ύψος του φράγματος και πιο συγκεκριμένα ο παράγοντας ασυμμετρίας $\Delta\phi = \phi_L - \phi_R$. Από το ακόλουθο διάγραμμα 6.18 παρατηρούμε πως ο παράγοντας ασυμμετρίας επηρεάζει πολύ ασθενώς την τιμή της μαγνητοαντίστασης επομένως το φράγμα μπορεί να θεωρηθεί με καλή ακρίβεια συμμετρικό. Για ένα συμμετρικό φράγμα η εξάρτηση της μαγνητοαντίστασης από το ύψος του καταγράφεται επίσης στο ακόλουθο διάγραμμα

Η μαγνητοαντίσταση για μεγάλες τιμές της παραμέτρου $h\omega$ αυξάνει με την αύξηση του ύψους του φραγμάτος μέχρι ενά σημείο και στην συνέχεια σταθεροποιείται με πτωτικές τάσεις. Για μικρές τιμές της παραμέτρου $h\omega$ η εξάρτηση από το ύψος είναι σημαντική γιατί με την άνοδο της τιμή του φράγματος η μαγνητοαντίσταση τείνει να αλλάξει πρόσημο. Οι δύο αυτές μεταβολές, η ελαφρά πτωτική τάση και η τάση για αλλαγή προσήμου για μεγάλα ύψη φράγματος ερμηνεύονται από την ελλάτωση της ισχύος του φαινομένου spin filtering. Όσο μεγαλύτερο είναι το ύψος του φράγματος τόσο λιγότερο συνεισφέρει στην μαγνητοαντίσταση το διαχωρισμός λόγω spin filtering στο φράγμα με συνέπεια για μεγάλες τιμές του $h\omega$ η μαγνητοαντίσταση να παραμένει σχεδόν σταθερή με ελαφρώς πτωτικές τάσεις αφού πρακτικά δεν ενισχύεται λόγω του φράγματος ενώ για μικρές τιμές της παραμέτρου $h\omega$ και για μικρές τάσης να μην υπάρχει ουσιαστικά ένα χαμηλότερο φράγμα επιτρέποντας την εύκολη διέλευση των ηλεκτρονίων για μία από τις δύο διαμορφώσεις και με αυτόν τον τρόπο την κίνηση της μαγνητοαντίστασης προς θετικές τιμές.



Σχήμα 6.18: Εξάρτηση της μαγνητοαντίστασης από το ύψος του φράγματος για συμμετρικό και μη συμμετρικό φράγμα

6.4 Συμπεράσματα

Σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας ήταν η μελέτη μιας ημιμαγνητικής διόδου $FM/FI/NM$ με την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Η μέθοδος αυτή όπως αναλυτικά περιγράφηκε στο Κεφάλαιο 4 αποτελεί μια προσεγγιστική μέθοδο για την επίλυση φυσικών προβλημάτων. Οι διόδους του συγκεκριμένου τύπου μπορούν να επιλυθούν με αναλυτικές μεθόδους και έχουν μελετηθεί διεξοδικά τόσο πειραματικά όσο και θεωρητικά. Οι θεωρητικές προσεγγίσεις αναφέρονται κατά κύριο λόγο στο μοντέλο των ελεύθερων ηλεκτρονίων. Με την χρήση της μεθόδου των πεπερασμένων διαφορών, η οποία βασίζεται στην επιλογή ενός διακριτού πλέγματος σημείων, το θεωρητικό μοντέλο το οποίο περιγράφει την συμπεριφορά των ηλεκτρονίων μέσα στην συσκευή

δεν είναι πλέον το μοντέλο των ελεύθερων ηλεκτρονίων αλλά προσεγγίζει το μοντέλο ισχυρού δεσμού. Η προσπάθεια ενσωμάτωσης των δύο καταστάσεων του σπιν του ηλεκτρονίου κατά την μοντελοποίηση, υπό μορφή κώδικα, της συσκευής, μαζί με την προσέγγιση ισχυρού δεσμού, είναι δύο σημεία το οποία δεν έχουν μελετηθεί εκτενώς από την επιστημονική κοινότητα. Η ύπαρξη αποτελεσμάτων αυτής της μελέτης και η μερική συμφωνία τους με προηγούμενους πειραματικούς και θεωρητικούς υπολογισμούς αποτελούν βάσιμες ενδείξεις ότι η μεθοδολογία που ακολουθήθηκε στην παρούσα μελέτη μπορεί να ερμηνεύσει σε ικανοποιητικό βαθμό την συμπεριφορά συσκευών του συγκεκριμένου τύπου και μπορεί να επεκταθεί με τις κατάλληλες προσαρμογές και σε άλλων τύπων συσκευές.

Από την μελέτη της διόδου προέκυψαν ορισμένα χρήσιμα συμπεράσματα. Το πρώτο από αυτά ήταν η ύπαρξη στην συσκευή τεσσάρων διαφορετικής έντασης ρευμάτων, δύο ανα διεύθυνση σπιν και δύο ανα διαμόρφωση των μαγνητίσεων. Το γεγονός αυτό πιστοποιεί ότι το υπολογιστικό μοντέλο που χρησιμοποιήθηκε στην μελέτη προσομοιάζει την λειτουργία μιας ημιμαγνητικής διόδου. Η εξάρτηση των συνολικών ρευμάτων ανά διαμόρφωση από το πάχος του μαγνητικού φράγματος συμφωνεί απόλυτα με τις θεωρητικές προβλέψεις, η εκθετική μείωση που παρατηρήθηκε οφείλεται στην μείωση της πιθανότητας διέλευσης λόγω του φαινομένου σήραγγας από το φράγμα εξαιτίας της αύξησης του πάχους του φράγματος.

Η παρατηρούμενη μαγνητοαντίσταση είναι άμεση συνέπεια της ύπαρξης των τεσσάρων ρευμάτων στην συσκευή. Η συμπεριφορά της τιμής της μαγνητοαντίσταση συναρτῆσει του πλάτους του φράγματος καθορίζεται από τις αγωγιμότητες των δύο διαμορφώσεων. Με την αύξηση του πλάτους του φράγματος η αγωγιμότητα της παράλληλης διαμόρφωσης αυξάνει με ταχύτερους ρυθμούς συγκρινόμενη με αυτήν της αντιπαράλληλης διαμόρφωσης μέχρι το σημείο που το πλάτος του φράγματος γίνεται ίσο με το μισό μήκος κύματος των ηλεκτρονίων. Με την περαιτέρω αύξηση του πλάτους του φράγματος αντιστρέφονται οι ρυθμοί αύξησης των αγωγιμοτήτων με συνέπεια την πτώση της τιμής της μαγνητοαντίστασης. Η εξάρτηση από την τάση σχετίζεται με το ενεργό πλάτος του φράγματος, όσο μεγαλύτερη είναι η τιμή της τάσης τόσο μικρότερο είναι το ενεργό πλάτος με συνέπεια τα κανάλια των ρευμάτων σπιν να έχουν παραπλήσιες πιθανότητες διέλευσης με αποτέλεσμα την μείωση της μαγνητοαντίστασης.

Οι παράμετροι με το μεγαλύτερο ενδιαφέρον είναι οι ενέργειες ανταλλαγής λόγω του διαχωρισμού των σπιν (*Spin – Splitting, h_0, D*) των δυο μαγνητικών υλικών που εμφανίζουν το φαινόμενο *spin filtering*. Από τα αποτελέσματα της μελέτης προκύπτει πως η παραμέτρος διαχωρισμού των σπιν *D* του μαγνητικού φράγματος είναι υπεύνηνη για την ενίσχυση της παρατηρούμενης μαγνητοαντίστασης αφού με την αύξηση της αυξάνεται και η παρατηρούμενη τιμή, δεν είναι όμως επαρκής για την πλήρη εμνησία της συμπεριφοράς της μαγνητοαντίστασης. Η παράμετρος *h₀* του διαχωρισμού των σπιν στο σιδηρομαγνητικό υλικό εμφανίζεται να έχει σημαντικότερο ρόλο στην παρατηρούμενη *TMR* καθώς σχετίζεται άμεσα με την τιμή του συντελεστή μετάδοσης ανα σπιν και ανα διαμόρφωση. Η εξάρτηση του συντελεστή μετάδοσης από την τιμή της παραμέτρου *h₀* φαίνεται να είναι ο κύριος λόγος της συμπεριφοράς της παρατηρούμενης μαγνητοαντίστασης αφού ερμηνεύει τόσο την εμφάνιση μηδενικών-αρνητικών τιμών όσο και την απότομη αύξηση της τιμής της *TMR* μετά από ενά όριο. Τέλος η τιμή του ύψους του φράγματος έχει μικρή συμβολή στην απόλυτη τιμή της παρατηρουμένης μαγνητοαντίστασης εμφανίζει όμως την δυνατότητα αλλαγής του προσήμου αυτής για μεγάλες τιμές ύψους φράγματος

Τα αποτελέσματα και τα συμπεράσματα της παρούσας μελέτης, μαζί με την διερεύνηση άλλων παραμέτρων όπως η εξάρτηση της μαγνητοαντίστασης από την ευκινησία των ηλεκτρονίων και την ενέργεια Fermi του συστήματος, παράμετροι που στην παρούσα μελέτη θεωρήθηκαν σταθερές, είναι δυνατόν να προτείνουν τα θεωρητικά χαρακτηριστικά των υλικών που χρησιμοποιούνται σε αυτόν τον τύπου διόδων και να οδηγήσουν στην επιλογή και κατασκευή καλύτερων υλικών με στόχο την βελτιστοποίηση της απόδοσης των εφαρμογών που χρησιμοποιούνται οι συγκεκριμένοι δίοδοι.

Παράρτημα Α'

Κώδικας *MATLAB*

```
clc; clear all;

general constants se olo ton kwdika
q = 1.6e-19; h = 6.62e-34; zplus=i*1e-10;
hbar=1.06e-34;m=0.25*9.1e-31;Go=(q*q)/(2*pi*hbar);kT=.025;

finite difference constants
a=3e-10;
to=2.25;

tight binding constants
mu0 = 2.25; Ebo=0.;      fermi energy
ho=0.9;      ferromagnet splitting
h1=0.;
Ebup=Ebo;      spin up FM1
Ebdo=Ebo+ho;   spin down FM1
Efr=ho/2;
Efrup=Efr-h1;
Efrdo=Efr+h1;
D=0.35;      spin filtering
Ubl =1.94;    barrier height
Ubr=1.7;
Nsites=2;     size of lead in device

Nbarrier=5;   size of barrier
Nd = 2*Nsites + Nbarrier;    total size of device

Vext=0.5;
```

hamiltonian of the device se parallel configuration

```
A = (diag((Ebo+2*to)*ones(1,2*Nd),0)-diag(to*ones(1,2*Nd-2),2)-diag(to*ones(1,2*Nd-2),-2));
```

hamiltonian elements of left lead

```
for k=1:2:2*Nsites-1; A(k,k)=Ebup+2*to; end;
```

```
for k=2:2:2*Nsites; A(k,k)=Ebdo+2*to; end;
```

hamiltonian elements of spin filter barrier

```
for k=2*Nsites+1:2:2*Nsites+2*Nbarrier-1; A(k,k)=mu0+Ubl+2*to-D; end;
```

```
for k=2*Nsites+2:2:2*Nsites+2*Nbarrier; A(k,k)=mu0+Ubl+2*to+D; end;
```

hamiltonian elements of right lead

```
for k=2*Nsites+2*Nbarrier+1:2:2*Nd-1; A(k,k)=Efrup+2*to; end;
```

```
for k=2*Nsites+2*Nbarrier+2:2:2*Nd; A(k,k)=Efrdo+2*to; end;
```

```
H2=A;
```

hamiltonian of the device se antiparallel configuration

```
C = diag((Ebo+2*to)*ones(1,2*Nd),0)-diag(to*ones(1,2*Nd-2),2)-diag(to*ones(1,2*Nd-2),-2);
```

```
for k=1:2:2*Nsites-1; C(k,k)=Ebup+2*to; end;
```

```
for k=2:2:2*Nsites; C(k,k)=Ebdo+2*to; end;
```

```
for k=2*Nsites+1:2:2*Nsites+2*Nbarrier-1; C(k,k)=mu0+Ubl+2*to+D; end;
```

```
for k=2*Nsites+2:2:2*Nsites+2*Nbarrier; C(k,k)=mu0+Ubl+2*to-D; end;
```

```
for k=2*Nsites+2*Nbarrier+1:2:2*Nd-1; C(k,k)=Efrup+2*to; end;
```

```
for k=2*Nsites+2*Nbarrier+2:2:2*Nd; C(k,k)=Efrdo+2*to; end;
```

```
Hap1=C;
```

```
NV = 20.;
```

```
VV = linspace(0,Vext,NV);
```

```
for kV =1:NV; o dextis tou bias
```

```
mu1 =mu0+VV(kV)/2; mu2 =mu0-VV(kV)/2; mu1,mu2 einai ta fermi level aristera deksia
```

energy grid

```
EE = min(Ebup,Ebdo):0.1*kT:max(Ebdo,mu0+to);
```

```
NE = length(EE);
```

$$dE = 0.1 * kT;$$

fermi distribution left right

$$f1 = 1./ (1 + \exp((EE - \mu1) ./ kT)); f2 = 1./ (1 + \exp((EE - \mu2) ./ kT)); f12 = f1 - f2;$$

potential me klisi

```

Uslope=linspace(VV(kV)/2,(-(Ubl-Ubr)-VV(kV)/2),Nbarrier);
Uslope2=[Uslope;Uslope];
Uslope3=reshape(Uslope2,1,2*Nbarrier);
U2 = [(VV(kV)/2)*ones(1,2*Nsites) Uslope3 (-VV(kV)/2)*ones(1,2*Nsites)];    kalutera
na eixe mu1 2 anti gia 00
UL2 = diag(U2) ;
Hd2 = H2+UL2;
hamiltonians me efarmogi tis eksoterikis tasis
Hp = Hp+UL;
Hap = Hap1+UL2;

```

```

for kE = 1:NE;
E = EE(kE);
k(E)

```

sf matrixes

```

ck1pup=1-((EE(kE)+zplus-Ebup-UL2(1,1))/(2*to));
ka1pup = acos(ck1pup);
ck1pdo=1-((EE(kE)+zplus-Ebdo-UL2(2,2))/(2*to));
ka1pdo=acos(ck1pdo);

ck2pup=1-((EE(kE)+zplus-Efrup-UL2(2*Nd-1,2*Nd-1))/(2*to));
ka2pup = acos(ck2pup);
ck2pdo=1-((EE(kE)+zplus-Efrdo-UL2(2*Nd,2*Nd))/(2*to));
ka2pdo=acos(ck2pdo);

ck1apup=1-((EE(kE)+zplus-Ebup-UL2(1,1))/(2*to));
ka1apup = acos(ck1apup);
ck1apdo=1-((EE(kE)+zplus-Ebdo-UL2(2,2))/(2*to));
ka1apdo=acos(ck1apdo);
ck2apup=1-((EE(kE)+zplus-Efrup-UL2(2*Nd-1,2*Nd-1))/(2*to));
ka2apup = acos(ck2apup);

```


ck2apdo=1-(((EE(kE)+zplus-Efrdo-UL2(2*Nd,2*Nd))/(2*to));
ka2apdo=acos(ck2apdo);

self energies

Sigma1p = zeros(length(H2)); Sigma2p = zeros(length(H2));
Sigma1ap = zeros(length(Hap1)); Sigma2ap = zeros(length(Hap1));

self energy is equal to the interface GF 1D semiinfinite lead

Sigma1p(1,1) = -to*exp(i*ka1pup);
Sigma1p(2,2) = -to*exp(i*ka1pdo);

Sigma2p(2*Nd-1,2*Nd-1) = -to*exp(i*ka2pup);
Sigma2p(2*Nd,2*Nd) = -to*exp(i*ka2pdo);

Sigma1ap(1,1) = -to*exp(i*ka1apup);
Sigma1ap(2,2) = -to*exp(i*ka1apdo);
Sigma2ap(2*Nd-1,2*Nd-1) = -to*exp(i*ka2apup);
Sigma2ap(2*Nd,2*Nd) = -to*exp(i*ka2apdo);

broadening matrices

Gamma1p = i*(Sigma1p-Sigma1p'); Gamma2p = i*(Sigma2p-Sigma2p');
Gamma1ap = i*(Sigma1ap-Sigma1ap'); Gamma2ap = i*(Sigma2ap-Sigma2ap');

retarded GF of the coupled device

Gp = inv(((EE(kE)+zplus)*eye(2*Nd))-Hd2-Sigma1p-Sigma2p);
Gap = inv(((EE(kE)+zplus)*eye(2*Nd))-Hap-Sigma1ap-Sigma2ap);

density of states

Dp=diag(i*(Gp-Gp'))/(2*pi);
Dpup(kE)=Dp(1);
Dpdo(kE)=Dp(2);

Dap=diag(i*(Gap-Gap'))/(2*pi);
Dapup(kE)=Dap(1);
Dapdo(kE)=Dap(2);

Number of electrons

Npup=trace(Dpup.*f1);

$N_{pdo} = dE * \text{sum}(D_{pdo} .* f1);$

$N_{apup} = dE * \text{sum}(D_{pup} .* f1);$

$N_{apdo} = dE * \text{sum}(D_{pdo} .* f1);$

transmission coefficient

$\text{tracematrixp} = \text{Gamma1p} * G_p * \text{Gamma2p} * G_p';$

$TT_{pup}(kE) = 0.0;$

for $k=1:2:2*N_d-1$; $TT_{pup}(kE) = TT_{pup}(kE) + \text{real}(\text{tracematrixp}(k,k));$ end;

$TT_{pdo}(kE) = 0.0;$

for $l=2:2:2*N_d$; $TT_{pdo}(kE) = TT_{pdo}(kE) + \text{real}(\text{tracematrixp}(l,l));$ end;

$\text{tracematrixap} = \text{Gamma1ap} * G_{ap} * \text{Gamma2ap} * G_{ap}';$

$TT_{apup}(kE) = 0.0;$

for $s=1:2:2*N_d-1$; $TT_{apup}(kE) = TT_{apup}(kE) + \text{real}(\text{tracematrixap}(s,s));$ end;

$TT_{apdo}(kE) = 0.0;$

for $t=2:2:2*N_d$; $TT_{apdo}(kE) = TT_{apdo}(kE) + \text{real}(\text{tracematrixap}(t,t));$ end;

end;

current integrated by trapezoid rule

$II_{pup}(kV) = G_o * dE * \text{sum}(TT_{pup} .* f12);$

$II_{pdo}(kV) = G_o * dE * \text{sum}(TT_{pdo} .* f12);$

$II_{apup}(kV) = G_o * dE * \text{sum}(TT_{apup} .* f12);$

$II_{apdo}(kV) = G_o * dE * \text{sum}(TT_{apdo} .* f12);$

Number of electrons

$N_{pup} = dE * \text{sum}(D_{pup} .* f1);$

$N_{pdo} = dE * \text{sum}(D_{pdo} .* f1);$

$N_{apup} = dE * \text{sum}(D_{pup} .* f1);$

$N_{apdo} = dE * \text{sum}(D_{pdo} .* f1);$

```
end;
```

```
G11=Iipup+Iipdo;  
G21=Iiapup+Iiapdo;  
TMR=(G11-G21)./G11;
```

```
hold on
```

```
figure
```

```
subplot(2,1,1)
```

```
plot(VV, Iipup, 'o', VV, Iipdo, '+', VV, Iiapup, '*', VV, Iiapdo, ' ', 'linewidth', 1); xlabel('Vd(V)'); ylabel('Id(a)
```

```
subplot(2,1,2)
```

```
plot(VV, TMR*100, 'r')
```

```
figure
```

```
plot(EE, TTapup, EE, TTapdo, EE, TTapup, 'k', EE, TTapdo, 'r')
```

Βιβλιογραφία

- [1] Neil W. Ashcroft and D. Mermin, *Solid State Physics*. New York: Hort,Rinehart and Winston, 1976.
- [2] Charles Kittel, *Introduction to Solid State Physics, 7th edition*. New York: John Wiley and Sons, Inc., 1996.
- [3] I.Giaver, “Electron tunneling between two superconductors,” *Physics Review Letters*, vol. 5, 1960.
- [4] J.Bardeen, L.N.Cooper, and J.R.Schrieffer, “Theory of superconductivity,” *Physics Review*, vol. 108, 1957.
- [5] R.Meservey and P.Tedrow, “Magnetic field splitting of the quasiparticle states in superconducting aluminum films,” *Physics Review Letters*, vol. 25, 1970.
- [6] J.S.Moodera, J. Nassar, and G.Mathon, “Spin-tunnelling in ferromagnetic junctions,” *Annu. Rev. Mater. Sci.*, vol. 29, 1999.
- [7] J.F.Gregg et al., “Spin electronics,a review,” *Journal of Appl. Phys.*, vol. 35, 2002.
- [8] J.S.Moodera and R.Meservey, *Spin polarized tunneling Magnetoelectronics*. New York: Elsevier,Academic Press), 2004.
- [9] R.Meservey and P.Tedrow, “Spin polarized electron tunneling,” *Physics Rep.*, vol. 238, 1994.
- [10] J.G.Simmons, “Generalized formula for the electric tunnel effect between similar electrodes separated by a thin insulating film,” *Physical Review Letters*, vol. 10, 1963.
- [11] W.F.Brinkman, R.C.Dynes, and J.M.Rowell, “Tunneling conductance of asymmetrical barriers,” *J. Appl. Phys.*, vol. 41, 1970.
- [12] J.S.Moodera, T.Santos, and T.Nagahama, “The phenomena of spin-filter tunneling,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 19, 2007.
- [13] M.Horne, P.Strange, W.M.Temmerman, Z.Szotek, A.Svane, and H.Winter, “The electronic structure of europium chalcogenides and pnictides,” *Journal of Physics: Condens.Matter*, vol. 16, 2004.
- [14] D.Ghosh et al., “Electronic structure and magneto-optical properties of magnetic semiconductors: europium monochalcogenides,” *Physic.Rev.B*, vol. 70, 2004.

- [15] L.Esaki et al., “Magnetointernal field emission in junctions of magnetic insulators,” *Physic.Rev.Lett.*, vol. 19, 1967.
- [16] M.Julliere, “Tunneling between ferromagnetic films,” *Physic.Lett.A*, vol. 54, 1975.
- [17] D.C.Worledge and T.Geballe, “Magnetoresistive double spin filter junction,” *Journal of applied Physics*, vol. 88, 2000.
- [18] A.Slobodskyy et al., “Voltage-controlled spin selection in a magnetic resonant tunnelling diode,” *Physic.Rev.Lett.*, vol. 90, 2003.
- [19] D.Awschalom, M.Flatti, and N.Samarth *Scientific American*, vol. June, 2002.
- [20] S.Datta and B.Das *Applied Physics,Letters*, vol. 55, 1990.
- [21] S.Sugahara and M.Tanaka, “A novel spin transistor based on spin filtering in ferromagnetic barrier,a spin filter transistor,” *Journal of Applied Physics*, vol. 105, 2004.
- [22] D.DiVicenzo, “Quabtum computing nad single qubit measurements using the spin filter effects,” *Journal of Applied Physics*, vol. 85, 1999.
- [23] Supriyo Datta, *Quantum Trasport:Atom to Transistor*. The Edinburgh Building, Cambridge, UK: JCambridge University Press, 2005.
- [24] Supriyo Datta, *Transport in Mesoscopic Systems*. The Edinburgh Building, Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1995.
- [25] J.C.Slonczewski, “Conductance and exchange coupling of two ferromagnets separated by a tunneling barrier,” *Physical Review B*, vol. 39, 1989.
- [26] A.Saffarzadeh, “Spin-filter magnetoresistance in magnetic barrier junctions,” *Journal of magnetism and magnetic materials*, vol. 269, 2004.
- [27] C.-R. Chang and S.-P. Chen, “Spin polarized tunneling through a ferromagnetic barrier,” *Chinese Journal of Physics*, vol. 36, 1998.
- [28] D. Datta, B. Behin-Aein, S. Salahuddin, and S. Datta, “Voltage asymmetry of spin-transfer torques,” *eprint arXiv:0910.2489*, 2009.
- [29] J.Dafei et al., “Spin-filter tunneling magnetoresistance in a magnetic tunnel,” *Physic.Rev.B*, vol. 73, 2006.
- [30] C.B.Duke, *Tunneling Phenomena in Solids*. New York: E.Burtein,S.Lundquist,Plenum, 1969.
- [31] M. Stearns, “Simple explanation of tunneling spin-polarazitation of fe ,co ,ni and its alloys,” *Magnetism and magnetic materials*, vol. 39, 1977.
- [32] X.Hao, J.S.Moodera, and R.Meservey, “Spin-filter effect of ferromagnetic europium sulfide tunnel barriers,” *Phys.Rev.B*, vol. 42, 1990.
- [33] J.Nowak and J.Rauluszkiewicz *Journal of Magn. Matt.*, vol. 109, 1992.

- [34] M.Abramowitz and I.A.Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*. New York: Dover, 1965.
- [35] K.H.Gundlach *Solid State Electron*, vol. 9, 1966.
- [36] Y.Li, B.Z.Li, and W. Z. ans D.S.Dai *Physical Review,B*, vol. 57, 1998.
- [37] Mazin I., “How to define and calculate the degree of spin polarization in ferromagnets,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 83, 1999.
- [38] M.Chapline et al., “Spin filter based tunnel junctions,” *Journal of Applied Physics*, vol. 100, 2006.
- [39] P. LeClair, J.S.Moodera, and R.Meservey, “Ferromagnetic- ferromagnetic tunneling and the spin filter effect,” *Journal of Applied Physics*, vol. 76, 1994.
- [40] M.Kok, J.N.Beukers, and A. Brinkman, “Spin-polarized tunneling through a ferromagnetic insulator,” *Journal of Applied Physics*, vol. 105, 2009.