Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. В. Ведяев, М. Е. Журавлев, Одноэлектронная функция Грина многослойных магнитных систем, *ТМФ*, 2006, том 148, номер 2, 179–188

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf2079>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.82.47.9

26 апреля 2023 г., 18:28:52

© 2006 г.

А. В. Ведяев*, М. Е. Журавлев†

ОДНОЭЛЕКТРОННАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА МНОГОСЛОЙНЫХ МАГНИТНЫХ СИСТЕМ

Предложен метод построения симметричной одноэлектронной функции Грина магнитной многослойной системы с произвольным направлением однородной намагниченности магнитных слоев. Показано, что построенная функция Грина допускает наложение определенных граничных условий.

Ключевые слова: функция Грина, магнитная многослойная система, неколлинеарная магнитная структура, обыкновенные дифференциальные уравнения.

1. ВВЕДЕНИЕ

Среди различных подходов к исследованию транспортных свойств магнитных многослойных наносистем те, что основаны на построении функции Грина, позволяют наиболее полно исследовать электронную проводимость магнитных слоистых наноструктур. Функции Грина используются как при численном счете, основанном на первых принципах [1], так и при модельных исследованиях, позволяющих качественно описать новые явления в магнитных наноструктурах [2]–[4].

В общем случае неколлинеарной намагниченности функция Грина представляет собой матрицу размером 2×2 [5]. При построении функции Грина многослойной системы приходится решать ряд задач, обусловленных геометрией исследуемой системы: сшивка на границах между слоями, наложение граничных условий. Все это делает процедуру построения функции Грина многослойной магнитной системы с неколлинеарной намагниченностью нетривиальной задачей даже в простейшей модели, когда в каждом слое электроны описываются как свободные электроны в постоянном потенциале с обменным расщеплением спиновых подзон. Еще одной проблемой, возникающей при построении функции Грина, является вопрос о ее симметрии относительно перестановки аргументов.

Построению функции Грина многослойной системы уделялось немало внимания [6]–[10]. В частности, в работах [6], [7] предложен способ сшивки на границах между

*Московский государственный университет, Москва, Россия. E-mail: vedy@magn.ru

†Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова, Москва, Россия.
E-mail: juen@mail.ru

слоями, основанный на так называемых поверхностных функциях Грина. Этот способ, хотя и является универсальным, становится очень громоздким при возрастании числа слоев и в случае матричных функций Грина.

В упомянутом случае свободных электронов одноэлектронная (матричная) функция Грина удовлетворяет системе линейных дифференциальных уравнений:

$$\hat{H}(\vec{r})G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (1)$$

где $\hat{H}(\vec{r})$ – гамильтониан системы, $\vec{r}, \vec{r}'$ – координаты, δ – дельта-функция. Система уравнений (1) может быть сведена к системе обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) с помощью преобразования Фурье по переменным x, y ($\vec{r} \equiv \{x, y, z\}$, ось z выбрана перпендикулярно границам слоев) – с помощью перехода к так называемому “ $k - z$ ” представлению [3] – в том случае, если многослойная система однородна вдоль слоев. Уравнение (1) в этом случае принимает вид

$$\hat{H}(k_x, k_y, z)G(k_x, k_y, z, z') = \delta(z - z'). \quad (2)$$

Как известно из теории ОДУ, в простейшем случае одного линейного дифференциального уравнения типа (2), а именно

$$\frac{\partial^2 G(z, z')}{\partial z^2} + V(z)G(z, z') = \delta(z - z'), \quad (3)$$

функция Грина строится с помощью двух линейно независимых решений $f_1(z), f_2(z)$ однородного уравнения (3) как

$$G(z, z') = \begin{cases} \frac{f_1(z)f_2(z')}{W_{12}}, & z > z', \\ \frac{f_2(z)f_1(z')}{W_{12}}, & z < z', \end{cases} \quad (4)$$

где вронскиан

$$W_{12} = \frac{\partial f_1(z)}{\partial z} f_2(z) - \frac{\partial f_2(z)}{\partial z} f_1(z).$$

По построению функция Грина (4) симметрична относительно перестановки аргументов:

$$G(z, z') = G(z', z). \quad (5)$$

Как отмечено в работе [7], в отличие от простейшей задачи (3) в общем случае функция Грина многослойной системы может быть и не симметричной. Этот вопрос требует отдельного исследования.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В работе [10] мы построили симметричную функцию Грина магнитной многослойной системы, предполагая, что намагниченности параллельны плоскости слоев. В данной работе мы рассматриваем более общую задачу: обобщаем метод построения симметричной функции Грина магнитной многослойной системы с неколлинеарной

намагниченностью [10] на случай, когда однородные намагниченности магнитных слоев могут быть направлены произвольно. Кроме того, мы показываем, что на искомую функцию Грина можно наложить определенные граничные условия. Наш метод является обобщением формул (4) для матричных функций Грина и кусочно-постоянного потенциала.

Уравнение для матричной функции Грина имеет вид [5]

$$\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + Q^2 - k^2 - \frac{2M}{\hbar^2} E_n^{(0)} \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{2M}{\hbar^2} E_n^{(1)} \begin{pmatrix} \cos \theta_n & e^{-i\phi_n} \sin \theta_n \\ e^{i\phi_n} \sin \theta_n & -\cos \theta_n \end{pmatrix} \right] \times \\ \times \begin{pmatrix} G_{nm}^{\uparrow\uparrow}(z, z'; \theta, \phi) & G_{nm}^{\uparrow\downarrow}(z, z'; \theta, \phi) \\ G_{nm}^{\downarrow\uparrow}(z, z'; \theta, \phi) & G_{nm}^{\downarrow\downarrow}(z, z'; \theta, \phi) \end{pmatrix} = \frac{2Ma_0}{\hbar^2} \begin{pmatrix} \delta(z - z') & 0 \\ 0 & \delta(z - z') \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где вектор Q выражается через энергию как $Q = \sqrt{(2M/\hbar^2)E}$, $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ – модуль момента электрона в плоскости (x, y) , M – масса электрона, n, m – номера слоев, которым принадлежат координаты z, z' , $E_n^{(0)}$ и $E_n^{(1)}$ определяют положение дна зоны и обменное расщепление в n -м слое. Углы $\theta^{(n)}$, $\phi^{(n)}$ определяют ориентацию намагниченности в n -м слое [11]. В немагнитном (проводящем или диэлектрическом) слое $\theta \equiv 0$, $\phi \equiv 0$. Матричная функция Грина зависит от совокупности углов $\theta \equiv \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N\}$, $\phi \equiv \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\}$.

3. НАЛОЖЕНИЕ УСЛОВИЙ СИММЕТРИИ НА ФУНКЦИЮ ГРИНА

В работе [10] авторами было показано, что в случае, когда намагниченности лежат в плоскостях слоев, $\phi_1 = \phi_2 = \dots = \phi_N = 0$, можно построить симметричную функцию Грина: $G_{nm}^{\nu\mu}(z, z'; \theta) = G_{mn}^{\mu\nu}(z', z; \theta)$. В рассматриваемом случае ненулевых углов ϕ данное соотношение не имеет места. Мы покажем, как можно построить функцию Грина, подчиняющуюся условию симметрии:

$$G_{nm}^{\nu\mu}(z, z'; \theta, \phi) = G_{mn}^{\mu\nu}(z', z; \theta, -\phi). \quad (7)$$

Система дифференциальных уравнений второго порядка может быть записана как система уравнений первого порядка:

$$\left(\hat{I} \frac{\partial}{\partial z} + \hat{L}_n \right) G_{nm}^{\uparrow}(z, z'; \theta, \phi) \equiv \left(\hat{I} \frac{\partial}{\partial z} + \hat{L}_n \right) \begin{pmatrix} G_{nm}^{\uparrow\uparrow}(z, z'; \theta, \phi) \\ \partial G_{nm}^{\uparrow\uparrow}(z, z'; \theta, \phi) / \partial z \\ G_{nm}^{\uparrow\downarrow}(z, z'; \theta, \phi) \\ \partial G_{nm}^{\uparrow\downarrow}(z, z'; \theta, \phi) / \partial z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \delta(z - z') \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

$$\left(\hat{I} \frac{\partial}{\partial z} + \hat{L}_n \right) G_{nm}^{\downarrow}(z, z'; \theta, \phi) \equiv \left(\hat{I} \frac{\partial}{\partial z} + \hat{L}_n \right) \begin{pmatrix} G_{nm}^{\downarrow\uparrow}(z, z'; \theta, \phi) \\ \partial G_{nm}^{\downarrow\uparrow}(z, z'; \theta, \phi) / \partial z \\ G_{nm}^{\downarrow\downarrow}(z, z'; \theta, \phi) \\ \partial G_{nm}^{\downarrow\downarrow}(z, z'; \theta, \phi) / \partial z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \delta(z - z') \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где $\hat{I}$ – единичная матрица размера 4×4 , оператор $\hat{L}^{(n)}$ имеет вид

$$\hat{L}_n = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ Q^2 - k^2 - \frac{2ME_n^{(0)}}{\hbar^2} - \frac{2ME_n^{(1)} \cos \theta_n}{\hbar^2} & 0 & -\frac{2ME_n^{(1)} e^{-i\phi_n} \sin \theta_n}{\hbar^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -\frac{2ME_n^{(1)} e^{i\phi_n} \sin \theta_n}{\hbar^2} & 0 & Q^2 - k^2 - \frac{2ME_n^{(0)}}{\hbar^2} + \frac{2ME_n^{(1)} \cos \theta_n}{\hbar^2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Построение функции Грина начнем с выбора четырех линейно независимых решений однородного уравнения в n -м слое:

$$\left(\hat{I} \frac{\partial}{\partial z} + \hat{L}_n \right) \begin{pmatrix} \Phi_n^{(1)}(z) \\ \Phi_n^{(2)}(z) \\ \Phi_n^{(3)}(z) \\ \Phi_n^{(4)}(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Четыре линейно независимых решения образуют фундаментальное решение [9]. Мы выбираем фундаментальную матрицу следующим образом:

$$\Phi_n(z, \phi_n) = \begin{pmatrix} \frac{e^{ik_n^{(1)} z} \cos \frac{\theta_n}{2}}{\sqrt{2k_n^{(1)}}} & \frac{e^{-ik_n^{(1)} z} \cos \frac{\theta_n}{2}}{\sqrt{2k_n^{(1)}}} & & & & & \\ \frac{ik_n^{(1)} e^{ik_n^{(1)} z} \cos \frac{\theta_n}{2}}{\sqrt{2k_n^{(1)}}} & \frac{-ik_n^{(1)} e^{-ik_n^{(1)} z} \cos \frac{\theta_n}{2}}{\sqrt{2k_n^{(1)}}} & & & & & \\ \frac{e^{ik_n^{(1)} z} e^{i\phi_n} \sin \frac{\theta_n}{2}}{\sqrt{2k_n^{(1)}}} & \frac{e^{-ik_n^{(1)} z} e^{i\phi_n} \sin \frac{\theta_n}{2}}{\sqrt{2k_n^{(1)}}} & & & & & \\ \frac{ik_n^{(1)} e^{ik_n^{(1)} z} \sin \frac{\theta_n}{2} e^{i\phi_n}}{\sqrt{2k_n^{(1)}}} & \frac{-ik_n^{(1)} e^{-ik_n^{(1)} z} \sin \frac{\theta_n}{2} e^{i\phi_n}}{\sqrt{2k_n^{(1)}}} & & & & & \\ & & \frac{-e^{ik_n^{(2)} z} e^{-i\phi_n} \sin \frac{\theta_n}{2}}{\sqrt{2k_n^{(2)}}} & \frac{-e^{-ik_n^{(2)} z} e^{-i\phi_n} \sin \frac{\theta_n}{2}}{\sqrt{2k_n^{(2)}}} & & & \\ & & \frac{-ik_n^{(2)} e^{ik_n^{(2)} z} e^{-i\phi_n} \sin \frac{\theta_n}{2}}{\sqrt{2k_n^{(2)}}} & \frac{-ik_n^{(2)} e^{-ik_n^{(2)} z} e^{-i\phi_n} \sin \frac{\theta_n}{2}}{\sqrt{2k_n^{(2)}}} & & & \\ & & \frac{e^{ik_n^{(2)} z} \cos \frac{\theta_n}{2}}{\sqrt{2k_n^{(2)}}} & \frac{e^{-ik_n^{(2)} z} \cos \frac{\theta_n}{2}}{\sqrt{2k_n^{(2)}}} & & & \\ & & \frac{ik_n^{(2)} e^{ik_n^{(2)} z} \cos \frac{\theta_n}{2}}{\sqrt{2k_n^{(2)}}} & \frac{-ik_n^{(2)} e^{-ik_n^{(2)} z} \cos \frac{\theta_n}{2}}{\sqrt{2k_n^{(2)}}} & & & \end{pmatrix} \quad (12)$$

где

$$k_n^{(1,2)} = \sqrt{Q^2 - k^2 - \frac{2M}{\hbar^2} (E_n^{(0)} \pm E_n^{(1)})}.$$

Каждый столбец матрицы (12) – решение однородного уравнения (11). Эти базисные функции определены для каждого слоя независимо и не являются непрерывными на границах между слоями. Мы также введем (4×4) -матрицу $F_n(z)$, каждый столбец которой является непрерывным решением однородного уравнения (11). Матрицы $\Phi_n(z, \phi_n)$ и $F_n(z)$ связаны линейным преобразованием

$$F_n(z) = \Phi_n(z, \phi_n) A_n, \quad (13)$$

матрицы коэффициентов A_n в разных слоях связаны друг с другом с помощью трансфер-матрицы:

$$A_n = T^{nm}(\phi)A_m, \quad (14)$$

которая определяется обычным образом:

$$\begin{aligned} T^{nm}(\phi) = & (\Phi_n(c_{n-1}, \phi_n))^{-1} \Phi_{n-1}(c_{n-1}, \phi_{n-1}) \times \\ & \times (\Phi_{n-1}(c_{n-2}, \phi_{n-1}))^{-1} \Phi_{n-2}(c_{n-2}, \phi_{n-2}) \times \dots \\ & \dots \times (\Phi_{m+1}(c_m, \phi_{m+1}))^{-1} \Phi_m(c_m, \phi_m), \end{aligned} \quad (15)$$

где c_n — z -координата плоскости, перпендикулярной оси z , являющейся границей между n -м и $(n+1)$ -м слоями. Из всех параметров гамильтониана, от которых зависит трансфер-матрица, мы явно указываем только ϕ . Элементы $F_n(z)$ (как и элементы матриц A_n) в отличие от $\Phi_n(z, \phi_n)$ зависят от всей совокупности углов θ , ϕ , а не только от θ_n , ϕ_n .

Определим вспомогательные матрицы

$$\begin{aligned} E(\phi) = & \begin{pmatrix} e^{-i\phi} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\phi} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\phi} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\phi} \end{pmatrix}, \\ L_1 = & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (16)$$

Легко проверяются следующие соотношения:

$$\Phi_n(z, \phi_n) = E\left(\frac{\phi_n}{2}\right) \Phi_n(z, \phi_n = 0) E\left(-\frac{\phi_n}{2}\right), \quad (17)$$

$$L_1^{-1} = L_1^T = -L_1, \quad L_2^{-1} = -L_2^T = L_2, \quad (18)$$

$$(\Phi_n(z, \phi_n = 0))^{-1} = (L_1 \Phi_n(z, \phi_n = 0) L_2)^T = (L_1^T \Phi_n(z, \phi_n = 0) L_2^T)^T. \quad (19)$$

Как и в работах [9], [10], будем искать функцию Грина в виде

$$G_{nm}^\uparrow(z, z') \equiv \begin{pmatrix} G_{nm}^{\uparrow\uparrow}(z, z'; \theta, \phi) \\ \partial G_{nm}^{\uparrow\uparrow}(z, z'; \theta, \phi) / \partial z \\ G_{nm}^{\downarrow\uparrow}(z, z'; \theta, \phi) \\ \partial G_{nm}^{\downarrow\uparrow}(z, z'; \theta, \phi) / \partial z \end{pmatrix} = \begin{cases} F_n^\uparrow(z) [[F_m^{\uparrow-1}(z')]_{[2]} + H_m^\uparrow(z')], & z > z', \\ F_n^\uparrow(z) H_m^\uparrow(z'), & z < z', \end{cases} \quad (20)$$

$$G_{nm}^\downarrow(z, z') \equiv \begin{pmatrix} G_{nm}^{\downarrow\downarrow}(z, z'; \theta, \phi) \\ \partial G_{nm}^{\downarrow\downarrow}(z, z'; \theta, \phi) / \partial z \\ G_{nm}^{\uparrow\downarrow}(z, z'; \theta, \phi) \\ \partial G_{nm}^{\uparrow\downarrow}(z, z'; \theta, \phi) / \partial z \end{pmatrix} = \begin{cases} F_n^\downarrow(z) [[F_m^{\downarrow-1}(z')]_{[4]} + H_m^\downarrow(z')], & z > z', \\ F_n^\downarrow(z) [H_m^\downarrow(z')], & z < z'. \end{cases} \quad (21)$$

В формулах (20), (21) и ниже символ $[F]_{[k]}$ используется для обозначения k -го столбца матрицы F . Фундаментальные матрицы $F_n^{\uparrow, \downarrow}(z)$ в этих формулах предполагаются непрерывными функциями z и связаны с фундаментальной матрицей (12) линейным соотношением

$$F_n^{\nu}(z) = \Phi_n(z, \phi_n) A_n^{\nu}, \quad \nu = \uparrow, \downarrow.$$

Выражения (20), (21) удовлетворяют уравнениям (8), (9), соответственно. Предположим, что векторы (столбцы) $H_m^{\uparrow, \downarrow}(z)$ могут быть выражены через обратные матрицы $F_m^{\uparrow, \downarrow}$ как

$$A_m^{\uparrow} H_m^{\uparrow}(z) = X_m [F_m^{\uparrow}]^{-1}_{[2]}, \quad A_m^{\downarrow} H_m^{\downarrow}(z) = Y_m [F_m^{\downarrow}]^{-1}_{[4]}. \quad (22)$$

Перепишем условия (7) как условия для матриц X_m, Y_m . Эти матрицы зависят от параметров гамильтониана (6), ниже мы будем явно указывать их зависимость от ϕ . Прежде всего заметим, что

$$\begin{aligned} G_{nm}^{\uparrow\uparrow}(z > z'; \theta, \phi) = \\ = \sum (\Phi_n(z, \theta_n, \phi_n))_{1j} (A_n^{\uparrow} A_m^{\uparrow -1} (\hat{I} + X_m(\phi)))_{jk} [\Phi_m^{-1}(z', \theta_m, \phi_m)]_{[2]}. \end{aligned} \quad (23)$$

Теперь с помощью выражения (19) для $\Phi_m^{-1}(z, \phi_m = 0)$ получим

$$\begin{aligned} G_{nm}^{\uparrow\uparrow}(z > z'; \theta, \phi) = \sum_{j,k=1}^4 E_{11} \left(\frac{\phi_n}{2} \right) (\Phi_n(z, \phi_n = 0))_{1j} E_{jj} \left(-\frac{\phi_n}{2} \right) \times \\ \times \left[T^{nm}(\phi) (\hat{I} + X_m(\phi)) E \left(\frac{\phi_m}{2} \right) L_2 \right]_{jk} (\Phi_m(z', \phi_m = 0))_{1k} E_{22} \left(-\frac{\phi_m}{2} \right). \end{aligned} \quad (24)$$

Это выражение должно быть равно выражению, получаемому из второй строки формулы (20):

$$\begin{aligned} G_{nm}^{\uparrow\uparrow}(z' < z; \theta, -\phi) = \sum_{j,k=1}^4 E_{11} \left(\frac{\phi_n}{2} \right) (\Phi_m(z, \phi_m = 0))_{1k} E_{kk} \left(-\frac{\phi_m}{2} \right) \times \\ \times \left[T^{mn}(-\phi) X_n(-\phi) E \left(\frac{\phi_n}{2} \right) L_2 \right]_{kj} (\Phi_n(z', \phi_n = 0))_{1j} E_{22} \left(-\frac{\phi_n}{2} \right). \end{aligned} \quad (25)$$

Сравнивая (24) и (25), получим, что необходимо выполнение следующего равенства:

$$\begin{aligned} E_{jj} \left(-\frac{\phi_n}{2} \right) \left[T^{nm}(\phi) (\hat{I} + X_m(\phi)) E \left(\frac{\phi_m}{2} \right) L_2 \right]_{jk} = \\ = E_{kk} \left(\frac{\phi_m}{2} \right) \left[T^{mn}(-\phi) X_n(-\phi) E \left(-\frac{\phi_n}{2} \right) L_2 \right]_{kj}. \end{aligned} \quad (26)$$

Условие симметрии $G_{nm}^{\downarrow\downarrow}(z > z'; \theta, \phi) = G_{nm}^{\downarrow\downarrow}(z' < z; \theta, -\phi)$ эквивалентно равенству

$$\begin{aligned} E_{jj} \left(-\frac{\phi_n}{2} \right) \left[T^{nm}(\phi) (\hat{I} + Y_m(\phi)) E \left(\frac{\phi_m}{2} \right) L_2 \right]_{jk} = \\ = E_{kk} \left(\frac{\phi_m}{2} \right) \left[T^{mn}(-\phi) Y_n(-\phi) E \left(-\frac{\phi_n}{2} \right) L_2 \right]_{kj}. \end{aligned} \quad (27)$$

Условие симметрии для недиагональных элементов дает равенство

$$\begin{aligned} E_{jj} \left(-\frac{\phi_n}{2} \right) \left[T^{nm}(\phi) (\hat{I} + X_m(\phi)) E \left(\frac{\phi_m}{2} \right) L_2 \right]_{jk} = \\ = E_{kk} \left(\frac{\phi_m}{2} \right) \left[T^{mn}(-\phi) Y_n(-\phi) E \left(-\frac{\phi_n}{2} \right) L_2 \right]_{kj}, \end{aligned} \quad (28)$$

из которого, принимая во внимание (26) и (27), получим $X_m(\phi) = Y_m(-\phi)$. Таким образом, необходимо построить семейство матриц X_m , удовлетворяющих равенству (26). Запишем равенство (26) в форме

$$\begin{aligned} E \left(-\frac{\phi_n}{2} \right) T^{nm}(\phi) (\hat{I} + X_m(\phi)) E \left(\frac{\phi_m}{2} \right) L_2 = \\ = L_2^T E \left(-\frac{\phi_n}{2} \right) [X_n(-\phi)]^T [T^{mn}(-\phi)]^T E \left(\frac{\phi_m}{2} \right), \end{aligned} \quad (29)$$

откуда легко получить

$$X_n(\phi) = -T^{nm}(\phi) L_2 (\hat{I} + [X_m(-\phi)]^T) L_2 T^{mn}(\phi). \quad (30)$$

Соотношение (30) позволяет выразить все X_n через X_0 :

$$X_n(\phi) = -\hat{I} - T^{n0}(\phi) L_2 [X_0(-\phi)]^T L_2 T^{0n}(\phi). \quad (31)$$

Это соотношение должно согласовываться с (30). Подставляя в выражение (30) $X_n(\phi)$ и $X_m(\phi)$ в виде (31), получим после преобразований уравнение для матрицы X_0 :

$$X_0(\phi) + L_2 [X_0(-\phi)]^T L_2 = -\hat{I}. \quad (32)$$

Матрицы $X_n(\phi)$ по определению не зависят от спиновых значков в отличие от матриц A_n^ν . Начиная с этого места будем исследовать $G_{nm}^\uparrow(z, z')$ и опустим спиновый индекс у матриц A_n^ν .

Заметим, что выражения для функций Грина (20), (21) могут быть теперь переписаны в виде

$$\begin{aligned} G_{nm}^\uparrow(z, z') &= \begin{cases} F_n^\uparrow(z) [[F_m^{\uparrow-1}(z')]_{[2]} + H_m^\uparrow(z')], & z > z', \\ F_n^\uparrow(z) H_m^\uparrow(z'), & z < z', \end{cases} = \\ &= \begin{cases} \Phi_n(z) (A_n A_m^{-1}) (\hat{I} + X_m(\phi)) [\Phi_m^{-1}(z')]_{[2]}, & z > z', \\ \Phi_n(z) (A_n A_m^{-1}) X_m(\phi) [\Phi_m^{-1}(z')]_{[2]}, & z < z', \end{cases} \end{aligned} \quad (33)$$

или через базис F_n . Приведем первую строку соотношения (20), записанную через базис F_n :

$$\begin{aligned} G_{nm}^\uparrow(z > z') &= F_n^\uparrow(z) [[F_m^{\uparrow-1}(z')]_{[2]} + H_m^\uparrow(z')] = \\ &= F_n^\uparrow(z) (\hat{I} + A_m^{-1} X_m(\phi) A_m) [F_m^{\uparrow-1}(z')]_{[2]} = \\ &= F_n^\uparrow(z) (-A_0^{-1} L_2 [X_0(-\phi)]^T L_2 A_0) [F_m^{\uparrow-1}(z')]_{[2]}. \end{aligned} \quad (34)$$

Аналогичные соотношения могут быть написаны и для $G_{nm}^\downarrow$.

4. НАЛОЖЕНИЕ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ НА ФУНКЦИЮ ГРИНА

Уравнение (32) обеспечивает выполнение условий симметрии (7). Обычно помимо условий симметрии и непрерывности на функцию Грина налагают определенные граничные условия. Мы будем решать уравнение (32) с учетом граничных условий, которые дают дополнительные уравнения для матрицы X_0 . Граничные условия определяются, среди прочего, геометрией системы. Мы предположим, что внешние слои полубесконечные, и выберем граничные условия следующим образом. Как следует из вида фундаментальной матрицы (12) и формул (20), (21), функция Грина экспоненциально зависит от переменных z, z' . Мы исключим экспоненты вида $e^{ik_{1,2}z}$ в левом слое и $e^{-ik_{1,2}z}$ – в правом. Эти условия имеют простой смысл: мы рассматриваем баллистический режим, когда $k_{1,2}$ действительные в проводящих слоях и мнимые в слоях изолятора, но в случае диффузного рассеяния электронов величины $k_{1,2}$ приобретают положительную мнимую часть. Исключая указанные экспоненты, мы исключаем неограниченное возрастание $G_{nm}^{\nu\mu}(z, z'; \theta, \phi)$ на бесконечности. Как видно из выражения (33), для исключения указанных экспонент в левом слое необходимо, чтобы в матрице $\hat{I} + X_0$ второй и четвертый столбцы обращались в нуль. Вместе с уравнением (32) это означает, что матрица X_0 имеет следующий вид:

$$X_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ X_{21}(\phi) & -1 & X_{23}(\phi) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ X_{23}(-\phi) & 0 & X_{43}(\phi) & -1 \end{pmatrix}. \quad (35)$$

Такая форма X_0 (что легко проверить, пользуясь выражением (33)), обеспечивает отсутствие растущих экспонент не только при $z \rightarrow -\infty$, но и при одновременном стремлении z, z' к $-\infty$, т.е. функция Грина для $z > z'$ содержит только экспоненты $e^{-ik_{1,2}(z+z')}$, $e^{-ik_{1,2}(z-z')}$.

После того как найдено, что X_0 имеет вид (35), соотношение (32) сводится к двум уравнениям:

$$\begin{aligned} -X_{21}(-\phi) + X_{21}(\phi) &= 0, \\ -X_{43}(-\phi) + X_{43}(\phi) &= 0. \end{aligned} \quad (36)$$

Прежде чем решать эти уравнения, исследуем ограничения, которые налагают граничные условия в правом внешнем слое – исключение $e^{-ik_{1,2}z}$. Для выполнения этого условия предположим, что в правом внешнем слое фундаментальная матрица $F_N^\dagger(z)$ совпадает с $F_N(z, \phi)$. В этом случае, как видно из соотношения (34), граничное условие будет выполнено, если матрица $A_0^{-1}L_2[X_0(-\phi)]^T L_2 A_0$ имеет нулевые вторую и четвертую строки:

$$V \equiv (A_0^{-1}L_2[X_0(-\phi)]^T L_2 A_0) = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & V_{13} & V_{14} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ V_{31} & V_{32} & V_{33} & V_{34} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (37)$$

Равенство (36) выполняется, если $V_{11} = -1$, $V_{13} = 0$, $V_{31} = 0$, $V_{33} = -1$ и матрица A_0 имеет вид

$$A_0 = \begin{pmatrix} a_{11} & -a_{11}V_{12}- & a_{13} & -a_{11}V_{14}- \\ & -a_{13}V_{32} & & -a_{13}V_{34} \\ a_{11}X_{21}(-\phi)+ & a_{22} & a_{13}X_{21}(-\phi)+ & a_{24} \\ +a_{31}X_{23}(\phi) & & +a_{33}X_{23}(\phi) & \\ a_{31} & -a_{31}V_{12}- & a_{33} & -a_{31}V_{14}- \\ & -a_{33}V_{32} & & -a_{33}V_{34} \\ a_{11}X_{23}(-\phi)+ & a_{42} & a_{13}X_{23}(-\phi)+ & a_{44} \\ +a_{31}X_{43}(-\phi) & & +a_{33}X_{43}(-\phi) & \end{pmatrix} \quad (38)$$

В выражении (38) параметры a_{ij} , V_{ij} – произвольные комплексные числа. Как и в случае граничных условий в левом внешнем слое, данный выбор матрицы A_0 вместе с равенством $F_N^\dagger = \Phi_N(z, \phi)$ обеспечивает отсутствие расходящихся экспонент при $z, z' \rightarrow +\infty$. Выбор A_0 и $F_N^\dagger(z)$ не независим. Выбирая $F_N^\dagger(z)$, мы тем самым задаем определенный вид A_N . Матрицы A_0 и A_N связаны трансфер-матрицей:

$$T^{0N}(\phi)A_N = A_0. \quad (39)$$

Уравнение (39) позволяет определить элементы матрицы X_0 :

$$\begin{aligned} X_{21}(\phi) &= \frac{(T^{0N}(-\phi))_{23}(T^{0N}(-\phi))_{31} - (T^{0N}(-\phi))_{21}(T^{0N}(-\phi))_{33}}{(T^{0N}(-\phi))_{13}(T^{0N}(-\phi))_{31} - (T^{0N}(-\phi))_{11}(T^{0N}(-\phi))_{33}}, \\ X_{23}(\phi) &= \frac{(T^{0N}(-\phi))_{13}(T^{0N}(-\phi))_{21} - (T^{0N}(-\phi))_{11}(T^{0N}(-\phi))_{23}}{(T^{0N}(-\phi))_{13}(T^{0N}(-\phi))_{31} - (T^{0N}(-\phi))_{11}(T^{0N}(-\phi))_{33}}, \\ X_{43}(\phi) &= \frac{(T^{0N}(-\phi))_{13}(T^{0N}(-\phi))_{41} - (T^{0N}(-\phi))_{11}(T^{0N}(-\phi))_{43}}{(T^{0N}(-\phi))_{13}(T^{0N}(-\phi))_{31} - (T^{0N}(-\phi))_{11}(T^{0N}(-\phi))_{33}}. \end{aligned} \quad (40)$$

Можно проверить, что $X_{21}(\phi)$, $X_{21}(-\phi)$, $X_{23}(\phi)$, $X_{23}(-\phi)$, $X_{43}(\phi)$ удовлетворяют уравнениям (36), пользуясь соотношением

$$T^{mn}(-\phi) = [L_2 T^{nm}(\phi) L_2]^T, \quad (41)$$

которое доказывается с помощью формул (17), (18), (19).

Остались не определенными параметры матрицы V , которая определяет матрицы A_n . Но функция Грина, как видно из выражения (33), зависит только от комбинаций матриц $A_n^{-1}A_m$, т.е. от трансфер-матрицы. Таким образом, матрица V не нужна для построения функции Грина. Формулы (31), (33), (35) и (40) решают задачу.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью трансфер-матрицы мы построили одноэлектронную функцию Грина определенной симметрии (7) магнитной многослойной системы, в которой магнитные слои могут чередоваться с немагнитными – проводящими или диэлектрическими. Мы предполагали баллистический режим проводимости в проводящих слоях.

Мы рассмотрели систему, бесконечную вдоль оси z ; соответственно граничные условия определялись условием невозрастания функции Грина при $z, z' \rightarrow \pm\infty$. Рассмотрение без труда может быть перенесено на случай конечной вдоль оси z системы, когда граничные условия определяются значением функции Грина на внешних границах системы.

Предложенный метод удобно применять при численных модельных расчетах для многослойных систем с произвольным числом слоев, в том числе для исследования зависящей от спина электронной проводимости, гигантского магнитосопротивления и туннельного магнитосопротивления в магнитных гетероструктурах [12].

Благодарности. Авторы благодарят РФФИ (грант № 04-02-16688) за поддержку.

Список литературы

- [1] J. Mathon, *Phys. Rev. B*, **55** (1997), 960; K. D. Belashchenko, E. Y. Tsymbal, I. I. Oleynik, M. van Schilfgaarde, *Phys. Rev. B*, **71** (2005), 224422.
- [2] A. Vedyayev, B. Dieny, N. Ryzhanova, *Europhys. Lett.*, **19** (1992), 329.
- [3] A. Vedyayev, C. Cowache, N. Ryzhanova, B. Dieny, *J. Phys.: Cond. Matt.*, **5** (1993), 8289.
- [4] L. Tagirov, *Phys. Rev. Lett.*, **83** (1999), 2058; M. Ye. Zhuravlev, E. Y. Tsymbal, A. V. Vedyayev, *Phys. Rev. Lett.*, **94** (2005), 026806.
- [5] A. Vedyayev, B. Dieny, N. Ryzhanova, J. B. Genin, C. Cowache, *Europhys. Lett.*, **25** (1994), 465.
- [6] T. E. Feuchtwang, *Phys. Rev. B*, **19** (1974), 4121; F. Garcia-Moliner, R. Pérez-Álvarez, H. Rodríguez-Coppola, V. R. Velasco, *J. Phys. A*, **23** (1990), 1405.
- [7] F. García-Moliner, V. R. Velasco, *Theory of Single and Multiple Interfaces: The Method of Surface Green Function Matching*, World Scientific, Singapore, 1992.
- [8] R. Pérez-Álvarez, F. García-Moliner, *Transfer Matrix, Green Function and Related Techniques: Tools for the Study of Multilayer Heterostructures*, Universitat Jamie I, Castellon de la Plana, Spain, 2004.
- [9] M. Ye. Zhuravlev, H. O. Lutz, A. V. Vedyayev, *J. Phys. A*, **38** (2005), 5547.
- [10] M. Ye. Zhuravlev, J. D. Burton, A. V. Vedyayev, E. Y. Tsymbal, *J. Phys. A*, **38** (2005), 5547.
- [11] H. E. Camblong, P. M. Levy, S. Zhang, *Phys. Rev. B*, **51** (1995), 16052.
- [12] E. Y. Tsymbal, O. Mryasov, P. R. LeClair, *J. Phys.: Cond. Matt.*, **15** (2003), R109.

Поступила в редакцию 15.07.2005,
после доработки 17.01.2006