Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Н. Х. Усеинов, Квазиклассические функции Грина магнитных точечных контактов, *ТМФ*, 2015, том 183, номер 2, 301–311

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf8786>

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: 54.89.56.158

26 апреля 2023 г., 17:54:29

© 2015 г.

Н. Х. Усеинов*

КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ ГРИНА МАГНИТНЫХ ТОЧЕЧНЫХ КОНТАКТОВ

Предложен метод построения квазиклассических симметричных и антисимметричных функций Грина магнитных точечных контактов с однородной намагниченностью различных ферромагнитных электродов. Полученная антисимметричная функция Грина позволяет исследовать баллистический и диффузный транспорт электронов через магнитный контакт с учетом неоднородности электрохимического потенциала.

Ключевые слова: квазиклассическая функция Грина, магнитная гетероструктура, магнитный точечный контакт, обыкновенные дифференциальные уравнения.

DOI: 10.4213/tmf8786

1. ВВЕДЕНИЕ

Известно, что эффективным методом исследования задачи электронного транспорта в теории проводимости сверхпроводников и нормальных металлов являются квазиклассические уравнения для функций Грина (см., например, [1]). В соответствующей формулировке квазиклассическая теория явлений переноса в микроконтактах с сужениями, основанная на дифференциальных уравнениях для функций Грина, была развита в работе Зайцева [2]. В этой работе была получена система квазиклассических уравнений, позволяющая исследовать неравновесные и нестационарные явления проводимости в структурах, содержащих одну или несколько границ между металлами. Эта система содержит матричные функции Грина, позволяющие описывать падающие на границы и отраженные от границ волны электронов. Эти функции Грина по обе стороны от границы сшиваются с помощью граничных условий, которые выведены для произвольной формы и произвольной прозрачности потенциального барьера. Квазиклассическая теория, которая описывает явления с характерными длинами, большими, чем длины волны Ферми k_F^{-1} , и частотами ниже, чем частота Ферми $\varepsilon_F/\hbar$, также может быть математическим базисом для исследования термодинамических и транспортных свойств магнитных гетероструктур. Построение квазиклассической функции Грина таких (магнитных)

---

*Институт физики, Казанский Приволжский федеральный университет, Казань, Россия. E-mail: nuseinov@mail.ru

гетероструктур и точечных контактов неоднократно проводилось в рамках различных моделей [3]–[9]. В частности, авторы работы [4], развивая квазиклассическую модель для функций Грина и используя граничные условия Зайцева [2], получили выражения для проводимостей при параллельной и антипараллельной ориентациях намагниченностей ферромагнитного гомоконтакта. В рамках этой модели были исследованы зависимости магнитосопротивления магнитного точечного контакта как функции отношения его радиуса a к длине свободного пробега l электрона проводимости. Предложенная схема вычисления функций Грина основывалась на интерполяции слагаемых в функциях Грина в двух режимах: диффузном ($l < a$) и баллистическом ($l > a$). При построении функции Грина ферромагнитного гетероконтакта (см., например, [7], [9]) приходится решать задачи, обусловленные геометрией исследуемой системы, проводить шивки спин-поляризованных каналов проводимости и вычислять коэффициент прохождения энергетического барьера. Кроме того, в результате несоответствия между зонами проводимости и магнитными свойствами контактирующих металлов появляется граничное сопротивление [8], связанное с кривизной электрохимических потенциалов (см. рис. 16). Все это делает процедуру построения квазиклассической функции Грина магнитных точечных контактов нетривиальной задачей даже в простейшей модели, когда в намагниченных берегах контакта электроны описываются как свободные с обменным расщеплением спиновых подзон.

В упомянутой работе [4] квазиклассические функции Грина удовлетворяют системе линейных дифференциальных уравнений (аналогичных уравнениям Больцмана в τ -приближении)

$$\begin{aligned} l_{z,\alpha} \frac{\partial g_{a,\alpha}(z, \mathbf{p}, t)}{\partial z} + \mathbf{l}_{\parallel,\alpha} \frac{\partial g_{s,\alpha}(z, \mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}} + g_{s,\alpha}(z, \mathbf{p}, t) - \langle g_{s,\alpha} \rangle &= 0, \\ l_{z,\alpha} \frac{\partial g_{s,\alpha}(z, \mathbf{p}, t)}{\partial z} + \mathbf{l}_{\parallel,\alpha} \frac{\partial g_{a,\alpha}(z, \mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}} + g_{a,\alpha}(z, \mathbf{p}, t) &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где $g_{s(a),\alpha}(z, \mathbf{p}, t)$ – симметричная (антисимметричная) функция Грина, $\mathbf{l}_{\parallel,\alpha}$ – вектор, определяющий длину свободного пробега электрона в плоскости контакта (см. рис. 1), абсолютная величина этого вектора определяется геометрией: $l_{\parallel,\alpha}^2 = l_{\alpha}^2 - l_{z,\alpha}^2$, где $l_{z,\alpha} = l_{\alpha} \cos \theta$ – проекция на ось z , α – спиновый индекс. Угловые скобки в первом уравнении (1) означают усреднение по телесному углу:

$$\langle g_{s,\alpha} \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} g_{s,\alpha} \sin \theta d\theta d\varphi. \quad (2)$$

Симметричная и антисимметричная функции Грина определяются по отношению к проекции $n_z = p_{z,\alpha}/p_{F,\alpha}$ импульса Ферми $p_{F,\alpha}$ на ось z :

$$g_{a(s),\alpha}(z, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{2} [g_{\alpha}(n_z, z, \mathbf{p}, t) \mp g_{\alpha}(-n_z, z, \mathbf{p}, t)]. \quad (3)$$

Граничные условия задачи в точке $z = 0$, выведенные в работе Зайцева [2], имеют вид

$$g_{a,\alpha}^L(0) = g_{a,\alpha}^R(0) = \begin{cases} g_{a,\alpha}(0), & p_{\parallel,\alpha} < p_{F,\alpha}^L, p_{F,\alpha}^R, \\ 0, & p_{\parallel,\alpha} > \min[p_{F,\alpha}^L, p_{F,\alpha}^R], \end{cases} \quad (4)$$

$$2R_{\alpha} g_{a,\alpha}(0) = D_{\alpha}(g_{s,\alpha}^L(0) - g_{s,\alpha}^R(0)), \quad (5)$$

Рис. 1. а – Схематическое изображение точечного контакта двух ферромагнитных металлов. Полуокружности соответствуют поверхностям Ферми для спиновых подзон меньшинства (min) электронов в правом (R) и большинства (maj) электронов в левом (L) электродах. Жирные стрелки показывают критический угол θ_L^{cr} падения электрона на контакт. Тонкие стрелки обозначают (падение) отражение электрона при угле падения больше критического, $\theta_L > \theta_L^{\text{cr}}$, при котором возникает полное отражение электронов. Штриховые стрелки обозначают параллельную и перпендикулярную к интерфейсу компоненты импульса Ферми. б – Схематическая иллюстрация кривизны и скачка электрохимического потенциала на границе. Отметим, что скачок электрического потенциала (не измеримый вольтметром) имеется уже в отсутствие тока.

где $p_{\parallel,\alpha}$ – проекция спин-зависимого импульса Ферми $p_{F,\alpha}^{L(R)}$ на плоскость контакта, верхними индексами L и R обозначены левая и правая стороны контакта, D_α и $R_\alpha = 1 - D_\alpha$ – квантово-механические коэффициенты прохождения и отражения области контакта, зависящие от $p_{F,\alpha}^{L(R)}$, спинового канала проводимости и угла подлета электрона к плоскости контакта (см. рис. 1а). Смысл граничных условий (4) заключается в равенстве чисел электронов, влетающих в контакт и вылетающих из него. Граничное условие (5) свидетельствует о том, что плотность тока j_α , которая определяется функцией $\langle g_{a,\alpha} \rangle$, пропорциональна разности потенциалов $eV \propto (\langle g_{s,\alpha}^L \rangle - \langle g_{s,\alpha}^R \rangle)$, где V – приложенное напряжение к берегам контакта или напряжение, возникающее за счет контактной разности потенциалов. Граничное условие (5) здесь играет роль закона Ома вдоль квазиклассической траектории движения электрона. Отметим также, что соотношения (4) и (5) подчиняются условию сохранения компоненты импульса, лежащей в плоскости контакта:

$$p_{\parallel,\alpha} = p_{F,\alpha}^L \sin \theta_L = p_{F,\alpha}^R \sin \theta_R. \quad (6)$$

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В работе [10] мы определили квазиклассические функции Грина магнитного точечного гетероконтакта. Это позволило вычислить спин-поляризованные проводимости гетероконтакта при параллельной и антипараллельной намагниченности ферромагнитных электродов. В данной работе мы рассмотрим более общую задачу: нахождение симметричной и антисимметричной функций Грина гетероконтакта, где ферромагнитные электроды могут быть разделены (немагнитным) проводящим или диэлектрическим слоем. Импульсы Ферми спиновых подзон и спин-зависимые от спина длины свободного пробега электронов проводимости в контактирующих ферромагнетиках будут произвольными. Предложенная схема вычисления основывается на интерполяции слагаемых в функциях Грина в двух режимах: диффузном ($l < a$) и баллистическом ($l > a$). Кроме того, мы учтем градиентные слагаемые в разложении функции Грина, которые позволяют приблизиться к промежуточному случаю, когда $l \sim a$. Наше исследование является существенным обобщением представленных в работах [4], [7], [10] формул для функций Грина.

Точечный контакт моделируется круговым отверстием радиуса a , проделанным в непроницаемой мембране, которая разделяет пространство на две половины – левую L и правую R , каждая из которых занята однодоменным ферромагнитным металлом. Ось z цилиндрической системы координат направлена перпендикулярно плоскости мембраны и проведена через центр отверстия (см. рис. 1).

3. ОБЩЕЕ РЕШЕНИЕ ДЛЯ ФУНКЦИИ ГРИНА С УЧЕТОМ ГРАДИЕНТНЫХ СЛАГАЕМЫХ

Решение системы (1) в координатном представлении при выбранной здесь системе единиц $k_B = \hbar = 1$ можно искать в виде

$$g_{s,\alpha}(z, \boldsymbol{\rho}, t) = \text{th}\left(\frac{\varepsilon}{2T}\right) + f_{s,\alpha}(z, \boldsymbol{\rho}, t). \quad (7)$$

Первое слагаемое соответствует равновесной функции Грина $g_s^{\text{eq}}(\varepsilon)$ вдали от точки контакта, ε – энергия электрона, T – температура (см. обзор [1]). Второе слагаемое соответствует неравновесной части функции Грина, которая определяет неоднородность потока электронов в плоскости контакта. Однако систему уравнений (1) с учетом граничных условий (4) и (5) удобно решать в смешанном представлении, т. е. в координатном представлении по переменной z , в импульсном k -представлении по переменной $\boldsymbol{\rho}$ и в энергетическом ε -представлении по переменной t . Кроме того, отметим, что далее в формулах мы не будем использовать спиновый индекс α , так как в этом нет необходимости. Все последующие решения уравнений и выводы формул мы будем выполнять только для одной проекции спина электрона проводимости. При этом предполагается, что при прохождении контакта спин электрона не переворачивается. Итак, переходя в системе (1) к обратному преобразованию Фурье, получим

$$l_z \frac{\partial g_a(z, \mathbf{k}, \varepsilon)}{\partial z} + (1 - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{l}_{\parallel}) g_s(z, \mathbf{k}, \varepsilon) = \langle g_s \rangle, \quad (8)$$

$$l_z \frac{\partial g_s(z, \mathbf{k}, \varepsilon)}{\partial z} + (1 - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{l}_{\parallel}) g_a(z, \mathbf{k}, \varepsilon) = 0. \quad (9)$$

Из уравнения (9) получаем связь симметричной и антисимметричной функций Грина:

$$\frac{\partial g_s(z, \mathbf{k}, \varepsilon)}{\partial z} = -\kappa g_a(z, \mathbf{k}, \varepsilon), \quad (10)$$

где для удобства введено обозначение $\kappa = [1 - i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{l}_{\parallel})]/l_z$. Подставляя теперь (10) в уравнение (8), получим неоднородное дифференциальное уравнение второго порядка:

$$\frac{\partial^2 g_s(z, \mathbf{k}, \varepsilon)}{\partial z^2} - \kappa^2 g_s(z, \mathbf{k}, \varepsilon) + \frac{\kappa}{l_z} \langle g_s \rangle = 0. \quad (11)$$

Общее решение этого уравнения можно представить в виде

$$g_s(z) = C_1 e^{\kappa z} + C_2 e^{-\kappa z} + \frac{1}{2l_z} \left[\int_{\xi_1}^z e^{\kappa(\xi-z)} \langle g_s(\xi) \rangle d\xi + \int_z^{\xi_2} e^{\kappa(z-\xi)} \langle g_s(\xi) \rangle d\xi \right], \quad (12)$$

где аргументы $\mathbf{k}$ и ε функции Грина для простоты записи опущены. Далее оставим только те решения, которые имеют физический смысл. В области $z > 0$, функция $g_s(z)$ при $z \rightarrow \infty$ не должна расти до бесконечности (для конечного решения), следовательно, коэффициент C_1 равен нулю. Кроме того, при $\xi_1 = 0$ и $\xi_2 = \infty$ имеем

$$g_s(z)|_{z>0} = C_2 e^{-\kappa z} + \frac{1}{2l_z} \left[\int_0^z e^{\kappa(\xi-z)} \langle g_s(\xi) \rangle d\xi + \int_z^{\infty} e^{\kappa(z-\xi)} \langle g_s(\xi) \rangle d\xi \right]. \quad (13)$$

Аналогично для области $z < 0$ в формуле (12) коэффициент C_2 равен нулю. Используя пределы интегрирования $\xi_1 = -\infty$ и $\xi_2 = 0$, получаем

$$g_s(z)|_{z<0} = C_1 e^{\kappa z} + \frac{1}{2l_z} \left[\int_{-\infty}^z e^{\kappa(\xi-z)} \langle g_s(\xi) \rangle d\xi + \int_z^0 e^{\kappa(z-\xi)} \langle g_s(\xi) \rangle d\xi \right]. \quad (14)$$

Теперь продифференцируем по z полученные решения (13) и (14). Далее, умножив результат на множитель $-1/\kappa$ и воспользовавшись соотношением (10), получаем интегральную связь антисимметричной и симметричной функций Грина:

$$\begin{aligned} g_a(z)|_{z>0} &= C_2 e^{-\kappa z} + \frac{1}{2l_z} \left[\int_0^z e^{\kappa(\xi-z)} \langle g_s(\xi) \rangle d\xi - \int_z^{\infty} e^{\kappa(z-\xi)} \langle g_s(\xi) \rangle d\xi \right], \\ g_a(z)|_{z<0} &= -C_1 e^{\kappa z} + \frac{1}{2l_z} \left[\int_{-\infty}^z e^{\kappa(\xi-z)} \langle g_s(\xi) \rangle d\xi - \int_z^0 e^{\kappa(z-\xi)} \langle g_s(\xi) \rangle d\xi \right]. \end{aligned} \quad (15)$$

Выражая из (15) слагаемые $C_1 e^{\kappa z}$, $C_2 e^{-\kappa z}$ и подставляя их в (13) и (14), получаем

$$\begin{aligned} g_s(z)|_{z>0} &= g_a(z)|_{z>0} + \frac{1}{l_z} \int_z^{\infty} e^{-\kappa(\xi-z)} \langle g_s(\xi) \rangle_R d\xi, \\ g_s(z)|_{z<0} &= -g_a(z)|_{z<0} + \frac{1}{l_z} \int_{-\infty}^z e^{-\kappa(z-\xi)} \langle g_s(\xi) \rangle_L d\xi. \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь важно отметить, что при определении области $z > 0$ или $z < 0$ усреднение $\langle g_s(\xi) \rangle_c$, стоящее под знаком интеграла, соответствует усреднению по углам

соответствующей стороны точечного контакта $c = (L, R)$. На основании принятого основного решения (7) системы уравнений (8), (9) в стационарном случае имеем равенство

$$g_s(z, \mathbf{k}, t)|_{t=0} = f_s(z, \mathbf{k}, t)|_{t=0},$$

поэтому для удобства введем новые обозначения для симметричной и антисимметричной функций Грина:

$$\begin{aligned} f_s(z, \mathbf{k}, \varepsilon)|_{z<0} &\equiv f_s^L, & g_a(z, \mathbf{k}, \varepsilon)|_{z<0} &\equiv g_a^L, \\ f_s(z, \mathbf{k}, \varepsilon)|_{z>0} &\equiv f_s^R, & g_a(z, \mathbf{k}, \varepsilon)|_{z>0} &\equiv g_a^R. \end{aligned}$$

Тогда решения (16) в новых обозначениях переписутся в виде

$$\begin{aligned} f_s^L &= -g_a^L + \frac{1}{l_z^L} \int_{-\infty}^z e^{-\kappa^L(z-\xi)} \langle f_s^L(\xi) \rangle_L d\xi, \\ f_s^R &= g_a^R + \frac{1}{l_z^R} \int_z^{\infty} e^{-\kappa^R(\xi-z)} \langle f_s^R(\xi) \rangle_R d\xi. \end{aligned} \quad (17)$$

Для нахождения антисимметричных функций Грина в точке $z = 0$, удовлетворяющих граничным условиям (4) и (5), получим самосогласованные решения уравнений (17). Для этого отметим следующее. Усредненные по телесному углу симметричные функции Грина фактически являются электрохимическими потенциалами, которые неоднородны вдоль траекторий, пересекающих интерфейс двух ферромагнитных металлов [8]. Неоднородность электрохимического потенциала на границе (см. рис. 1б) выражается градиентным слагаемым в разложении этой функции в ряд по переменной ξ . Кроме того, функции $\langle g_a^c \rangle_c$ и $\langle f_s^c(\xi) \rangle_c$ удовлетворяют диффузионному уравнению с длиной затухания, много большей длины свободного пробега l_z^c (см., например, [11]). Тогда мы можем разложить $\langle f_s^c(\xi) \rangle_c$ в ряд около точки z и вынести из-под интегралов независимые от ξ члены. Подставляя разложения

$$\langle f_s^c(\xi) \rangle_c \simeq \langle f_s^c(z) \rangle_c + (\xi - z) \left. \frac{\partial \langle f_s^c(\xi) \rangle_c}{\partial \xi} \right|_{\xi=z} \quad (18)$$

в уравнения (17) и усредняя по телесным углам в каждом полупространстве, запишем результат для правой стороны контакта:

$$\begin{aligned} \langle f_s^R(z) \rangle_R &= \langle g_a^R \rangle_R + \langle f_s^R(z) \rangle_R \int_z^{\infty} \left\langle \frac{e^{-\kappa^R(\xi-z)}}{l_z^R} \right\rangle_R d\xi + \\ &+ \left. \frac{\partial \langle f_s^R(\xi) \rangle_R}{\partial \xi} \right|_{\xi=z} \int_z^{\infty} \left\langle \frac{e^{-\kappa^R(\xi-z)}}{l_z^R} \right\rangle_R (\xi - z) d\xi. \end{aligned} \quad (19)$$

Далее введем новую независимую переменную $\eta \equiv \xi - z$ и перепишем это уравнение в точке $z \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} \langle f_s^R(0) \rangle_R &= \langle g_a^R \rangle_R + \langle f_s^R(0) \rangle_R \int_0^{\infty} \left\langle \frac{e^{-\kappa^R \eta}}{l_z^R} \right\rangle_R d\eta + \\ &+ \left. \frac{\partial \langle f_s^R(\xi) \rangle_R}{\partial \xi} \right|_{\xi=0} \int_0^{\infty} \left\langle \frac{e^{-\kappa^R \eta}}{l_z^R} \right\rangle_R \eta d\eta. \end{aligned} \quad (20)$$

Аналогичную процедуру проделаем с функцией Грина левой стороны контакта: введем новую независимую переменную $\eta \rightarrow -\eta \equiv z - \xi$ и сменим пределы интегрирования. Результат преобразований в формулах (17) запишем единой формулой:

$$\begin{aligned} \langle f_s^c(0) \rangle_c = & \mp \langle g_a^c \rangle_c + \langle f_s^c(0) \rangle_c \int_0^\infty \left\langle \frac{e^{-\kappa^c \eta}}{l_z^c} \right\rangle_c d\eta \mp \\ & \mp \frac{\partial \langle f_s^c(\xi) \rangle_c}{\partial \xi} \Big|_{\xi=0} \int_0^\infty \left\langle \frac{e^{-\kappa^c \eta}}{l_z^c} \right\rangle_c \eta d\eta, \end{aligned} \quad (21)$$

где знак минус соответствует функции Грина левой стороны контакта, а знак плюс – функции Грина правой стороны. В выражении (21) все интегралы имеют аналитическое решение и выражаются в виде функциональных зависимостей от величины волнового вектора k и спин-поляризованных длин свободного пробега $l_{z,\alpha}^{L(R)}$. Подробное вычисление интегралов в (21) выходит за рамки нашей основной задачи, поэтому мы представим их как параметры и обозначим следующим образом:

$$\lambda_0^c = \int_0^\infty \left\langle \frac{e^{-\kappa^c \eta}}{l_z^c} \right\rangle_c d\eta, \quad \lambda_1^c = \int_0^\infty \left\langle \frac{e^{-\kappa^c \eta}}{l_z^c} \right\rangle_c \eta d\eta. \quad (22)$$

Тогда два линейных самосогласованных уравнения (21) можно записать в виде

$$\langle f_s^c \rangle_c = \mp \Lambda_c \langle g_a^c \rangle_c \mp l^c \Lambda'_c \frac{\partial \langle f_s^c \rangle_c}{\partial \xi}, \quad (23)$$

где введены дополнительные обозначения отношения интегралов (22):

$$\Lambda_c \equiv \frac{1}{1 - \lambda_0^c}, \quad \Lambda'_c \equiv \frac{\lambda_1^c}{l^c(1 - \lambda_0^c)}. \quad (24)$$

Итак, теперь мы можем записать окончательные выражения для симметричных функций Грина с учетом градиентных слагаемых. Для этого подставим усредненные выражения (23) в уравнения (17) и, переходя в этих уравнениях к переменным интегрирования $\eta = \pm(z - \xi)$, получим

$$f_s^c = \mp g_a^c \mp \Lambda_c \langle g_a^c \rangle_c \int_0^\infty \frac{e^{-\kappa^c \eta}}{l_z^c} d\eta \mp l^c \Lambda'_c \frac{\partial \langle f_s^c \rangle_c}{\partial \xi} \int_0^\infty \frac{e^{-\kappa^c \eta}}{l_z^c} d\eta, \quad (25)$$

где знак минус соответствует функции Грина левой стороны контакта, а знак плюс – функции Грина правой стороны.

Теперь вычислим антисимметричные функции Грина g_a^c . Для этого подставим полученный результат (25) в граничные условия (4) и (5). Однако предварительно запишем граничное условие (5), используя обратное преобразование Фурье:

$$2Rg_a(0, \mathbf{k}, \varepsilon) = -D[g_s^R(0, \mathbf{k}, \varepsilon) - g_s^L(0, \mathbf{k}, \varepsilon)]. \quad (26)$$

Здесь на основании (7) и преобразования Фурье симметричные функции Грина имеют вид

$$\begin{aligned} g_s^R(0, \mathbf{k}, \varepsilon) &= \frac{2\pi a}{k} J_1(ka) \operatorname{th}\left(\frac{\varepsilon}{2T}\right) + f_s^R(0, \mathbf{k}, \varepsilon), \\ g_s^L(0, \mathbf{k}, \varepsilon) &= \frac{2\pi a}{k} J_1(ka) \operatorname{th}\left(\frac{\varepsilon - eV}{2T}\right) + f_s^L(0, \mathbf{k}, \varepsilon), \end{aligned} \quad (27)$$

где $J_1(ka)$ – функция Бесселя первого порядка, k – абсолютная величина волнового вектора в плоскости контакта, V – приложенное напряжение к берегам контакта. Подставляя (27) в (26), затем используя условие $R + D = 1$, получаем

$$(1 - D)g_a(0, \mathbf{k}, \varepsilon) = -D \frac{\pi a}{k} J_1(ka) \left[\operatorname{th} \left(\frac{\varepsilon}{2T} \right) - \operatorname{th} \left(\frac{\varepsilon - eV}{2T} \right) \right] - \frac{D}{2} [f_s^R(0, \mathbf{k}, \varepsilon) - f_s^L(0, \mathbf{k}, \varepsilon)]. \quad (28)$$

Далее, подставляя в эту формулу симметричные функции Грина (25) для каждой стороны контакта и учитывая граничные условия (4), получаем основное выражение для антисимметричной функции Грина:

$$\begin{aligned} g_a(0, \mathbf{k}, \varepsilon) = & -D \frac{\pi a}{k} J_1(ka) \left[\operatorname{th} \left(\frac{\varepsilon}{2T} \right) - \operatorname{th} \left(\frac{\varepsilon - eV}{2T} \right) \right] - \\ & - \Lambda_L \langle g_a^L \rangle_L \int_0^\infty \frac{D e^{-\kappa^L \eta}}{2l_z^L} d\eta - l^L \Lambda'_L \frac{\partial \langle f_s^L \rangle_L}{\partial \xi} \int_0^\infty \frac{D e^{-\kappa^L \eta}}{2l_z^L} d\eta - \\ & - \Lambda_R \langle g_a^R \rangle_R \int_0^\infty \frac{D e^{-\kappa^R \eta}}{2l_z^R} d\eta - l^R \Lambda'_R \frac{\partial \langle f_s^R \rangle_R}{\partial \xi} \int_0^\infty \frac{D e^{-\kappa^R \eta}}{2l_z^R} d\eta. \end{aligned} \quad (29)$$

Чтобы найти окончательное выражение для функции Грина $g_a(0, \mathbf{k}, \varepsilon)$, мы усредним выражение (29) по телесным углам левой и правой сторон контакта и воспользуемся непрерывностью функции $g_a(0, \mathbf{k}, \varepsilon)$ на границе (см. условие (4)).

В заключение этого раздела отметим, что в баллистическом режиме ($l > a$) первое слагаемое в выражении (29) существенно превосходит остальные, поскольку в них большие значения длин свободного пробега $l_z^{L(R)}$ стоят в знаменателях, так что в этом случае добавки от интегралов не приведут к большим ошибкам. Кроме того, надо отметить, что используемые нами приближения могут оказаться неприменимыми в промежуточном режиме, когда $l \sim a$, и значения этих величин составляют несколько ангстрем. Однако предложенная схема вычисления функций Грина может быть использована как некоторая интерполяционная процедура, приводящая к конечному результату.

4. ФУНКЦИИ ГРИНА ТОЧЕЧНОГО КОНТАКТА БЕЗ УЧЕТА ГРАДИЕНТНЫХ СЛАГАЕМЫХ

Сначала найдем выражение для антисимметричной функции Грина без учета градиентов. В этом случае соотношение (29) запишется в виде

$$g_a(0, \mathbf{k}, \varepsilon) = -D \gamma_k - \Lambda_L \langle g_a^L \rangle_L \int_0^\infty \frac{D e^{-\kappa^L \eta}}{2l_z^L} d\eta - \Lambda_R \langle g_a^R \rangle_R \int_0^\infty \frac{D e^{-\kappa^R \eta}}{2l_z^R} d\eta, \quad (30)$$

где для сокращения записи мы ввели дополнительное обозначение

$$\gamma_k = \frac{\pi a}{k} J_1(ka) \left[\operatorname{th} \left(\frac{\varepsilon}{2T} \right) - \operatorname{th} \left(\frac{\varepsilon - eV}{2T} \right) \right].$$

Теперь, предполагая, что антисимметричная функция Грина g_a в левой части соотношения (30) согласно граничному условию (4) равна как g_a^L , так и g_a^R , после

поочередного усреднения по телесному углу в соответствующем полупространстве получим систему двух уравнений

$$\begin{aligned}\langle g_a^L \rangle_L &= -\langle D \rangle_L \gamma_k - \Lambda_L \langle g_a^L \rangle_L \int_0^\infty \left\langle \frac{De^{-\kappa^L \eta}}{2l_z^L} \right\rangle_L d\eta - \\ &\quad - \Lambda_R \langle g_a^R \rangle_R \int_0^\infty \left\langle \frac{De^{-\kappa^R \eta}}{2l_z^R} \right\rangle_L d\eta, \\ \langle g_a^R \rangle_R &= -\langle D \rangle_R \gamma_k - \Lambda_L \langle g_a^L \rangle_L \int_0^\infty \left\langle \frac{De^{-\kappa^L \eta}}{2l_z^L} \right\rangle_R d\eta - \\ &\quad - \Lambda_R \langle g_a^R \rangle_R \int_0^\infty \left\langle \frac{De^{-\kappa^R \eta}}{2l_z^R} \right\rangle_R d\eta.\end{aligned}\tag{31}$$

Для упрощения этих формул введем обозначения интегралов

$$\begin{aligned}\lambda_L^L &\equiv \int_0^\infty \left\langle \frac{De^{-\kappa^L \eta}}{2l_z^L} \right\rangle_L d\eta, & \lambda_L^R &\equiv \int_0^\infty \left\langle \frac{De^{-\kappa^R \eta}}{2l_z^R} \right\rangle_L d\eta, \\ \lambda_R^L &\equiv \int_0^\infty \left\langle \frac{De^{-\kappa^L \eta}}{2l_z^L} \right\rangle_R d\eta, & \lambda_R^R &\equiv \int_0^\infty \left\langle \frac{De^{-\kappa^R \eta}}{2l_z^R} \right\rangle_R d\eta.\end{aligned}\tag{32}$$

Отметим, что вычисление этих интегралов не является нашей главной задачей. Их аналитические выражения с коэффициентом прохождения D для вычисления магнитосопротивления точечного контакта с магнитной доменной стенкой приведены в работе [7]. Таким образом, используя обозначения (32), мы приводим систему уравнений (31) к достаточно простому виду:

$$\begin{aligned}\langle g_a^L \rangle_L &= -\langle D \rangle_L \gamma_k - \Lambda_L \langle g_a^L \rangle_L \lambda_L^L - \Lambda_R \langle g_a^R \rangle_R \lambda_L^R, \\ \langle g_a^R \rangle_R &= -\langle D \rangle_R \gamma_k - \Lambda_L \langle g_a^L \rangle_L \lambda_R^L - \Lambda_R \langle g_a^R \rangle_R \lambda_R^R.\end{aligned}$$

Решая эту систему, получаем усредненные выражения для антисимметричных функций Грина слева и справа от границы контакта:

$$\begin{aligned}\langle g_a^L \rangle_L &= \frac{(1 + \Lambda_R \lambda_R^R) \langle D \rangle_L - \Lambda_R \lambda_L^R \langle D \rangle_R}{\Lambda_L \lambda_R^L \Lambda_R \lambda_L^R - (1 + \Lambda_L \lambda_L^L)(1 + \Lambda_R \lambda_R^R)} \gamma_k, \\ \langle g_a^R \rangle_R &= \frac{(1 + \Lambda_L \lambda_L^L) \langle D \rangle_R - \Lambda_L \lambda_R^L \langle D \rangle_L}{\Lambda_L \lambda_R^L \Lambda_R \lambda_L^R - (1 + \Lambda_L \lambda_L^L)(1 + \Lambda_R \lambda_R^R)} \gamma_k.\end{aligned}\tag{33}$$

Подставляя решения (33) в уравнение (30), получаем

$$g_a(0, \mathbf{k}, \varepsilon) = -\gamma_k \{D - G_L I_L - G_R I_R\},\tag{34}$$

где для компактности записи введены обозначения

$$G_L = \Lambda_L \frac{(1 + \Lambda_R \lambda_R^R) \langle D \rangle_L - \Lambda_R \lambda_L^R \langle D \rangle_R}{(1 + \Lambda_L \lambda_L^L)(1 + \Lambda_R \lambda_R^R) - \Lambda_L \lambda_R^L \Lambda_R \lambda_L^R},\tag{35}$$

$$G_R = \Lambda_R \frac{(1 + \Lambda_L \lambda_L^L) \langle D \rangle_R - \Lambda_L \lambda_R^L \langle D \rangle_L}{(1 + \Lambda_L \lambda_L^L)(1 + \Lambda_R \lambda_R^R) - \Lambda_L \lambda_R^L \Lambda_R \lambda_L^R},\tag{36}$$

$$I_L = \int_0^\infty \frac{De^{-\kappa^L \eta}}{2l_z^L} d\eta, \quad I_R = \int_0^\infty \frac{De^{-\kappa^R \eta}}{2l_z^R} d\eta.\tag{37}$$

Отсюда видно, что антисимметричную функцию Грина можно представить как функцию поперечного волнового вектора и энергии электрона на интерфейсе гетероструктуры, состоящей из нормальных и (или) ферромагнитных металлов, если известны коэффициенты прохождения спиновых каналов проводимости.

5. ФУНКЦИИ ГРИНА ТОЧЕЧНОГО КОНТАКТА С УЧЕТОМ ГРАДИЕНТНЫХ СЛАГАЕМЫХ

Теперь в уравнении (29) учтем градиентные слагаемые и воспользуемся усредненными производными симметричных функций Грина, которые равны антисимметричным функциям Грина (см. формулу (10)). Тогда, используя введенные ранее обозначения интегралов (37), запишем уравнение (29) в виде

$$g_a(0, \mathbf{k}, \varepsilon) = -D\gamma_k - \Lambda_L \langle g_a^L \rangle_L I_L + l^L \Lambda'_L \langle \kappa^L g_a^L \rangle_L I_L - \\ - \Lambda_R \langle g_a^R \rangle_R I_R + l^R \Lambda'_R \langle \kappa^R g_a^R \rangle_R I_R. \quad (38)$$

В этом выражении имеются средние величины $\langle g_a^c \rangle_c$ и $\langle \kappa^c g_a^c \rangle_c$, которые необходимо найти. Действуя, как и в случае расчета функций Грина без учета градиентов, выполним усреднение по левой и правой сторонам контакта. В этом случае получаются громоздкие, но простые системы уравнений относительно $\langle g_a^c \rangle_c$ и $\langle \kappa^c g_a^c \rangle_c$. Отметим, что средние величины $\langle \kappa^c g_a^c \rangle_c$ будут также выражаться через интегралы типа $\langle \kappa^c I_{c'} \rangle_c$ (где c' может не совпадать с c), которые можно вычислить. Решая системы сначала относительно $\langle g_a^c \rangle_c$, а затем относительно $\langle \kappa^c g_a^c \rangle_c$ и выделяя из решений множитель γ_k , получим

$$g_a(0, \mathbf{k}, \varepsilon) = -\frac{\pi a}{k} J_1(ka) \left[\text{th} \left(\frac{\varepsilon}{2T} \right) - \text{th} \left(\frac{\varepsilon - eV}{2T} \right) \right] \times \\ \times \{ D - G_L I_L - G_R I_R - F^{\text{grad}}(\mathbf{k}, D, l_z^L, l_z^R) \}, \quad (39)$$

где $F^{\text{grad}}(\mathbf{k}, D, l_z^L, l_z^R)$ представляет собой громоздкую функцию из нескольких слагаемых, введенных выше обозначений интегралов и средних величин от известных параметров задачи. Отметим, что здесь слагаемые в фигурных скобках являются функциями поперечного волнового вектора и скалярных параметров контакта, которые не зависят от энергии. Множитель $\left[\text{th} \left(\frac{\varepsilon}{2T} \right) - \text{th} \left(\frac{\varepsilon - eV}{2T} \right) \right]$ в фурье-представлении по энергии ε в стационарном случае равен $2eV$. Таким образом, окончательно с учетом спинового индекса антисимметричную функцию Грина мы запишем в виде

$$g_{a,\alpha}(\mathbf{k}) = -\frac{2\pi a e V}{k} J_1(ka) \{ D_\alpha - F_\alpha^{\text{heter}}(\mathbf{k}) - F_\alpha^{\text{grad}}(\mathbf{k}) \}, \quad (40)$$

где слагаемое F_α^{heter} представляет собой сумму $G_{L,\alpha} I_{L,\alpha} + G_{R,\alpha} I_{R,\alpha}$ (см. (34)–(37)).

В заключение этого раздела отметим, что полученное выражение (40) для антисимметричной функции Грина позволяет численно рассчитать спин-зависимую электронную проводимость и магнитосопротивление в следующих структурах: в магнитных планарных контактах, при использовании только коэффициента прохождения D_α (см., например, [12]); в магнитных точечных гетероконтактах, при учете двух слагаемых D_α и $F_\alpha^{\text{heter}}(\mathbf{k})$ (см. [7]); в магнитных точечных гетероконтактах при исследовании более общего случая, когда $l \sim a$, с добавлением слагаемого $F_\alpha^{\text{grad}}(\mathbf{k})$ (см. [13]).

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью квазиклассических уравнений для функций Грина и граничных условий мы построили симметричную и антисимметричную функции Грина магнитного точечного гетероконтакта, в котором магнитные электроды могут быть разделены немагнитными металлическими или диэлектрическими слоями. Предложенная схема вычисления основывается на интерполяции слагаемых, входящих в функции Грина, в двух приближениях: диффузном ($l < a$) и баллистическом ($l > a$). Были учтены градиентные слагаемые в разложении функции Грина, которые позволяют приблизиться к промежуточному случаю, когда $l \sim a$, для объяснения многообразия наблюдаемых экспериментальных данных. Представленные теоретические выражения симметричных и антисимметричных функций Грина могут быть использованы при модельных расчетах спин-зависимой проводимости, гигантского и туннельного магнитосопротивления, а также интерпретации экспериментальных данных, полученных при исследовании резистивных свойств магнитных гетероконтактов и наноконтактов, таких как Co/Fe, Ni/Мю-металл и туннельных точечных контактов из CoFeB/MgO/CoFe.

Благодарности. Автор благодарит доцента Р.Г. Деминова и профессора Л.Р. Тагирова за обсуждение результатов. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 14-02-00348а) и Программы повышения конкурентоспособности Казанского федерального университета, финансируемой правительством РФ.

Список литературы

- [1] J. Rammer, H. Smith, *Rev. Modern Phys.*, **58**:2 (1986), 323–359.
- [2] А. В. Зайцев, *ЖЭТФ*, **86**:5 (1984), 1742–1758.
- [3] C. Heide, R. Elliott, N. S. Wingreen, *Phys. Rev. B*, **59**:6 (1999), 4287–4304.
- [4] L. R. Tagirov, B. P. Vodopyanov, K. B. Efetov, *Phys. Rev. B*, **63**:10 (2001), 104428, 4 pp., arXiv: cond-mat/0207648.
- [5] M. Ye. Zhuravlev, H. O. Lutz, A. V. Vedyayev, *Phys. Rev. B*, **63**:17 (2001), 174409, 7 pp.
- [6] M. Ye. Zhuravlev, E. Y. Tsymbal, S. S. Jaswal, A. V. Vedyayev, B. Dieny, *Appl. Phys. Lett.*, **83**:17 (2003), 3534–3536.
- [7] A. N. Useinov, R. G. Deminov, L. R. Tagirov, G. Pan, *J. Phys.: Condens. Matter*, **19**:19 (2007), 196215, 10 pp., arXiv: 0706.0266.
- [8] L. R. Tagirov, N. García, *Superlattices and Microstructures*, **41**:2–3 (2007), 152–162.
- [9] Н. Х. Усеинов, *ФТТ*, **51**:3 (2009), 508–513.
- [10] А. Н. Усеинов, Л. Р. Тагиров, Р. Г. Деминов, Н. Х. Усеинов, *Ученые записки Казанск. гос. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки*, **149**:3 (2007), 5–30.
- [11] Л. Р. Тагиров, Б. П. Водопьянов, Р. Г. Деминов, А. Н. Усеинов, *Ученые записки Казанск. гос. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки*, **147**:2 (2005), 42–51.
- [12] A. N. Useinov, J. Kosel, N. Kh. Useinov, L. R. Tagirov, *Phys. Rev. B.*, **84**:8 (2011), 085424, 8 pp.
- [13] R. G. Deminov, N. Kh. Useinov, L. R. Tagirov, *Magnetic Resonance in Solids. Electron. J.*, **16**:2 (2014), 14209, 9 pp.

Поступила в редакцию 1.09.2014,
после доработки 30.09.2014