

铁磁非铁磁夹层中电子自旋波的传输及应用*

郑勇林^{1)2)†} 王晓茜¹⁾ 葛泽玲²⁾ 郭红力²⁾ 严刚峰¹⁾
戴松晖¹⁾ 朱晓玲¹⁾ 田晓滨¹⁾

1) (成都大学电子信息工程学院, 成都 610106)

2) (长江师范学院凝聚态物理研究所, 重庆 408100)

(2013年7月19日收到; 2013年8月17日收到修改稿)

建立了有限对一维铁磁性和非磁性层交错组成的周期系统, 应用布洛赫自旋波量子理论, 研究了该系统的基本性质及电子波函数散射特征对交错层数量依赖的关系. 研究发现: 在系统中电子波函数可表示为无限周期系统中转换矩阵特征向量的叠加或类布洛赫函数, 解此函数可得到任意层数系统的单色波散射的精确解. 在此基础上, 导出了电子波函数在周期系统中反射系数和透射系数对能量的依赖关系. 对光谱窗口的计算发现其势能和宽度几乎与全反射区域一样. 该系统由于高能量的传输和在电子自旋方向上对交换能的依赖而可能用于自旋滤波器.

关键词: 磁性多层膜, 铁磁性和非磁性结构, 电子散射, 电子自旋滤波器

PACS: 77.55.Nv, 75.40.Gb, 75.70.Cn, 75.30.Et

DOI: 10.7498/aps.62.227701

1 引言

基于电子自旋的输运理论的研究及应用一直受到人们的高度的重视. Liang 和 Huang^[1] 在介观自旋轨道耦合系统自旋偏振问题研究中, 建立了块自旋偏振和基于电流自旋偏振的一般形式, 揭示了块自旋偏振和基于电流自旋偏振的基本性质和它们的关系. Sulston 和 Burrows^[2] 研究了自旋极化中子通过非周期和周期磁晶格点阵的传输, 通过对两种晶格系统的比较, 揭示了周期性晶格产生自旋极化的区域更宽, 因而更容易产生偏振束, 但在非周期系统中偏振区域相对较窄, 在电子器件应用中, 更适合精细控制. 文献 [3] 研究了混合铁磁/半导体纳米系统中电子气的自旋偏振, 表明大的自旋偏振电流能到达相应的纳米系统, 还表明电子输运的自旋极性能被偏置电压所转换. 这些有趣性质可能实现半导体自旋注入和应用偏置电压实现可调自旋滤波器. 在铁磁层结构的自旋输运、磁振子在界面的相转变问题、磁性双层膜、铁电双层膜中的交换

偏置及其热稳定性也有相应的研究^[4-6], 并揭示了一些重要现象. 关于自旋极化电子通过有限 n 对铁磁性和非磁性 (FNF) 层交错组成的周期系统的讨论有一些显著特征, 通常在这种超级层系统中电子的散射特征是由它们依赖的层数量来描述. 本文建立了一维方 (矩形) 势阱模型, 探讨了有限周期系统中自旋偏振电子波函数及输运现象, 解此函数得到了任意层数系统的单色波散射的精确解, 由此导出了反射和透射系数对能量的依赖关系. 该系统由于高能量的分布和在电子自旋方向上对交换能的依赖而可能用于自旋滤波器.

2 模型与理论

2.1 模型

考虑电子通过一个交替 (FNF) 层组成的有限周期系统的运动, 应用一维矩形 Kronig-Penney 势, 系统包含有限数量的等同周期性单元构成一维有限方势垒 (如图 1 所示). 在层的厚度 x_1 和 x_2 上, 系统中势能 $U(x)$ 与坐标的关系为两个常数值, 即

* 国家自然科学基金 (批准号: 11205022) 和重庆市教委科学技术研究项目 (批准号: KJ061305, KJ081307) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: zhyong303@163.com

$U_1 = 0$ 和 U_2 , 周期 (单胞) 的长度是 $l = x_1 + x_2$. 在铁磁层中的势为

$$U_2 = U + JM_s, \quad (1)$$

且依赖电子自旋方向 ($s = \pm 1$), 其中 J 和 M 分别是交换积分和磁化强度.

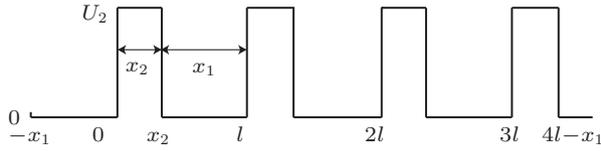


图 1 在一维有限周期性方势垒系统中势能 $U(x)$ 与坐标的关系

2.2 自旋极理论

由布洛赫的自旋波量子理论 [7], 假设原子中有一个未抵消的电子自旋, 对于这样一个自旋系统, 若只考虑哈密顿量中与自旋有关的部分, 其形式为

$$\hat{H} = -g\mu_B H \sum_i S_{iz} - 2A \sum_{i < j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \sum_{i < j} D_{ij} [\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{3}{\gamma_{ij}^2} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})], \quad (2)$$

其中, $D_{ij} = \frac{g^2 \mu_B^2}{r_{ij}^3}$, \mathbf{r}_{ij} 为电子 i 和电子 j 间的位矢距离; 式中第一项为电子系统在外磁场 H 中的塞曼能量; 第二项为交换能, 求和限于近邻; 第三项为自旋磁矩间的偶极作用能, 由于是长程作用, 求和应遍布于全部电子自旋.

显然, 对自旋反转来说, 交换能增加较大, 而磁偶极相互作用能增加较小, 如果不考虑磁偶极相互作用, 且令外磁场 $H = 0$, 则 (2) 式简化为

$$H_{\text{ex}} = -2A \sum_{i < j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (3)$$

如果在 N 个原子组成的一维线链中有 l 个自旋反转并且 $l \ll N$, 在不考虑自旋反转相邻的情况下, 可以推得波函数固有能量 [8]

$$E^{(l)} = E_g + 2A \sum_{n=1}^l [1 - \cos(k_n a)], \quad (4)$$

其中

$$k_n = \frac{2\pi v_n}{Na}, v_n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N}{2}. \quad (5)$$

各个 k_n 可以有相同的值, 因此 (4) 式可以改写为

$$E^{(l)} = E_g + \sum_k n_k \varepsilon_k,$$

$$\varepsilon_k = 2A[1 - \cos(ka)], \quad (6)$$

并且 $\sum n_k = l$. 当 $ka \ll 1$ 时, 有

$$E^{(l)} \approx E_g + \sum_k n_k A k^2 a^2. \quad (7)$$

可见, 对于上述电子自旋系统, 是一个以本征能量为 $E^{(l)}$ 的平面波的方式进行的, 波矢量是 \mathbf{k} , $A \propto T_c$, 对于通常的铁磁体 $T_c \approx 10^3$ K.

3 传输系数的计算

关于自旋极中子通过非周期和周期磁晶格点阵的传输在文献 [9] 中已有研究; 量子阱中波函数的行为在文献 [10] 中也已有研究. 对于一维 (矩形) 势有限周期性方势垒系统, 在传输系数上电子反自旋发射交换辟裂导致明显的特性差异, 这种特征可用无限周期系统中转换矩阵特征向量的叠加或类布洛赫函数来考虑.

3.1 转换矩阵

把已知量子力学方程平面波的解写为如下形式

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} a_j e^{ik_j x} \\ b_j e^{-ik_j x} \end{pmatrix} \quad x \in X_j, \quad (8)$$

这里 X_j 是数字上为第 j 均匀空间 (层) 区域, 在这系统中一个波矢具有两个不同的波矢值, 即

$$k_j = \sqrt{2(E^{(l)} - U_j)} \quad j = 1, 2; \quad (9)$$

$E^{(l)}$ 为在单位原子中的固有能量, 也即为一维线链中 l 个自旋倒向体系固有能量和相应的波长 $\lambda_j = 12.3/\sqrt{(E^{(l)} - U)/\text{eV}} \text{ \AA}$. 在方程 (8) 中实波函数等于行的线性叠加, 转换通过边界 (在 i 和 j 之间界面点的连续边界条件) 写成矩阵积: $\psi(x+0) = M_{ij}\psi(x-0)$, 或更详细的写为

$$\begin{pmatrix} a_i e^{ik_i x} \\ b_i e^{-ik_i x} \end{pmatrix} = \frac{1}{2k_i} \begin{pmatrix} k_i + k_j & k_i - k_j \\ k_i - k_j & k_i + k_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_j e^{ik_j x} \\ b_j e^{-ik_j x} \end{pmatrix}, \quad (10)$$

其行的线性叠加给出函数关系, 左和右边界差异给出它们的等式, 在 j 层距离为 d 的内部由对角矩阵 $\psi(x+d) = M_j(d)\psi(x)$ 描述, 或

$$\begin{pmatrix} a_j e^{ik_j(x+d)} \\ b_j e^{-ik_j(x+d)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik_j d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_j d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_j e^{ik_j x} \\ b_j e^{-ik_j x} \end{pmatrix} \quad (11)$$

描述. 如果已知某些初始点的值, 那么根据方程 (10) 和 (11) 矩阵乘积就可在任何点对波函数进行计算 [11,12], 从而得到相应的反射和透射波函数的解.

依据转换矩阵状态, 在有限周期系统中转换矩

$$M_l = \frac{1}{4k_1k_2} \begin{pmatrix} e^{ik_1x_1} [(k_2+k_1)^2 e^{ik_2x_2} - (k_2-k_1)^2 e^{-ik_2x_2}] & (k_2^2 - k_1^2) (e^{ik_2x_2} - e^{-ik_2x_2}) \\ -(k_2^2 - k_1^2) (e^{ik_2x_2} - e^{-ik_2x_2}) & e^{-ik_1x_1} [(k_2+k_1)^2 e^{-ik_2x_2} - (k_2-k_1)^2 e^{ik_2x_2}] \end{pmatrix} \quad (12b)$$

矩阵 (12) 的对角化用于计算它的能量. 现在只要找到基特征向量矩阵, 然后组合即得到求解满足边界条件的散射问题的解. 因为, 基矩阵等于 1, 在指数形式中特征向量可记为: $w_{\pm} = \exp(\pm ipl)$, 这里复波数 p 由如下方程定义

$$\cos pl = \cos(k_1x_1 + k_2x_2) - \frac{(k_1 - k_2)^2}{2k_1k_2} \sin k_1x_1 \sin k_2x_2, \quad (13)$$

于是转换矩阵 (12) 的特征向量等于

$$\begin{pmatrix} u(p) \\ v(p) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (k_1 + k_2) [e^{-ik_2x_2} - e^{ipl} e^{ik_1x_1}] e^{-ik_1x_1/2} \\ (k_1 - k_2) [e^{-ik_2x_2} - e^{ipl} e^{-ik_1x_1}] e^{ik_1x_1/2} \end{pmatrix}. \quad (14)$$

反射系数为矩阵的两个特征向量 [$r(p) = v(p)/u(p)$ 和 $r'(-p) = v(-p)/u(-p)$] 振幅的比率, 且由下面等式决定

$$r = r' = \frac{(k_1 - k_2) \sin(pl + k_2x_2 - k_1x_1)/2}{(k_1 + k_2) \sin(pl + k_2x_2 + k_1x_1)/2} = \frac{(k_1 + k_2) \sin(pl - k_2x_2 - k_1x_1)/2}{(k_1 - k_2) \sin(pl - k_2x_2 + k_1x_1)/2}. \quad (15)$$

因而在无限周期系统中, 只要重复转换的结果, 转换矩阵 (12) 的特征向量变得像布洛赫波的幂乘数, 即

$$M_l^m \begin{pmatrix} e^{ik_j\Delta x} \\ r e^{-ik_j\Delta x} \end{pmatrix} = e^{ipml} \begin{pmatrix} e^{ik_j\Delta x} \\ r e^{-ik_j\Delta x} \end{pmatrix}, \quad M_l^m \begin{pmatrix} r' e^{ik_j\Delta x} \\ e^{-ik_j\Delta x} \end{pmatrix} = e^{-ipml} \begin{pmatrix} r' e^{ik_j\Delta x} \\ e^{-ik_j\Delta x} \end{pmatrix}, \quad (16)$$

这里 $\Delta x = x - \bar{x}_j$, 其中 \bar{x}_j 表示 X_j 层的中心 (具有平均的意义). 由方程 (16) 定义的基函数, 在相关的间隔中从给定点周期内的任何整数 m 有 ($\Delta x \rightarrow \Delta x + ml$), 如果复波数 p 有非零的虚部, 那么函数 (16) 式可以被减少和增加的乘数除尽.

阵包含重复单元, 这就是转换矩阵的一个周期 l , 即得转换矩阵

$$M_l = M_1(x_1/2) M_{12} M_2(x_2) M_{21} M_1(x_1/2), \quad (12a)$$

它有如下形式

$$M_l = \begin{pmatrix} (k_2^2 - k_1^2) (e^{ik_2x_2} - e^{-ik_2x_2}) & \\ e^{-ik_1x_1} [(k_2+k_1)^2 e^{-ik_2x_2} - (k_2-k_1)^2 e^{ik_2x_2}] & \end{pmatrix} \quad (12b)$$

全部波函数为两基函数 (16) 式的线性组合, 即

$$\psi(\Delta x + ml) = \begin{pmatrix} [a_j^+ e^{ipml} + a_j^- r' e^{-ipml}] e^{ik_j\Delta x} \\ [a_j^+ r e^{ipml} + a_j^- e^{-ipml}] e^{-ik_j\Delta x} \end{pmatrix}, \quad (17)$$

函数 (17) 式给出了稳态薛定谔方程对势能 U 与任意周期的精确解, 它包含一个自由参数 a_1^+ 或 a_1^- , 另一个因子 a_2^{\pm} 是从标准化得到, 即由方程 (10) 确定. 在 (17) 式中方括号是单元数为 m 的平面波的振幅, 单胞内函数的行为由坐标上的复指数函数描述, 波函数是被分为内和外单元两部分.

3.2 在有限周期系统中的散射

对具有 M 对交叠层 (单元周期) 的系统, 其反射波的滞后由最后反射层决定, 因此 (17) 式列的第二行的振幅变为零, 以及入反射波之间的关系为

$$a_j^- = -a_j^+ r e^{2ipMl}, \quad (18)$$

以此取代 (11) 式, 而得到在 $m = 0$ 的最初层的反射系数, 即反射波振幅为 [(17) 式方括号第二行与衰减波 (11) 式方括号第一行] 的比率.

$$R = \frac{r[1 - \exp(2iMpl)]}{1 - r' \exp(2iMpl)}, \quad (19)$$

(19) 式的结构很简单, 频率为 $\omega = E/h$ 的平面波和波矢 (数) $k_1(\omega)$ 从左边指向第一个垒, 其反射因子为 $r(p(\omega))$ (如图 1 所示). 另一个波以振幅 $\exp(iMpl)$ 到达系统的最后边界和以同样因子 r (但异号) 反射回到第一个垒壁, 从而以 $\exp(iMpl)$ 为倍数的相位再一次改变振幅. 方程 (19) 的分子是两个波的简单和 (差), 考虑分母以多种形式从外部边界反射, 这不在周期系统内散射, 因为它们是本征函数. 周期系统的所有特征是由分布规律 $p(\omega)$ 描述, 散射仅仅在两个外部边界发生. 如果用均匀系统代替周期系统, 譬如: 假设 $x_1 \rightarrow 0$, 那么在通常公

式中方程 (19) 在板的厚度 l 上波数 $p = k_2$ 的多种形式的散射就可被忽略, 于是得到用波数表示的反射系数为

$$r_h = (k_1 - k_2) / (k_1 + k_2), \quad (20)$$

对层 $M \rightarrow \infty$ 的无限系统, 因方程 (19) 中波数 p 非零的虚部很小, 所以指数因子 $\exp(2iMpl) \rightarrow 0$ (或是因很快的振荡) 而消失, 这使我们得到 $R_\infty = r(p)$. 换言之, $r(p)$ 意味为一个半无限周期系统. 在有限周期系统中散射是受反射系数约束, 而无限系统由几何相因子 $\exp(2iMpl)$ 决定.

4 讨论

对具体的铁磁体模型, 假设当层厚 $x_1 = 0.6l$, $x_2 = 0.4l$, 势能 $U_2 = (q_0 r_B)^2 / 2$ (在原子单位中, r_B 为玻尔半径, $q_0 l / \pi = 3$) 时, 由 (13), (15) 和 (19) 式可精确地计算系统的反射系数, 且该结果与平均波数实部函数

$$\langle k \rangle l = k_1 x_1 + k_2 x_2 \quad (21)$$

的解一样, 如图 2 所示. 图中实线和圆线分别表示布洛赫波的实部和虚部. 能隙 (禁带) 出现在幅角为整数 (在有效均匀系统中每周期 l 半波长的整数) 周围. 当动能比势垒低 (这里情况是 $\langle k \rangle l / \pi < q_0 x_1 / \pi = 1.8$) 时, 能隙就很宽; 当动能比势垒高时, 能隙就狭窄. 在带隙内实部 pl/π 保持为

整常数值 (图中水平段). 从图中还可见在带隙内虚部有变化, 此时 $\text{Im}p > 0$, 存在波阻尼; 带隙色散带间没有阻尼, 局域点处 $\text{Im}p = 0$. 对动能在阈值下能隙是很窄的, 而在阈值之上能隙很宽. 细线显示 $\text{Im}k_2 x_2 / \pi$ 值在势垒之下.

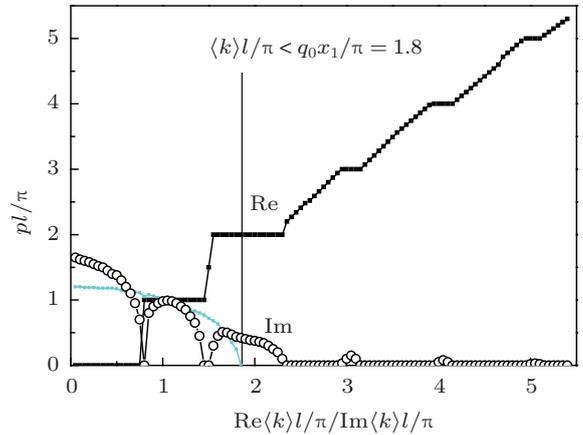


图 2 复布洛赫波数 p 的实部 (实线) 和虚部 (圆线) 与平均波数 $\text{Re}\langle k \rangle / \text{Im}\langle k \rangle$ 的关系

如图 3 所示, 对半无限 (粗实线) 和四势垒 (虚线) 系统的反射系数振幅的模 $R_\infty = r$ 是遵从方程 (15) 的, 为了与一势垒 (细实线) 的反射系数 $|R|$ 振幅模的关系进行比较, 这里也给出了一势垒情形下的反射系数

$$R_1 = \frac{r_h [1 - \exp(2ik_2 x_2)]}{1 - r_h^2 \exp(2ik_2 x_2)}. \quad (22)$$

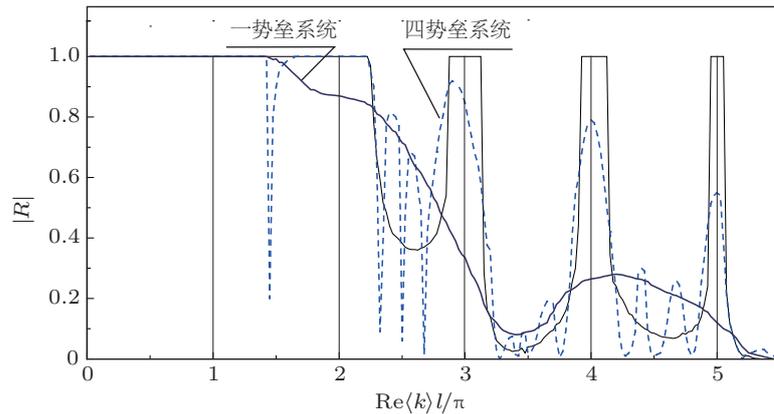


图 3 半无限系统 (实线)、四势垒系统 (虚线) 和一势垒 (细实线) 反射系数 $|R|$ 振幅的模数与均匀系统中一个周期上的半波长数的关系

从图 2 所示可见, 在 $\langle k \rangle l / \pi = 1.8$ 处曲线 (细实线) 出现了中断, 它的发生是由于幅角 $\text{Re}\langle k \rangle l / \pi$ 在这点上所包含的平方根函数 $k_2 x_2 = x_2 \sqrt{k_1^2 - p_0^2}$ 的数值有明显变化的缘故. 在带隙内反射因子 $|r| = 1$ (波不能通过无限系统), 而当在带隙 $|r| < 1$ 时 (波

产生传播). 注意: 对一势垒情形, 反射振幅因子 $|R_1|$ 从接近 1 变到 0; 而四势垒 $|R_4|$ 的值在函数 $|r|$ 的周围变化, 如图 3 中的振荡虚线. 而对于交叠层 M 相应每一个能带都在 $(M - 1 = 3)$ 时 $|r| \rightarrow 0$ (表示绝对透明). 但这种情况从 (19) 式的分子来看, 预期在第

M 层时趋于 0, 可是这种情形是不能实现的, 因为在带隙中分母也下降而趋于零. 在势垒 (< 1.8) 时有一个完全透明的窗口, 然而, 这个窗口非常窄, 所以在给出的范围并不是所有的波信号都能感知 (譬如图 3 所示, 尽管在 $\langle k \rangle l / \pi \approx 1.4$ 位置有清晰的峰).

5 结论

综上所述, 有限周期结构上的散射特征 is 任何自然单色波都有的共同特性, 即固有性质. 在铁磁层系统中, 电子的交换相互作用可用于自旋滤波器.

从图 2 和图 3 可见, 沿波数轴只要有一个小的位移变化都可能导致反射波振幅的强烈变化, 这种变化在自旋方向尤其敏感显著. 事实上, 产生这种变化的原因是因为对一个电子自旋系统来说, 由于沿波数轴移动存在的自旋反转使能量交换增减有较大变化, 继而引起反射系数较大的变化, 而透射和反射是由振幅平方值 $|T|^2 = 1 - |R|^2$ 决定. 这一性质对选择电子束的动能非常有利, 从而在带隙中将更易给出态与自旋方向以及在允许带中电子的反自旋方向. 因此, 交替的非磁性层和铁磁层系统几乎成为一理想的自旋滤波器.

-
- [1] Liang S D, Huang G Y 2012 *Physics B* **407** 3382
 [2] Sulston K W, Burrows B L 2000 *Solid State Commun.* **114** 567
 [3] Lu M W, Yan X H 2006 *Solid State Commun.* **138** 147
 [4] Zhou W P, Yun G H, Liang X X 2009 *Chin. Phys. B* **18** 5496
 [5] Zhou G H, Pan X, Zhu Y F 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 097501 (in Chinese) [周广宏, 潘旋, 朱雨富 2013 物理学报 **62** 097501]
 [6] Liu Y, Peng X P 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 057701
 [7] Bloch F Z 1930 *Physica* **61** 206
 [8] Jiang S T 1993 *Theory of Ferromagnetic* (Beijing: Science Press) p88 (in Chinese) [姜寿亭 1993 铁磁性理论 (北京: 科学出版社) 第 88 页]
 [9] Pedesen F B, Hemmer P C 1994 *Phys. Rev. B* **50** 7724
 [10] Ren S Y 2001 *Phys. Rev. B* **64** 035322
 [11] Pereyra P, Castillo E 2002 *Phys. Rev. B* **65** 205120
 [12] Einevoll G T, Hammer P C, Thomsen J 1990 *Physica B* **42** 3485

Transmission and application of electron spin wave function in alternating ferromagnetic and nonmagnetic layers*

Zheng Yong-Lin^{1)2)†} Wang Xiao-Xi¹⁾ Ge Ze-Ling²⁾ Guo Hong-Li²⁾
Yan Gang-Feng¹⁾ Dai Song-Hui¹⁾ Zhu Xiao-Ling¹⁾ Tian Xiao-Bin¹⁾

1) (*Institute of Electronics and Information Engineering, Chengdu University, Chengdu 610106, China*)

2) (*Institute of Condensed Matter Physics, Yangtze Normal University, Chongqing 408100, China*)

(Received 19 July 2013; revised manuscript received 17 August 2013)

Abstract

We establish a general model of a finite periodic system by n pairs of alternating ferromagnetic and nonmagnetic (FNF) layers. Using Bloch spin wave quantum theory, the basic properties of alternating FNF layers and the dependence of property of electron wave scattering in alternating layers on the number of layers are investigated. It is found that an electron wavefunction in the system can be expressed as the superposition of eigenvectors of a transfer matrix or Bloch-like functions in an infinite periodic system. From this function we can obtain an exact solution for monochromatic wave scattering of a system with an arbitrary number of layers. On this basis, the dependences of reflection and transmission coefficients on energy for the electron wavefunction in a periodic system are determined. The calculation of spectral window shows that its energy position and width are the same as those of almost full reflection region. The system can be used as spin filter due to high-energy dispersion and dependence of exchange energy on electron spin direction.

Keywords: multilayer film of magnetic, ferromagnetic and nonmagnetic structure, electron wave scattering, spin filter of electron

PACS: 77.55.Nv, 75.40.Gb, 75.70.Cn, 75.30.Et

DOI: 10.7498/aps.62.227701

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11205022) and the Science and Technology Foundation of the Education Committee of Chongqing, China (Grant Nos. KJ061305, KJ081307)

† Corresponding author. E-mail: zhyong303@163.com