

อภินันทนาการ



สำนักหอสมุด

รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

โครงการ สภาพนำไฟฟ้าของโครงสร้างผสม เฟอร์โรแมกเนติก/ฉนวน/

เฟอร์โรแมกเนติก ในแบบจำลองแลททิส



โดย

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.เอก จันท๊ะยอด

สำนักหอสมุด มหาวิทยาลัยพระนคร
วันลงทะเบียน - 1 ส.ค. 2562
เลขทะเบียน 10 20709
เลขเรียกหนังสือ 0 0c .
361

.5
01575
2560

กันยายน 2560

บทคัดย่อ

งานวิจัยนี้ศึกษาเชิงทฤษฎีของสภาพนำไฟฟ้าและสปินโพลาริซ์เซชันของกระแสไฟฟ้าผ่านโครงสร้างผสมเฟอร์โรแมกเนติกในระบบหนึ่งมิติ โดยพิจารณาการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนแบบแลทธิสร์ร่วมกับวิธีการกระเจิงในทางกลศาสตร์ควอนตัม ซึ่งได้คำนวณหาเงื่อนไขที่เหมาะสมระหว่างรอยต่อของโครงสร้างเพื่อคำนวณค่าการทะลุผ่านและการสะท้อนกลับของอนุภาค รวมถึงการใช้สมการลานดาวน์เออร์ในการคำนวณหาสภาพนำไฟฟ้า ซึ่งจะพิจารณาผลกระทบของรอยต่อแบบปกติและแบบสามารถกลับทิศของสปินได้ รวมทั้งผลกระทบของความสามารถในการกระโดดข้ามแลทธิสของอนุภาคทั้งกับแลทธิสที่หนึ่งและแลทธิสลำดับที่สอง โดยแสดงผลการคำนวณออกมาในเชิงตัวเลข ซึ่งพบว่า สภาพนำไฟฟ้าที่เกิดขึ้นสามารถวัดว่าค่าทั้งสภาพนำไฟฟ้าของอิเล็กตรอนและของโฮล โดยจะมีค่าเพิ่มขึ้นเมื่อมีการไบแอสพลังงานที่เพิ่มขึ้น และมีเพิ่มขึ้นอย่างรวดเร็วเมื่อไบแอสพลังงานเท่ากับพลังงานส่วนน้อยของเฟอร์โรแมกเนติก เมื่อพิจารณาผลของกำแพงศักย์ พบว่าสภาพนำไฟฟ้าจะลดลงเมื่อกำแพงศักย์เพิ่มขึ้น แต่เมื่อพิจารณาการกระเจิงที่รอยต่อแบบสามารถกลับทิศของสปินได้ พบว่าสภาพนำไฟฟ้าจะเพิ่มขึ้นเมื่อการกระเจิงแบบปกติ และการกระเจิงแบบสามารถกลับทิศของสปินได้มีค่าใกล้เคียงกัน นอกจากนี้ งานวิจัยยังได้พิจารณาถึงความสามารถในการกระโดดข้ามแลทธิสของอนุภาค พบว่าเมื่ออนุภาคมีโอกาสกระโดดข้ามแลทธิสได้มากขึ้นจะทำให้สภาพนำไฟฟ้าเพิ่มขึ้นอีกด้วย

ซึ่งความรู้ที่ได้จากโครงการวิจัยนี้สามารถนำไปใช้เป็นแนวทางในการออกแบบอุปกรณ์ที่มีรอยต่อดังกล่าวเป็นส่วนประกอบ

Abstract

This work theoretically study the conductance and the spin polarization of current in a ferromagnetic heterostructure in one-dimension by using a tight binding approximation and a scattering method. We calculated the suitable conditions in the interface between a metal and a ferromagnetic junction to find the tunneling transmission and reflection probabilities, in addition, we then used the Landauer formula to calculate the conductance spectrum. We focus on the effect of the scattering potential on the interface of the junction and the hopping energy for both nearest neighbor and the next nearest neighbor on the conductance spectrum.

It was found that the conductance spectrum changes slope at the bias voltage that reached the bottom of the minority band and the top of the majority band of the ferromagnetic. The conductance spectrum was suppressed for all energies when either the non-spin-flip or spin-flip scattering at the interface increased. However, the conductance spectrum can be enhanced when the interface was taken into account for the appropriate value of the spin-flip and non-spin-flip scattering. In addition, the conductance can be increased by increasing the next-nearest neighbor hopping energy in the ferromagnetic material.

This findings in this project can be used to help design spintronic devices that contain these types of interface.

Executive Summary

การพัฒนาอุปกรณ์ที่ใช้คุณสมบัติของสปินของพาหะไฟฟ้าหรือที่เรียกว่า อุปกรณ์สปินทรอนิกส์ กำลังได้รับความนิยมในการค้นคว้าวิจัยอย่างแพร่หลาย และเป็นแรงบันดาลใจให้เกิดงานวิจัยจำนวนมาก ทั้งด้านการทดลองและทางทฤษฎีที่เกี่ยวกับการขนส่งพาหะทางไฟฟ้าที่มีค่าสปินไม่เป็นศูนย์ ซึ่งพาหะไฟฟ้าดังกล่าวมักอยู่ในสสารประเภทที่มีความเป็นแม่เหล็ก และสารกึ่งตัวนำที่มีการคู่ควบกันของสปินกับวงโคจร ซึ่งส่วนใหญ่แล้วอุปกรณ์สปินทรอนิกส์จะประกอบไปด้วยสสารหลายชั้นเพื่อให้ได้คุณสมบัติทางไฟฟ้าที่ดีขึ้น ดังนั้นจึงอาจเกิดปัญหาการช่องว่างระหว่างสสารที่ประกอบเป็นโครงสร้างผสมเกิดขึ้น แล้วส่งผลทำให้พาหะนำไฟฟ้าลดลงหรือเปลี่ยนแปลงไปในทางที่แย่ลง ดังนั้นการศึกษาและพัฒนาผลกระทบที่เกิดขึ้นกับโครงสร้างผสมจึงจำเป็นอย่างยิ่งเพื่อจะได้นำไปพัฒนาและออกแบบอุปกรณ์ให้มีประสิทธิภาพยิ่งขึ้น

งานวิจัยนี้ศึกษาเชิงทฤษฎีของสภาพนำไฟฟ้าและสปินโพลาไรซ์เซชันของกระแสไฟฟ้าผ่านโครงสร้างผสมโลหะและเฟอร์โรแมกเนติกในระบบหนึ่งมิติ โดยพิจารณาการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนแบบแลทธิสร่วมกับวิธีการกระเจิงในทางกลศาสตร์ควอนตัม ซึ่งได้คำนวณหาเงื่อนไขที่เหมาะสมระหว่างรอยต่อของโครงสร้างเพื่อคำนวณหาค่าการทะลุผ่านและการสะท้อนกลับของอนุภาค รวมถึงการใช้สมการลานดาร์นเออร์ในการคำนวณหาสภาพนำไฟฟ้า ซึ่งจะพิจารณาผลกระทบของรอยต่อแบบปกติและแบบสามารถกลับทิศของสปินได้ รวมทั้งผลกระทบของความสามารถในการกระโดดข้ามแลทธิสของอนุภาคทั้งกับแลทธิสที่หนึ่งและแลทธิสลำดับที่สอง โดยแสดงผลการคำนวณออกมาในเชิงตัวเลข ซึ่งพบว่า สภาพนำไฟฟ้าที่เกิดขึ้นสามารถวัดว่าค่าทั้งสภาพนำไฟฟ้าของอิเล็กตรอนและของโฮล โดยจะมีค่าเพิ่มขึ้นเมื่อมีการไบแอสพลังงานที่เพิ่มขึ้น และมีเพิ่มขึ้นอย่างรวดเร็วเมื่อไบแอสพลังงานเท่ากับพลังงานส่วนน้อยของเฟอร์โรแมกเนติก เมื่อพิจารณาผลของกำแพงศักย์ พบว่าสภาพนำไฟฟ้าจะลดลงเมื่อกำแพงศักย์เพิ่มขึ้น แต่เมื่อพิจารณาการกระเจิงที่รอยต่อแบบสามารถกลับทิศของสปินได้ พบว่าสภาพนำไฟฟ้าจะเพิ่มขึ้นเมื่อการกระเจิงแบบปกติ และการกระเจิงแบบสามารถกลับทิศของสปินได้มีค่าใกล้เคียงกัน นอกจากนี้

งานวิจัยยังได้พิจารณาถึงความสามารถในการกระโดดข้ามแลททิซของอนุภาค พบว่าเมื่ออนุภาคมีโอกาสกระโดดข้ามแลททิซได้มากขึ้นจะทำให้สภาพนำไฟฟ้าเพิ่มขึ้นอีกด้วย

ความรู้ที่ได้จากโครงการวิจัยนี้สามารถนำไปใช้เป็นแนวทางในการออกแบบอุปกรณ์ที่มีรอยต่อดังกล่าวเป็นส่วนประกอบ โดยงานวิจัยนี้ได้ตีพิมพ์ผลลัพธ์ที่ได้ลงในวารสารวิชาการระดับนานาชาติที่อยู่ในฐานข้อมูล ISI หรือ Quartile ที่ 2 (Physica B: Condensed Matter) ที่มีค่า Impact factor 1.386 ชื่อเรื่อง "Tight binding calculation of tunneling conductance of a metal/ferromagnetic junction"



สารบัญ

เรื่อง	หน้า
บทนำ	1
เอกสารที่เกี่ยวข้อง	3
แบบจำลองและวิธีการคำนวณ	6
ผลและอภิปรายผล	11
สรุปผล	21
เอกสารอ้างอิง	22
ผลลัพธ์จากโครงการวิจัย	23
ภาคผนวก	



กิตติกรรมประกาศ

ผู้วิจัยขอขอบพระคุณ กองทุนอุดหนุนการวิจัย จากงบประมาณรายได้ของมหาวิทยาลัยนเรศวร ปีงบประมาณ 2559 เป็นอย่างยิ่ง โครงการวิจัยนี้ไม่สามารถสำเร็จลุล่วงไปได้หากผู้วิจัยไม่ได้รับการสนับสนุนจากทุนดังกล่าว นอกจากนี้ผู้วิจัยขอขอบคุณ รศ.ดร.พวงรัตน์ ไพเราะ และ ดร.อัจฉรา กาอ้าย ที่ให้คำปรึกษา คำแนะนำที่ดี เป็นประโยชน์อย่างยิ่งที่ทำให้โครงการนี้สำเร็จได้ด้วยดี และขอขอบคุณ ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ ที่เอื้อหนุนสถานที่ทำวิจัยเป็นอย่างดี



เอก จันทะยอด

กันยายน 2560

บทนำ

ปัจจุบันนี้อุปกรณ์ทางอิเล็กทรอนิกส์เป็นส่วนหนึ่งที่สำคัญต่อการสื่อสารในชีวิตประจำวันของมนุษย์เรา หากเราสามารถพัฒนาอุปกรณ์เหล่านี้ให้มีประสิทธิภาพดียิ่งขึ้นก็จะส่งผลต่อความสะดวก รวดเร็ว แม่นยำ ในการสื่อสารด้วยเช่นกัน หลักการทำงานของอุปกรณ์เหล่านี้มีพื้นฐานมาจากความรู้ ความเข้าใจฟิสิกส์ของสสารประเภทต่างๆ เช่น โลหะ สารเฟอร์โรแมกเนติก สารกึ่งตัวนำ และสารตัวนำยิ่งยวด นักฟิสิกส์พบว่าหากสร้างระบบโครงสร้างผลสมที่ประกอบด้วยสสารดังกล่าวจะสามารถเพิ่ม ประสิทธิภาพการนำไฟฟ้าของอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ให้ดียิ่งขึ้น [1-6] ซึ่งความเข้าใจเกี่ยวกับการขนส่งถ่ายเท ประจุไฟฟ้าข้ามรอยต่อระหว่างสสารเหล่านี้มีความจำเป็นอย่างยิ่ง และนำไปสู่การออกแบบ พัฒนา อุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ต่างๆ

ที่ผ่านมาได้มีการนำเสนองานวิจัยทางทฤษฎีของพาหะนำไฟฟ้าข้ามรอยต่อของ โลหะ/เฟอร์โรแมกเนติก ในหนึ่งมิติ สองมิติ และ สามมิติ [7] ซึ่งกลุ่มวิจัยนี้พบว่าโครงสร้างความเป็นมิติของรอยต่อดังกล่าว มีผลต่อสภาพนำไฟฟ้าที่ได้แตกต่างกัน รวมถึงโครงสร้างผลสมอื่นๆ เช่น FM/I/FM ได้ถูกนำเสนอโดย Julliere [8] และ Stonczewski [9] โดยจำลองการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนแบบต่อเนื่องเพื่อพิจารณาค่า สภาพนำไฟฟ้าทะลุผ่านรอยต่อ FM/I/FM โดย I คือฉนวนบางที่พิจารณาเป็นครั้งแรกเดลต้าฟังก์ชัน [10] ซึ่งพวกเขาได้แนะนำว่าควรพิจารณาค่าความต้านทานแม่เหล็กขนาดใหญ่ ที่มีผลกระทบของความไม่เป็น อิสระของสปินด้วยที่บริเวณรอยต่อ [11-14] เช่น การค้นพบสารที่มีการคู่ควบกันของสปินกับวงโคจร แบบรีซบา [13] ซึ่งเกิดจากความไม่สมมาตรกันของโครงสร้างสสาร เมื่อพิจารณาคณสมบัติของสสารนี้ที่ รอยต่อของโครงสร้างผลสม เช่น สารเฟอร์โรแมกเนติก/สารตัวนำยิ่งยวด [15-16] มีผลทำให้จุดสูงสุดของ สภาพนำไฟฟ้าเปลี่ยนแปลง หรือรอยต่อของโลหะ/ระบบที่มีการคู่ควบสปินกับวงโคจรแบบรีซบา [17-18] โลหะ/ระบบที่มีการคู่ควบสปินกับวงโคจรแบบเดรสเซลฮอส [19] โลหะ/เฟอร์โรแมกเนติก [7] พบว่าเมื่อ การพิจารณารอยต่อที่มีทั้งการกระเจิงของสปินแบบกลับเปลี่ยนทิศทางได้และไม่ได้ ด้วยขนาดที่ใกล้เคียง กัน จะทำให้สภาพนำไฟฟ้ามีค่าสูงสุด จะเห็นว่าการพิจารณาผลกระทบที่รอยต่อ มีความสำคัญต่อ ประสิทธิภาพของสภาพนำไฟฟ้าและสปินโพลาริเซชันของระบบอย่างมาก และปัจจุบันก็ยังไม่มียานวิจัยที่ สามารถเพิ่มประสิทธิภาพการไหลของอิเล็กตรอนและสปินได้อย่างสมบูรณ์ ซึ่งก็ยังเป็นปัญหาที่นักวิจัย ต้องคิดค้นและพัฒนาต่อไป

ในงานวิจัยที่ได้กล่าวมาข้างต้นได้ศึกษาาระบบโครงสร้างผลสมโดยใช้แบบจำลองแบบต่อเนื่อง (Continuous model) ในการอธิบายคุณสมบัติของประจุไฟฟ้า เช่น ฮามิลโตเนียน แถบพลังงาน ลักษณะการเคลื่อนที่ เป็นต้น แต่แบบจำลองนี้ไม่จำกัดโอกาสในการเคลื่อนที่ของอนุภาค ซึ่งในทางทฤษฎี นั้นยังมีแบบจำลองที่มีความเสมือนจริงมากกว่าแบบจำลองต่อเนื่อง นั่นคือ แบบจำลองแลตทิส (Lattice model or Tight binding model) ถึงแม้จะมีนักวิจัยบางกลุ่มที่ศึกษากระแสไฟฟ้าไหลผ่านโครงสร้าง ผลสมดังกล่าวด้วยแบบจำลองแลตทิส แต่ได้พิจารณาระบบที่มีลักษณะเป็นควินตัมไวร์ (วัสดุนาโนที่ โครงสร้าง 2 มิติ อีก 1 มิติมีขนาดเล็กมาก) [20-23] และได้คำนวณหาเงื่อนไขขอบเขตที่รอยต่อภายใต้

ฟังก์ชันกรีน (Green's function) ซึ่งเป็นการสมมุติให้รอยต่อมีคุณภาพที่แย่มาก แต่จากผลวิจัยที่ผ่านมาพบว่าคุณภาพของรอยต่อมีอิทธิพลต่อพาหะนำไฟฟ้าและสปินโพลาริเซชันเป็นอย่างมาก [7, 15-19, 24-25] รวมถึงในการทดลองจริงๆ เราสามารถทำให้รอยต่อมีคุณภาพที่ดีขึ้นได้ หมายความว่าเราสามารถพิจารณาคุณภาพรอยต่อตั้งแต่คุณภาพดีเยี่ยมไปจนถึงคุณภาพแย่มากที่มีต่อพาหะนำไฟฟ้าและสปินผ่านโครงสร้างผสมต่างๆ ได้ ซึ่งจะเห็นว่าการศึกษาเกี่ยวกับสปินและพาหะไฟฟ้ายังไม่สามารถอธิบายได้อย่างกระจ่างแจ้ง

ดังนั้นในงานวิจัยนี้จะศึกษาทฤษฎีของการส่งผ่านของพาหะนำไฟฟ้าของโครงสร้างผสมที่ประกอบด้วยสารสารเฟอร์โรแมกเนติกสองชนิด โดยจะใช้การจำลองการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนแบบจำลองแลตทิส (Lattice model or Tight binding model) ในระบบหนึ่งมิติ และสองมิติ รวมถึงข้อได้เปรียบของแบบจำลอง เช่น ความหนาแน่นสถานะ (density of states) โอกาสในการเคลื่อนที่ไปยังตำแหน่งอื่น (nearest-neighbor and next nearest-neighbor hopping energy) แถบพลังงาน (energy band) เป็นต้น ทั้งนี้ในงานวิจัยจะคำนวณหาเงื่อนไขขอบเขตที่เหมาะสมของรอยต่อพร้อมทั้งพิจารณาตัวแปรที่อธิบายถึงคุณภาพของรอยต่อตั้งแต่คุณภาพดีเยี่ยมจนถึงคุณภาพที่แย่ง ที่มีต่อพฤติกรรมของการขนส่งประจุไฟฟ้าและสปินของระบบที่ประกอบด้วยโครงสร้างดังกล่าว เพื่อวิธีการควบคุมและจัดการกับการขนส่งของพาหะไฟฟ้าให้มีประสิทธิภาพสูงสุด และเป็นประโยชน์ต่อการนำไปสู่การออกแบบอุปกรณ์สปินทรอนิกส์ที่มีขนาดเล็ก และประมวผลด้วยความรวดเร็ว

จากผลการวิจัย เราพบว่าค่าสภาพนำไฟฟ้าที่เกิดขึ้นของโครงสร้างผสมนี้ซึ่งจำลองการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนเป็นแบบแลตทิสมีลักษณะคล้ายกับการจำลองโครงสร้างแบบพิจารณาอิเล็กตรอนเคลื่อนที่อิสระทั้งผลของการรบกวนจากกำแพงศักย์แบบมีการกลับทิศของสปินและกำแพงศักย์แบบปกติที่บริเวณรอยต่อของโครงสร้างผสมนี้ ยิ่งกว่านั้น การจำลองอิเล็กตรอนแบบแลตทิสสามารถพบค่าสภาพนำไฟฟ้าของโฮลซึ่งจะให้ผลกระทบบางอย่างออกมาในลักษณะตรงกันข้ามกับอิเล็กตรอน ดังนั้นเราจึงได้วิเคราะห์ผล นำองค์ความรู้ใหม่นี้เขียนเป็นบทความวิจัยส่งตีพิมพ์ลงในวารสารระดับนานาชาติ 1 เรื่อง (Physica B: Condensed Matter) ชื่อเรื่อง *Tight binding calculation of tunneling conductance of a metal/ferromagnetic junction*

เอกสารที่เกี่ยวข้อง

งานวิจัยนี้ศึกษาเชิงทฤษฎีการขนส่งของอนุภาคและสปินในโครงสร้างผลสมสองมิติที่อยู่ในระนาบ xz ซึ่งจะประกอบด้วย สารเฟอร์โรแมกเนติก/ฉนวน/สารเฟอร์โรแมกเนติก ดังรูปที่ 1 ซึ่งจะใช้วิธีการจำลองอิเล็กตรอนแบบแลททิซเพื่ออธิบายคุณสมบัติต่างๆ ของอนุภาคและสปินในแต่ละชั้นของโครงสร้างผลสม ในงานวิจัยจะเน้นถึงปัญหาของคู่ที่ไม่เหมาะสมกันระหว่างรอยต่อของสสารและการจำกัดของโอกาสในการเคลื่อนที่ของพาหะไฟฟ้าในหนึ่งมิติและสองมิติ โดยการหาวิธีการและเงื่อนไขขอบเขตที่เหมาะสมเพื่อคำนวณหาความน่าจะเป็นในการทะลุผ่านของพาหะไฟฟ้าข้ามรอยต่อของระบบผลสมโดยพิจารณาที่อุณหภูมิศูนย์เคลวิน



รูปที่ 1 รูปวาดโครงสร้างผลสมที่ประกอบด้วยสารเฟอร์โรแมกเนติก/ฉนวน/สารเฟอร์โรแมกเนติกในแบบจำลองแลททิซจตุรัสที่มีค่าคงที่แลตทิซ a อยู่ในระนาบ xz โดยที่ n และ m แสดงถึงจำนวนหลักและแถวตามลำดับ

การมีคุณสมบัติทางแม่เหล็กสามารถจำแนกประเภทของโลหะตามสมบัติแม่เหล็กได้เป็นประเภทดังนี้ 4

1. สารที่มีสมบัติเป็นไดอะแมกเนติก (diamagnetism) เป็นสารที่มีอิเล็กตรอนภายในอะตอมอยู่เป็นคู่โดยมีทิศทางตรงกันข้ามกัน ถ้านำสารนี้ไปวางไว้ในสนามแม่เหล็ก มันจะถูกผลักโดยสนามแม่เหล็กที่นำไปวางแต่ถูกเหนี่ยวนำไปในทิศทางตรงกันข้ามกับสนามแม่เหล็กที่เหนี่ยวนำตัวอย่างสารประเภทนี้ได้แก่ Pb, Bi และ Cu เป็นต้น

2. สารที่มีสมบัติเป็นพาราแมกเนติก (paramagnetism) เป็นสารที่ถูกดูดโดยสนามแม่เหล็กที่นำไปวาง สมบัตินี้ของสารเกิดจากการที่อะตอมของสารมีอิเล็กตรอนเดี่ยวอยู่ใกล้เคียงกัน และอิเล็กตรอนเหล่านี้มีทิศทางไปทางเดียวกัน ตัวอย่างสารประเภทนี้ได้แก่ Cr , Mn เป็นต้น

3. สารที่มีสมบัติเป็นเฟอร์โรแมกเนติก (ferromagnetism) ถ้านำสารประเภทนี้ไปวางในสนามแม่เหล็กจะถูกดูดอย่างแรง ทั้งนี้เพราะอะตอมของสารดังกล่าวมีอิเล็กตรอนเดี่ยวและอยู่เรียงกันเป็นจำนวนมาก นอกจากนี้อิเล็กตรอนเหล่านี้ยังมีทิศทางไปทางเดียวกันด้วย ตัวอย่างสารประเภทนี้ได้แก่ Fe , Co , Ni และโลหะผสม เช่น Cu_2MnAl เป็นต้น

4. สารที่มีสมบัติเป็นแอนติเฟอร์โรแมกเนติก (anti-ferromagnetism) เป็นสารที่อะตอมต่างๆ อยู่เรียงกันเช่นเดียวกับสารที่เป็นเฟอร์โรแมกเนติก แต่การจัดเรียงตัวเป็นไปในลักษณะที่หักล้างแมกเนติกโมเมนต์ซึ่งกันและกัน จึงทำให้แมกเนติกโมเมนต์ลดลง

คุณสมบัติทางแม่เหล็กดังกล่าวหากอธิบายในทางทฤษฎีทางกลศาสตร์ควันตัมแล้วสามารถเขียนฮามิลโตเนียนของอิเล็กตรอนในระบบสองมิติที่อธิบายระบบของสสารเฟอร์โรแมกเนติกในแบบจำลองอิเล็กตรอนแบบแลตทิส (lattice model) ได้ดังนี้

ส่วนฮามิลโตเนียนของอิเล็กตรอนในระบบสองมิติที่มีส่วนของการคู่ควบสปินกับวงโคจรแบบรัชาในแบบจำลองอิเล็กตรอนแบบแลตทิสสามารถเขียนได้ดังนี้

$$H_{FM} = \sum_{nm\sigma} (\epsilon_{nm\sigma} \pm \epsilon_{ex} \vec{m} \cdot \vec{\sigma}) C_{nm\sigma}^\dagger C_{nm\sigma} - t \sum_{nm\sigma} (C_{n+1,m\sigma}^\dagger C_{nm\sigma} + C_{n,m+1,\sigma}^\dagger C_{nm\sigma} + c.c.) \quad (4)$$

เมื่อ n และ m แสดงถึงจำนวนหลักและแถวตามลำดับ

m^* คือ มวลยังผล

\vec{m} คือ แมกเนโตเซชันในสารเฟอร์โรแมกเนติก

P คือ โมเมนต์

$C_{ij\sigma}^\dagger$ ($C_{ij\sigma}$) คือ ตัวดำเนินการสร้าง (ทำลาย) ของอิเล็กตรอน

σ คือ เพลสเมตริกซ์

$\epsilon_{nm\sigma}$ คือ พลังงานจลน์ของอิเล็กตรอน ณ ตำแหน่ง nm

ε_{ex} คือ พลังงานที่ถูกปรับเปลี่ยนลดหรือเพิ่ม

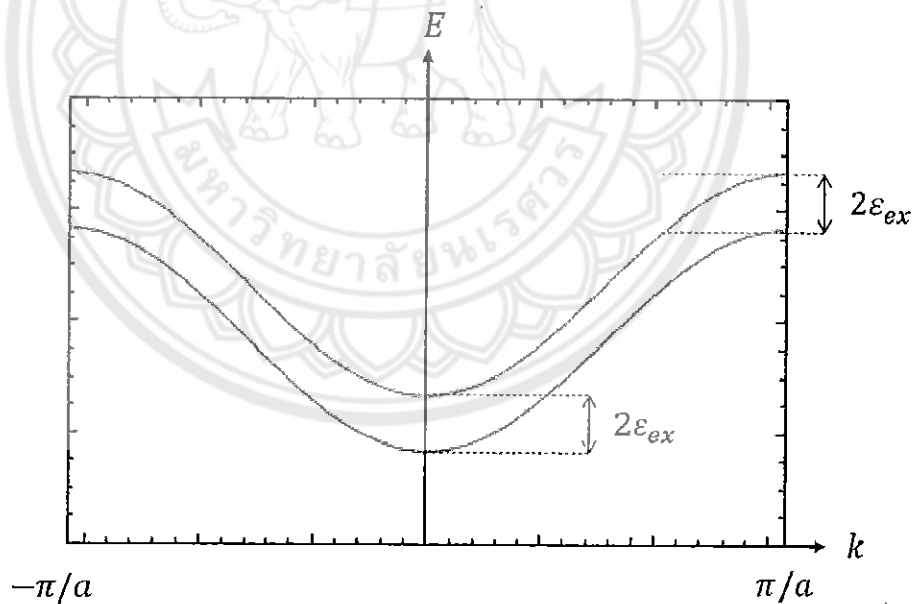
$t = \hbar^2/2m^*a$ คือ พลังงานในการส่งผ่านไปยังอิเล็กตรอนตัวอื่น (hopping energy) แบบไม่แลกเปลี่ยนสปิน ซึ่งจะพิจารณาที่ใกล้ที่สุดอันดับแรกและลำดับที่สอง

c.c. คือ คอมเพล็กซ์คอนจูเกต

จากฮามิลโตเนียนนี้สามารถคำนวณหาแถบพลังงานของระบบได้ดังนี้

$$E_{FM}(k) = \varepsilon_{FM} \pm \varepsilon_{ex} - 2t(\cos k_x a + \cos k_z a) \quad (5)$$

เครื่องหมาย \pm แสดงถึงแถบพลังงานที่ปรับเปลี่ยนเพิ่มขึ้นและลดลงดังแสดงในรูปที่ 2 ส่วน k_x และ k_z คือเวกเตอร์คลื่นในทิศทาง x และ z ตามลำดับ



รูปที่ 2 รูปวาดของแถบพลังงานที่เพิ่มขึ้น (เส้นสีแดง) และแถบพลังงานที่ลดลง (เส้นสีน้ำเงิน) ของระบบเฟอร์โรแมกเนติก ε_{ex} คือพลังงานที่ถูกปรับเปลี่ยนเพิ่มขึ้นและลดลง

แบบจำลองและวิธีการคำนวณ

เพื่อสะดวกต่อการเขียนบทความผู้วิจัยขอเขียนบรรยายเป็นภาษาอังกฤษ

The simplest tight binding approximation is a method used to approximate the electronic properties in a normal metal and a ferromagnetic material in a chain lattice site (see Fig 1), which is obtained by discretizing the free

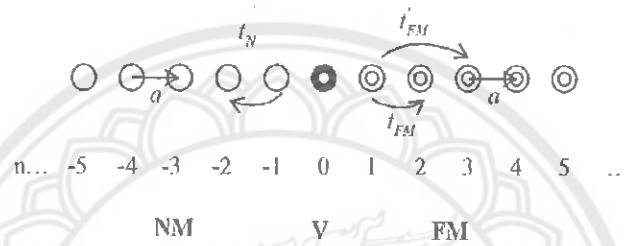


Figure 1: Schematic illustration of the chain lattice junction of a normal metal/ferromagnetic, a is a lattice constant of the system. The t_N is the nearest neighbor hopping energy of a metal, t_{FM} and t'_{FM} are respectively the nearest neighbor and the next-nearest neighbor hopping energy of a ferromagnetic.

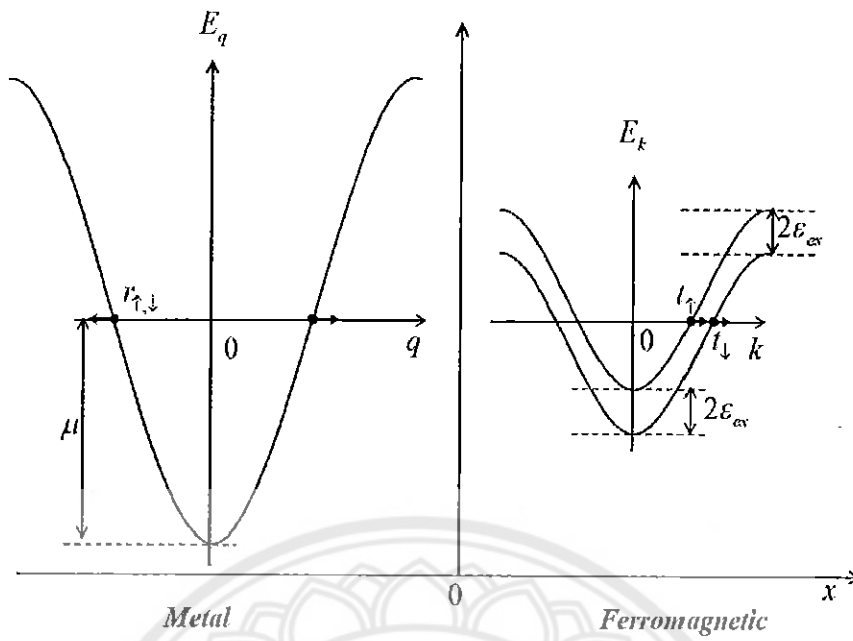


Figure 2: Sketches of the energy dispersion of the electron in the metal (left) and the ferromagnetic system (right). Where $|k|$ and $|q|$ are between $-\pi/a$ and π/a .

electron Hamiltonian: $p^2/2m + \varepsilon_{ex}\hat{m}\hat{\sigma}_z$, where m is the electron mass, p is the electron momentum, ε_{ex} is the exchange splitting energy, \hat{m} is the magnetization direction in a ferromagnetic, and σ_z is the Pauli's spin matrices. In this work, we assume that the electron can move to the nearest-neighbor and next-nearest neighbor. It can be written as;

$$H_{FM} = \sum_{n\sigma} (\varepsilon_{n\sigma} - \varepsilon_{ex}\hat{m}\hat{\sigma}_z - \mu) C_{n\sigma}^\dagger C_{n\sigma} - t_{FM} \sum_{n\sigma} (C_{n+1,\sigma}^\dagger C_{n\sigma} + H.C.) - t'_{FM} \sum_{n\sigma} C_{n+2,\sigma}^\dagger C_{n\sigma} + H.C., \quad (1)$$

where the subscripts n indicate the row indices of the chain lattice. The $C_{n\sigma}^\dagger$ ($C_{n\sigma}$) is the creation (annihilation) operator of an electron at index (n) at lattice site with spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$, $\varepsilon_{n\sigma}$ is the on-site energy, t_{FM} is the hopping energy (nearest neighbor) for the lattice constant a (see Fig.2), μ is the chemical potential, t'_{FM} denotes the next-nearest neighbor hopping energy. For a metal, there is no exchange energy term and t_{FM} becomes t_N . Using the Fourier transform to generalize the Hamiltonian, we obtained the eigenstates and eigenvalues using standard quantum mechanics method, thus obtaining the energy dispersion relationship of an electron in a FM system as

$$E(\mathbf{k}) = (\varepsilon_{FM} - \mu \pm \varepsilon_{ex}) - 2t_{FM} \cos(k_x a) - 2t'_{FM} \cos(2k_x a) \quad (2)$$

where k_x is the wave vector in the x direction. The energy dispersion relationship is shown in Fig.2. Using the BTK model [32], the electron wave function as a function of energy E in the metal is written as a linear combination of the incident momentum and reflected states for the same energy. In the absence of an applied magnetic field, we write the two cases of the

wave function in the metal as

$$U_{N,1}(n) = \left[e^{iq_x an} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + e^{-iq_x an} \begin{pmatrix} r_{1\downarrow} \\ r_{1\uparrow} \end{pmatrix} \right] \quad (3)$$

$$U_{N,2}(n) = \left[e^{iq_x an} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + e^{-iq_x an} \begin{pmatrix} r_{2\downarrow} \\ r_{2\uparrow} \end{pmatrix} \right], \quad (4)$$

where $q_x = \frac{1}{a} \cos^{-1}(\frac{\epsilon_N - E}{2t_N})$ is the wave vector along the x direction with $|q_x| < \pi/a$. The $r_{j\sigma}$ is the reflection amplitudes of the spin- σ state in case j . The wave functions in the FM region consists of a linear combination of the two transmitted states which can be written as,

$$U_{FM}(n) = \left[t_{\uparrow j} e^{ik_{\uparrow}^x an} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + t_{\downarrow j} e^{ik_{\downarrow}^x an} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right], \quad (5)$$

where $j = 1, 2$ refers to the different incoming states in a metal, $t_{\uparrow, \downarrow}$ corresponds to the transmission amplitudes of up-spin and down-spin, respectively in case j , and $k_{\uparrow, \downarrow}^x a$ was defined from Eq.(2) as

$$\cos(k_{\uparrow, \downarrow}^x a) = \sqrt{\frac{1}{2} + \left(\frac{t_{FM}}{4t'_{FM}} \right)^2 - \frac{1}{4t'_{FM}} (E - \epsilon_{FM} + \mu \mp \epsilon_{ex}) - \frac{t_{FM}}{4t'_{FM}}}. \quad (6)$$

The plus and minus signs are for the up-spin and down-spin wave vectors in a ferromagnetic, respectively. All wave functions must have a positive group velocities. We now develop a suitable way to calculate the boundary conditions of our junction by adopting the procedure for a metal/superconductor junction in a lattice model [33]. In each region, we have to set a different equation to describe both bulk states of a normal metal and a ferromagnetic. These equations provide the matching conditions for the two wave functions $U_N(n)$ and $U_{FM}(n)$ at the interface.

$$t_N[U_{FM}(0) - U_N(0)] + 2t'_{FM}U_{FM}(0) = 0, \quad (7)$$

$$t_N U_N(-1) - (t_{FM} + 2t'_{FM}) U_{FM}(-1) + V U_{FM}(0) = 0, \quad (8)$$

where the matrix V is $\begin{pmatrix} V_0 & V_F \\ V_F & V_0 \end{pmatrix}$. The diagonal elements of V from now on mean $V_0 = V_{\uparrow\uparrow} = V_{\downarrow\downarrow}$, which is a non-spin-flip scattering at the potential barrier of the junction. The off-diagonal elements are denoted by $V_F = V_{\uparrow\downarrow} = V_{\downarrow\uparrow}$, which means the spin-flip interfacial scattering. Finally, the reflection and transmission probabilities can be calculated as explained in Ref.[24]. Eventually, the conductance spectra in the one-dimensional system at zero temperature can be written as,

$$G(eV) = \frac{e^2 a}{2\pi} T(eV). \quad (9)$$



ผลการคำนวณ

This work uses a lattice model to look at the effect of the non-spin-flip and spin-flip scattering potentials at the interface on the reflection and transmission probabilities and the conductance spectrum. The conductance spectra were plotted as a function of energy with units of $e^2a/2\pi$.

The fundamental electronic properties of the junction can be understood by the transmission and reflection probabilities. We set the parameters in the following discussion. We first ignored the next-nearest-neighbor in the system and set the nearest neighbor hopping energy of the ferromagnetic as $t_{FM} = 0.2t_N$ to ensure that there will be a particle available to tunnel into the ferromagnetic for all energy. Here, we are not interested in the effect that the exchange splitting energy (ε_{ex}) in the FM has on the transmission and reflection probability, so it is set to $0.2t_N$. When the ε_{ex} is large, the space between the minority and majority band of the ferromagnetic is also larger.

The transmission and the reflection probabilities as a function of a bias voltage can be seen in Fig 3 and Fig 4. The probability was zero until the bias voltage was the same value as the bottom of the FM majority band. The probability increased with higher bias voltage until the bias voltage was the same as the bottom of the minority band, the probabilities then showed the first kink. The onset of transmission and reflection probability to the first kink equals $2\varepsilon_{ex}$. Also, the second kink of the transmission and reflection probability occurred at the top of the majority band of the FM, the probabilities they became zero when the bias voltage reached the top of the minority band. Similarly, this effect can be seen in the conductance spectra in Fig 5.

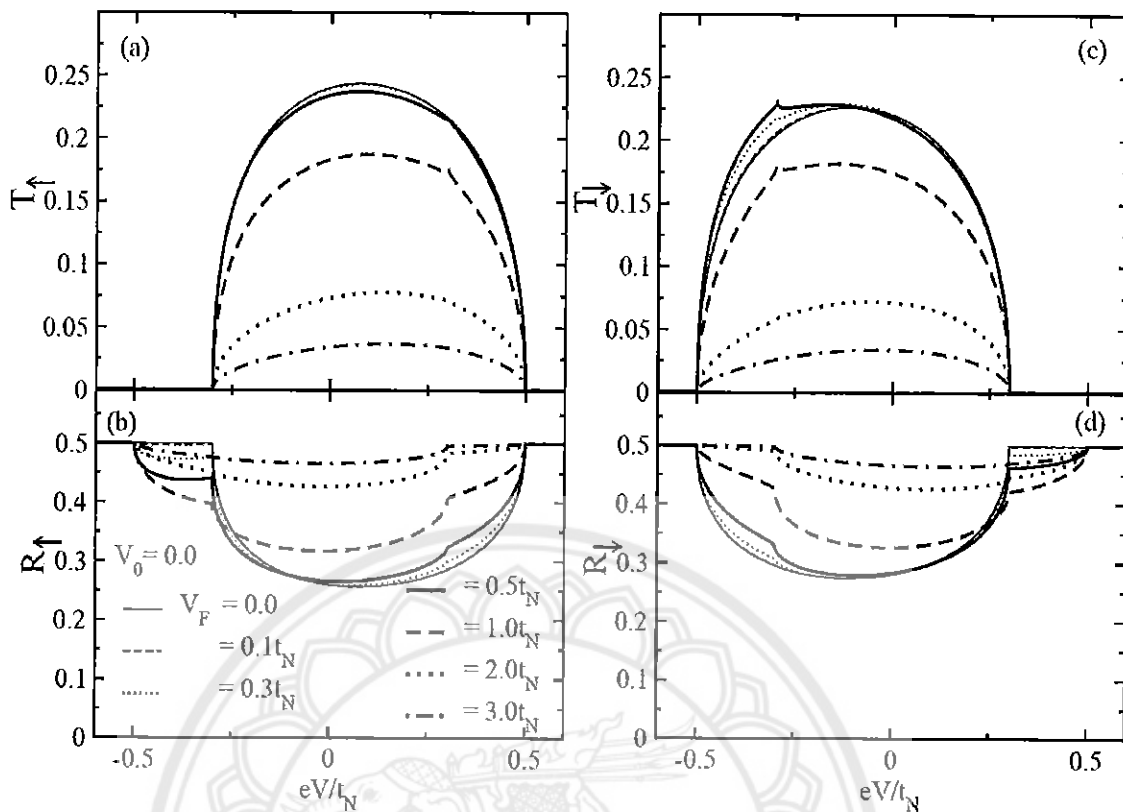


Figure 3: Plots of electrons transmission probabilities with spin-up (T_{\uparrow}) and spin-down (T_{\downarrow}) and electrons reflection probabilities with spin-up (R_{\uparrow}) and spin-down (R_{\downarrow}) as a function of energy eV with different value of spin-flip scattering (V_F) when a non-spin-flip scattering (V_0) is vanished. It ignored the next-nearest neighbor and the parameter t_{FM} is $0.2t_N$.

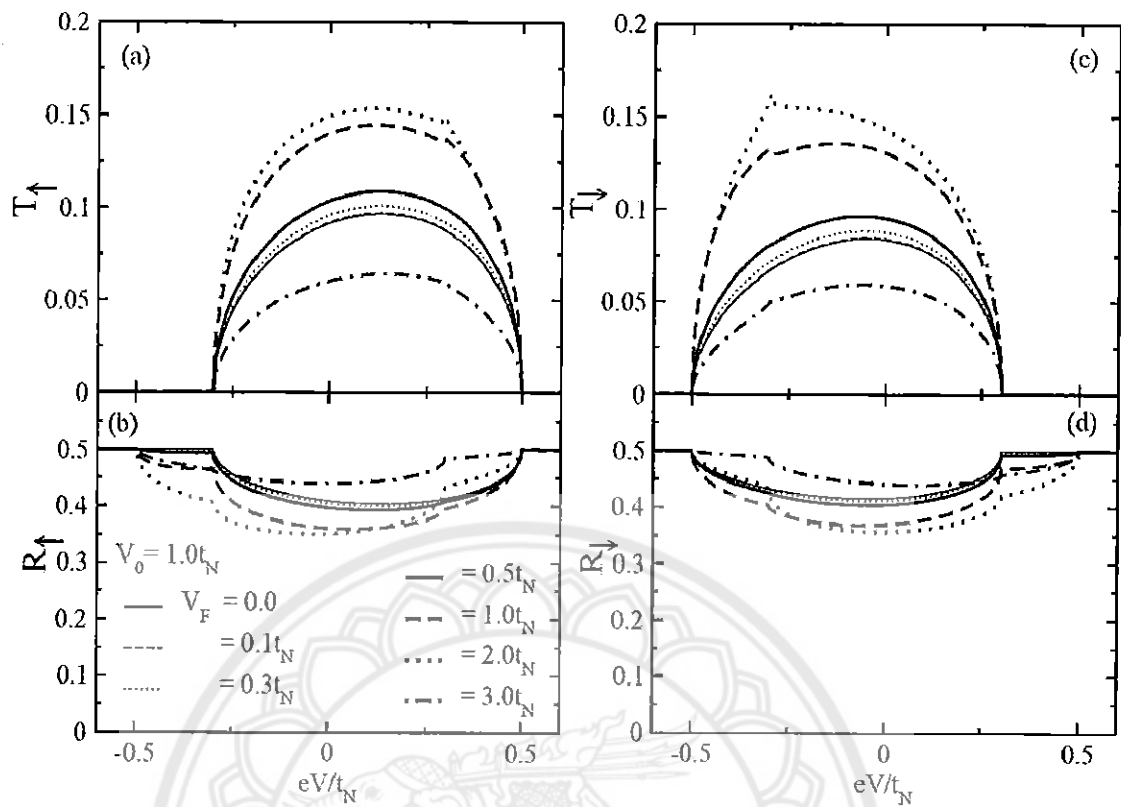


Figure 4: Plots of electrons transmission probabilities with spin-up (T_{\uparrow}) and spin-down (T_{\downarrow}) and electrons reflection probabilities with spin-up (R_{\uparrow}) and spin-down (R_{\downarrow}) as a function of energy eV with different value of spin-flip scattering (V_F) when a non-spin-flip scattering is a tunneling limit ($V_0 = 1.0t_N$), t_{FM} is ignored and $t_{FM} = 0.2t_N$.

Interfacial scattering generally reduces the tunneling conductance. We showed the plot of the transmission and reflection probabilities for both spin up and spin down as a function of the energy with the different values of the non-spin-flip (V_0) and spin-flip scattering (V_F), in Fig 3. In order to see the effect of the V_F and V_0 on the transmission and reflection probabilities, we separate the figure into two cases: (i) where V_0 is small to mimic an ohmic contact and (ii) where the V_0 is large for a tunneling limit contact. Fig 3, shows the T_\uparrow , T_\downarrow , R_\uparrow , and R_\downarrow for the applied voltage that dominates for all ferromagnetic's energy under this model. The V_0 is set to be zero and the V_F was varied. It was found that the T_\uparrow and T_\downarrow were normally decreased by increasing the V_F . While the R_\uparrow and R_\downarrow show two different regions, the first one is for the energies near the bottom of the ferromagnetic band. The R_\uparrow first increases as V_F increases, but then R_\uparrow will start to decrease with higher V_F values. The second region is for the energy near the top of the band, the R_\downarrow was normally increased. One can see that the R_\downarrow behaves in an opposite fashion to the R_\uparrow . This behavior is caused by the different nature of electron-like and hole-like particles.

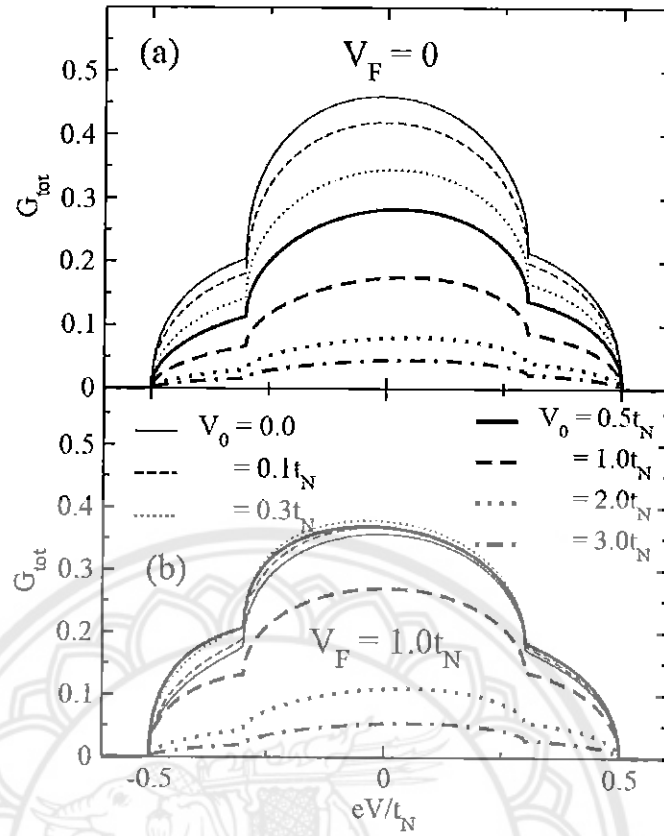


Figure 5: Plots of the conductance spectra as a function of energy with different V_0 for (a) $V_F = 0$ and for (b) $V_F = 1.0t_N$. The t'_{FM} is ignored and $t_{FM} = 0.2t_N$.

In a tunneling limit junction, the V_0 is large and the V_F increased, as shown in Fig 4. Two kinds of scattering potential affect the transport properties of the junction as T_{\uparrow} and T_{\downarrow} either increase or decrease when the V_F was enhanced, namely, they were enhanced with increasing V_F until it reached a maximum value at the suitable condition of V_F , it then decreased again when the V_F increased. While, the R_{\uparrow} and R_{\downarrow} were suppressed with increasing V_F until it reached a minimum level at the value of the V_F , after that they increased again.

Next we consider the conductance spectrum that was determined from the calculated physical quantities of the junction. In Fig 5, the total conductance spectrum (G_T) is shown where V_F is zero (see Fig 5a). It can be seen that the conductance spectrum decreased as the V_0 was increased as expected. When the V_F was increased (see Fig 5b), the G_T either enhanced or suppressed. To clarify the effect of V_0 and V_F on G_T , we plotted G_T as a function of V_F by varying V_0 for a constant bias voltage ($eV = -0.4t_N, 0, \text{ and } 0.4t_N$) near the bottom, middle, and top of the FM band (see Fig 6). When V_0 and V_F were increased under the appropriate condition, the G_T rose to a maximum value. The effect of interfacial scattering at this junction is not the same as that in the metal/Rashba system [24] as (i) the non-spin-flip scattering potential can affect the conductance at the energy reached by the kinks (the conductance showed a short, sharp dip downwards). The conductance in the metal/Rashba system does not show this behavior. (ii) The kink in the hole-conductance of the system showed a dip-like behavior when the V_F was included. While, the hole-conductance of a metal/Rashba system showed an upward pointing kink.

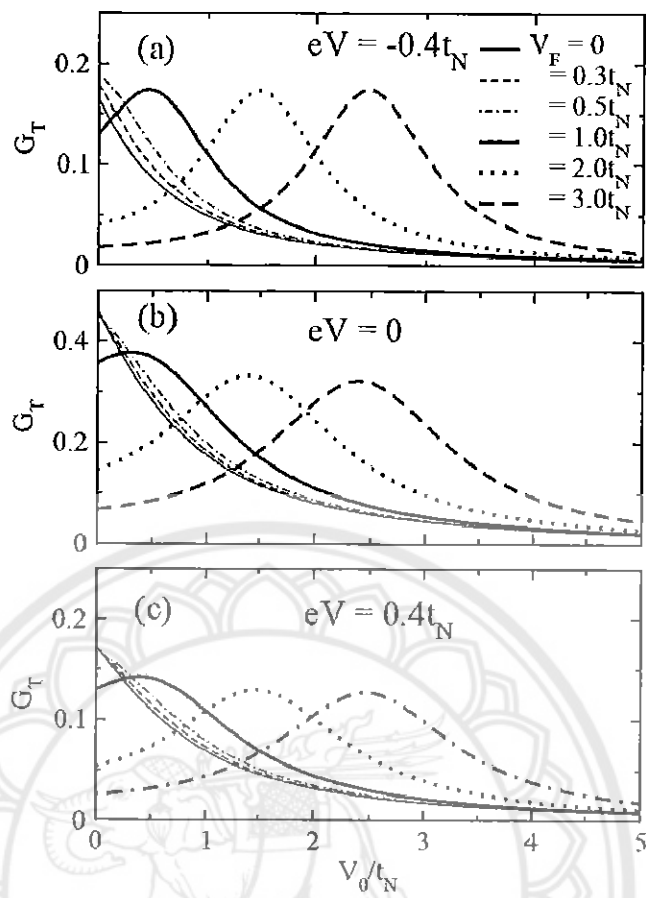


Figure 6: The total conductance spectra at a constant energy $eV = -0.4t_N$, $eV = 0$, and $eV = 0.4t_N$, plots as a function of a non-spin-flip scattering (V_0) for different V_F . The t'_{FM} is ignored and $t_{FM} = 0.2t_N$.

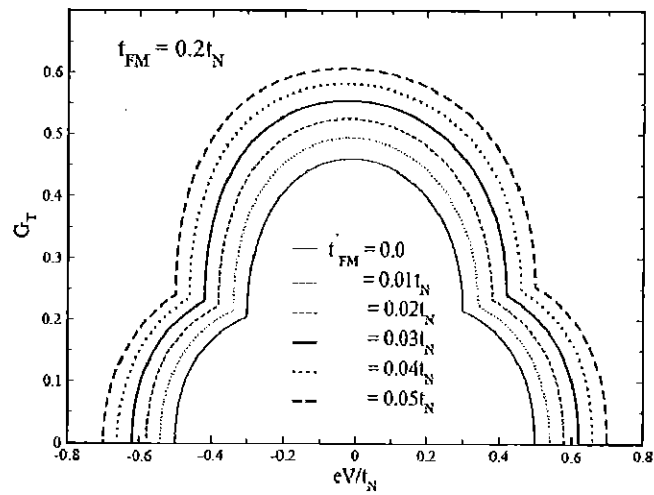


Figure 7: Plots of the conductance spectra as a function of energy with different a next-nearest neighbor hopping energy of a FM (t'_{FM}), this plot set $t_{FM} = 0.2t_N$ and ignored the effect of scattering potentials.



The hopping energy limits the rate that particles can move to an adjacent lattice site. It controls the bandwidth and curvature of the band; as the hopping energy decreases, the bandwidth and curvature of the band also decreases. We also considered the effect of the hopping energy mismatch on the conductance spectra. A difference in hopping energy was found to be similar with the difference in the effective mass in a continuous model that is defined by $t = \hbar^2/2ma^2$. The hopping energy is a small value, while the relevant effective mass trend to be large. Here, we set the nearest neighbor hopping energy in a metal to be equivalent to a ferromagnetic and we only considered the next-nearest neighbor in a ferromagnetic material as depicted in Fig 7. It was found that the energy dispersion range was expanded when the t'_{FM} was increased. However, the distance between the onset and the first kink of the conductance spectrum (also the second kink and the offset conductance) did not change as it only depended on the exchange energy. The effect of both scattering potentials was also considered on the conductance. We plotted G_T as a function of V_0 as shown in Fig 8a. Again, in the case of $V_F = 0$, when the junction was a perfect barrier potential, the G_T had a maximal value and then it decreased when the value of V_0 was high. The next-nearest neighbor hopping energy was set to a large value that resulted in an increase of G_T . Also, the G_T reached a maximum value when the V_F and V_0 were increased as seen in Fig 8b. Furthermore, the next-nearest neighbor hopping energy was increased, resulting in an increase of G_T .

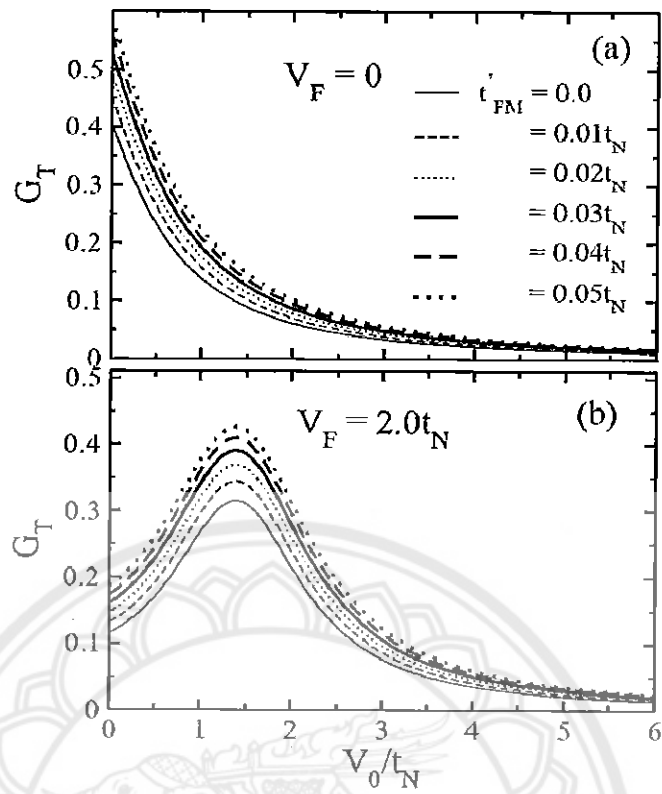
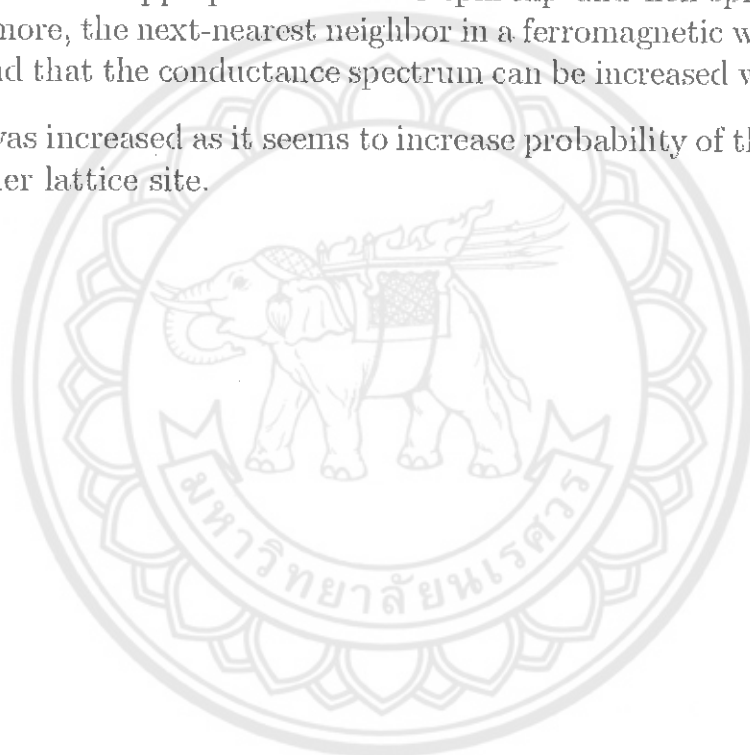


Figure 8: The total conductance spectra at a constant energy $eV = 0$, plots as a function of a non-spin-flip scattering V_0 for (a) $V_F = 0$ and for (b) $V_F = 2.0t_N$. The t'_{FM} in this plot is varied and $t_{FM} = 0.2t_N$.

สรุปผล

A theory of tunneling spectroscopy of a metal/ferromagnetic junction was presented within a chain lattice model. The appropriate boundary conditions at the interface were calculated to describe the properties of particles in our junction. The numerical solution results of electron- and hole-tunneling conductance was considered under the effect of a non-spin-flip and spin-flip scattering potential. It was found that the conductance spectrum had characteristic kinks at the energy equivalent of the bottom of the minority band and the top of the majority band of the ferromagnetic. An increasing in either spin-flip or non-spin-flip scattering caused the conductance to decrease. However, the conductance can be enhanced when the interface was taken into account for the appropriate value of spin-flip and non-spin-flip scattering. Furthermore, the next-nearest neighbor in a ferromagnetic was considered. It was found that the conductance spectrum can be increased when the hopping energy was increased as it seems to increase probability of the particle moving to another lattice site.



เอกสารอ้างอิงของโครงการวิจัย

1. T. Miyazaki, T. Yaoi, and S. Ishio, *J. Magn. Magn. Mater.* 98, L7 (1991); T. Miyazaki and N. Tezuka, *ibid.* 139, L231 (1995).
 2. J. S. Moodera, Lisa R. Kinder, Terrilyn M. Wong, and R. Meservey, *Phys. Rev. Lett.* 74, 273 (1995).
 3. J. S. Moodera and Lisa R. Kinder, *J. Appl. Phys.* 79, 4724 (1996).
 4. M. Oestreich, *Nature (London)* 402 (1999) 735.
 5. I. Zutic, J. Fabian, and S. D. Sarma, *Rev. Mod. Phys.* 76 (2004) 323.
 6. S. A. Wolf, et. al, *Science* 294 (2001) 1488.
 7. K. Pasanai and P. Pairor, *Phys. Rev. B* 84, 224432 (2011).
 8. M. Julliere, *Phys. Lett.* 54A, 225 (1975).
 9. J. C. Slonczewski, *Phys. Rev. B* 39, 6995 (1989).
 10. J. M. MacLaren, X.-G. Zhang, and W. H. Butler, *Phys. Rev. B* 56, 11 827 (1997).
 11. R. Y. Gu, D. Y. Xing, and J. Dong, *J. Appl. Phys.* 80, 7163 (1996).
 12. G. E. Blonder, M. Tinkham, and T. M. Klapwijk, *Phys. Rev. B* 25, 4515 (1982).
 13. E. I. Rashba, *Fiz. Tverd. Tela* 2, 1224 (1960), *Solid state Ionics* 2, 1109 (1960).
 14. Y. A. Bychhov and E. I. Rashba, *J. Phys. C* 17, 6039 (1984).
 15. B. Lv, *Eur. Phys. J. B* 83, 493-497 (2011).
 16. S. Wu and K. V. Samokhin, *Phys. Rev. B* 81, 214506 (2010).
 17. B. Srisongmuang, P. Pairor and M. Berciu, *Phys. Rev. B* 78, 155317 (2008).
 18. A. Jantayod and P. Pairor, *Physica E*. 48 111 (2013).
 19. A. Jantayod, *Superlattices and Microstructures*, 64 78 (2013).
 20. F. Mireles and G. Kirczenow, *Phys. Rev. B* 64, 024426 (2001).
 21. Z. H. Yang, J. Wang, and K. S. Chan, *Supercond. Sci. Technol.* 22, 055012 (2009).
 22. J. Wang, K. S. Chan, and D. Y. Xing, *Phys. Rev B* 73, 033316 (2006).
 23. M. Yamamoto, T. Ohtsuki, and B. Kramer, *Phys. Rev B* 72, 115321 (2005).
 24. A. F. Andreev, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 46, 1823 (1964), *Sov. Phys. JETP* 19, 1228 (1964).
 25. T. P. Pareek and P. Bruno, *Phys. Rev B* 65, R241305 (2002).
-

ผลลัพธ์ที่ได้จากงานวิจัย

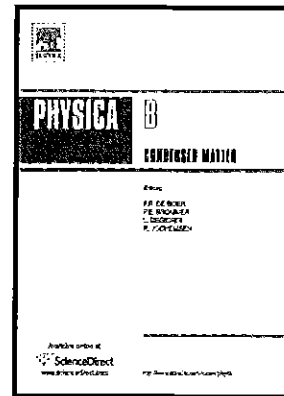
งานวิจัยนี้เป็นงานวิจัยพื้นฐาน เพื่อสร้างองค์ความรู้ใหม่ เพราะฉะนั้นจะมีประโยชน์อย่างมากสำหรับนักวิจัยหรือนิสิต นักศึกษา ที่สนใจค้นคว้าหาความรู้ที่เป็นประโยชน์ในการพัฒนาศักยภาพของตนเอง รวมถึงนักทดลองซึ่งสามารถนำความรู้ที่ได้เพื่อเป็นแนวทางในการออกแบบอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ในอนาคต ในงานวิจัยนี้ค้นพบองค์ความรู้ใหม่ซึ่งได้ตีพิมพ์ผลงานวิจัยลงในวารสารระดับนานาชาติจำนวน 1 ฉบับ ซึ่งเป็นวารสารที่อยู่ในฐานข้อมูล ISI หรือ Quartile ที่ 2 มีค่า Impact factor 1.386 (Physica B: Condensed Matter) ชื่อเรื่อง "Tight binding calculation of tunneling conductance of a metal/ferromagnetic junction" โดยมี ผศ.ดร.เอ จันทะยอด เป็นผู้เขียน



Author's Accepted Manuscript

Tight binding calculation of tunneling conductance
of a metal/ferromagnetic junction

Aek Jantayod



PII: S0921-4526(17)30573-2
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.physb.2017.08.080>
Reference: PHYSB310220

To appear in: *Physica B: Physics of Condensed Matter*

Received date: 16 January 2017

Revised date: 24 August 2017

Accepted date: 29 August 2017

Cite this article as: Aek Jantayod, Tight binding calculation of tunneling conductance of a metal/ferromagnetic junction, *Physica B: Physics of Condensed Matter*, <http://dx.doi.org/10.1016/j.physb.2017.08.080>

This is a PDF file of an unedited manuscript that has been accepted for publication. As a service to our customers we are providing this early version of the manuscript. The manuscript will undergo copyediting, typesetting, and review of the resulting galley proof before it is published in its final citable form. Please note that during the production process errors may be discovered which could affect the content, and all legal disclaimers that apply to the journal pertain.



Tight binding calculation of the tunneling conductance of a metal/ferromagnetic junction

ว.ศ. 2562

Aek Jantayod

Department of Physics, Faculty of Science, Naresuan University, Phitsanulok 65000, Thailand

Research Center for Academic Excellence in Applied Physics, Faculty of Science, Naresuan University, Phitsanulok 65000, Thailand

Abstract

A tight binding approximation was used to describe the electronic properties of a metal/ferromagnetic junction in a one-dimensional system. The appropriate boundary conditions were calculated to describe the quality of the interface, the non-spin-flip and spin-flip scattering potential. The BTK model was used to compute the reflection and transmission probabilities, and the Landauer formulation was used to calculate the conductance spectrum. It was found that the conductance spectrum changes slope at the bias voltage that reached the bottom of the minority band and the top of the majority band of the ferromagnetic. The conductance spectrum was suppressed for all energies when either the non-spin-flip or spin-flip scattering at the interface increased. However, the conductance spectrum can be enhanced when the interface was taken into account for the appropriate value of the spin-flip and non-spin-flip scattering. In addition, the conductance can be increased by increasing the next-nearest neighbor hopping energy in the ferromagnetic material.

Keywords: A metal/ferromagnetic junction, Tight binding approximation, Tunneling conductance, Lattice model

Email address: aekj@nu.ac.th (Aek Jantayod)

1. Introduction

In recent years, the study of tunneling of electron charge and spin transport across a magnetic tunnel junctions (MTJs) has been extensively researched [1, 2, 3, 4, 5]. This research has been conducted to produce future electronics devices, known as the spin-electronics or spintronics devices [6, 7, 8, 9]. The MTJs are promising candidates for inclusion in magnetic random access memory, magnetic filed sensor and quantum computing devices. These devices use the magnetic properties of the tunnel junction between a nonmagnetic metal and a magnetic material [4, 6, 8]. A key objective of this field is to obtain a high spin current from a ferromagnetic tunnel junction by using the magnetization direction properties of the magnetic material [10, 11]. However, there is a considerable problem of determining the spin polarization from the interface between two materials, which is called the conductivity mismatch, resulting in poor spin injection from a ferromagnetic into a semiconductor [12, 13, 14, 15, 16]. Amazingly, the efficiency of spin injection could be enhanced by the insertion of a thin insulator barrier at the interface between the two materials [13, 14].

In addition, embedding magnetic impurities ions at the interface between the magnetic and non-magnetic metal can cause spin-flip scattering, resulting in a significant change of the spin current and spin accumulation in the vicinity of the interface [17, 18, 19, 20, 21, 22]. The study of the effect of these two kinds of interface scattering on the charge and spin transport are published. For instance, the heterostructure consists of a metal/Rashba spin-orbit coupling junction [23, 24, 25], a metal/ferromagnetic junction [26, 27], a metal/cubic semiconductor with Dresselhaus spin-orbit coupling junction [28], and a ferromagnetic/ferromagnetic/ferromagnetic double junction [29]. They found that the conductance spectrum could be enhanced when the interface consists of an equal value for non-spin-flip and spin-flip scattering. Similarly, the tunneling magnetoresistance of a ferromagnetic/non-magnetic metal/ferromagnetic double junction was studied [30, 31]. They found that an asymmetry between the interface spin-flip strengths of spin-up and spin-down electrons can result in an enhancement of the tunnel magnetoresistance. From these studies it can be seen that the interface properties play an important role in determining the efficiency of both charge and spin transport through the heterostructure.

This work explores the single band tight binding model with a scattering method, which takes into account the quantum effect at the single-particle

level. We also find the appropriate boundary condition which consists of two kinds of interfacial scattering in the metal/ferromagnetic junction to calculate the transmission and reflection probabilities along with the conductance spectrum at zero temperature.

2. Model and Assumptions

The simplest tight binding approximation is a method used to approximate the electronic properties in a normal metal and a ferromagnetic material in a chain lattice site (see Fig 1), which is obtained by discretizing the free electron Hamiltonian: $p^2/2m + \varepsilon_{ex}\hat{m}\hat{\sigma}_z$, where m is the electron mass, p is the electron momentum, ε_{ex} is the exchange splitting energy, \hat{m} is the magnetization direction in a ferromagnetic, and $\hat{\sigma}_z$ is the Pauli's spin matrices. In this work, we assume that the electron can move to the nearest-neighbor and next-nearest neighbor. It can be written as;

$$H_{FM} = \sum_{n\sigma} (\varepsilon_{n\sigma} - \varepsilon_{ex}\hat{m}\hat{\sigma}_z - \mu) C_{n\sigma}^\dagger C_{n\sigma} - t_{FM} \sum_{n\sigma} (C_{n+1,\sigma}^\dagger C_{n\sigma} + H.C.) - t'_{FM} \sum_{n\sigma} C_{n+2,\sigma}^\dagger C_{n\sigma} + H.C., \quad (1)$$

where the subscripts n indicate the row indices of the chain lattice. The $C_{n\sigma}^\dagger$ ($C_{n\sigma}$) is the creation (annihilation) operator of an electron at index (n) at lattice site with spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$, $\varepsilon_{n\sigma}$ is the on-site energy, t_{FM} is the hopping energy (nearest neighbor) for the lattice constant a (see Fig.2), μ is the chemical potential, t'_{FM} denotes the next-nearest neighbor hopping energy. For a metal, there is no exchange energy term and t_{FM} becomes t_N . Using the Fourier transform to generalize the Hamiltonian, we obtained the eigenstates and eigenvalues using standard quantum mechanics method, thus obtaining the energy dispersion relationship of an electron in a FM system as

$$E(\mathbf{k}) = (\varepsilon_{FM} - \mu \pm \varepsilon_{ex}) - 2t_{FM} \cos(k_x a) - 2t'_{FM} \cos(2k_x a) \quad (2)$$

where k_x is the wave vector in the x direction. The energy dispersion relationship is shown in Fig.2. Using the BTK model [32], the electron wave function as a function of energy E in the metal is written as a linear combination of the incident momentum and reflected states for the same energy. In the absence of an applied magnetic field, we write the two cases of the

barrier of the junction. The off-diagonal elements are denoted by $V_F = V_{\uparrow\downarrow} = V_{\downarrow\uparrow}$, which means the spin-flip interfacial scattering. Finally, the reflection and transmission probabilities can be calculated as explained in Ref.[24]. Eventually, the conductance spectra in the one-dimensional system at zero temperature can be written as,

$$G(eV) = \frac{e^2 a}{2\pi} T(eV). \quad (9)$$

3. Results and Discussions

This work uses a lattice model to look at the effect of the non-spin-flip and spin-flip scattering potentials at the interface on the reflection and transmission probabilities and the conductance spectrum. The conductance spectra were plotted as a function of energy with units of $e^2 a / 2\pi$.

The fundamental electronic properties of the junction can be understood by the transmission and reflection probabilities. We set the parameters in the following discussion. We first ignored the next-nearest-neighbor in the system and set the nearest neighbor hopping energy of the ferromagnetic as $t_{FM} = 0.2t_N$ to ensure that there will be a particle available to tunnel into the ferromagnetic for all energy. Here, we are not interested in the effect that the exchange splitting energy (ϵ_{ex}) in the FM has on the transmission and reflection probability, so it is set to $0.2t_N$. When the ϵ_{ex} is large, the space between the minority and majority band of the ferromagnetic is also larger.

The transmission and the reflection probabilities as a function of a bias voltage can be seen in Fig 3 and Fig 4. The probability was zero until the bias voltage was the same value as the bottom of the FM majority band. The probability increased with higher bias voltage until the bias voltage was the same as the bottom of the minority band, the probabilities then showed the first kink. The onset of transmission and reflection probability to the first kink equals $2\epsilon_{ex}$. Also, the second kink of the transmission and reflection probability occurred at the top of the majority band of the FM, the probabilities they became zero when the bias voltage reached the top of the minority band. Similarly, this effect can be seen in the conductance spectra in Fig 5.

Interfacial scattering generally reduces the tunneling conductance. We showed the plot of the transmission and reflection probabilities for both spin up and spin down as a function of the energy with the different values of the non-spin-flip (V_0) and spin-flip scattering (V_F), in Fig 3. In order to see the

effect of the V_F and V_0 on the transmission and reflection probabilities, we separate the figure into two cases: (i) where V_0 is small to mimic an ohmic contact and (ii) where the V_0 is large for a tunneling limit contact. Fig 3, shows the T_\uparrow , T_\downarrow , R_\uparrow , and R_\downarrow for the applied voltage that dominates for all ferromagnetic's energy under this model. The V_0 is set to be zero and the V_F was varied. It was found that the T_\uparrow and T_\downarrow were normally decreased by increasing the V_F . While the R_\uparrow and R_\downarrow show two different regions, the first one is for the energies near the bottom of the ferromagnetic band. The R_\uparrow first increases as V_F increases, but then R_\uparrow will start to decrease with higher V_F values. The second region is for the energy near the top of the band, the R_\downarrow was normally increased. One can see that the R_\downarrow behaves in an opposite fashion to the R_\uparrow . This behavior is caused by the different nature of electron-like and hole-like particles.

In a tunneling limit junction, the V_0 is large and the V_F increased, as shown in Fig 4. Two kinds of scattering potential affect the transport properties of the junction as T_\uparrow and T_\downarrow either increase or decrease when the V_F was enhanced, namely, they were enhanced with increasing V_F until it reached a maximum value at the suitable condition of V_F , it then decreased again when the V_F increased. While, the R_\uparrow and R_\downarrow were suppressed with increasing V_F until it reached a minimum level at the value of the V_F , after that they increased again.

Next we consider the conductance spectrum that was determined from the calculated physical quantities of the junction. In Fig 5, the total conductance spectrum (G_T) is shown where V_F is zero (see Fig 5a). It can be seen that the conductance spectrum decreased as the V_0 was increased as expected. When the V_F was increased (see Fig 5b), the G_T either enhanced or suppressed. To clarify the effect of V_0 and V_F on G_T , we plotted G_T as a function of V_F by varying V_0 for a constant bias voltage ($eV = -0.4t_N, 0, \text{ and } 0.4t_N$) near the bottom, middle, and top of the FM band (see Fig 6). When V_0 and V_F were increased under the appropriate condition, the G_T rose to a maximum value. The effect of interfacial scattering at this junction is not the same as that in the metal/Rashba system [24] as (i) the non-spin-flip scattering potential can affect the conductance at the energy reached by the kinks (the conductance showed a short, sharp dip downwards). The conductance in the metal/Rashba system does not show this behavior. (ii) The kink in the hole-conductance of the system showed a dip-like behavior when the V_F was included. While, the hole-conductance of a metal/Rashba system showed an upward pointing kink.

The hopping energy limits the rate that particles can move to an adjacent lattice site. It controls the bandwidth and curvature of the band; as the hopping energy decreases, the bandwidth and curvature of the band also decreases. We also considered the effect of the hopping energy mismatch on the conductance spectra. A difference in hopping energy was found to be similar with the difference in the effective mass in a continuous model that is defined by $t = \hbar^2/2ma^2$. The hopping energy is a small value, while the relevant effective mass trend to be large. Here, we set the nearest neighbor hopping energy in a metal to be equivalent to a ferromagnetic and we only considered the next-nearest neighbor in a ferromagnetic material as depicted in Fig 7. It was found that the energy dispersion range was expanded when the t'_{FM} was increased. However, the distance between the onset and the first kink of the conductance spectrum (also the second kink and the offset conductance) did not change as it only depended on the exchange energy. The effect of both scattering potentials was also considered on the conductance. We plotted G_T as a function of V_0 as shown in Fig 8a. Again, in the case of $V_F = 0$, when the junction was a perfect barrier potential, the G_T had a maximal value and then it decreased when the value of V_0 was high. The next-nearest neighbor hopping energy was set to a large value that resulted in an increase of G_T . Also, the G_T reached a maximum value when the V_F and V_0 were increased as seen in Fig 8b. Furthermore, the next-nearest neighbor hopping energy was increased, resulting in an increase of G_T .

4. Conclusions

A theory of tunneling spectroscopy of a metal/ferromagnetic junction was presented within a chain lattice model. The appropriate boundary conditions at the interface were calculated to describe the properties of particles in our junction. The numerical solution results of electron- and hole-tunneling conductance was considered under the effect of a non-spin-flip and spin-flip scattering potential. It was found that the conductance spectrum had characteristic kinks at the energy equivalent of the bottom of the minority band and the top of the majority band of the ferromagnetic. An increasing in either spin-flip or non-spin-flip scattering caused the conductance to decrease. However, the conductance can be enhanced when the interface was taken into account for the appropriate value of spin-flip and non-spin-flip scattering. Furthermore, the next-nearest neighbor in a ferromagnetic was considered. It was found that the conductance spectrum can be increased when the hopping

energy was increased as it seems to increase probability of the particle moving to another lattice site.

Acknowledgment

We would like to acknowledge financial supported from Naresuan University.

- [1] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* 61, 2472 (1988).
- [2] G. Binasch, P. Grunberg, F. Saurenbach, and W. Zinn, *Phys. Rev. B* 39, 4828 (1989).
- [3] J. S. Moodera, L.R. Kinder, T. M. Wong, R. Meservey, *Phys. Rev. Lett.* 74, 3273 (1995).
- [4] A. Fert, *Rev. Mod. Phys.* 80, 1517 (2008).
- [5] P. A. Grunberg, *Rev. Mod. Phys.* 80, 1531 (2008).
- [6] I. Zutic, J. Fabian, and S. D. Sarma, *Rev. Mod. Phys.* 76, 323 (2004).
- [7] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. V. Molnar, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, and D. M. Treger, *Science* 294, 1488 (2001).
- [8] G. Prinz, *Physics Today* 48, 58 (1995).
- [9] P. R. Hammar, B. R. Bennett, M. J. Yang, and M. Johnson, *Phys. Rev. Lett.* 83, 203 (1999); 84, 5024 (2000).
- [10] Y. Tserkovnyak, A. Brataas, and G. E. W. Bauer, *Phys. Rev. Lett.* 88, 117601 (2002); *Phys. Rev. B* 66, 224403 (2002).
- [11] M. V. Costache, M. Sladkov, S. M. Watts, C. H. van der Wal, and B. J. van Wees, *Phys. Rev. Lett.* 97, 216603 (2006).
- [12] G. Schmidt, D. Ferrand, L. W. Molenkamp, A. T. Filip, and B. J. van Wees, *Phys. Rev. B* 62, R4790 (2000).

- [13] A. T. Filip, B. H. Hoving, F. J. Jedema, B. J. van Wees, B. Dutta, and S. Borghs, *Phys. Rev. B* 62, 9996 (2000).
- [14] E. I. Rashba, *Phys. Rev. B* 62, R16267 (2000).
- [15] D. Grundler, *Phys. Rev. Lett.* 86, 1058 (2001).
- [16] G. Kirczenow, *Phys. Rev. B* 63, 054422 (2001).
- [17] F. Guinea, *Phys. Rev. B* 58, 9212 (1998).
- [18] P. Lyu, D. Y. Xing, and J. Dong, *Phys. Rev. B* 58, 54 (1998).
- [19] J. Inoue and S. Maekawa, *J. Mag. Magn. Mater.* 198-199, 167 (1999).
- [20] R. Jansen and J. S. Moodera, *Phys. Rev. B* 61, 9047 (2000).
- [21] A. Vedyayev, D. Bagrets, A. Bagrets, and B. Dieny, *Phys. Rev. B* 63, 064429 (2001).
- [22] M. Wawrzyniak, M. Gmitra, and J. Barnas, *J. Appl. Phys.* 99, 023905 (2006).
- [23] A. Jantayod and P. Pairor, *Physica E* 48, 111 (2013).
- [24] A. Jantayod and P. Pairor, *Super. Micro.* 88, 541 (2015).
- [25] B. Srisongmuang and P. Pairor and M. Berciu, *Phys. Rev. B* 78, 155317 (2008).
- [26] K. Pasanai and P. Pairor, *Phys. Rev. B* 84, 224432 (2011).
- [27] W. Chen, Z.Z. Zhang, L. Jiang, Z.W. Xing, R. Shen, and B.G. Wang, *E. Phys. J. B* 85, 275 (2012).
- [28] A. Jantayod, *Super. Micro.* 64, 78 (2013).
- [29] K. Pasanai, *J. Mag. Magn. Mater.* 422, 1 (2017).
- [30] M. J. Ma, M. B. A. Jalil, and S.G. Tan, *J. Appl. Phys.* 105, 07E907 (2009).
- [31] M. J. Ma, M. B. A. Jalil, S. G. Tan, and H. Y. Meng, *J. Appl. Phys.* 107, 114321 (2010).

[32] G. E. Blonder, M. Tinkham, and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B 25, 4515 (1982).

[33] P. Pairor and M. B. Walker, Phys. Rev. B 65, 064507 (2001).

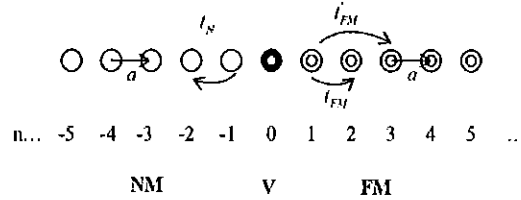


Figure 1: Schematic illustration of the chain lattice junction of a normal metal/ferromagnetic, a is a lattice constant of the system. The t_N is the nearest neighbor hopping energy of a metal, t_{FM} and t'_{FM} are respectively the nearest neighbor and the next-nearest neighbor hopping energy of a ferromagnetic.

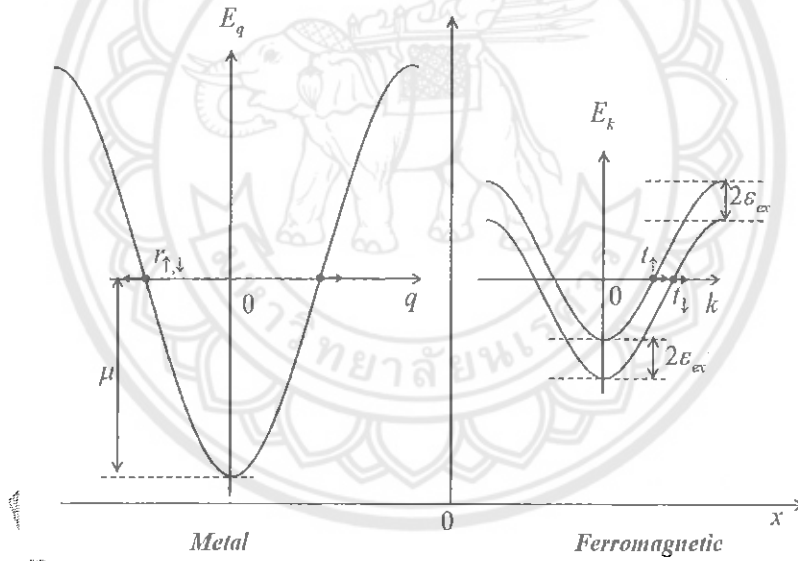


Figure 2: Sketches of the energy dispersion of the electron in the metal (left) and the ferromagnetic system (right). Where $|k|$ and $|q|$ are between $-\pi/a$ and π/a .

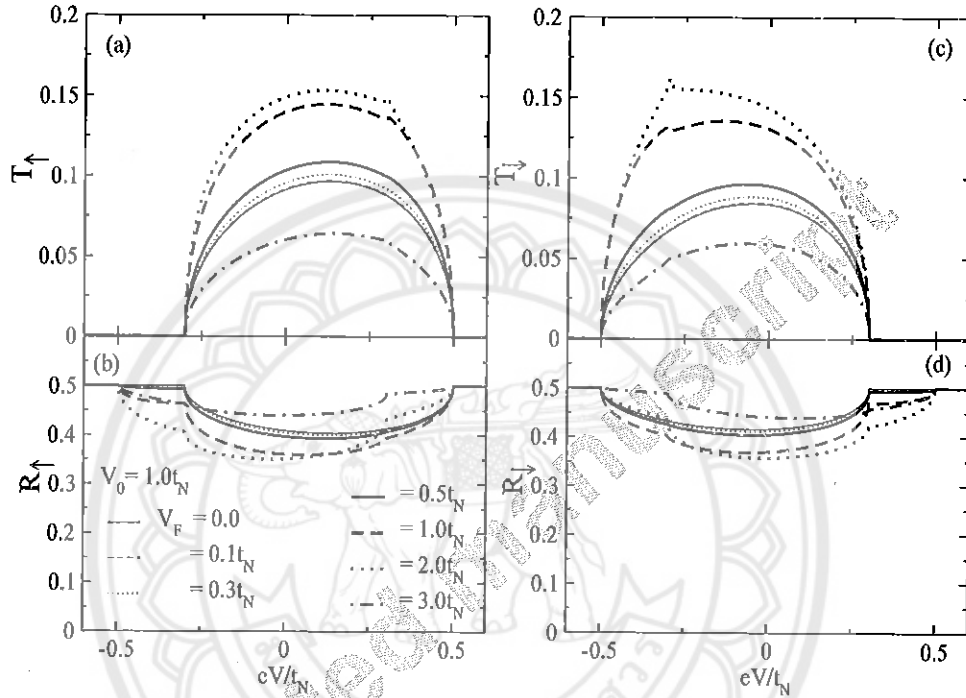


Figure 4: Plots of electrons transmission probabilities with spin-up (T_{\uparrow}) and spin-down (T_{\downarrow}) and electrons reflection probabilities with spin-up (R_{\uparrow}) and spin-down (R_{\downarrow}) as a function of energy eV with different value of spin-flip scattering (V_F) when a non-spin-flip scattering is a tunneling limit ($V_0 = 1.0t_N$), t_{FM} is ignored and $t_{FM} = 0.2t_N$.

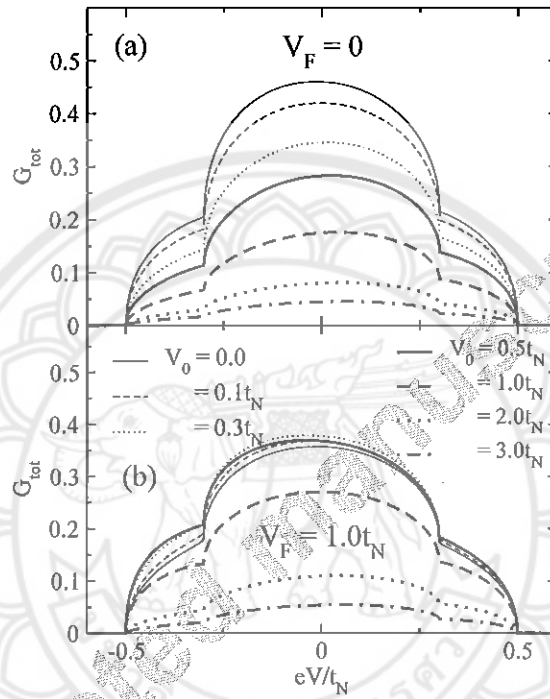


Figure 5: Plots of the conductance spectra as a function of energy with different V_0 for (a) $V_F = 0$ and for (b) $V_F = 1.0t_N$. The t_{FM} is ignored and $t_{FM} = 0.2t_N$.

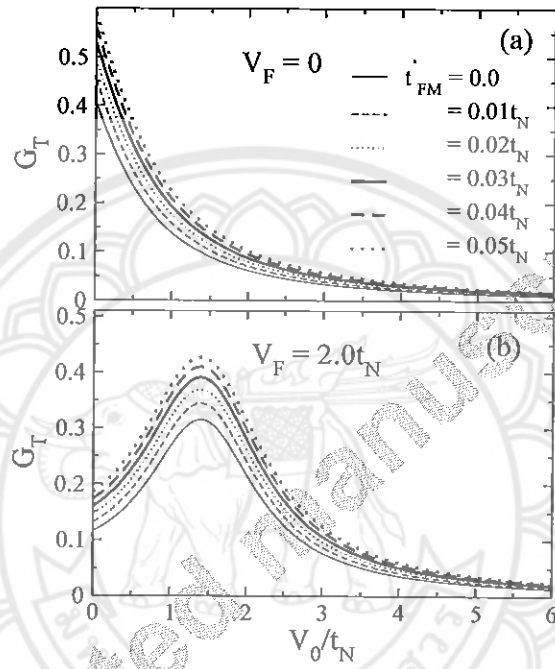


Figure 8: The total conductance spectra at a constant energy $eV = 0$, plots as a function of a non-spin-flip scattering V_0 for (a) $V_F = 0$ and for (b) $V_F = 2.0t_N$. The t'_{FM} in this plot is varied and $t_{FM} = 0.2t_N$.