Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. В. Ведяев, О. А. Котельникова, Л. Ю. Лысцева,
Н. В. Рыжанова, Н. В. Стрелков, М. Г. Чшиев, Спин-
поляризованный транспорт в структурах с туннельными
барьерами, *ТМФ*, 2011, том 168, номер 3, 428–440

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6691>

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: 107.22.136.117

26 апреля 2023 г., 14:04:44

© 2011 г.

А. В. Ведяев*, О. А. Котельникова*,
Л. Ю. Лысцева*, Н. В. Рыжанова*,
Н. В. Стрелков*, М. Г. Чшиев†

СПИН-ПОЛЯРИЗОВАННЫЙ ТРАНСПОРТ В СТРУКТУРАХ С ТУННЕЛЬНЫМИ БАРЬЕРАМИ

Теоретически исследован спин-зависящий транспорт в структурах с барьером из окисла магния и ферромагнитными электродами при неколлинеарной ориентации намагниченностей в ферромагнитных слоях. В двухзонной s - d модели с использованием техники Келдыша неравновесных функций Грина и с учетом s - d гибридизации рассмотрены эффекты туннельного магнитосопротивления и спинового торка. Исследована роль слоя хрома как дополнительного спинового фильтра для s -электронов, а также возможность увеличения эффектов туннельного магнитосопротивления и спинового торка при резонансном туннелировании в пятислойной структуре Fe|Cr|Fe|MgO|Fe .

Ключевые слова: туннельное магнитосопротивление, спин-поляризованный ток, спин-овый торк, многослойные наноструктуры.

1. ВВЕДЕНИЕ

Туннельное магнитосопротивление (ТМС) в последнее десятилетие является предметом пристального изучения как в теоретических, так и экспериментальных группах ввиду высокой чувствительности этого явления к магнитному полю, что в свою очередь делает устройства с ТМС хорошим кандидатом для приготовления логических элементов MRAM (magnetic random access memories) [1], [2]. В первых устройствах с ТМС в качестве туннельного барьера использовались тонкие, порядка нескольких нанометров, слои аморфного окисла алюминия [2]. Получающиеся при этом величины эффекта достигали 50 % при комнатной температуре (так называемая оптимистическая оценка). В настоящее время исследования сосредоточились на другом типе структур, использующих в качестве барьера слой кристаллического окисла магния MgO [3]–[6]. Причиной этого послужило обнаружение весьма высокого значения ТМС, достигающего в некоторых экспериментах 600 % [7]. Общепринятая в настоящее время теоретическая интерпретация этих результатов основывается

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия.
E-mail: nik@magn.ru

†SPINTEC, CEA/CNRS/UJF, Grenoble, France

на вытекающих из основных принципов расчета электронного спектра в структурах с $\text{Fe}|\text{MgO}_{(001)}$ границами [3], [4]. Эти расчеты показывают, что на поверхности Ферми ОЦК-железа (а также Co и CoFe) вдоль кристаллического направления (001) имеются лишь s -подобные электроны с симметрией Δ_1 и с магнитным моментом, направленным по намагниченности (далее для краткости будем говорить о них как о электронах со спином “вверх”). Эти блоховские состояния имеют наименьший декремент затухания по сравнению с электронами со спинами “вниз” с симметрией Δ_5 . Состояния s -подобных электронов со спином “вниз” на уровне Ферми отсутствуют. Из этого следует, что структура типа $\text{Fe}|\text{MgO}_{(001)}|\text{Fe}$ является хорошим спиновым фильтром и должна находиться в проводящем состоянии только при параллельной конфигурации намагниченностей в ферромагнитных (F) слоях, а ТМС достигать бесконечного значения. Другими словами, ОЦК-железо (а также Co и CoFe) в таких структурах обнаруживает полуметаллическое поведение.

Тем не менее эксперимент показывает, как было упомянуто выше, что ТМС имеет конечное, хотя и весьма высокое значение, т. е. структура остается проводящей и при антипараллельной конфигурации намагниченностей. На наш взгляд, предлагаемые в настоящее время объяснения этого, например наличие на интерфейсе тонкого слоя FeO, не вполне удовлетворительны. Для дальнейшего обсуждения важно напомнить, что проводимость ферромагнитных металлов d -группы имеет двухзонный характер, а расчеты показывают наличие на уровне Ферми ОЦК-железа электронов с Δ_2 -, Δ'_2 - и Δ_5 -симметриями со спином “вниз”. Наше предположение основано на том, что на границе $\text{Fe}|\text{MgO}_{(001)}$ происходит частичное нарушение симметрии ввиду s - d гибридизации с переходом в проводящее состояние при антипараллельной конфигурации намагниченностей в F-электродах. Этот механизм был впервые предложен и теоретически исследован в работе [8]. Кроме упомянутых, интересно также исследовать более сложные структуры, в которых имеется включение тонкого слоя хрома на границе с барьером; этот слой, как показывают расчеты, представляет собой дополнительный барьер для s -подобных электронов с Δ_1 -симметрией и изменяет тем самым эффективность спинового фильтра. Действительно, экспериментальные исследования структур $\text{Fe}|\text{Cr}|\text{MgO}|\text{Fe}$ [9] продемонстрировали быстрое убывание ТМС с увеличением толщины слоя хрома. С другой стороны, кристаллографические исследования структур $\text{Fe}|\text{Cr}|\text{MgO}|\text{Fe}$ показали их большое сходство со структурой в мультислоях $\text{Fe}|\text{Cr}|\text{Fe}$, в которых было обнаружено гигантское магнитосопротивление. Таким образом, мы не ожидаем существенной деполяризации тока в хrome ввиду его возможного антиферромагнитного характера. В настоящей работе мы теоретически исследуем влияние s - d гибридизации на ТМС в структурах $\text{Fe}|\text{Cr}|\text{MgO}|\text{Fe}$, а также резонансное туннелирование в более сложной структуре $\text{Fe}|\text{Cr}|\text{Fe}|\text{MgO}|\text{Fe}$ с неколлинеарной конфигурацией намагниченностей в электродах.

2. МОДЕЛЬ

Для построения качественной теории используем упрощенную двухзонную модель квазисвободных носителей в ферромагнитном металле, представляющих собой совокупность s -подобных электронов со спином “вверх” и d -подобных дырок со спином “вниз”. Из этой модели следует, что проводимость структуры с двумя ферромагнитными электродами с антипараллельной конфигурацией намагниченностей, разделенных туннельным барьером, равна нулю. При параллельной конфигурации

намагниченностей структура находится в проводящем состоянии, т. е. ТМС имеет бесконечную величину.

Для пояснения особенностей ТМС при неколлинеарной конфигурации намагниченностей в такой модельной структуре будем использовать технику Келдыша неравновесных функций Грина [10] и учтем влияние s - d гибридизации с помощью теории возмущений по этому параметру. Для построения вольтамперной характеристики учтем влияние приложенного напряжения на высоту туннельного барьера, а также, как следствие, трапецеидальную форму этого барьера. Падением напряжения в металлических электродах можно пренебречь ввиду его малости по сравнению с разностью потенциалов на границах барьера. Для нахождения волновых функций и функций Грина будем использовать приближение Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна. Кроме того, для приближения к реальной ситуации учтем различие эффективных масс в элементах структуры.

Перейдем теперь к детальному описанию схемы расчета. Для нахождения гибридизационных поправок к волновым функциям, представляющих собой спинор четвертого порядка, необходимо решить матричное уравнение

$$\begin{pmatrix} \psi_s^\uparrow(z) \\ \psi_s^\downarrow(z) \\ \psi_d^\uparrow(z) \\ \psi_d^\downarrow(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_{s0}^\uparrow(z) \\ \psi_{s0}^\downarrow(z) \\ \psi_{d0}^\uparrow(z) \\ \psi_{d0}^\downarrow(z) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sum_i G_s^{\uparrow\uparrow}(z, z_i) \gamma_i^{\uparrow\uparrow} & \sum_i G_s^{\uparrow\downarrow}(z, z_i) \gamma_i^{\uparrow\downarrow} \\ 0 & 0 & \sum_i G_s^{\downarrow\uparrow}(z, z_i) \gamma_i^{\downarrow\uparrow} & \sum_i G_s^{\downarrow\downarrow}(z, z_i) \gamma_i^{\downarrow\downarrow} \\ \sum_i G_d^{\uparrow\uparrow}(z, z_i) \gamma_i^{\uparrow\uparrow} & \sum_i G_d^{\uparrow\downarrow}(z, z_i) \gamma_i^{\uparrow\downarrow} & 0 & 0 \\ \sum_i G_d^{\downarrow\uparrow}(z, z_i) \gamma_i^{\downarrow\uparrow} & \sum_i G_d^{\downarrow\downarrow}(z, z_i) \gamma_i^{\downarrow\downarrow} & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \psi_s^\uparrow(z) \\ \psi_s^\downarrow(z) \\ \psi_d^\uparrow(z) \\ \psi_d^\downarrow(z) \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где $\psi_{0s(d)}^{\uparrow(\downarrow)}(z)$ и $\psi_{s(d)}^{\uparrow(\downarrow)}(z)$ суть соответственно нулевые и полные по параметру гибридизации волновые функции для $s(d)$ -носителей со спинами “вверх” (“вниз”), $G_{s(d)}^{\sigma\sigma'}(z, z_i)$ – запаздывающая равновесная функция Грина $s(d)$ -носителей, z_i – координата интерфейса металл/туннельный барьер (ось z перпендикулярна интерфейсам), $\gamma_i^{\sigma\sigma'}$ – параметр гибридизации на i -м интерфейсе. Как видно из уравнения (1), мы предполагаем, что наибольший вклад в нарушение симметрии вносит гибридизация на интерфейсе. Кроме того, мы пренебрегаем вкладом недиагональной по спину компоненты гибридизации, которая обусловлена спин-орбитальным взаимодействием и имеет релятивистский характер. Для краткости мы опустили в аргументах волновых функций и функций Грина энергию E туннелирующих электронов и квазиимпульс $\vec{k}$ в плоскости слоев.

Для нахождения электрического тока необходимо построить неравновесную функцию Грина

$$G_{\sigma\sigma\kappa}^{+-}(z, z') = \sum_{\sigma'} [f(E) \psi_\ell^{\sigma(\sigma')}(z') \psi_\ell^{\sigma(\sigma')}(z) + f(E - eV) \psi_r^{\sigma(\sigma')}(z') \psi_r^{\sigma(\sigma')}(z)], \quad (2)$$

где верхний индекс в скобках у волновой функции соответствует проекции спина падающего электрона. При отражении электрона от границы слоя с повернутой намагниченностью может начать распространяться электрон как с той же, так и с другой проекцией спина. Индексы ℓ и g относятся к носителям, движущимся слева направо и справа налево соответственно; $f(E)$ и $f(E - eV)$ – функции распределения в левом и правом электродах. Ток вычислим с помощью формулы, обычно используемой в технике Келдыша:

$$j^\sigma \propto i \iint \kappa d\kappa dE \left(\frac{\partial}{\partial z'} - \frac{\partial}{\partial z} \right) G_{\sigma\sigma\kappa}^{--}(z, z') \Big|_{z=z'}. \quad (3)$$

В рассматриваемой структуре помимо гигантского значения ТМС наблюдается еще один интересный эффект: возникновение в ней при протекании тока крутящего момента – спинового торка, действующего на намагниченность каждого из ферромагнитных слоев. Происхождение спинового торка связано с тем, что при неколлинеарной ориентации намагниченностей двух ферромагнитных слоев спин-поляризованный ток переносит неравновесную компоненту намагниченности, направленную под углом к основной (равновесной) намагниченности. Обменное s – d взаимодействие в свою очередь создает эффективное поле, действующее на намагниченность, что и приводит к возникновению крутящего момента:

$$\vec{T} = \vec{T}_\parallel + \vec{T}_\perp = g \frac{J_{sd}}{\hbar} [\vec{M} \times \vec{m}], \quad (4)$$

где вектор $\vec{T}$ разбивается на два вектора: параллельный плоскости намагниченности и перпендикулярный ей. Вектор $T_\perp$ действует аналогично внешнему полю и приводит к прецессии намагниченности, тогда как $T_\parallel$ действует на намагниченность подобно затуханию в уравнении Ландау–Лифшица–Гильберта, однако его действие зависит от направления тока и может приводить к переориентации намагниченностей либо в параллельной, либо в антипараллельной конфигурации. В формуле (4) g – гиромагнитное отношение, J_{sd} – параметр s – d взаимодействия и $\vec{m}$ – неравновесная намагниченность s -электронов.

Компоненты спинового торка в нашей методике могут быть рассчитаны по формуле

$$\begin{aligned} T = T_x + iT_y \propto \iint \kappa d\kappa dE & [f(E)\psi_\ell^{\uparrow(\uparrow)*}(z)\psi_\ell^{\downarrow(\uparrow)}(z) + \\ & + f(E - eV)\psi_r^{\uparrow(\uparrow)*}(z)\psi_r^{\downarrow(\uparrow)}(z) + f(E)\psi_\ell^{\uparrow(\downarrow)*}(z)\psi_\ell^{\downarrow(\downarrow)}(z) + \\ & + f(E - eV)\psi_r^{\uparrow(\downarrow)*}(z)\psi_r^{\downarrow(\downarrow)}(z)]. \end{aligned} \quad (5)$$

В это выражение входят волновые функции несколько другого вида, которые отражают изменение поляризации спина при отражении от границы с повернутой намагниченностью, например

$$\psi_{1l}^{\downarrow(\uparrow)} = \frac{128q_1q_2(k_4m_2 - k_5m_1)\sqrt{k_1^3k_3^2m_3^2m_b^2m_2^2}\sqrt{m_1^3k_2}\sin\theta}{\text{den}} e^{-ik_2(z-z_1)}, \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} \text{den} = & (1 + \cos \theta) [E(q_2 m_1 - i k_4 m_b) \varphi_2^\uparrow - E^{-1}(q_2 m_1 + i k_4 m_b) \varphi_4^\uparrow] \times \\ & \times [E(q_2 m_2 - i k_5 m_b) \varphi_2^\downarrow - E^{-1}(q_2 m_2 + i k_5 m_b) \varphi_4^\downarrow] + \\ & + (1 - \cos \theta) [E(q_2 m_2 - i k_5 m_b) \varphi_2^\uparrow - E^{-1}(q_2 m_1 + i k_5 m_b) \varphi_4^\uparrow] \times \\ & \times [E(q_2 m_1 - i k_4 m_b) \varphi_2^\downarrow - E^{-1}(q_2 m_1 + i k_4 m_b) \varphi_4^\downarrow]. \end{aligned}$$

Нулевые токи для s -электронов со спином “вверх” и d -дырок со спином “вниз” представляют собой интегралы вида

$$j_{0s}^\uparrow = C \iint \kappa d\kappa dE j_{0s\kappa}^\uparrow(E), \quad j_{0d}^\downarrow = C \iint \kappa d\kappa dE j_{0d\kappa}^\downarrow(E), \quad (7)$$

где $C = 0.1385 m_1^{-1} \cdot 10^{13}$ А/см². Например, соответствующий вклад от s -электронов равен

$$\begin{aligned} j_{0s\kappa}^\uparrow = & C \iint \kappa d\kappa dE \frac{q_1 q_2 \operatorname{Re} k_1 |k_3|^2 m_1 m_3^2 m_b^2}{|\text{den}|^2} \times \\ & \times [(1 + \cos \theta) \operatorname{Re} k_4 m_1 |E(q_2 m_2 - i k_5 m_b) \varphi_2^\downarrow - E^{-1}(q_2 m_2 + i k_5 m_b) \varphi_4^\downarrow|^2 + \\ & + (1 - \cos \theta) \operatorname{Re} k_5 m_2 |E(q_2 m_1 - i k_4 m_b) \varphi_2^\uparrow - E^{-1}(q_2 m_1 + i k_4 m_b) \varphi_4^\uparrow|^2], \quad (8) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} E = & \exp \int_{z_2}^{z_3} q(z) dz = \\ = & \exp \left\{ \frac{b}{3m_b \cdot 0.288V} \left[(q_0^2 + \kappa^2 + 0.288\varepsilon)^{3/2} - (q_0^2 + \kappa^2 - 0.288(V - \varepsilon))^{3/2} \right] \right\}, \quad (9) \\ q^2(z) = & \frac{2m_b}{\hbar^2} \left(U - E_e - eV \frac{z - z_2}{z_3 - z_2} \right) + \kappa^2, \quad q_{1(2)} = q(z_{2(3)}). \end{aligned}$$

В вышеприведенных выражениях z_1 , z_2 и z_3 представляют собой координаты интерфейсов Fe|Cr, Cr|MgO и MgO|Fe соответственно; V – есть приложенное напряжение; θ – угол между намагниченностями в слоях железа, который появляется после преобразования спиновых операторов в повернутой системе координат в соответствии с формулами (5.6)–(5.10) из книги С. В. Тябликова [11]; m_1 и m_2 суть нормированные эффективные массы s -электронов со спинами “вверх” и “вниз” в ферромагнитных электродах, а m_3 и m_b – в слое хрома и в барьере. Кроме того,

$$\begin{aligned} \varphi_2^{\uparrow(1)} = & e^{ik_3 a} (m_{1(2)} k_3 - k_{1(2)} m_3) (q_1 m_3 + i k_3 m_b) + \\ & + e^{-ik_3 a} (m_{1(2)} k_3 + k_{1(2)} m_3) (q_1 m_3 - i k_3 m_b), \\ \varphi_4^{\uparrow(1)} = & e^{ik_3 a} (m_{1(2)} k_3 - k_{1(2)} m_3) (q_1 m_3 - i k_3 m_b) + \\ & + e^{-ik_3 a} (m_{1(2)} k_3 + k_{1(2)} m_3) (q_1 m_3 + i k_3 m_b), \end{aligned} \quad (10)$$

где $k_1(k_2)$ и $k_4(k_5)$ – z -компоненты волновых векторов s -электронов с энергией E для спинов “вверх” (“вниз”) для левого и правого электродов, а k_3 – аналогичная

компонента для слоя хрома:

$$\begin{aligned} k_{1(2)}^2 &= \frac{2m_{1(2)}}{\hbar^2}(E_e - U_s \pm J_{sd}) - \kappa^2, \\ k_{4(5)}^2 &= \frac{2m_{1(2)}}{\hbar^2}(E_e - U_s \pm J_{sd} + eV) - \kappa^2, \\ k_3^2 &= \frac{2m_3}{\hbar^2}(E_e - U_s^{\text{Cr}}) - \kappa^2; \end{aligned} \quad (11)$$

здесь U_s – дно s -зоны в слое железа без учета обменного расщепления J_{sd} , а U_s^{Cr} – дно этой же зоны в слое хрома. Аналогичное (11) выражение может быть получено для тока $j_{0d}^\downarrow$ с использованием параметров d -электронов со спином “вниз” (параметров $k_{2,d}$, $m_{1,d}$ и т.д.). Заметим, что в нашей модели дно s -зоны в слое хрома находится выше уровня Ферми, так что квазиимпульс k_3 оказывается чисто мнимым. Как следует из выражений (7)–(9), для чисто мнимых k_5 , $k_{4,d}$ и $\theta = \pi$ токи s - и d -электронов обращаются в ноль, а ТМС стремится к бесконечности.

Учет s - d гибридизации приводит к дополнительным вкладам в волновые функции, например

$$\Delta\psi_s^{\uparrow(\downarrow)}(z < z_1) = G_s^{\uparrow\downarrow}(z, z_1)\gamma_i^{\uparrow\downarrow}G_d^{\uparrow\downarrow}(z_i, z_i)\gamma_i^{\uparrow\downarrow}\psi_s^{\uparrow\downarrow}(z_i).$$

Если учесть дополнительные члены второго порядка по гибридизации, то появляются по четыре новых вклада в токи s - и d -электронов, выражения для которых мы приводим ниже. Имеем

$$\begin{aligned} \Delta j_{2\kappa}^\uparrow &= 16m_1m_3^2m_b^2m_3^d m_b^d k_1(\gamma_2^{\uparrow\downarrow})^2 \times \\ &\times \text{Im} \{ r_1^{\uparrow*} k_3^2 (\phi_{2s}^{\uparrow(\downarrow)})^2 \phi_{2d}^{\uparrow(\downarrow)} [e^{ik_3^d a} (m_1^d k_3^d - k_1^d m_3^d) + e^{-ik_3^d a} (m_1^d k_3^d + k_1^d m_3^d)] \}, \end{aligned} \quad (12)$$

где $r_1^\uparrow = \text{num}^\uparrow / \text{den}$ и величина $\text{num}^\uparrow$ определяется следующим выражением:

$$\begin{aligned} \text{num}^\uparrow &= (1 + \cos \theta) [E(q_2 m_1 - ik_4 m_b) \varphi_1^\uparrow - E^{-1}(q_2 m_1 + ik_4 m_b) \varphi_3^\uparrow] \times \\ &\times [E(q_2 m_2 - ik_5 m_b) \varphi_2^\downarrow - E^{-1}(q_2 m_2 + ik_5 m_b) \varphi_4^\downarrow] + \\ &+ (1 - \cos \theta) [E(q_2 m_2 - ik_5 m_b) \varphi_1^\uparrow - E^{-1}(q_2 m_2 + ik_5 m_b) \varphi_3^\uparrow] \times \\ &\times [E(q_2 m_1 - ik_4 m_b) \varphi_2^\downarrow - E^{-1}(q_2 m_1 + ik_4 m_b) \varphi_4^\downarrow], \end{aligned}$$

в котором

$$\begin{aligned} \varphi_1^{\uparrow,\downarrow} &= e^{ik_3 a} (m_{1,2} k_3 + k_{1,2} m_3) (q_1 m_3 + ik_3 m_b) + e^{-ik_3 a} (m_{1,2} k_3 - k_{1,2} m_3) (q_1 m_3 - ik_3 m_b), \\ \varphi_3^{\uparrow,\downarrow} &= e^{ik_3 a} (m_{1,2} k_3 + k_{1,2} m_3) (q_1 m_3 - ik_3 m_b) + e^{-ik_3 a} (m_{1,2} k_3 - k_{1,2} m_3) (q_1 m_3 + ik_3 m_b). \end{aligned}$$

В формуле (12)

$$\begin{aligned} \phi_{2s}^{\uparrow(\downarrow)} &= \frac{1}{\text{den}} \{ (1 + \cos \theta) [E(q_2 m_2 - ik_5 m_b) \varphi_2^\downarrow - E^{-1}(q_2 m_2 + ik_5 m_b) \varphi_4^\downarrow] \times \\ &\times [E(q_2 m_1 - ik_4 m_b) + E^{-1}(q_2 m_1 + ik_4 m_b)] + \\ &+ (1 - \cos \theta) [E(q_2 m_1 - ik_4 m_b) \varphi_2^\downarrow - E^{-1}(q_2 m_1 + ik_4 m_b) \varphi_4^\downarrow] \times \\ &\times [E(q_2 m_2 - ik_5 m_b) + E^{-1}(q_2 m_2 + ik_5 m_b)] \}. \end{aligned}$$

Для того чтобы получить выражение для $\phi_{2d}^{\uparrow(\uparrow)}$, необходимо заменить в выражении для $\phi_{2s}^{\uparrow(\uparrow)}$ все параметры на соответствующие параметры d -электронов. Индексы у токов означают, что эти токи являются дополнительными, обусловленными гибридизацией на интерфейсе Cr|MgO (при $z = z_2$), причем $\gamma_i^{\sigma\sigma} = \gamma_i^{\sigma\sigma}(z_i)$.

Второй вклад в токи имеет вид

$$\Delta j_{3\kappa}^{\uparrow} = 64q_1q_2k_1m_1m_b^2m_3^2m_b^d(\gamma_3^{\uparrow\uparrow})^2 \text{Im} [r_1^{\uparrow*}k_3^2(\phi_{3s}^{\uparrow(\uparrow)})^2\phi_{3d}^{\uparrow(\uparrow)}(E_d\varphi_{2d}^{\uparrow} + E_d^{-1}\varphi_{4d}^{\uparrow})], \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} \phi_{3s}^{\uparrow(\uparrow)} = \frac{1}{\text{den}} \{ & m_1(1 + \cos \theta) [E(q_2m_2 - ik_5m_b)\varphi_2^{\downarrow} - E^{-1}(q_2m_2 + ik_5m_b)\varphi_4^{\downarrow}] + \\ & + m_2(1 - \cos \theta) [E(q_2m_1 - ik_4m_b)\varphi_2^{\downarrow} - E^{-1}(q_2m_1 + ik_4m_b)\varphi_4^{\downarrow}] \}. \end{aligned}$$

Выражение для $\phi_{3d}^{\uparrow(\uparrow)}$ можно получить из $\phi_{3s}^{\uparrow(\uparrow)}$, заменив все параметры на соответствующие параметры для d -электронов.

Наконец, два последних вклада в токи записываются как

$$\begin{aligned} \Delta j_{2\kappa}^{\uparrow} = & -256q_1q_2q_1^d q_2^d m_b^3 m_3^3 (m_b^d m_3^d)^2 m_1 k_1 \sin^2 \theta \gamma_2^{\uparrow\uparrow} \gamma_2^{\downarrow\downarrow} \times \\ & \times \text{Im} \left\{ \frac{r_1^{\uparrow*} k_3^2 \phi_2^{\uparrow(\uparrow)}}{\text{den} \cdot \text{den}_d} (k_4 m_2 - k_5 m_1) (k_4^d m_2^d - k_5^d m_1^d) \times \right. \\ & \times [e^{ik_3 a} (k_3 m_2 - k_2 m_3) + e^{-ik_3 a} (k_3 m_2 + k_2 m_3)] \times \\ & \times [e^{ik_3^d a} (k_3^d m_2^d - k_2^d m_3^d) + e^{-ik_3^d a} (k_3^d m_2^d + k_2^d m_3^d)] \times \\ & \left. \times [e^{ik_3^d a} (k_3^d m_1^d - k_1^d m_3^d) + e^{-ik_3^d a} (k_3^d m_1^d + k_1^d m_3^d)] \right\}, \\ \Delta j_{3\kappa}^{\uparrow} = & -64q_1q_2m_b^3(m_3m_b^d)^2 m_1 k_1 \sin^2 \theta \gamma_2^{\uparrow\uparrow} \gamma_2^{\downarrow\downarrow} \times \\ & \times \text{Im} \left\{ \frac{r_1^{\uparrow*} k_3^2 \phi_3^{\uparrow(\uparrow)}}{\text{den} \cdot \text{den}_d} (k_4 m_2 - k_5 m_1) (k_4^d m_2^d - k_5^d m_1^d) \times \right. \\ & \left. \times (E\varphi_2^{\downarrow} + E^{-1}\varphi_4^{\downarrow})(E_d\varphi_{2d}^{\downarrow} + E_d^{-1}\varphi_{4d}^{\downarrow})(E_d\varphi_{2d}^{\uparrow} + E_d^{-1}\varphi_{4d}^{\uparrow}) \right\}. \end{aligned}$$

Аналогичные дополнительные токи появляются и для d -электронов.

3. РЕЗОНАНСНОЕ ТУННЕЛИРОВАНИЕ ПРИ НАЛИЧИИ ПРОМЕЖУТОЧНОГО СЛОЯ ФЕРРОМАГНЕТИКА

Одним из ограничений при промышленном использовании туннельных контактов является их слишком высокое сопротивление при разумной толщине барьера, а значит, и недостаточно высокие значения туннельного тока. Попытки увеличить ток за счет уменьшения толщины барьера сталкиваются со значительными технологическими трудностями – с появляющимися в барьере порами и неоднородностями его толщины. Для увеличения туннельного тока может быть использовано резонансное туннелирование через промежуточные металлические слои в структуре с несколькими барьерами. Особенно перспективной в этом смысле представляется структура типа $F_1|O|F_2(a)|O|F_3(a)|O|F_4$. Действительно, пусть толщина внутренних ферромагнитных слоев такова, что выполнено условие резонансного туннелирования для

электронов со спином “вверх”, а электроны со спином “вниз” находятся вне резонанса. Тогда при параллельной ориентации намагниченностей во внутренних слоях проводимость системы будет очень высокой и целиком будет определяться спиновым каналом “вверх”. Если же ориентация этих намагниченностей изменится на антипараллельную, то условие резонанса для электрона с любой проекцией спина будет нарушено, и значение ТМС в такой структуре в идеальном случае будет экспоненциально большим. Теоретическое исследование данной структуры было выполнено в работе [12], и оно действительно показало значительное увеличение как туннельного тока, так и ТМС.

Мы также исследовали влияние резонансного туннелирования на эти величины. Для этого мы выполнили расчет туннельного тока и ТМС в достаточно сложной пятислойной структуре $\text{Fe}|\text{Cr}|\text{Fe}|\text{MgO}|\text{Fe}$. В этом случае внутренний слой железа представляет собой квантовую яму, а ток может приобрести резонансный характер, и можно ожидать как возрастания туннельного тока, так и изменения фильтрующих свойств системы. Получены новые волновые функции для этой структуры, например

$$\tilde{\psi}_{1l}^{\uparrow(\downarrow)} = \sqrt{\frac{m_1}{k_1}} (e^{ik_1(z-z_1)} - \tilde{r}_1^{\uparrow}), \quad \tilde{r}_1^{\uparrow} = \frac{\widetilde{\text{num}}^{\uparrow}}{\widetilde{\text{den}}},$$

где

$$\begin{aligned} \widetilde{\text{num}}^{\uparrow} &= (1 + \cos \theta) [E(q_2 m_1 - ik_4 m_b) \tilde{\varphi}_1^{\uparrow} - E^{-1}(q_2 m_1 + ik_4 m_b) \tilde{\varphi}_3^{\uparrow}] \times \\ &\quad \times [E(q_2 m_2 - ik_5 m_b) \tilde{\varphi}_2^{\downarrow} - E^{-1}(q_2 m_2 + ik_5 m_b) \tilde{\varphi}_4^{\downarrow}] + \\ &\quad + (1 - \cos \theta) [E(q_2 m_2 - ik_5 m_b) \tilde{\varphi}_1^{\uparrow} - E^{-1}(q_2 m_2 + ik_5 m_b) \tilde{\varphi}_3^{\uparrow}] \times \\ &\quad \times [E(q_2 m_1 - ik_4 m_b) \tilde{\varphi}_2^{\downarrow} - E^{-1}(q_2 m_1 + ik_4 m_b) \tilde{\varphi}_4^{\downarrow}], \\ \widetilde{\text{den}} &= (1 + \cos \theta) [E(q_2 m_1 - ik_4 m_b) \tilde{\varphi}_2^{\uparrow} - E^{-1}(q_2 m_1 + ik_4 m_b) \tilde{\varphi}_4^{\uparrow}] \times \\ &\quad \times [E(q_2 m_2 - ik_5 m_b) \tilde{\varphi}_2^{\downarrow} - E^{-1}(q_2 m_2 + ik_5 m_b) \tilde{\varphi}_4^{\downarrow}] + \\ &\quad + (1 - \cos \theta) [E(q_2 m_2 - ik_5 m_b) \tilde{\varphi}_2^{\uparrow} - E^{-1}(q_2 m_1 + ik_5 m_b) \tilde{\varphi}_4^{\uparrow}] \times \\ &\quad \times [E(q_2 m_1 - ik_4 m_b) \tilde{\varphi}_2^{\downarrow} - E^{-1}(q_2 m_1 + ik_4 m_b) \tilde{\varphi}_4^{\downarrow}]. \end{aligned}$$

Выражения для токов при этом усложняются и приобретают вид

$$\begin{aligned} j_s^{\uparrow} &= \frac{512 q_1 q_2 k_1^3 |k_3|^2 m_1^3 m_3^2 m_b^2}{|\widetilde{\text{den}}|^2} \times \\ &\quad \times \{ (1 + \cos \theta) \text{Re } k_4 m_1 |E(q_2 m_2 - ik_5 m_b) \tilde{\varphi}_2^{\downarrow} - E^{-1}(q_2 m_2 + ik_5 m_b) \tilde{\varphi}_4^{\downarrow}|^2 + \\ &\quad + (1 - \cos \theta) \text{Re } k_5 m_2 |E(q_2 m_1 - ik_4 m_b) \tilde{\varphi}_2^{\downarrow} - E^{-1}(q_2 m_1 + ik_4 m_b) \tilde{\varphi}_4^{\downarrow}|^2 \}, \\ j_d^{\downarrow} &= \frac{512 q_{1,d} q_{2,d} k_{2,d}^3 |k_{3,d}|^2 m_{2,d}^3 m_{3,d}^2 m_{b,d}^2}{|\widetilde{\text{den}}_d|^2} \times \\ &\quad \times \{ (1 + \cos \theta) \text{Re } k_{4,d} m_{1,d} |E(q_2 m_2 - ik_5 m_b) \tilde{\varphi}_2^{\downarrow} - E^{-1}(q_2 m_2 + ik_5 m_b) \tilde{\varphi}_4^{\downarrow}|_d^2 + \\ &\quad + (1 - \cos \theta) \text{Re } k_{5,d} m_{2,d} |E(q_2 m_1 - ik_4 m_b) \tilde{\varphi}_2^{\downarrow} - E^{-1}(q_2 m_1 + ik_4 m_b) \tilde{\varphi}_4^{\downarrow}|_d^2 \}. \end{aligned}$$

Рис. 1. Угловая зависимость в структуре Fe|MgO|Fe без учета (j_0) и с учетом s - d гибридизации (j_Σ). На врезке показана зависимость вблизи области $\theta = \pi$. Параметр $V = 0.5$ эВ.

Рис. 2. Та же зависимость, что и на рис. 1, для структуры Fe|Cr|MgO|Fe с дополнительным слоем хрома с толщиной $4 \text{ \AA}$.

4. ПОЛУЧЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Мы выбрали модель зонной структуры, обеспечивающей в отсутствие s - d гибридизации полуметаллическое поведение двухзонной проводимости с соответствующими следствиями для эффекта ТМС. Покажем, что появляющиеся дополнительные s - d смешанные токи существенно изменяют физическую картину.

Чтобы проанализировать влияние s - d гибридизации на интерфейсах, мы провели численный расчет угловой зависимости нулевых и дополнительных токов с использованием аналитических выражений, полученных в предыдущем разделе. Результаты расчетов для структур Fe|MgO|Fe и Fe|Cr|MgO|Fe приведены на рис. 1 и рис. 2. При расчете мы использовали параметры из работ [3], [4]: $m_{s,F} = 1.27$, $m_{d,F} = 1.36$, $m_{s,B} = m_{d,B} = 0.38$, $U_s = 4.34$ и $U_d = 15.82$ для s - и d -электронов в ферромагнетике (F) и барьере (B). На рис. 1 показана зависимость туннельного тока от угла

Рис. 3. Зависимость дифференциальной проводимости в структуре Fe|MgO|Fe от величины приложенного напряжения.

между намагниченностями в ферромагнитных электродах в стандартной структуре Fe|MgO|Fe (толщина слоя хрома $a = 0$). Как видно из рисунка, нулевой ток j_0 (черные кружочки) при отсутствии s - d гибридизации имеет обычную угловую зависимость и обращается в ноль при антипараллельной конфигурации намагниченностей ($\theta = \pi$) в соответствии с полуметаллической моделью зонной структуры с бесконечной величиной ТМС. Напротив, полный ток j_Σ (светлые треугольники), с учетом вкладов второго порядка по параметру s - d гибридизации, уже не равен нулю при антипараллельной конфигурации. Это происходит из-за взаимной конвертации туннелирующих s - и d -электронов на интерфейсе, благодаря чему они могут свободно распространяться и в слое с противоположным направлением намагниченности. Подобная зависимость получена и для структуры с дополнительным слоем хрома (см. рис. 2). Следует отметить существенное уменьшение тока при параллельной конфигурации, поскольку хром представляет собой дополнительный барьер для s -электронов с Δ_1 -симметрией. При этом увеличивается и роль s - d гибридизации.

На рис. 3 приведена зависимость дифференциальной проводимости в структуре Fe|MgO|Fe от приложенного напряжения. Характерной особенностью этой зависимости является наличие минимума при напряжении $V = 0.3$ эВ, что ранее наблюдалось в эксперименте [9]. Эта особенность обусловлена тем, что вклад в полный ток дают как s -электроны, так и d -дырки. При увеличении напряжения ток от s -электронов растет все быстрее, так как с ростом их энергии увеличивается плотность доступных состояний, тогда как для d -дырок эта плотность уменьшается до нуля при $V = 0.3$ эВ. Комбинация этих двух эффектов приводит к появлению минимума.

На рис. 4 и рис. 5 показаны зависимости полного тока в резонансной структуре Fe|Cr|Fe|MgO|Fe от угла и от толщины внутреннего слоя железа.

Что касается пятислойной структуры, то угловая зависимость в ней качественно не отличается от зависимости для трехслойной структуры. По-прежнему нулевой ток s -электронов максимален при $\theta = 0$ и равен нулю при $\theta = \pi$, когда s -электрон в правом электроде попадает в запрещенную зону. Угловая зависимость этого тока изображена на рис. 4. Аналогичные закономерности наблюдаются для d -электронов.

Рис. 4. Угловая зависимость туннельного тока j_s s -электронов в структуре Fe|Cr|Fe|MgO|Fe. Параметры: $V = 0.1$ эВ, $a = 10 \text{ \AA}$.

Рис. 5. Зависимость туннельного тока j_s s -электронов в структуре Fe|Cr|Fe|MgO|Fe от толщины внутреннего слоя железа. Параметры: $\theta = \pi/3$, $V = 0.5$ эВ, $a = 10 \text{ \AA}$.

Наиболее интересной представляются зависимости туннельного тока и ТМС от толщины промежуточного слоя железа, которые имеют резонансный характер. На рис. 5 приведена зависимость туннельного тока s -электронов от толщины внутреннего слоя железа. Поскольку для пятислойной структуры мы ограничились лишь вычислением нулевого тока, ТМС в этом случае принимает бесконечное значение, поэтому на рис. 6 приведена зависимость от толщины внутреннего слоя железа величины “полуТМС” $(\sigma(\theta)|_{\theta=0} - \sigma(\theta)|_{\theta=\pi/2})/\sigma(\theta)|_{\theta=\pi/2}$. Как на графиках туннельного тока, так и на графиках величины “полуТМС” видно заметное возрастание этих величин в точках резонанса.

На рис. 7 представлена угловая зависимость компоненты спинового торка, вызванного током s -электронов на интерфейсах в структуре Fe|MgO|Fe. Как показывают несложные преобразования, мнимая его часть (параллельная компонента)

Рис. 6. Зависимость “полу-ТМС” в структуре Fe|Cr|Fe|MgO|Fe от толщины внутреннего слоя железа. Параметры $V = 0.5$ эВ, $\theta = 0$, $a = 10$ Å, $b = 7$ Å.

Рис. 7. Угловая зависимость мнимой части торка T_y в структуре Fe|MgO|Fe. Параметры те же, что и на рис. 1.

практически пропорциональна $\sin \theta$, что следует и из явного вида волновой функции (6).

Благодарности. Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 10-02-0056).

Список литературы

- [1] J.S. Moodera, L.R. Kinder, T.M. Wong, R. Meservey, *Phys. Rev. Lett.*, **74**:16 (1995), 3273–3276.
- [2] S.S.P. Parkin, K.P. Roche, M.G. Samant, P.M. Rice, R.B. Beyers, R.E. Scheuerlein, E. J. O’Sullivan, S.L. Brown, J. Bucchigano, D. W. Abraham, Yu Lu, M. Rooks, P. L. Trouiloud, R. A. Wanner, W. J. Gallagher, *J. Appl. Phys.*, **85** (1999), 5828–5833.
- [3] W.H. Butler, X.-G. Zhang, T. C. Schulthess, J.M. MacLaren, *Phys. Rev. B*, **63**:5 (2001), 054416, 12 pp.
- [4] W.H. Butler, X.-G. Zhang, S. Vutukuri, M. Chshiev, T. C. Schulthess, *IEEE Trans. Magn.*, **41**:10 (2005), 2645–2648.
- [5] S.S.P. Parkin, C. Kaiser, A. Panchula, P.M. Rice, B. Hughes, M. Samant, S.-H. Yang, *Nature Materials*, **3**:12 (2004), 862–867.

- [6] S. Yuasa, T. Nagahama, A. Fukushima, Y. Suzuki, K. Ando, *Nature Materials*, **3**:12 (2004), 868–871.
- [7] S. Ikeda, J. Hayakawa, Y. Asashizawa, Y. M. Lee, K. Miura, H. Hasegawa, M. Tsunoda, F. Matsukura, H. Ohno, *Appl. Phys. Lett.*, **93**:8 (2008), 082508, 3 pp.
- [8] A. Vedyayev, N. Ryzhanova, N. Strelkov, M. Chshiev, B. Dieny, *J. Appl. Phys.*, **107**:10 (2010), 09C720, 3 pp.
- [9] F. Greullet, C. Tiusan, F. Montaigne, M. Hehn, D. Halley, O. Bengone, M. Bowen, W. Weber, *Phys. Rev. Lett.*, **99**:18 (2007), 187202, 4 pp.
- [10] Л. В. Келдыш, *ЖЭТФ*, **47**:5 (1964), 1515–1527.
- [11] С. В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма*, Наука, М., 1975.
- [12] A. Vedyayev, N. Ryzhanova, R. Vlutters, B. Dieny, N. Strelkov, *J. Phys.: Condens. Matter*, **12**:8 (2000), 1797–1804.

Поступила в редакцию 22.02.2011