

01:05:06

Осцилляции туннельного магнитосопротивления в структуре ферромагнетик/диэлектрик/ферромагнетик

© С.А. Игнатенко, А.Л. Данилюк, В.Е. Борисенко

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
220013 Минск, Белоруссия
e-mail: s2ign@tut.by

(Поступило в Редакцию 4 октября 2004 г.)

Разработана модель спин-зависимого транспорта электронов через структуру ферромагнетик/диэлектрик/ферромагнетик, учитывающая силы изображения, параметры туннельного барьера, эффективные массы туннелирующего электрона в барьере и ферромагнетике в рамках приближения свободных электронов. Расчеты, проведенные для структуры железо/оксид алюминия/железо, показывают, что туннельное магнитосопротивление с ростом прикладываемого напряжения монотонно убывает, а затем наблюдаются затухающие осцилляции, которые связаны с интерференцией волновых функций электронов в области проводимости потенциального барьера. Силы изображения увеличивают туннельное магнитосопротивление в 2–3 раза.

Введение

Структуры, содержащие чередующиеся ферромагнитные и диэлектрические слои, вызывают значительный исследовательский интерес [1,2] в связи с перспективностью их использования в интегрированных элементах памяти. Проводимостью таких структур можно управлять с помощью внешнего магнитного поля. Основной характеристикой указанных структур является туннельное магнитосопротивление (TMR).

Для расчетов TMR был разработан ряд моделей [3–10], которые отличаются учетом параметров потенциального барьера и влияния прикладываемого напряжения. Однако эти модели не позволяют описать наблюдаемого в экспериментах резкого уменьшения и отрицательных значений TMR при росте внешнего смещения, а также колебаний магнитосопротивления. Некоторые ограничения были устранены в работе [10], где моделирование осуществляли, решая трехмерное уравнение Шредингера. Однако до настоящего времени отсутствует адекватная физическая интерпретация наблюдаемых эффектов, в частности осцилляций магнитосопротивления.

В реальной структуре металл/диэлектрик/металл форма потенциальных барьеров отличается от прямоугольной вследствие влияния сил изображения [11]. Для туннелирующих электронов изменяются как высота барьера, так и его ширина. Так как величина TMR существенно зависит от параметров барьера [1,2], то для адекватного описания переноса электронов в структуре металл/диэлектрик/металл необходимо учитывать силы изображения. В предложенных ранее моделях [3–7,10] они не учитывались.

Целью данной работы является теоретическое исследование влияния сил изображения на спин-зависимый транспорт электронов в структуре ферромагнетик/диэлектрик/ферромагнетик с учетом прикладываемого потенциала, а также физическая интерпретация

нелинейного поведения TMR при росте внешнего смещения. Численное моделирование проведено для структуры, в которой в качестве ферромагнетика используется железо, а в качестве диэлектрика — оксид алюминия.

Модель

Моделируемая структура, состоящая из двух идентичных ферромагнетиков, между которыми находится слой немагнитного диэлектрика туннельной толщины, показана на рис. 1. При приложении потенциала в ней возникает ток, который состоит из двух компонент, образуемых электронами со спином вверх и со спином вниз. В отсутствие рассеяния смешивание их не происходит. Электроны с определенным спином, эмиттируемые из одного из ферромагнетиков, туннелируют в другой ферромагнетик, где они могут занимать лишь вакантные места с такой же спиновой поляризацией. При параллельной намагниченности обоих ферромагнетиков структура будет обладать наименьшим сопротивлением R_p , а при антипараллельной — наибольшим сопротивлением R_{ap} . Это обусловлено влиянием направления вектора намагниченности, который изменяет степень спиновой поляризации электронов [3]. Разность сопротивлений R_p и R_{ap} определяет величину TMR

$$\text{TMR} = \frac{R_{ap} - R_p}{R_{ap}}. \quad (1)$$

Силы изображения [11] делают потенциальный барьер, соответствующий диэлектрику, более плавным у границ с ферромагнетиком, как это схематично показано на рис. 1. Именно такая форма потенциального барьера заложена в предлагаемой нами модели. Кроме этого, в отличие от предшествующих моделей [3–7,10] мы учитываем поперечное движение электронов, различие в эффективных массах электронов с различной спиновой поляризацией в барьере и в ферромагнетике.

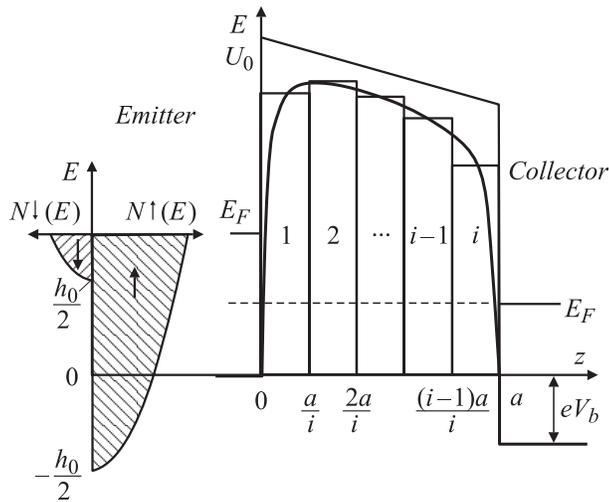


Рис. 1. Потенциальный профиль структуры ферромагнетик/диэлектрик/ферромагнетик при внешнем смещении V_b с учетом сил изображения.

В приближении свободных электронов зонный спектр спин-поляризованных носителей заряда в ферромагнетике описывается параболой для каждой спиновой компоненты. Разность между дном зоны спин-вверх поляризованных электронов и дном зоны спин-вниз поляризованных электронов отражает степень спиновой поляризации электронов в ферромагнетике и количественно описывается величиной молекулярного поля h_0 [4–7,10].

Если слои структуры расположены в направлении z , ее размеры в плоскости xu достаточно велики, чтобы не учитывать квантование при движении электронов вдоль границ раздела, то волновая функция электронов имеет вид

$$\Phi_\sigma = \psi_\sigma(z)e^{ik_{\parallel}\rho}, \quad (2)$$

где $\psi_\sigma(z)$ — продольная волновая функция (вдоль z -направления); k_{\parallel} — поперечный волновой вектор в плоскости xu ; $\rho = (x, y)$ — координата в плоскости барьера; σ — спин электрона (вверх — \uparrow или вниз — \downarrow).

При туннелировании электрона через потенциальный барьер поперечная составляющая энергии остается неизменной, что позволяет зафиксировать k_{\parallel} .

Одноэлектронное стационарное уравнение Шредингера для продольных волновых функций $\psi_\sigma(z)$ в i -области (рис. 1) имеет вид

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_{i\sigma}^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{i\sigma}^*} + U_0 - h_{0i}\sigma_i - eV_i - e\varphi_i \right] \psi_\sigma(z) = E\psi_\sigma(z), \quad (3)$$

где \hbar — постоянная Планка; e — заряд электрона; $m_{i\sigma}^*$ — эффективная масса электрона в i -области; U_0 — высота потенциального барьера; V_i — внешнее поле в i -области; $h_{0i}\sigma_i$ — внутренняя обменная энергия [5,7];

h_{0i} — молекулярное поле (внутри диэлектрика $h_0 = 0$); σ_i — матрица Паули; φ_i — потенциал сил изображения в i -области; E — полная энергия электрона.

Эффективная масса электрона в каждом слое изотропна и для электрона в ферромагнетике и диэлектрике различна. Величины h_{0i} и σ_i берутся вдоль оси намагниченности i -области.

Принимаем, что волновая функция $\psi_\sigma(z)$ в i -области представляет собой линейную комбинацию двух волн, соответствующих свободному движению электрона в противоположных направлениях: в области эмиттера имеется падающая и отраженная волны, а в коллекторе — только прошедшая. Область барьера разбивается на n слоев, для каждого из которых записывается своя волновая функция в соответствии с уравнением (3). Волновые векторы в эмиттере, коллекторе и барьере определяются следующим образом:

$$k_{\sigma em} = \frac{\sqrt{2m_{f\sigma}^* \left(E_z \pm \frac{h_0}{2} \right)}}{\hbar},$$

$$k_{\sigma col} = \frac{\sqrt{2m_{f\sigma}^* \left(E_z \pm \frac{h_0}{2} + eV_b \right)}}{\hbar},$$

$$k_i = \frac{\sqrt{2m_d^* \left(E_z - U_0 + \frac{i}{n}eV_b + \frac{1.15e^2 \ln 2}{8\pi\epsilon\epsilon_0 a} \frac{n^2}{i(n-i)} - \left(1 - \frac{m_d^*}{m_{f\sigma}^*} \right) E_{\parallel} \right)}}{\hbar}, \quad (4)$$

где $i = 1, 2, \dots, n$; $m_{f\sigma}^*$, m_d^* — эффективные массы электрона в ферромагнетике и диэлектрике соответственно; E_z , E_{\parallel} — продольная и поперечная составляющие энергии; V_b — прикладываемое к структуре внешнее напряжение; ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума; ϵ — относительная диэлектрическая проницаемость материала барьера; a — толщина барьера; четвертый член в выражении для волнового вектора в барьере описывает воздействие сил изображения [11]; член $(1 - m_d^*/m_{f\sigma}^*)E_{\parallel}$ отражает вклад поперечной составляющей энергии электрона на границе ферромагнетик/диэлектрик.

На всех границах областей накладываются условия непрерывности волновых функций $\psi_\sigma(z)$ и их первых производных $\psi'_\sigma(z)/m^*$.

Таким образом, мы получаем систему из $2(n+1)$ уравнений, для решения которой используем метод трансферной матрицы [12]. Она связывает амплитуды волн в эмиттере и коллекторе. В отличие от [10], где размерность матриц 4×4 , мы используем 2×2 матрицы для каждой спиновой ориентации в отдельности. Такой выбор обусловлен некогерентным распространением спинов и позволяет существенно упростить и ускорить расчет.

Коэффициент прохождения через исследуемую структуру равен отношению плотности потока прошедшей волны к плотности потока падающей волны.

Для расчета туннельного тока проводим суммирование вероятностей туннелирования по распреде-

Параметры структуры Fe/Al₂O₃/Fe

Параметр	Величина
Уровень Ферми E_F	1.3 eV [13]
Молекулярное поле h_0	1.9 eV [10,13]
Эффективная масса электрона со спином вверх в Fe $m_{f\uparrow}^*/m_e^-$	1.27 [13]
Эффективная масса электрона со спином вниз в Fe $m_{f\downarrow}^*/m_e^-$	1.36 [13]
Эффективная масса электрона в барьере (Al ₂ O ₃) m_a^*/m_e^-	0.4 [12]
Ширина потенциального барьера a	1–5 nm
Относительная диэлектрическая проницаемость наноразмерного оксида алюминия ϵ	5–10
Высота потенциального барьера в отсутствии внешнего смещения U_0	3.0–5.0 eV

лению электронов в эмиттере с помощью формулы Тсу–Исаки [12]

$$I = \frac{2\pi e}{\hbar^3} m_{f\sigma}^* \iint T(E_z, E_{\parallel}) (f_1 - f_3) dE_z dE_{\parallel}, \quad (5)$$

где I — туннельный ток, f_1 и f_3 — функции Ферми–Дирака в областях эмиттера и коллектора соответственно.

Суммирование проводим по двум независимым спиновым компонентам. При нулевой температуре выражение (5) преобразуется к виду

$$I = \frac{2\pi e}{\hbar^3} m_{f\sigma}^* \left(\int_{E_F - eV_b}^{E_F} \int_0^{E_F - E_z} T(E_z, E_{\parallel}) dE_{\parallel} dE_z + \int_0^{E_F - eV_b} \int_{E_F - E_z - eV_b}^{E_F - E_z} T(E_z, E_{\parallel}) dE_{\parallel} dE_z \right), \quad (6)$$

где E_F — энергия Ферми эмиттера.

В терминах туннельных токов I_p , I_{ap} , соответствующих параллельной и антипараллельной намагниченности ферромагнетиков, выражение (1) преобразуется к виду

$$\text{TMR} = \frac{I_p - I_{ap}}{I_p}. \quad (7)$$

Численные расчеты по предложенной модели выполнены для структуры Fe/Al₂O₃/Fe. Такой выбор обусловлен приемлемостью использования параболической зонной модели для свободных электронов железа, а также распространенностью оксида алюминия при изготовлении диэлектрических слоев туннельной толщины.

Результаты расчетов и их обсуждение

Параметры моделируемой структуры Fe/Al₂O₃/Fe приведены в таблице. Известно, что для электродов из железа туннельный ток определяется в основном свободными d -электронами [14]. Это подтверждает ранее выдвинутую гипотезу [15], согласно которой волновые векторы для электронов со спином вверх и вниз в железе на уровне Ферми соответственно равны 0.109 и 0.042 nm⁻¹.

Блоховские состояния других зон не имеют подходящей симметрии для эффективной связи через поверхность раздела ферромагнетик/диэлектрик и быстро затухают в потенциальном барьере [13,14].

Энергию Ферми E_F и величину молекулярного поля h_0 определяли в соответствии с расчетами из первых принципов [13] по положению дна зон для электронов со спином вверх и со спином вниз. Ширину потенциального барьера (Al₂O₃) варьировали от 1 до 5 nm, так как при толщине меньше 1 nm сложно получить сплошную пленку, а при толщине более 5 nm регистрируемый туннельный ток ничтожно мал [2,12].

На рис. 2 показана зависимость туннельного тока от внешнего смещения при толщине барьера 1 nm и высоте $U_0 = 3.6$ eV. При малых напряжениях ток для параллельной намагниченности больше (кривая 1), так как вероятность прохождения через барьер для электронов со спином вверх больше, чем для электронов со спином вниз, а спиновая поляризация туннельного тока положительна (рис. 1). При внешних смещениях 0.6–1.7 V ток для антипараллельной намагниченности превышает ток для параллельной намагниченности, что ведет к изменению знака TMR (7). Изменение намагниченности коллектора означает, что поляризация электронов в нем меняет знак. Для туннелирующих электронов со спином вверх это ведет к уменьшению вероятности

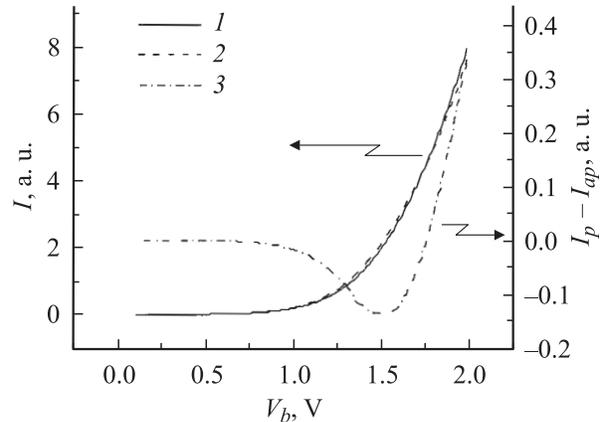


Рис. 2. Вольт-амперная характеристика структуры Fe/Al₂O₃/Fe для параллельной (1) и антипараллельной намагниченности (2). 3 — разность токов.

прохождения через потенциальный барьер. В то же время вероятность прохождения электронов со спином вниз растёт. Так как в токе электронов из эмиттера преобладает положительная поляризация ($k_{\uparrow em} > k_{\downarrow em}$), то изменение намагничённости ведёт к падению общего тока.

На рис. 3 показана зависимость TMR от внешнего смещения для различной ширины потенциального барьера без учета сил изображения. При низких напряжениях смещения величина TMR положительна и имеет практически максимальное значение. С ростом внешнего смещения TMR уменьшается и монотонно приближается к максимальному отрицательному значению, после чего наблюдаются затухающие осцилляции. С ростом ширины туннельного барьера уменьшается значение TMR при малых смещениях, а также частота и амплитуда осцилляций.

Зависимость TMR от внешнего смещения можно разделить на две части: монотонную и осциллирующую. Туннельный ток для каждой из них связан, вероятно, с различными механизмами. Для монотонной части убывание TMR и переход в отрицательную область обусловлены более резким ростом коэффициента прохождения электронов для случая антипараллельной намагничённости по сравнению с параллельной. Влияние степени спиновой поляризации электронов в эмиттере на TMR при этом менее существенно.

Рассмотрим две составляющие коэффициента прохождения электронов через потенциальный барьер, одна из которых зависит от отношения волновых векторов в ферромагнетиках, а вторая — от соотношения интенсивности проходящей и падающей волны (матричного элемента трансферной матрицы) [12]. С увеличением внешнего смещения первая составляющая растёт как для параллельной, так и для антипараллельной намагничённости. Причем при определенном внешнем смещении данные составляющие сближаются. Это обусловлено более существенной зависимостью туннельного прохождения электронов от внешнего электрического поля, чем от спиновой поляризации электронов в эмиттере и коллекторе. Таким образом, величина TMR с ростом внешнего смещения монотонно уменьшается вследствие сближения волновых векторов электронов.

Вторая составляющая, определяющая интенсивность проходящей волны по отношению к падающей, для антипараллельной намагничённости всегда больше. С ростом внешнего смещения эти интенсивности для каждой из намагничённостей пропорционально увеличиваются. С учетом первой составляющей это приводит к монотонному росту коэффициентов прохождения. Причем для антипараллельной намагничённости наблюдается более значительный рост. Это проявляется как монотонное уменьшение TMR и переход в отрицательную область (рис. 3).

При достижении напряжения, соответствующего максимальному отрицательному значению TMR, возникает согласование интерференции волновых функций

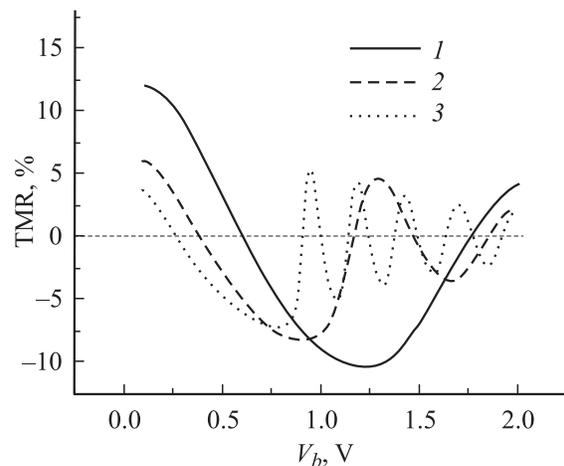


Рис. 3. Зависимость TMR структуры Fe/Al₂O₃/Fe от внешнего смещения для толщины Al₂O₃: 1 — 1, 2 — 2, 3 — 5 nm.

(наблюдается когерентность волновых функций электронов). Далее с ростом внешнего смещения прирост интенсивности проходящей волны для антипараллельной конфигурации начинает замедляться, что приводит к сближению значений коэффициентов прохождения для двух спиновых конфигураций и увеличению TMR. При этом интерференция волновых функций в области, где $eV_b > U_0 - E_F$, начинает оказывать преобладающее влияние на туннелирование электронов.

В этих условиях электроны с верхних энергетических уровней эмиттера через запрещенную зону диэлектрика проходят также и через его зону проводимости. В зоне проводимости диэлектрика они имеют действительный волновой вектор. Часть из них отражается от границы раздела диэлектрика с коллектором и интерферирует с налетающими электронными волнами. При этом с уменьшением толщины барьера требуется большее внешнее смещение для появления достаточно протяженной области проводимости в диэлектрике, через которую проходят электроны. Поэтому отрицательное значение TMR максимально для барьера с толщиной 1 nm.

В области осцилляций TMR превалирует вклад интерференции волновых функций в проводимость структуры, как для параллельной, так и для антипараллельной намагничённости ферромагнетиков. Рассогласование условий интерференции приводит к колебаниям коэффициентов прохождения. При этом условия возникновения пиков и спадов коэффициентов прохождения для различной намагничённости различаются, что и ведёт к осцилляции TMR. Таким образом, в основе возникновения осцилляций TMR лежит преобладание вклада в проводимость структуры интерференции падающей и отраженной электронных волн и рассогласование условий интерференции для различной намагничённости эмиттера и коллектора.

С увеличением напряжения амплитуда осцилляции TMR уменьшается, а период увеличивается. Уменьше-

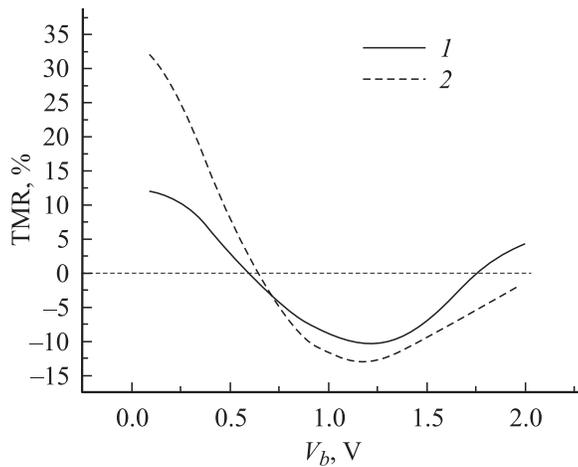


Рис. 4. Зависимость TMR структуры Fe/Al₂O₃/Fe от внешнего смещения при $a = 1$ nm: 1 — без учета сил изображения, 2 — с учетом.

ние амплитуды связано с тем, что с ростом напряжения разница между коэффициентами прохождения для двух различных намагниченностей ферромагнетиков уменьшается. Это наблюдается при смещениях 1–2 В, когда коэффициент прохождения для электронов с верхних энергетических уровней близок к единице. Увеличение периода осцилляций TMR связано с ростом барьера в области энергий ниже уровня Ферми в эмиттере. Отметим, что осцилляции TMR имеют место, только когда прикладываемое к структуре напряжение больше, чем разность между высотой потенциального барьера и уровнем Ферми, т. е. $V_b > U_0 - E_F$.

На рис. 4 показано влияние потенциала сил изображения на зависимость TMR от внешнего смещения при значении $\epsilon = 10$. В данном случае на величину TMR оказывают влияние два конкурирующих процесса. Первый состоит в росте TMR вследствие уменьшения эффективной ширины барьера. Второй заключается в уменьшении TMR за счет изменения формы барьера [16]. Первый процесс оказывает более сильное воздействие. Поэтому в целом учет сил изображения приводит к увеличению TMR. Так, для Fe/Al₂O₃/Fe структуры с шириной барьера 1 nm значение TMR при $V_b \rightarrow 0$ увеличивается в 2.5 раза (рис. 4). Отметим, что для электронов, туннелирующих с уровня Ферми при $a = 1$ nm, уменьшение эффективной ширины барьера составляет около 20%. При этом изменение формы потенциального барьера модифицирует условия возникновения интерференции, что проявляется как незначительное смещение отрицательного максимума TMR.

Заключение

Предложенная модель спин-зависимого переноса электронов через структуру ферромагнетик/диэлектрик/ферромагнетик и проведенное численное моделирова-

ние туннельных токов и TMR структуры Fe/Al₂O₃/Fe указывают на существенное влияние на них не только параметров туннельного барьера, эффективной массы туннелирующих электронов в барьере и ферромагнетике, но и сил изображения.

Показано, что величина магнитосопротивления с ростом внешнего смещения монотонно уменьшается вследствие сближения волновых векторов для электронов с различной спиновой поляризацией в коллекторе и достигает максимального отрицательного значения при возникновении согласованной, конструктивной интерференции волновых функций. Осцилляции магнитосопротивления обусловлены периодически меняющимися с увеличением внешнего смещения условиями интерференции электронных волн в коллекторе для параллельной и антипараллельной намагниченности ферромагнетиков. При этом учет сил изображения ведет к существенному росту магнитосопротивления в области малых внешних смещений вследствие уменьшения эффективной ширины и изменения формы потенциального барьера.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования Республики Беларусь (грант № 04-3065) и Фонда фундаментальных исследований Республики Беларусь (грант № Ф04М-039).

Список литературы

- [1] Moodera J.S., Kim T.H., Tanaka C. et al. // *Phil. Mag.* B. 2000. Vol. 80. N 2. P. 195–206.
- [2] Prinz G.A. // *Science*. 1998. Vol. 282. P. 1660–1663.
- [3] Julliere M. // *Phys. Lett.* 1975. Vol. 54A. N 3. P. 225–226.
- [4] MacLaren J.M., Zhang X.G., Butler W.H. // *Phys. Rev. B*. 1997. Vol. 56. N 18. P. 11 827–11 832.
- [5] Slonchewski J.C. // *Phys. Rev. B*. 1989. Vol. 39. N 10. P. 6995–7002.
- [6] Zhang J., White R.M. // *J. Appl. Phys.* 1998. Vol. 83. N 11. P. 6512–6514.
- [7] Zhang X., Li B.-Z., Sun G. et al. // *Phys. Rev. B*. 1997. Vol. 56. N 9. P. 5484–5488.
- [8] Miyazaki T., Tezuka N., Kumagai S. et al. // *J. Phys. D*. 1998. Vol. 31. P. 630–656. Sharma M., Wang S.X., Nickel J.H. // *Phys. Rev. Lett.* 1999. Vol. 82. N 3. P. 616–619.
- [9] LeClair P., Swagten H.J.M., Kohlhepp J.T. et al. // *Appl. Phys. Lett.* 2000. Vol. 76. N 25. P. 3783–3785.
- [10] Liu S.S., Guo G.Y. // *J. Magn. Magn. Mater.* 2000. Vol. 209. P. 135–137.
- [11] Simmons J.G. // *J. Appl. Phys.* 1963. Vol. 34. P. 1793.
- [12] Ferry D., Goodnick S. *Transport in Nanostructures* Cambridge, 1997. 512 p.
- [13] Davis A.H., MacLaren J.M. // *J. Appl. Phys.* 2000. Vol. 87. N 9. P. 5224–5226.
- [14] Butler W.H., Zhang X.-G., Schulthess T.C. et al. // *J. Appl. Phys.* 1999. Vol. 85. N 8. P. 5834–5839.
- [15] Stearns M.B. // *J. Magn. Magn. Mater.* 1977. Vol. 5. P. 167.
- [16] Montaigne F., Hehn M., Schuhl A. // *Phys. Rev. B*. 2001. Vol. 64. N 14. P. 144 402-1–144 402-4.