

01;05;06

## Влияние интерфейсного $s-d$ -рассеяния на транспорт в структурах ферромагнетик/диэлектрик/ферромагнетик

© С.А. Игнатенко

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

(Поступило в Редакцию 13 февраля 2006 г.)

Разработана двухзонная  $s-d$ -модель на основе метода функций Грина для расчета проводимости и туннельного магнитосопротивления структур ферромагнетик/диэлектрик/ферромагнетик. На примере Fe/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Fe показано, что  $s-d$ -рассеяние на границе раздела между ферромагнетиком и диэлектриком приводит к увеличению туннельного магнитосопротивления. Степень спиновой поляризации тока при этом уменьшается и даже становится отрицательной, что в основном связано с рассеянием сильно локализованных  $d$ -электронов в  $s$ -зону и последующим туннелированием сквозь диэлектрик.

PACS: 71.10.Fd, 72.10.-d, 72.10.Fk, 72.25.Ba, 72.25.Mk, 73.40.Rw

### Введение

Туннельные структуры ферромагнетик/диэлектрик/ферромагнетик (ФДФ) вызывают огромный исследовательский интерес вследствие перспектив использования в интегрированных элементах памяти. Их основными характеристиками являются туннельное магнитосопротивление (TMR) и сопротивление при параллельной и антипараллельной намагниченностях ферромагнетиков. В настоящее время ФДФ-структуры на пленках  $3d$ -ферромагнетиков и Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> могут показывать TMR более 40% при комнатной температуре [1]. В процессе изготовления на границе между ферромагнетиком и диэлектриком (интерфейсе) неминуемо образуются всевозможные дефекты — ионы примесей, шероховатость поверхности, границы зерен, дефекты упаковки, вакансии и др. Исследование влияния электронного рассеяния на дефектах является важным и необходимым шагом на пути производства структур с воспроизводимыми, повторяемыми характеристиками.

Для ферромагнитных металлов  $3d$ -группы расчеты из первых принципов показывают, что спиновая поляризация тока определяется симметрией блоховских состояний на уровне Ферми [2,3]. В зависимости от кристаллографического направления и спина в Fe, Co и Ni уровень Ферми могут пересекать  $s$ -,  $p$ - и/или  $d$ -состояния [4]. Из-за неидеальности выращиваемых слоев ферромагнетика, как правило, являются поликристаллическими и на границе с диэлектриком могут находиться в различной кристаллографической ориентации. Мы можем разделить все состояния на две принципиально различные группы: первая объединяет  $s$ - и  $p$ -, а вторая —  $d$ -состояния. Электроны, принадлежащие первой группе (далее  $s$ -электроны), ведут себя подобно свободным частицам. Они хорошо связываются с затухающими  $s$ -состояниями в диэлектрике и в основном определяют транспортные характеристики ФДФ-структуры. Электроны второй группы (далее  $d$ -электроны) сильно локализованы и не имеют подходящей симметрии со стороны слоя

диэлектрика. Они в основном определяют магнитные свойства вещества. Обменное взаимодействие между  $s$ - и  $d$ -зонами ( $sd$ -гибридизация) приводит к расщеплению спин-вниз зоны относительно спин-вверх.

В качестве материала диэлектрика ФДФ-структур наиболее часто используется оксид алюминия, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [5]. Структурный анализ пленок Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, выращенных естественным или плазменным окислением алюминия, показывает, что оксид алюминия аморфный, и его структура далека от идеальной [6].

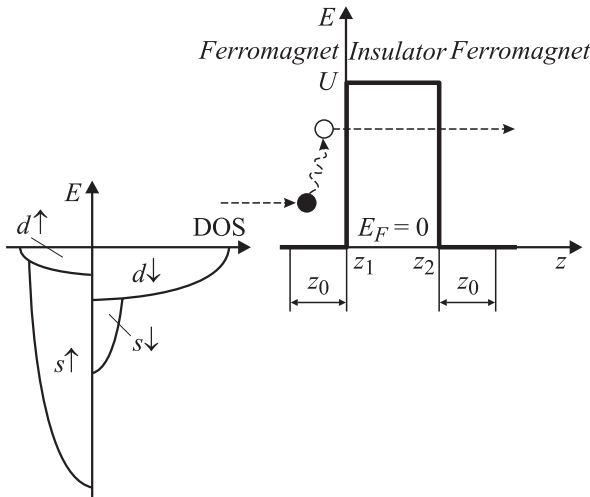
Аморфный барьер, дефекты интерфейсов и структурные неоднородности делают точные расчеты из первых принципов практически невозможными. Для трактовки диффузионного транспорта в этом случае необходимы более упрощенные модели.

Во многих случаях экспериментальные данные для ФДФ-структур хорошо качественно описываются моделью свободных электронов [7]. Это связано с хорошей аппроксимацией зонной структуры ферромагнетиков параболами (см., например, Fe в направлении [111], Ni в [110] [4]). В большинстве случаев теоретические модели используют однозонную модель, в предположении, что в транспорте участвуют только квазисвободные электроны [7,8]. Учет двух типов электронов, свободных  $s$  и локализованных  $d$ , был сделан лишь в [9], где авторы исследовали влияние поверхностного загрязнения ионами примеси на проводимость и TMR. Для адекватного описания реальной зонной структуры периодическая часть  $s-d$ -гибридизации учитывалась в относительном смещении спин-вверх зоны относительно спин-вниз. Было установлено, что интерфейсное  $s-d$ -рассеяние вследствие ионов примесей существенно меняет электронный транспорт. Модель [9] учитывает рассеяния только вследствие загрязнения ионами примеси. Влияние  $sd$ -связывания между ферромагнетиком и диэлектриком также исследовалось в работе [10], где было показано значительное изменение степени спиновой поляризации тока в системе Co(Fe)/диэлектрик/нормальный металл.

В данной работе мы проводим анализ влияния  $s-d$ -рассеяния вследствие разнообразных дефектов границы раздела между ферромагнетиком и диэлектриком на проводимость и TMR структур ФДФ. Для этой цели разработана численная модель на основе рекурсивного метода функций Грина. Мы показываем, что связывание между  $s$ - и  $d$ -электронами приводит к увеличению TMR благодаря спин-вниз  $d$ -электронам в параллельной конфигурации. Степень спиновой поляризации тока при этом уменьшается и может даже становиться отрицательной.

### Модель

Будем рассматривать трехслойную ФДФ-структуру, в которой два полубесконечных ферромагнетика разделены диэлектриком туннельной толщины (рис. 1). Поликристаллические ферромагнитные электроды описываются двухзонной  $s-d$ -моделью. Первая зона образована легкими, подвижными  $s$ -состояниями, а вторая зона — тяжелыми, более локализованными  $d$ -электронами. Для обеих зон предполагаем параболическое дисперсионное соотношение, т.е. электроны считаем свободными (участвующими в транспорте). Для компонент спин-вверх и спин-вниз соответствующие параболы смещены друг относительно друга. Величина смещения определяется периодической частью  $s-d$ -гибридизации. Тонкий слой изотропного диэлектрика представляет потенциальный барьер для туннелирующих частиц (рис. 1). На границах раздела между диэлектриком и ферромагнетиками присутствует слой дефектов (шероховатость поверхности, ионы примесей и др.). В нем электроны претерпевают рассеяние, переходя из одной зоны в другую и обратно.



**Рис. 1.** Потенциальный профиль структуры ферромагнетик/диэлектрик/ферромагнетик. Слева изображена  $s-d$ -зонная структура ферромагнетика. Штриховыми линиями схематично показан один из вариантов  $s-d$ -рассеяния в интерфейсной области  $z_0$ .

Пусть  $z_1$  и  $z_2$  — позиции интерфейсов, плоскость  $x-y$  расположена параллельно слоям диэлектрика и ферромагнетиков, а ось  $z$  — перпендикулярно, в направлении туннелирования электронов (рис. 1). Гамильтониан исследуемой системы записывается в виде

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\sigma} \int dr c_s^{\sigma+}(r) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_s^*} \nabla^2 + U(z) \right] c_s^{\sigma}(r) \\
 & + \sum_{\sigma} \int dr c_d^{\sigma+}(r) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_d^*} \nabla^2 + U(z) \right] c_d^{\sigma}(r) \\
 & + \sum_{\alpha=1,2} \sum_{\sigma} \sum_n \int dr \delta(z - z^{\alpha}) \delta(\rho - \rho_n^{\alpha}) \\
 & \times \gamma_n^{\alpha} [c_s^{\sigma+}(r) c_d^{\sigma}(r) + c_d^{\sigma+}(r) c_s^{\sigma}(r)], \quad (1)
 \end{aligned}$$

где  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  — спиновой индекс;  $c_s^{\sigma+}(r)$ ,  $c_d^{\sigma+}(r)$ ,  $c_s^{\sigma}(r)$  и  $c_d^{\sigma}(r)$  — операторы рождения и уничтожения  $s$ - и  $d$ -электронов со спином  $\sigma$  в точке  $r = (x, y, z)$ ;  $U(z)$  — потенциальный барьер (рис. 1);  $\alpha = 1, 2$  — номера интерфейса;  $\rho_n^{\alpha}$  — координата точки  $n$  в плоскости  $(x, y)$  в интерфейсе  $\alpha$ ;  $\gamma_n^{\alpha}$  — случайный параметр рассеяния между  $s$ - и  $d$ -электронами. Первые два слагаемых в (1) являются обычным гамильтонианом движения частицы в потенциальном поле, в то время как последнее слагаемое описывает взаимное рассеяние двух типов электронов. Каждая точка  $\rho_n^{\alpha}$  внутри интерфейса  $\alpha$  характеризуется случайным потенциалом  $\gamma_n^{\alpha}$   $s-d$ -гибридизации.

Решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (1) для реальной структуры с некоторым уникальным распределением интерфейсных дефектов (вообще говоря, заранее неизвестным) является довольно трудоемкой задачей. Сделаем одно упрощение. Будем считать, что центры рассеяния внутри интерфейсов распределены равномерно. Туннелирующий электрон испытывает  $s-d$ -рассеяния одинаково во всех точках  $\rho_n^{\alpha}$  в пределах интерфейса  $\alpha$ , т.е. каждая поперечная точка в плоскости  $(x, y)$  становится эквивалентной. Учитывая, что рассматриваемые ферромагнитные электроды поликристаллические, а слой диэлектрика изотропный, мы можем решать уравнение Шредингера лишь для одной поперечной точки. Будем считать, что размеры ФДФ-структуры в плоскости  $(x, y)$  достаточно большие и квантования в движении электрона не происходит. Таким образом, волновая функция, являющаяся решением уравнения Шредингера с гамильтонианом (1), может быть разделена на произведение двух независимых составляющих  $\Psi_{s(d)}^{\sigma} = \psi_{s(d)}^{\sigma}(z) \exp(i\kappa_{s(d)}^{\sigma}(x + y))$ , где  $\kappa_{s(d)}^{\sigma}$  — волновой вектор  $s-d$ -электрона со спином  $\sigma$  в плоскости  $(x, y)$ .

Для волновой функции вдоль оси  $z$  в дискретном случае запишем

$$|\psi_{s(d)}^{\sigma}\rangle = \sum_j \exp(ik_{s(d)}^{\sigma} j) a_j^{\sigma+} |0\rangle, \quad (2)$$

где  $k_{s(d)}^{\sigma}$  — продольный волновой вектор;  $j$  — координата узла сетки дискретизации. Гамильтониан (1)

в стандартной решеточной модели сильной связи [11] переписывается в виде

$$H^\sigma = \begin{pmatrix} H_{ss}^\sigma & H_{sd}^\sigma \\ H_{ds}^\sigma & H_{dd}^\sigma \end{pmatrix}, \quad (3,a)$$

$$H_{ss}^\sigma = \sum_j (\varepsilon_{0s} + U_j + V_{sj}^\sigma) c_{sj}^{\sigma+} c_{sj}^\sigma - t_s \sum_j (c_{sj}^{\sigma+} c_{s,j+1}^\sigma + c_{sj}^{\sigma+} c_{s,j-1}^\sigma), \quad (3,b)$$

$$H_{dd}^\sigma = \sum_j (\varepsilon_{0d} + U_j + V_{dj}^\sigma) c_{dj}^{\sigma+} c_{dj}^\sigma - t_d \sum_j (c_{dj}^{\sigma+} c_{d,j+1}^\sigma + c_{dj}^{\sigma+} c_{d,j-1}^\sigma), \quad (3,c)$$

$$H_{sd} = H_{ds} = \sum_j \gamma_j (c_{sj}^+ c_{dj} + c_{dj}^+ c_{sj}), \quad (3,d)$$

где  $t_s = \hbar^2/2m_s^*a^2$  — прыжковый интеграл  $s$ -электрона между узлами сетки;  $a$  — расстояние между соседними узлами;  $\varepsilon_{0s} = 4t_s$ ;  $t_d$  и  $\varepsilon_{0d}$  — аналогичны для  $d$ -электрона;  $V_{sj}^\sigma$  и  $V_{dj}^\sigma$  — дно потенциальных ям  $s$ - и  $d$ -электронов со спином  $\sigma$ . Потенциал  $s$ - $d$ -рассеяния  $\gamma_j$  входит только в недиагональные элементы матрицы гамильтониана (3,a) и таким образом связывает электроны из  $s$ - и  $d$ -зон. Диагональные элементы (3,b) и (3,c) описывают обычный процесс туннелирования сквозь потенциальный барьер  $U_j$ .

В реальных структурах ширина интерфейсной области имеет некоторую конечную ширину, в то время как исходный гамильтониан содержит  $\delta$ -подобный интерфейс (1). Континуальная модель с гамильтонианом (1) пренебрегает существованием кристаллической решетки. Слишком узкий интерфейс будет приводить к малым поправкам в проводимость из-за рассеяния. Очевидно, что это слабо соответствует реальным процессам рассеяния. По этой причине мы вводим область рассеяния конечной ширины порядка расстояния между атомными плоскостями на границе ферромагнетика и диэлектрика.

Поскольку мы рассматриваем рассеяние только на интерфейсе, то потенциал  $\gamma_j$  принимает ненулевые значения только на границе раздела между ферромагнетиком и диэлектриком. Предполагаем, что распределение потенциала  $s$ - $d$ -рассеяния случайное и лежит в интервале  $-\gamma \leq \gamma_j \leq +\gamma$ , а среднее значение  $\langle \gamma_j \rangle = 0$ . По существу, наша модель некоррелированного беспорядка в узлах сетки дискретизации является расширением модели Андерсона [12] на двухзонную систему. Здесь мы рассматриваем лишь смешивание между  $s$ - и  $d$ -зонами, когда беспорядок вводится только в недиагональные элементы гамильтониана. Однако модель может быть легко распространена на случай „обычного“ беспорядка с помощью добавления соответствующих членов в диагональные части (3,b) и (3,c). Единственный параметр, описывающий беспорядок, это —  $\gamma$ . Он показывает степень беспорядка и характеризует рассеяние вследствие различных дефектов в интерфейсе.

Для расчета проводимости ФДФ-структуры использовалась известная формула Тсу-Исаки. Так же как и гамильтониан (3), она является  $2 \times 2$  квадратной матрицей. Диагональные элементы описывают проводимость вследствие прямого туннелирования, а недиагональные — вследствие межзонного  $s$ - $d$ -рассеяния. Недиагональные элементы эквивалентны вершинным поправкам к проводимости [9]. В пределе малых прикладываемых напряжений и низкой температуры проводимость записывается как (спиновый индекс здесь и далее опускаем) [13]:

$$G_\alpha = \frac{e^2 m_\alpha^*}{2\pi^2 \hbar^3} \int_{\max\{V_\alpha, V_\beta\}}^{E_F} (T_{\alpha\alpha}(E) + T_{\alpha\beta}(E)) dE, \quad (4)$$

где индексы  $\alpha$  и  $\beta$  обозначают  $s$ - и  $d$ -зоны;  $T_{\alpha\beta}(E)$  — коэффициент прохождения из  $\alpha$ -зоны эмиттера в  $\beta$ -зону коллектора для электрона с продольной компонентой энергии  $E$ . Интегрирование ведется от максимального положения дна потенциалов эмиттера  $V_\alpha$  и коллектора  $V_\beta$ .

Отметим, что проводимость (4) в основном будет определяться электронами с наибольшей продольной энергией  $E \rightarrow E_F$  из-за экспоненциального роста вероятности туннелирования от энергии.

Коэффициенты прохождения в (4) определяются как отношение потоков прошедшей волны к падающей [11,13]. Поток, в свою очередь, равен произведению скорости волны  $v_{s(d)}$  на ее амплитуду. Для скорости запишем

$$v_{s(d)} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} = -\frac{2t_{s(d)}a}{\hbar} \sin(k_{s(d)}a), \quad (5)$$

где  $k_{s(d)}$  — волновой вектор  $s(d)$  электрона. Амплитуды прошедшей и падающей волн определяются матрицей рассеяния  $S$  [11]:

$$S = \begin{pmatrix} S_{ss} & S_{sd} \\ S_{ds} & S_{dd} \end{pmatrix} \quad (6,a)$$

$$S_{ss} = -2it_s \sin(k_s a) g_{ss}^{N+1,0}, \quad (6,b)$$

$$S_{sd} = -g_{sd}^{N+1,0} (t_d \exp(ik_d a) - t_s \exp(-ik_s a)), \quad (6,c)$$

$$S_{ds} = -g_{ds}^{N+1,0} (t_s \exp(ik_s a) - t_d \exp(ik_d a)), \quad (6,d)$$

$$S_{dd} = -2it_d \sin(k_d a) g_{dd}^{N+1,0}, \quad (6,e)$$

где  $g_{sd}^{N+1,0}$  — функция Грина, связывающая  $s$ -зону в узле 0 эмиттера и  $d$ -зону в узле  $N+1$  коллектора;  $g_{ss}^{N+1,0}$ ,  $g_{ds}^{N+1,0}$ ,  $g_{dd}^{N+1,0}$  — аналогично. Для расчета функций Грина использовался рекурсивный метод [11].

Для проверки правильности расчета на каждом шаге интегрирования в (4) проводится следующий тест: сумма всех коэффициентов прохождения и отражения должна быть равна двум. Число 2 обозначает две одновременно падающие волны — одна из  $s$ -зоны, вторая — из  $d$ -зоны. Для коэффициентов отражения записываются выражения, аналогичные коэффициентам прохождения [11,14].

Параметры структуры Fe/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Fe

Параметр	Значение
Энергия Ферми $E_F$ , eV	0
Высота потенциального барьера $U_s = U_d$ , eV	3.0
Ширина потенциального барьера $a$ , nm	1.0 [16]
Ширина интерфейса (области рассеяния) $z_0$ , nm	0.28
Волновой вектор Ферми $s$ -электронов со спином вверх $k_s^\uparrow$ , nm <sup>-1</sup>	10.9 [15]
Волновой вектор Ферми $s$ -электронов со спином вниз $k_s^\downarrow$ , nm <sup>-1</sup>	4.2 [15]
Волновой вектор Ферми $d$ -электронов со спином вверх $k_d^\uparrow$ , nm <sup>-1</sup>	0.5
Волновой вектор Ферми $d$ -электронов со спином вниз $k_d^\downarrow$ , nm <sup>-1</sup>	1.4
Эффективная масса $s$ -электронов $m_s^*/m_0$	1.0
Эффективная масса $d$ -электронов $m_d^*/m_0$	10.0
Потенциал $s-d$ -рассеяния $\gamma$ , eV	0–3.0

Полная проводимость ФДФ-структуры определяется как сумма компонент спин-вверх и спин-вниз. Зная проводимости для параллельной ( $G^P$ ) и антипараллельной ( $G^{AP}$ ) намагниченностей ферромагнетиков, определяем TMR (1) как

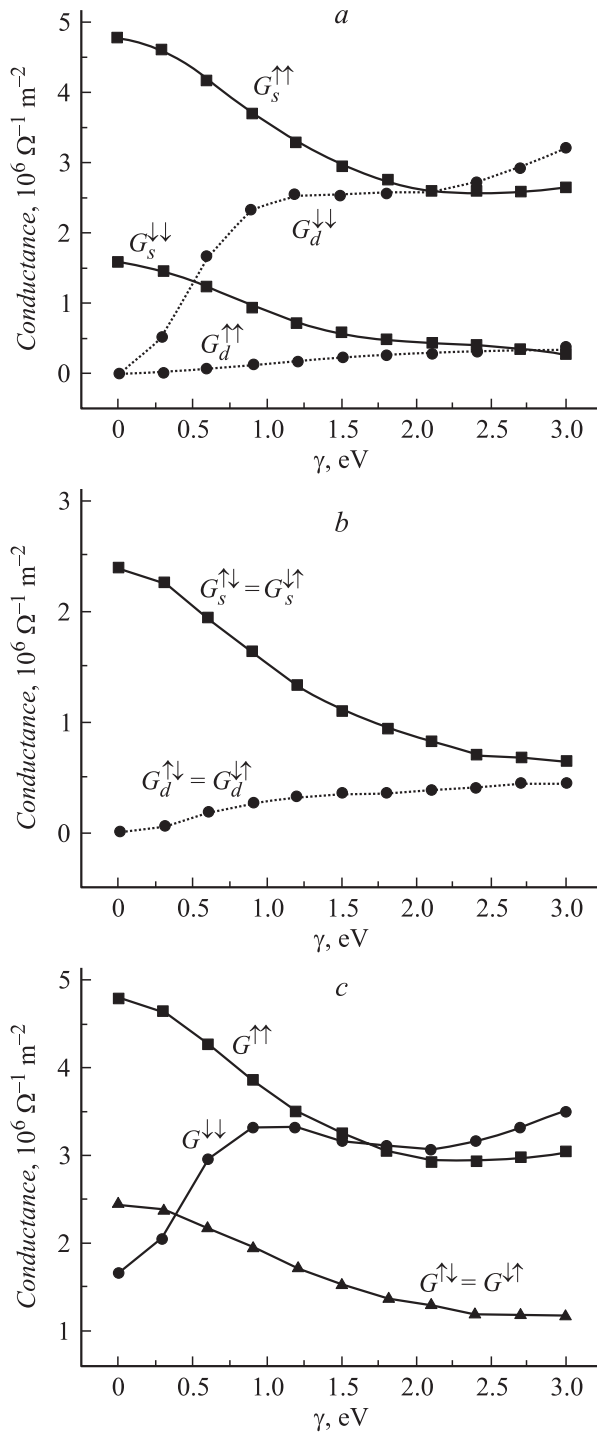
$$TMR = \frac{G^P - G^{AP}}{G^P} 100\%. \quad (7)$$

### Результаты расчетов

Для расчета выберем ФДФ-структуру на основе железо/оксид алюминия/железо. Параметры исследуемой Fe/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-структуры приведены в таблице. В соответствии с оценками [15], для подвижных  $s$ -электронов в железе волновые векторы на уровне Ферми равны  $k_s^\uparrow = 10.9$  и  $k_s^\downarrow = 4.2 \text{ nm}^{-1}$ , а эффективная масса  $m_s^* = 1.0m_0$  ( $m_0$  — масса покоя электрона). Эффективные массы в ферромагнетике и диэлектрике считались одинаковыми. Для более локализованных  $d$ -электронов  $m_d^* = 10m_0$ . Их плотность состояний на уровне Ферми значительно превышает плотность  $s$ -носителей [4], и для ориентации спин-вниз плотность состояний больше, чем для спин-вверх. Это означает, что  $k_d^\downarrow > k_d^\uparrow$ . Значения волновых векторов выбирались таким образом, чтобы удовлетворять типичным отношениям плотностей состояний для  $3d$ -переходных металлов [9]. Значение волнового вектора определяет положение дна зоны относительно уровня Ферми. Уровень Ферми фиксировали на нуле. Ширина области раздела между ферромагнетиком и диэлектриком  $z_0$ , в которой происходит рассеяние электронов, брались равной размеру элементарной ячейки кристаллической решетки  $bcc$  железа [4]. Ширина слоя диэлектрика выбиралась в соответствии с оптимальными экспериментальными значениями для ФДФ-структур [16]. Для расчета каждой точки проводимости проводилось усреднение по 1000 различных конфигураций потенциала рассеяния  $\gamma$ .

На рис. 2, *a* показана зависимость проводимости ФДФ-структуры от величины рассеивающего потенциала  $\gamma$  для случая параллельной намагниченности ферромаг-

нетиков. При  $\gamma = 0$  электрон из  $s$ -зоны одного ферромагнетика туннелирует непосредственно в  $s$ -зону второго ферромагнетика, и электрон из  $d$ -зоны туннелирует в  $d$ -зону. Оба процесса проходят без смешивания, независимо друг от друга. Вероятности туннелирования пропорциональны квадратам диагональных элементов матрицы рассеяния (6). Для  $d$ -электронов вероятность туннелирования значительно меньше, чем для  $s$ -электронов. Это связано с большой эффективной массой  $m_d^* = 10m_s^*$ . Волновая функция  $d$ -электрона быстро затухает в области диэлектрика. Фактически во всех исследуемых случаях вклад в проводимость от прямого туннелирования  $d$ -электронов ничтожно мал. Слабая связь волновых функций  $d$ -симметрии через интерфейс ферромагнетик/диэлектрик является причиной экспериментально наблюдаемой положительной спиновой поляризации тока для ферромагнитных металлов третьей группы [17]. Для выбранных исходных данных при  $\gamma = 0$  проводимость спин-вверх и спин-вниз  $s$ -электронов на 15 порядков и выше, чем для  $d$ -носителей. Увеличение рассеивающего потенциала  $\gamma$  приводит к связыванию  $d$ -волновой функции с  $s$ -функцией в интерфейсной области  $z_0$ . Для электронов открываются дополнительные каналы между  $s$ - и  $d$ -зонами, которые количественно описываются недиагональными элементами матрицы рассеяния (6). Так, например, электрон из  $d$ -зоны эмиттера рассеивается в  $s$ -канал и затем туннелирует в сквозь диэлектрик в коллектор. Эффективность данного процесса особенно велика для ориентации спин-вниз ( $\downarrow\downarrow$ , см. рис. 2, *a*). Для  $s$ -электронов открывается два эффективных канала вследствие рассеяния на двух интерфейсах. В первом канале  $s$ -электрон проходит через диэлектрик и рассеивается в  $d$ -зону на границе диэлектрик/ферромагнетик. Проводимость при этом увеличивается. Второй канал, наоборот, уменьшает проводимость. В нем электрон рассеивается на границе ферромагнетик/диэлектрик в  $d$ -зону и отражается обратно в эмиттер. Поскольку эффективность последнего процесса выше, на рис. 2, *a* наблюдается уменьшение  $G_s^{\uparrow\uparrow}$  и  $G_s^{\downarrow\downarrow}$  при увеличении  $\gamma$ . В целом, увеличение потенциала  $\gamma$  от 0 до 3.0 eV приводит к падению  $G^{\uparrow\uparrow}$  на  $\sim 40\%$  и



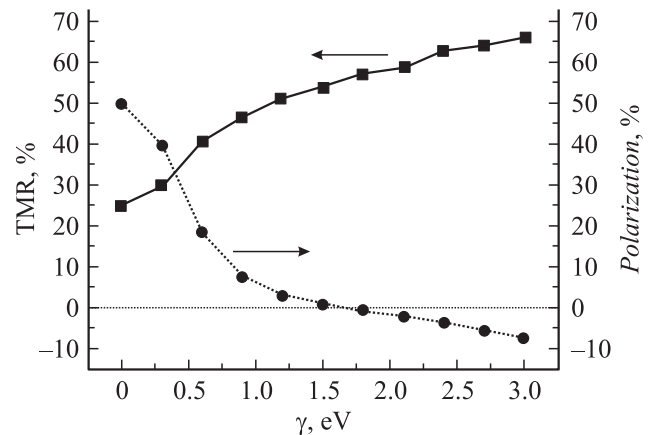
**Рис. 2.** Влияние поверхностного  $s-d$ -рассеяния на проводимость структуры ФДФ при параллельной (а) и антипараллельной (б) намагниченности ферромагнетика. Суммарная проводимость определяется как сумма  $s$ - и  $d$ -компонент  $G^{\uparrow(\downarrow)\uparrow} = G_s^{\uparrow(\downarrow)\uparrow} + G_d^{\uparrow(\downarrow)\uparrow}$ ,  $G^{\uparrow\downarrow} = G^{\downarrow\uparrow} = G_s^{\uparrow\downarrow} + G_d^{\uparrow\downarrow} = G_s^{\downarrow\uparrow} + G_d^{\downarrow\uparrow}$  (с).

увеличению  $G^{\downarrow\downarrow}$  почти в два раза (рис. 2, с). Заметим, что для  $\downarrow\downarrow$  ориентации увеличение проводимости существенно нелинейно, что связано с большим взаимным перекрытием  $s$ - и  $d$ -зон.

При антипараллельной намагниченности ферромагнетиков в транспорте участвуют электроны, продольная компонента энергии которых лежит в интервале  $\max\{V_{s(d)}^{\uparrow}, V_{s(d)}^{\downarrow}\} \dots E_F$  [8]. Это означает, что для  $s$ - и  $d$ -электронов  $G^{\uparrow\downarrow} = G^{\downarrow\uparrow}$ , а график зависимости проводимости от величины рассеивающего потенциала (рис. 2, б) содержит две кривые —  $s$  и  $d$ . Физические процессы, описанные выше для параллельной намагниченности остаются неизменными. Разница заключается лишь в том, что увеличение  $\gamma$  до 3.0 eV приводит к уменьшению суммарной проводимости почти в два раза (рис. 2, с).

В принципе, поверхностное  $s-d$ -расстояние открывает множество дополнительных каналов для носителей заряда, однако для обеих конфигураций намагниченности ферромагнетиков можно выделить только два, оказывающих наибольшее воздействие на проводимость. Первый — это рассеяние легких  $s$ -электронов на границе ферромагнетик/диэлектрик в  $d$ -зону и последующее отражение обратно в эмиттер. Второй канал связан с тяжелыми  $d$ -электронами, которые рассеиваются на интерфейсе ферромагнетик/диэлектрик в  $s$ -зону и затем туннелируют сквозь диэлектрик в коллектор.

В отсутствие поверхностного  $s-d$ -рассеяния исследуемая ФДФ-структура обладает TMR = 25% (7) (рис. 3). Увеличение потенциала  $\gamma$  вызывает увеличение TMR почти в два с половиной раза, что связано в основном с вкладом спин-вниз  $d$ -электронов в параллельной конфигурации (рис. 2, а). Разница между проводимостями при параллельной и антипараллельной намагниченности увеличивается (рис. 2, с) и, как следствие, растет TMR. На рис. 3 также показана спиновая поляризация проводимости (тока)  $P = (G^{\uparrow} - G^{\downarrow}) / (G^{\uparrow} + G^{\downarrow})$  при параллельной конфигурации в зависимости от  $\gamma$ . Как видно,  $P$  монотонно уменьшается и при  $\gamma > 1.5$  eV даже становится отрицательной. В отсутствие рассеяния  $P$  определяется в основном  $s$ -электронами, для которых степень спиновой поляризации в объеме ферромагнетика положительна  $k_s^{\uparrow} > k_s^{\downarrow}$ . Интерфейсное  $s-d$ -рассеяние увеличивает вклад в проводимость  $d$ -электронов, сте-



**Рис. 3.** Зависимость TMR и спиновой поляризации тока от величины поверхностного  $s-d$ -рассеяния.

пень поляризации которых отрицательна  $k_d^\downarrow > k_d^\uparrow$ , что и проявляется в уменьшении  $P$  (рис. 3). Отметим, что речь идет о степени поляризации непосредственно за областью рассеяния  $z_0$  в коллекторе. В глубине ферромагнетика, на расстоянии нескольких межатомных слоев,  $P$  восстанавливается до объемных значений  $P = 50\%$ . Полученные результаты согласуются с результатами теоретических расчетов [10]. В работе [18] экспериментально было показано изменение знака спиновой поляризации при замене диэлектрика с  $\text{Al}_2\text{O}_3$  на  $\text{SrTiO}_3$  или  $\text{Ce}_{0.69}\text{La}_{0.31}\text{O}_{1.845}$  и объяснено как результат связывания  $d$ - и  $s$ -волновых функций на интерфейсах. Включение ультратонкой прослойки Ru в интерфейс  $\text{Co}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Co}$  туннельного перехода может также приводить к изменению знака поляризации [19]. Авторы объясняют это как результат сильной модификации плотности состояний в интерфейсе  $\text{Co}/\text{Ru}$ . Варьируя параметры пленки Ru, возможно управлять поверхностным связыванием и квантовыми состояниями на границе раздела ферромагнетик/диэлектрик.

В экспериментальных исследованиях загрязнение поверхности раздела между ферромагнетиком и диэлектриком иногда приводит к уменьшению TMR. Так, например, уменьшение TMR наблюдалось при добавлении в интерфейс тонкого слоя Cr [20]. В ходе окисления алюминия может происходить нежелательное переокисление нескольких атомных слоев ферромагнетика с образованием  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ,  $\text{CoO}$ ,  $\text{Co}_2\text{O}_4$  [6,16]. TMR при этом уменьшается. Это говорит о присутствии иных механизмов рассеяния помимо описанного в данной работе. Для адекватного сравнения с экспериментальными данными необходимо [21], во-первых, учитывать каждый тип дефектов в отдельности (например, ясно, что вакансии и шероховатость поверхности по-разному будут влиять на транспорт электронов) и, во-вторых, разрабатывать полностью трехмерную численную модель.

## Заключение

Предложена двухзонная  $s-d$ -модель для описания диффузионного режима спин-зависимого транспорта в магнитных туннельных переходах типа ферромагнетик/диэлектрик/ферромагнетик. Исследовано влияние межзонного  $s-d$ -рассеяния в неидеальных интерфейсах на проводимость и TMR. Для расчета проводимости использованы формула Тсу-Исаки и рекурсивный метод функций Грина. На примере системы  $\text{Fe}/\text{Al}_2\text{O}_2/\text{Fe}$  показано, что:

1) существуют только два канала, которые оказывают наибольшее воздействие на проводимость — это рассеяние легких  $s$ -электронов на границе ферромагнетик/диэлектрик в  $d$ -зону с последующим отражением обратно в эмиттер и рассеяние тяжелых  $d$ -электронов в  $s$ -зону с последующим туннелированием сквозь диэлектрик в коллектор;

2)  $s-d$ -рассеяние увеличивает проводимость при параллельной намагниченности ферромагнетиков и уменьшает при антипараллельной, причем увеличение при

параллельной намагниченности связано с вкладом из-за  $d$ -электронов;

3) с ростом потенциала  $s-d$ -рассеяния от 0 до 3.0 eV TMR увеличивается в 2.5 раза, в то время как степень спиновой поляризации уменьшается и при  $\gamma > 1.5$  eV даже становится отрицательной.

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда фундаментальных исследований Республики Беларусь, грант Ф04М-039.

## Список литературы

- [1] Parkin S.S.P., Roche K.P., Samant M.G. et al. // J. Appl. Phys. 1999. Vol. 85. N 8. P. 5828–5833.
- [2] McLaren J.M., Zhang X.-G., Butler W.H. et al. // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 59. N 8. P. 5470–5478.
- [3] Butler W.H., Zhang X.-G., Schulthess T.C. et al. // Phys. Rev. B. Vol. 63. P. 054416-1–054416-12.
- [4] Moruzzi V.L., Janak J.F., Williams A.R. Calculated Electronic Properties of Metals. Pergamon, 1978. 196 p.
- [5] Moodera J.S., Kim T.H., Tanaka C. et al. // Phil. Mag. B. 2000. Vol. 80. N 2. P. 195–206.
- [6] Mitsuzuka T., Matsuda K., Kamijo A. et al. // J. Appl. Phys. 1999. Vol. 85. N 8. P. 5807–5809.
- [7] Zhang X., Li B.-Z., Sun G. et al. // Phys. Rev. B. 1997. Vol. 56. N 9. P. 5484–5488. Mointagne F., Hehn M., Schuhl A. // Phys. Rev. B. 2001. Vol. 14. P. 144402-1–144402-4.
- [8] Игнатенко С.А., Данилюк А.Л., Борисенко В.Е. // ЖТФ. 2005. Т. 85. Вып. 6. С. 8–12.
- [9] Bagrets D., Bagrets A., Vedyayev A. et al. // Phys. Rev. B. 2002. Vol. 65. P. 064430-1–064430-19.
- [10] Tsymal E.Yu., Pettifor D.G. // J. Phys. Condens. Matter. 1997. Vol. 9. P. L411–L417.
- [11] Datta S. Electronic Transport in Mesoscopic Systems. Cambridge, 1995. 377 p.
- [12] Anderson P.W. // Phys. Rev. 1958. Vol. 109. P. 1492–1505.
- [13] Davies J.H. The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction. Cambridge, 1998. 438 p.
- [14] Игнатенко С.А., Борисенко В.Е. // ФТП. 2005. Т. 39. Вып. 9. С. 1083–1087.
- [15] Stearns M.B. // J. Magn. Magn. Mater. 1977. Vol. 5. N 2. P. 167–171.
- [16] Moodera J.S., Gallagher E.F., Robinson K. et al. // Appl. Phys. Lett. 1997. Vol. 70. N 22. P. 3050–3052.
- [17] Monsma D.J., Parkin S.S.P. // Appl. Phys. Lett. 2000. Vol. 77. N 5. P. 720–722.
- [18] De Teresa J.M., Barthelemy A., Fert A. et al. // Science. 1999. Vol. 286. P. 507–509.
- [19] LeClair P., Hoex B., Wieldraaijer H. et al. // Phys. Rev. B. Vol. 64. P. 100406-1–100406-4.
- [20] LeClair P., Kohlhepp J.T., Swagten H.J.M. et al. // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 86. N 6. P. 1066–1069.
- [21] Gebele O., Bohm M., Krey U. et al. // J. Magn. Magn. Mater. 2000. Vol. 214. P. 309–326.