

Эффект спиновой фильтрации в двойных туннельных переходах: двухзонная модель электронной структуры магнитных диэлектриков

Т. А. Хачатурова, М. А. Белоголовский¹⁾, А. И. Хачатуров

Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина Национальной АН Украины, 83114 Донецк, Украина

Поступила в редакцию 27 января 2010 г.

После переработки 11 марта 2010 г.

Обсуждается влияние верхнего края валентной зоны изолятора на эффект спиновой фильтрации в туннельных структурах с наноразмерными слоями магнитного диэлектрика. Показано, что в том случае, когда уровень Ферми находится посередине запрещенной зоны диэлектрика, данный эффект полностью исчезает при нулевом напряжении смещения и существенно подавляется при конечных напряжениях. Указанное обстоятельство и является основной причиной наблюдавшегося недавно гигантского расхождения между теоретическими значениями магнетосопротивления двойных туннельных спиновых фильтров и соответствующими экспериментальными данными.

Значительная (и все возрастающая) часть магнитоэлектронных устройств основана на использовании эффекта туннельного магнетосопротивления (ТМР), когда сопротивление тонкопленочной гетероструктуры из чередующихся магнитных и немагнитных слоев зависит от взаимной ориентации полей намагничивания двух магнитных слоев [1]. Их основной характеристикой является отношение разности сопротивлений в состояниях с антипараллельной, R_{AP} , и параллельной, R_P , ориентациями намагниченности электродов к величине R_P :

$$TMR = (R_{AP} - R_P)/R_P. \quad (1)$$

Для реализации ТМР эффекта обычно используются трехслойные туннельные переходы, образованные двумя пленками ферромагнитного металла (FM), разделенными тонким (порядка 1 нм) слоем изолятора (I) [2]. В работе [3] был предложен новый тип магнитоэлектронных устройств с обычными металлическими (M) электродами и магнитными туннельными барьерами (FI). Последние выполняют роль спиновых фильтров, поскольку вероятность туннелирования электронов сквозь них радикально зависит от ориентации электронных спинов (см. ниже). Теоретические оценки [3] показали, что предельные значения туннельного магнетосопротивления двойных спиновых фильтров M-FI₁-FI₂-M в нуле напряжений могут достигать тысяч процентов и, значит, на порядок величины превосходить рекордные ТМР, полученные на стандартных FM-I-FM переходах с кристаллическим оксидом магния [1]. Более того, в то

время как магнетосопротивление FM-I-FM контактов убывает с ростом приложенного к ним напряжения V , в M-FI₁-FI₂-M структурах оно увеличивается и достигает максимума при конечных V , что представляет непосредственный практический интерес [4].

Двойные спиновые фильтры вида M-FI₁-I-FI₂-M с M=Al, FI₁=FI₂=EuS и I=Al₂O₃ (толщины d пленок алюминия и прослойки из оксида алюминия, разделяющей два магнитных слоя – 10 нм и 0.6 нм, соответственно; толщины D пленок FI₁ и FI₂ менялись от 1.5 до 3 нм) были реализованы и исследованы в работе [5]. При этом оказалось, что измеренные величины магнетосопротивления как при очень малых, так и при больших V расходились с теоретическими не менее чем на два порядка, хотя экспериментальные зависимости ТМР от V , действительно, имели максимум вблизи расчетных значений V . Как было отмечено в комментарии [6], это обстоятельство позволяет говорить о необходимости более глубокого теоретического анализа данного явления.

Существенное расхождение между расчетными и измеренными значениями туннельного магнетосопротивления наблюдалось и ранее в FM-I-FM контактах, в частности, для I=MgO [1] и связывалось с двумя возможными причинами – неидеальным FM-I интерфейсом [7] либо неоднородным туннельным барьером с примесными состояниями внутри него [8] и, соответственно, неупругим туннелированием носителей тока [9]. Авторы работы [5] предположили, что те же факторы приводят и к радикальному подавлению магниторезистивного эффекта в двойных M-FI₁-I-FI₂-M спиновых фильтрах, которое (и это необходи-

¹⁾ e-mail: bel@fti.dn.ua

мо подчеркнуть) оказывается намного более существенным, чем для FM-I-FM структур. Не отрицая того, что они, действительно, могут заметно понизить величину TMR, мы покажем далее, что гигантское расхождение между теоретическими значениями магнетосопротивления двойных спиновых фильтров и соответствующими экспериментальными данными является следствием некорректного выражения для электронной энергии в магнитных слоях FI₁ и FI₂. Действительно, в работах [3, 5], как и в подавляющем большинстве других публикаций, посвященных проблеме электронного транспорта в планарных гетероструктурах с чередующимися металлическими и диэлектрическими слоями, расчет вероятности туннелирования электронов $P(E, V)$ с энергией E через изолирующую прослойку основан на стандартном приближении потенциального барьера [10]. При достаточно малых V , когда искажениями его формы можно пренебречь, затухание электронной волновой функции в немагнитном диэлектрическом слое зависит лишь от высоты барьера φ и в рамках приближения эффективной массы электрона m^* [10] дается формулой

$$\kappa^2(E) = \frac{2m^*}{\hbar^2}(\varphi - E). \quad (2)$$

В магнитном диэлектрике эффективная высота потенциального барьера зависит от спина туннелирующего электрона – если он параллелен вектору намагниченности диэлектрика, то $\varphi_{\uparrow} = \varphi - \Delta$, в противном случае $\varphi_{\downarrow} = \varphi + \Delta$ (рис.1а). Такой подход полностью справедлив для вакуумной прослойки, в то время как в твердотельных структурах электрон туннелирует сквозь запрещенную зону диэлектрика между нижним краем зоны проводимости E_c и верхним краем валентной зоны E_v (рис.1б) и соотношение (2) выполняется только при условии, что химический потенциал находится вблизи E_c , и поэтому присутствием валентной зоны можно пренебречь.

Однако, на самом деле, в сильно разупорядоченных диэлектрических слоях химический потенциал оказывается “привязанным” к середине запрещенной зоны шириной $E_g = E_c - E_v$ [11], и тогда необходим учет взаимного влияния двух зон. Исследования эффекта туннелирования Фаулера-Нордгейма [4] сквозь пленку EuS, подобную тем, которые использовались в [5], показали, что расстояние от уровня Ферми E_F до нижнего края зоны проводимости $E_c - E_F$ составляет примерно 0.8 эВ. В то же время оценка E_g для EuS из данных рис.2 работы [12] дает примерно 1.5 эВ, то есть в данном случае $E_F \approx \bar{E} = (E_c + E_v)/2$. Наш расчет для этого случая подобен тому, который был выполнен в работе [13] для системы графен-

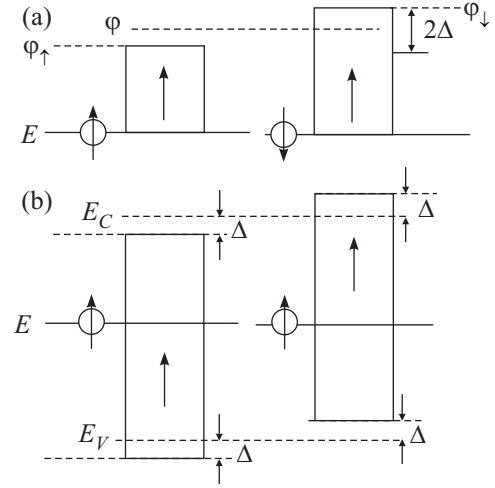


Рис.1. Энергетические диаграммы, иллюстрирующие влияние спинового расщепления Δ в магнитном диэлектрике на туннелирование электронов со спинами вверх и вниз в приближении потенциального барьера высотой φ (а) и двухзонной модели (б); E – энергия электрона, E_c – нижний край зоны проводимости, E_v – верхний край валентной зоны.

узкозонный полупроводник-графен, однако отличается тем, что M-электрод – это обычный металл, имеется два туннельных барьера, и они представляют собой широкозонные полупроводники с $E_g \approx 1.5$ эВ. Для них мы имеем гамильтониан в виде 2×2 матрицы с диагональными элементами, которые описывают движение электронов в отдельных зонах, и недиагональным элементом, учитывающим межзонные переходы. Предполагая, что последний мал по сравнению с полушириной запрещенной зоны (а именно такие энергии нас будут интересовать в дальнейшем), мы получим следующее выражение для коэффициента κ , определяющего экспоненциальное затухание волновой функции в глубь широкозонного полупроводника:

$$\kappa^2(E) = \frac{m^*}{\hbar^2} E_g \left[-1 + \sqrt{1 + 4(E_c - E)(E - E_v)/E_g^2} \right]. \quad (3)$$

Вблизи энергий E_c и E_v , когда второе слагаемое под корнем в (3) мало, справедлива формула Кейна [14]:

$$\kappa^2(E) = \frac{2m^*}{\hbar^2} \frac{(E_c - E)(E - E_v)}{E_g}, \quad (4)$$

а для энергий в окрестности $\bar{E} = (E_c + E_v)/2$:

$$\begin{aligned} \kappa^2(E) &= \frac{0.057m^*}{\hbar^2} E_g + \frac{\sqrt{2}m^*}{\hbar^2} \frac{(E_c - E)(E - E_v)}{E_g} \approx \\ &\approx \frac{2m^*}{\hbar^2} \frac{(E_c - E)(E - E_v)}{\sqrt{2}E_g}. \end{aligned} \quad (5)$$

Коэффициент прохождения электрона $T(E)$ сквозь данный широкозонный полупроводник может быть определен стандартным путем в результате сшивки волновых функций. При этом в двухзонной модели изолятора радикально меняется вклад в магнетосопротивление тех электронов, энергии которых близки к середине запрещенной зоны. Действительно, при выполнении равенства (2) туннельный ток сквозь магнитную изолирующую прослойку формируется преимущественно электронами со спинами, параллельными ее намагниченности, поскольку в любом случае $\kappa_{\uparrow}^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2}(\varphi - E - \Delta)$ меньше $\kappa_{\downarrow}^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2}(\varphi - E + \Delta)$. Таким образом, в приближении потенциального барьера магнетосопротивление (1) двойного спинового фильтра всегда отлично от нуля. В то же время, согласно (5), при $E = \bar{E}$ коэффициенты κ_{\uparrow} и κ_{\downarrow} , определяющие затухание электронных волновых функций со спинами вверх и вниз, совпадают:

$$\kappa_{\uparrow}^2 = \kappa_{\downarrow}^2 \approx \frac{2m^* (E_g/2 - \Delta)(E_g/2 + \Delta)}{\hbar^2 \sqrt{2}E_g}.$$

Поэтому при условии $E_F = \bar{E}$ TMR симметричной M-FI₁-I-FI₂-M гетероструктуры для малых напряжений смещения в точности равен нулю (см. рис.1b).

Обсудим теперь случай высоких напряжений. Из соотношений (4) и (5) следует, что функциональные зависимости $\kappa^2(E)$ в двух предельных случаях совпадают с небольшим отличием в коэффициенте. Поэтому для качественного анализа эффекта двухзонности достаточно ограничиться формулой Кейна (4) для $\kappa(E)$, положив m^* равной массе свободного электрона. Кроме того, толщины D магнитных слоев в эксперименте [5] были достаточно большими. Тогда, как и в работе [13], коэффициент прохождения экспоненциально мал и равен $T(E) \sim \exp[-2\kappa(E)D]$. Последующие численные расчеты, результаты которых сравниваются с экспериментальными данными [5], были выполнены в рамках тех же приближений, что и в работе [5] (одномерность, отсутствие процессов рассеяния и интерференции, нулевая температура, ВКБ-приближение для расчета вероятности туннелирования электрона $T_{\uparrow,\downarrow}(E)$). Основное отличие заключалось в замене соотношения (2) в $T_{\uparrow,\downarrow}(E)$ на выражение (4) и предположении $E_F \approx \bar{E}$. Геометрия образцов и значения характерных параметров были также взяты из работы [5] (см. подпись к рис.2). Рассчитанная зависимость TMR от V для $E_F = \bar{E}$ представлена на рис.2, кривая 1. Следует заметить, что она намного лучше описывает местоположения максимумов в экспериментальных кривых TMR (V) (ср. с рис.2 в [5]) по сравнению с зависимостями, полученными авторами [5] в рамках приближения по-

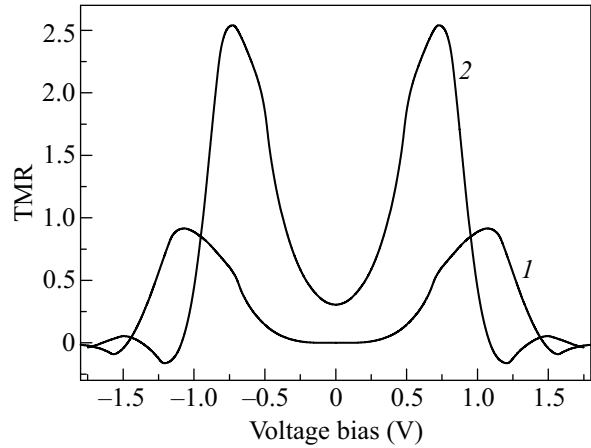


Рис.2. Зависимость туннельного магнетосопротивления двойного спинового фильтра Al-EuS-Al₂O₃-EuS-Al от напряжения смещения, рассчитанная в двухзонной модели (4) для двух значений параметра δ , описывающего положение уровня Ферми относительно середины запрещенной зоны магнитного диэлектрика: $\delta = 0$ (кривая 1), ± 0.2 эВ (кривая 2). Расчетные характеристики EuS слоев $-E_g = 1.6$ эВ, $D_{\text{FI}} = 1.5$ нм, спиновое расщепление $\Delta = 0.12$ эВ, параметры изолирующей прослойки из оксида алюминия $\varphi_1 = 1.0$ эВ, $d_1 = 0.6$ нм

тениального барьера (2), а сами максимальные значения TMR на порядок величины меньше значений, указанных на рис.1 в работе [5]. Оставшееся расхождение составляет несколько десятков процентов и, по-видимому, связано с неидеальностью границ раздела. Кривая 2 на рис.2 демонстрирует влияние сдвига δ уровня Ферми по отношению к середине запрещенной зоны $E_F = \bar{E} \pm \delta$. При этом наряду с ростом расчетных значений TMR наблюдается смещение местоположения максимумов TMR в сторону меньших напряжений. Это обстоятельство противоречит данным [5] и, по нашему мнению, указывает на то, что в эксперименте [5] величина δ , действительно, была близкой к нулю.

Таким образом, в рамках простейшей двухзонной модели нами показано, что учет влияния верхнего края валентной зоны изолятора на эффект спиновой фильтрации в гетероструктурах с наноразмерными слоями магнитного диэлектрика приводит к устранению гигантского расхождения между теоретическими и экспериментальными значениями магнетосопротивления двойных туннельных спиновых фильтров. Повысить величину магнетосопротивления можно путем контролируемого сдвига химического потенциала относительно середины запрещенной зоны диэлектрика (см. рис.2).

1. S. Yuasa, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 031001 (2008).
2. M. Julliere, Phys. Lett. A **54**, 225 (1975).
3. D. C. Worledge and T. H. Geballe, J. Appl. Phys. **88**, 5277 (2000).
4. T. Nagahama, T. S. Santos, and J. S. Moodera, Phys. Rev. Lett. **99**, 016602 (2007).
5. G-X. Miao, M. Müller, and J. S. Moodera, Phys. Rev. Lett. **102**, 076601 (2009).
6. J. M. De Teresa, Physics **2**, 13 (2009).
7. F. Bonell, S. Andrieu, A. M. Bataille et al., Phys. Rev. B **79**, 224405 (2009).
8. A. M. Bratkovsky, Phys. Rev. B **56**, 2344 (1997).
9. S. Zhang, P. M. Levy, A. C. Marley, and S. S. P. Parkin, Phys. Rev. Lett. **79**, 3744 (1997).
10. C. B. Duke, in: *Tunneling Phenomena in Solids*, Eds. E. Burstein and S. Lundqvist, Plenum Press, New York, 1969.
11. У. Харрисон, *Электронная структура и свойства твердых тел*, М.: Мир, 1983.
12. A. D. Mohite, T. S. Santos, J. S. Moodera, and B. W. Alphenaar, Nature Nanotechnology **4**, 425 (2009).
13. П. В. Ратников, А. П. Силин, Краткие сообщения по физике ФИАН № 11, 34 (2008).
14. E. O. Kane, J. Phys. Chem. Solids **1**, 249 (1957).