

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 $\text{Fe}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Fe}$ 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_2O_3 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_2O_3 [5]. Структурный анализ пленок Al_2O_3 , 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 $\text{Co}(\text{Fe})/\text{диэлектрик}/\text{нормальный металл}$.

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.

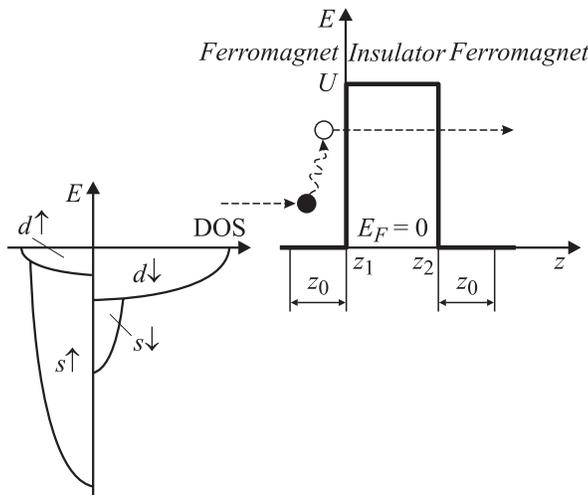


Рис. 1. Потенциальный профиль структуры ферромагнетик/диэлектрик/ферромагнетик. Слева изображена $s-d$ -зонная структура ферромагнетика. Штриховыми линиями схематично показан один из вариантов $s-d$ -рассеяния в интерфейсной области z_0 .

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 σ в точке $r = (x, y, z)$; $U(z)$ — потенциальный барьер (рис. 1); $\alpha = 1, 2$ — номера интерфейса; ρ_n^{α} — координата точки n в плоскости (x, y) в интерфейсе α ; γ_n^{α} — 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 ρ_n^{α} внутри интерфейса α характеризуется случайным потенциалом γ_n^{α} $s-d$ -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 ρ_n^{α} в пределах интерфейса α , 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 σ 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 ε_{0d} — аналогичны для d -электрона; V_{sj}^σ и V_{dj}^σ — дно потенциальных ям s - и d -электронов со спином σ . Потенциал s - d -рассеяния γ_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 δ -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 γ_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 — γ . 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 2×2 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 α и β обозначают s - и d -зоны; $T_{\alpha\beta}(E)$ — коэффициент прохождения из α -зоны эмиттера в β -зону коллектора для электрона с продольной компонентой энергии E . Интегрирование ведется от максимального положения дна потенциалов эмиттера V_α и коллектора V_β .

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/Al₂O₃/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 ⁻¹	10.9 [15]
Волновой вектор Ферми s -электронов со спином вниз k_s^\downarrow , nm ⁻¹	4.2 [15]
Волновой вектор Ферми d -электронов со спином вверх k_d^\uparrow , nm ⁻¹	0.5
Волновой вектор Ферми d -электронов со спином вниз k_d^\downarrow , nm ⁻¹	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 γ , 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/Al₂O₃-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 γ .

На рис. 2, *a* показана зависимость проводимости ФДФ-структуры от величины рассеивающего потенциала γ 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 γ 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 γ . В целом, увеличение потенциала γ от 0 до 3.0 eV приводит к падению $G^{\uparrow\uparrow}$ на $\sim 40\%$ и

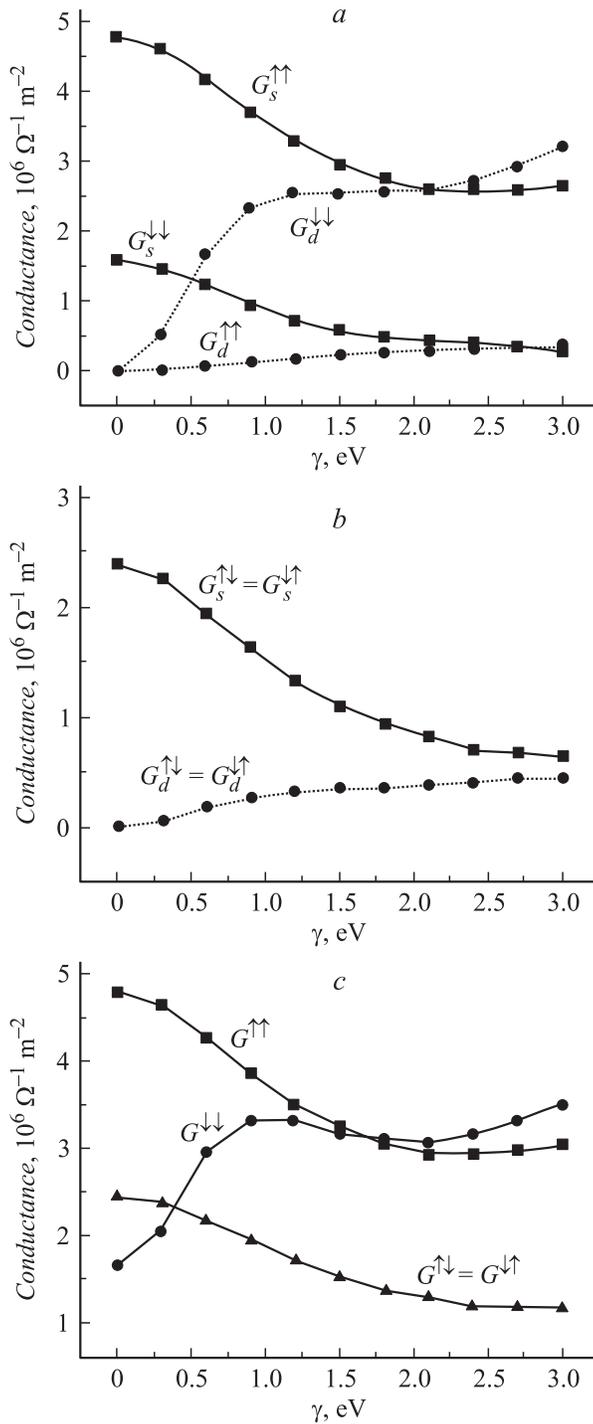


Рис. 2. Влияние поверхностного $s-d$ -рассеяния на проводимость структуры ФДФ при параллельной (а) и антипараллельной (б) намагниченности ферромагнетика. Суммарная проводимость определяется как сумма s - и d -компонент $G^{\uparrow(\downarrow)\uparrow} = G_s^{\uparrow(\downarrow)\uparrow} + G_d^{\uparrow(\downarrow)\uparrow}$,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

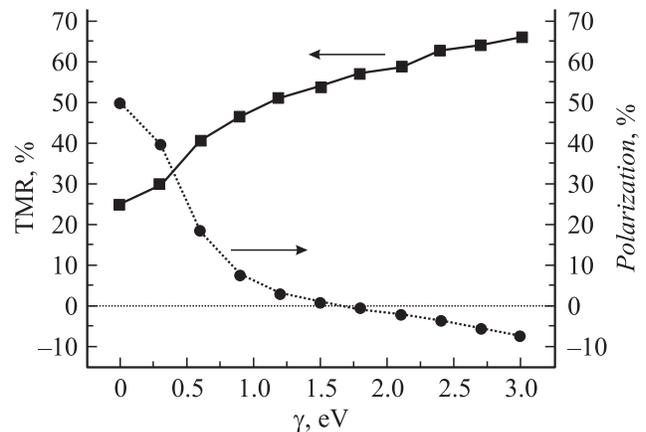


Рис. 3. Зависимость TMR и спиновой поляризации тока от величины поверхностного $s-d$ -рассеяния.

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 Al_2O_3 на 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 Co/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 окисливания алюминия может происходить нежелательное переокисление нескольких атомных слоев ферромагнетика с образованием Fe_3O_4 , CoO , Co_2O_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.