

PACS: 73.40.Gk, 73.40.Rw, 75.70.-i

А.И. Хачатуров

ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА СПИН-ЗАВИСИМОЕ ТУННЕЛИРОВАНИЕ В КОНТАКТАХ Fe–Al₂O₃–Fe

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины
ул. Р. Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина
E-mail: khach@hsts.fti.ac.donetsk.ua

Статья поступила в редакцию 1 марта 2006 года

Установлено, что из-за особенностей электронного спектра железа величина магнитосопротивления туннельных структур Fe–Al₂O₃–Fe под давлением должна убывать, а не возрастать, как этого можно было бы ожидать, принимая во внимание тот факт, что в условиях гидростатического сжатия толщина изолирующего слоя туннельного контакта уменьшается. Показано, что экспериментальное подтверждение этого результата явилось бы убедительным доводом в пользу справедливости использования ВКБ-приближения для решения проблем спин-зависимого туннелирования.

Введение

В течение последнего десятилетия процессы электронного туннелирования в структурах ферромагнитный металл–изолятор–ферромагнитный металл (FM–I–FM) привлекали самое пристальное внимание теоретиков. Благодаря этому к настоящему времени создано немало серьезных теоретических построений, которые в состоянии адекватно описать основные закономерности, наблюдаемые в поведении контактного магнитного сопротивления [1,2]. На этом фоне вызывает удивление почти полное отсутствие простых феноменологических схем, на основе которых можно было бы понять на качественном уровне основные процессы, ответственные за возникновение магнитосопротивления, и причины его изменения при различных внешних воздействиях.

До недавнего времени единственной такой моделью можно было считать механизм, предложенный в пионерской работе Жулиера [3]. Эта модель строилась на предположениях, что проницаемость туннельного барьера постоянна во всем диапазоне энергий и напряжений, а проводимость отдельного канала пропорциональна произведению плотностей состояний соответствующих зон на уровне Ферми. При антипараллельной конфигурации намагниченностей (в отсутствие магнитного поля) имеется два независимых кана-

ла. В одном из них электрон, стартуя из зоны со спином вверх (индекс 1), на противоположной стороне контакта попадает в зону со спином вниз (индекс 2). Его проводимость $\sigma_{12} \propto N_L^\uparrow(E_{F_1})N_R^\downarrow(E_{F_2})$. Во втором канале электрон, туннелирующий из зоны со спином вниз, попадает в зону со спином вверх $\sigma_{21} \propto N_L^\downarrow(E_{F_2})N_R^\uparrow(E_{F_1})$. Полная проводимость туннельного контакта $\sigma^{\uparrow\downarrow}$ в этом случае равна сумме проводимостей отдельных каналов σ_{12} и σ_{21} :

$$\sigma^{\uparrow\downarrow} \propto N_L^\uparrow(E_{F_1})N_R^\downarrow(E_{F_2}) + N_L^\downarrow(E_{F_2})N_R^\uparrow(E_{F_1}). \quad (1)$$

При параллельной намагниченности (в присутствии магнитного поля) также реализуется два канала: канал $1 \rightarrow 1$ и канал $2 \rightarrow 2$. В канале $1 \rightarrow 1$ электрон из зоны со спином вверх попадает в зону со спином вверх, а в канале $2 \rightarrow 2$ электрон из зоны со спином вниз попадает в зону со спином вниз. Их проводимости равны соответственно $\sigma_{11} \propto N_L^\uparrow(E_{F_1})N_R^\uparrow(E_{F_1})$ и $\sigma_{22} \propto N_L^\downarrow(E_{F_2})N_R^\downarrow(E_{F_2})$. Полная проводимость при параллельной конфигурации

$$\sigma^{\uparrow\uparrow} \propto N_L^\uparrow(E_{F_1})N_R^\uparrow(E_{F_1}) + N_L^\downarrow(E_{F_2})N_R^\downarrow(E_{F_2}). \quad (2)$$

По определению контактное магнитное сопротивление JMR (Junction Magnetoresistance) равно

$$\text{JMR} = \frac{\sigma^{\uparrow\uparrow} - \sigma^{\uparrow\downarrow}}{\sigma^{\uparrow\uparrow}}. \quad (3)$$

Подставляя в (3) соотношения (1) и (2), получаем [4]:

$$\text{JMR} = \frac{\sigma^{\uparrow\uparrow} - \sigma^{\uparrow\downarrow}}{\sigma^{\uparrow\uparrow}} = \frac{2P_L P_R}{1 + P_L P_R}, \quad (4)$$

где $P_L = N_L^\uparrow - N_L^\downarrow / N_L^\uparrow + N_L^\downarrow$ и $P_R = N_R^\uparrow - N_R^\downarrow / N_R^\uparrow + N_R^\downarrow$ – намагниченности соответственно правого и левого электродов. Формула (4) прямо указывает на то, что причиной возникновения JMR в модели Жулиера является разница плотностей состояний на уровне Ферми зон с различной ориентацией спинов.

Численные оценки показали, что рассматриваемая модель предсказывает значения контактного магнитного сопротивления, совпадающие по порядку величины с наблюдаемыми в эксперименте. Однако она оказывается не в состоянии объяснить падение магнитосопротивления с ростом напряжения смещения на переходе. Действительно, маловероятно ожидать, что плотность состояний ферромагнетика претерпевает значительные изменения в интервале энергий порядка нескольких сотен милливольт в окрестности уровня Ферми.

Может показаться, что недостатки модели Жулиера легко устранимы. Достаточно лишь отказаться от некоторых предположений (например, перестать считать прозрачность туннельного контакта постоянной величиной), и рассо-

гласование расчетов с экспериментальными данными исчезнет. Однако такой вполне естественный шаг, как использование для расчета туннельной прозрачности $D(E, V)$ ВКБ-приближения, неожиданно сталкивается с принципиальными трудностями. Дело в том, что как было показано У. Харрисоном [5], в ВКБ-приближении выражения для туннельного тока и, следовательно, для дифференциальной туннельной проводимости вообще не содержат плотностей состояний электродов. На первый взгляд, это делает невозможным использование простых формул, предоставляемых квазиклассическим подходом, для изучения магниторезистивных эффектов, поскольку при этом, казалось бы, исчезает сама причина возникновения исследуемой величины.

Выход из создавшегося положения довольно прост. Он состоит в отказе от сугубо одномерной задачи, каковой является модель Жулиера, и переходе к рассмотрению квазитрехмерной задачи. Оказывается, что в трехмерном случае вследствие зеркального характера туннелирования число электронов, способных принять участие в туннелировании при параллельной конфигурации намагниченностей, всегда превышает соответствующее число при антипараллельной конфигурации. Обычно эти электроны не вносят заметного вклада в туннельный ток и туннельную проводимость, поскольку обладают ненулевыми значениями составляющей волнового импульса параллельной плоскости барьера k_{\parallel} и, как следствие, имеют пренебрежимо малую вероятность туннелирования $D(E_z, V)$. Тем не менее, как было показано в [6], в тех случаях, когда энергия Ферми хотя бы одной из зон, принимающих участие в туннелировании, невелика, роль электронов, движущихся под большими углами к плоскости туннельного барьера, многократно возрастает.

В работе [7] на основе расчетов, исходящих из первых принципов, были пересчитаны зонные параметры железа. Оказалось, что зона со спином вниз имеет ширину всего лишь несколько сотен милливольт ($E_{F_2} = 0.35$ eV), которая более чем на полпорядка меньше соответствующего значения зоны со спином вверх ($E_{F_1} = 2.25$ eV). Малая величина энергии Ферми одной из зон позволила достичь значений контактного магнитного сопротивления порядка нескольких десятков процентов при вполне правдоподобных барьерных параметрах [7,8]. Авторами работы [9] на основе новых зонных параметров была предложена феноменологическая модель спин-зависимого туннелирования в контактах FM–I–FM, которая наглядно продемонстрировала причины убывания JMR с ростом напряжения смещения на туннельном переходе. В [10] нами были выявлены причины, по которым экспериментальные значения JMR понижаются с ростом толщины потенциального барьера и повышаются с увеличением его высоты.

В настоящей работе показано, что туннельные эксперименты в условиях гидростатического сжатия в состоянии дать ответ на вопрос: действительно ли в спектре ферромагнитного металла присутствует зона с малым числом носителей?

2. Влияние высокого давления на контактное магнитное напряжение в нуле напряжений

Для того чтобы оценить воздействие высокого гидростатического давления на туннельные характеристики контактов FM–I–FM, достаточно учесть три основных фактора: уменьшение толщины изолирующего слоя, изменение высоты потенциального барьера и, наконец, изменение зонных параметров электродов [11]. В случае туннельных контактов с обычными металлическими электродами наиболее существенное влияние на туннельные характеристики оказывает изменение толщины изолирующего слоя. Поскольку значения давления p , которые предполагается использовать в обсуждаемых экспериментах, не превышают нескольких десятков килобар, модуль упругости диэлектрической прослойки можно считать постоянной величиной. Следовательно, имеются все основания ожидать, что толщина изолирующей прослойки d под действием гидростатического давления уменьшается линейным образом:

$$d = d_0 (1 - \alpha p). \quad (5)$$

Согласно [11] коэффициент пропорциональности α при использовании в качестве изолирующего слоя оксида алюминия можно положить равным $2.4 \cdot 10^{-3} \text{ kbar}^{-1}$. Если бы толщина барьера была единственным изменяющимся под давлением параметром, то, как показывают расчеты, выполненные по формуле [9]:

$$\text{JMR} |_{V=0} = \frac{\int_0^{E_{F_1} - E_{F_2}} D(E_z, 0) dE_z}{\int_0^{E_{F_1}} D(E_z, 0) dE_z + \int_0^{E_{F_2}} D(E_z, 0) dE_z}, \quad (6)$$

давление должно было бы привести к линейному возрастанию контактного магнитосопротивления (рис. 1). Зависимость, приведенная на рис. 1, рассчитана для туннельного контакта Fe–Al₂O₃–Fe. При этом в качестве зонных параметров железных электродов использовались значения из работы [7]: $E_{F_1} = 2.25 \text{ eV}$ – для зоны со спином вверх и $E_{F_2} = 0.35 \text{ eV}$ – для зоны со спином вниз. Высота потенциального барьера полагалась равной половине запрещенной зоны аморфного алюминия $\phi = 3.85 \text{ eV}$, которая по данным [12] составляет $E_g = 7.7 \text{ eV}$.

Согласно оценке, проведенной в [12], изменение ширины запрещенной зоны $E_g = 7.7 \text{ eV}$ в окисле алюминия составляет всего лишь 1.5 meV , поэтому изменение высоты барьера $\Delta\phi$ при давлениях $p = 15\text{--}20 \text{ kbar}$ должно быть заключено в пределах $12.5\text{--}15 \text{ meV}$. Вообще говоря, наши расчеты показывают, что при уменьшении высоты потенциального барьера значение контактного магнитосопротивления понижается. Однако столь малое уменьшение высоты барьера не в состоянии вызвать существенное изменение JMR, и поэтому этим фактором можно пренебречь.

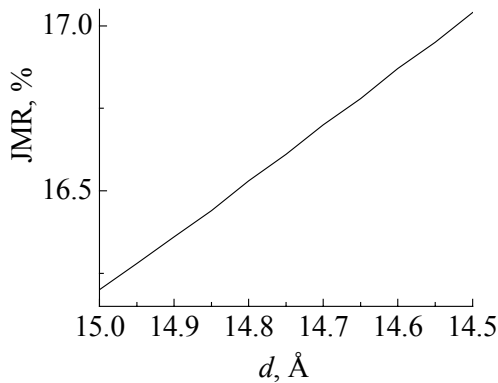


Рис. 1. Зависимость магнитосопротивления туннельного контакта Fe–Al₂O₃–Fe от толщины изолирующего слоя при нулевом напряжении смещения на переходе $V = 0$. Высота потенциального барьера $\phi = 3.85$ eV и энергии Ферми железа $E_{F1} = 2.25$ eV и $E_{F2} = 0.35$ meV являются постоянными параметрами

меньшей $\delta E_{F2}^{(1)}$. Действительно, в модели свободных электронов изменение величины зоны определяется соотношением $\delta E_F \approx E_F (1 + 2p/E)$. Полагая модуль Юнга для железа равным $E = 200$ МПа, при $p = 20$ kbar находим $\delta E_{F1}^{(1)} = 45$ meV и $\delta E_{F2}^{(1)} = 7$ meV. При неизменном молекулярном поле $h = E_{F1} - E_{F2}$ единственной возможностью сохранить заполнение обеих зон на уровне Ферми является переход электронов из большей зоны в меньшую. В результате меньшая зона увеличивается на $\delta E_{F2}^{(2)}$, а большая – уменьшается на $\delta E_{F1}^{(1)}$. При этом суммарные изменения обеих зон $\Delta E_{F1} = \delta E_{F1}^{(1)} - \delta E_{F1}^{(2)}$ и $\Delta E_{F2} = \delta E_{F2}^{(1)} + \delta E_{F2}^{(2)}$ должны быть одинаковыми, т.е.

$$\delta E_{F1}^{(1)} - \delta E_{F1}^{(2)} = \delta E_{F2}^{(1)} + \delta E_{F2}^{(2)}. \quad (7)$$

Вторым уравнением для нахождения неизвестных $\delta E_{F1}^{(2)}$ и $\delta E_{F2}^{(2)}$ служит условие сохранения числа частиц, согласно которому число электронов, ушедших из первой зоны, равно числу частиц, пришедших во вторую:

$$\begin{aligned} & \left[\left(E_{F1} + \delta E_{F1}^{(1)} \right)^{3/2} - \left(E_{F1} + \delta E_{F1}^{(1)} - \delta E_{F1}^{(2)} \right)^{3/2} \right] = \\ & = \left[\left(E_{F2} + \delta E_{F2}^{(1)} + \delta E_{F2}^{(2)} \right)^{3/2} - \left(E_{F2} + \delta E_{F2}^{(1)} \right)^{3/2} \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

В случае туннелирования между обычными металлами с одной единственной зоной на уровне Ферми давления порядка $p = 15-20$ kbar не вызывают значительного изменения зонных параметров. Увеличение энергии Ферми, связанное с уменьшением геометрических размеров элементарной ячейки, невелико по сравнению с самой величиной E_F . Однако в рассматриваемом нами случае мы имеем весьма необычную ситуацию. На уровне Ферми расположены одновременно две зоны, одна из которых значительно меньше другой. Под давлением обе зоны увеличиваются, но прирост большей зоны $\delta E_{F1}^{(1)}$ по абсолютной величине существенно превышает прирост

меньшей $\delta E_{F2}^{(1)}$.

Полагая $\delta E_{F_1}^{(2)} \ll E_{F_1} + \delta E_{F_1}^{(1)}$ и $\delta E_{F_2}^{(2)} \ll E_{F_2} + \delta E_{F_2}^{(1)}$, находим

$$\begin{aligned} \Delta E_{F_1} &= \delta E_{F_1}^{(1)} - \frac{\delta E_{F_1}^{(1)} - \delta E_{F_2}^{(1)}}{1 + \sqrt{\left(E_{F_1} + \delta E_{F_1}^{(1)}\right) / \left(E_{F_2} + \delta E_{F_2}^{(1)}\right)}}, \\ \Delta E_{F_2} &= \delta E_{F_2}^{(1)} + \frac{\delta E_{F_1}^{(1)} - \delta E_{F_2}^{(1)}}{1 + \sqrt{\left(E_{F_2} + \delta E_{F_2}^{(1)}\right) / \left(E_{F_1} + \delta E_{F_1}^{(1)}\right)}}. \end{aligned} \quad (9)$$

Отсюда

$$\Delta E_{F_1} = \Delta E_{F_2} = (\lambda(p) - 1) (E_{F_1} - E_{F_1} E_{F_2} + E_{F_2}),$$

где $\lambda(p) = 1 + 2p/E$.

В результате перехода электронов из большой зоны со спином вверх малая зона со спином вниз увеличивается на ΔE_{F_1} , много большую, чем $\delta E_{F_2}^{(1)}$, которую следовало бы ожидать в случае, если бы она являлась единственной зоной на уровне Ферми. Действительно, при давлении $p = 20$ kbar величина $\Delta E_{F_1} = 35$ meV почти на полпорядка превышает величину $\delta E_{F_2}^{(1)} = 7$ meV. Как показывают наши расчеты, выполненные по формулам [9], указанные изменения зонных параметров приводят к уменьшению магнитосопротивления, которое по величине превосходит соответствующее повышение, вызванное уменьшением толщины изолирующего слоя (рис. 2).

Выводы и заключение

В результате детальных исследований электронного туннелирования в структурах металл–изолятор–металл, проведенных в семидесятых годах прошлого века, было установлено, что основным фактором, приводящим к изменению туннельных характеристик в условиях гидростатического сжатия до 20–30 kbar, является уменьшение толщины изолирующего слоя. Как было показано в работе [10], само по себе это уменьшение должно приводить к

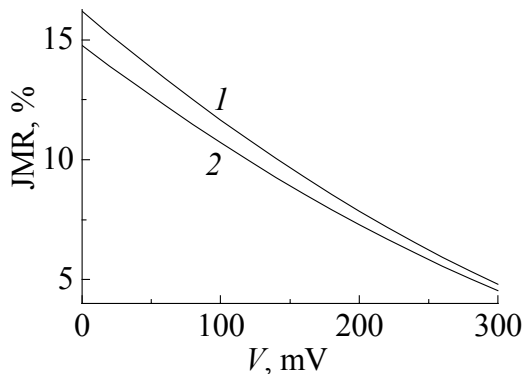


Рис. 2. Зависимости магнитосопротивления туннельного контакта Fe–Al₂O₃–Fe от напряжения смещения на переходе, рассчитанные в предположении, что давление изменяет набор постоянных параметров: кривая 1 – $p = 0$, $\phi = 3.85$ eV, $E_{F_1} = 2.25$ eV, $E_{F_2} = 0.35$ meV; кривая 2 – $p = 20$ kbar, $\phi = 3.85$ eV, $d = 14.28$ Å, $E_{F_1} = 2.285$ meV, $E_{F_2} = 0.385$ meV

повышению магнитосопротивления, поскольку при этом вклад в туннельный ток от электронов с ненулевыми k_{\parallel} увеличивается. Однако ферромагнитные металлы, такие как железо, обладают той особенностью, что на уровне Ферми одновременно находятся две зоны: большая (спин вверх) и малая (спин вниз).

В настоящей работе показано, что в условиях гидростатического сжатия часть электронов из большей зоны переходит в меньшую, в результате чего увеличение последней намного превосходит ожидаемое. Численные расчеты показывают, что указанная перестройка зонной структуры приводит к уменьшению магнитосопротивления в исследуемых структурах. Таким образом, если в эксперименте будет установлено, что давления уменьшают магнитосопротивление, то это можно будет считать весомым аргументом в пользу правильности расчетов, проведенных в [7–10], и справедливости феноменологической модели, развитой в [9].

Автор благодарит М.А. Белоголовского и В.Ю. Таренкова за полезные замечания и обсуждение результатов работы.

1. *T. Schulthess, J.M. MacLaren*, Phys. Rev. **B63**, 054416 (2001).
2. *C. Zhang, X.-G. Zhang, P.S. Krstić, Hai-ping Cheng et al.*, Phys. Rev. **B69**, 134406 (2004).
3. *M. Julliere*, Phys. Lett. **A54**, 225 (1975).
4. *J.S. Moodera, J. Nassar, G. Mathon*, Ann. Rev. **29**, 381 (1999).
5. *W.A. Harrison*, Phys. Rev. **123**, 85 (1961).
6. *А.И. Хачатуров*, ФНТ **31**, 109 (2005).
7. *A.H. Davies, J.M. MacLaren*, J. Appl. Phys. **87**, 5224 (2000).
8. *F. Montaigne, M. Hehn, A. Schuhl*, Phys. Rev. **B64**, 14402 (2001).
9. *А.И. Хачатуров*, Письма в ЖЭТФ **82**, 723 (2005).
10. *А.И. Хачатуров*, ЖТФ **76**, 79 (2006).
11. *В.М. Свистунов, М.А. Белоголовский, О.И. Черняк*, УФН **151**, 31 (1987).
12. *M.C. Zetel, L. Gunther, B.A. Ratnam, P.M. Tedrow*, J. Appl. Phys. **59**, 191 (1986).

A.I. Khachaturov

PRESSURE EFFECT ON SPIN-DEPENDENT TUNNELING IN Fe–Al₂O₃–Fe JUNCTIONS

It is found that due to the band features of Fe the magnitude of the junction magnetoresistance in Fe–Al₂O₃–Fe junctions should decrease with pressure and not increase as may be expected taking into account that under pressure barrier thickness decreases.

Fig. 1. Junction magnetoresistance versus barrier thickness for a tunnel junction Fe–Al₂O₃–Fe at zero bias $V = 0$. The fixed parameters are: barrier height $\phi = 3.85$ eV and the band Fermi energies $E_{F1} = 2.25$ eV, $E_{F2} = 0.35$ meV

Fig. 2. Junction magnetoresistance versus bias voltage for a tunnel junction Fe–Al₂O₃–Fe under the assumption that pressure changes the set of constant parameters: curves 1 – $p = 0$, $\varphi = 3.85$ eV, $E_{F1} = 2.25$ eV, $E_{F2} = 0.35$ meV; curves 2 – $p = 20$ kbar, $\varphi = 3.85$ eV, $d = 14.28$ Å, $E_{F1} = 2.285$ meV, $E_{F2} = 0.385$ meV