PACS: 68.65.Ac, 75.47.De, 68.35.Ct

Т.А. Хачатурова, А.В. Василенко

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ СПИНОВОГО ФИЛЬТРА, ОСНОВАННОГО НА КВАНТОВОМ РАЗМЕРНОМ ЭФФЕКТЕ

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины ул. Р. Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина

Статья поступила в редакцию 24 марта 2014 года

Предложен и теоретически обоснован новый метод увеличения спиновой поляризации туннелирующих электронов в многослойных структурах с помощью квантового размерного эффекта в ферромагнитной металлической пленке наноразмерной толщины. Математическое моделирование зарядового транспорта в проводящих гетероструктурах показало, что разброс толщин такой пленки, неизбежный в условиях промышленного производства, не окажет существенного влияния на обсуждаемый эффект. Это позволит создать новые спинтронные устройства для вычислительной техники с гораздо большей эффективностью, чем существующие.

Ключевые слова: математическое моделирование зарядового транспорта, квантовая электроника, спин-поляризованный ток, ферромагнитные пленки, размерный эффект

Запропоновано й теоретично обґрунтовано новий метод збільшення спінової поляризації тунелюючих електронів у багатошарових гетероструктурах за допомогою квантового розмірного ефекту в феромагнітній металевій плівці нанорозмірної товщини. Математичне моделювання зарядового транспорту в гетероструктурах, що проводять, показало, що розкид товщини такої плівки, який є неминучим в умовах промислового виробництва, не впливає істотним чином на обговорюваний ефект, що дозволить створити нові спінтронні пристрої для обчислювальної техніки з набагато більшою ефективністю, ніж існуючі.

Ключові слова: математичне моделювання зарядового транспорту, квантова електроніка, спін-поляризований струм, феромагнітні плівки, розмірний ефект

Введение

Спинтроника представляет собой новый раздел квантовой электроники, в котором базовым элементом является спин электрона, а не его заряд, как в традиционных электронных устройствах [1]. В современных вычислительных устройствах уже используются спинтронные гетероструктуры в качестве магниторезистивной оперативной памяти. В ней в отличие от общеприня-

тых типов запоминающих устройств информация хранится не в виде электрических зарядов или токов, а в магнитных элементах памяти, которые представляют собой два ферромагнитных электрода 2 и 4, разделенных сверхтонким слоем диэлектрика 3 (рис. 1,a) [2].

Основное, что препятствует широкому внедрению магниторезистивной памяти, – это недостаточно высокая степень спиновой поляризации электронов проводимости в ферромагнитных металлических слоях. Проблема в том, что у 3*d*-ферромагнетиков (железо, кобальт, никель и их сплавы), использующихся в настоящее время в магниторезистивных элементах памяти, его величина даже при низких температурах достигает не более 20–30% [3]. Значительно повысить степень спиновой поляризации электронов, туннелирующих в детектор, можно с помощью эффекта спиновой фильтрации, если в магниторезистивном элементе памяти заменить обычный диэлектрик на ферромагнитный изолятор, а магнитные электроды – на обычные металлы [4].



Рис. 1. Схематическое изображение стандартного (*a*) и предлагаемого (*б*) магниторезистивного элемента памяти: 1 - подложка; 2, 4 - ферромагнитные электроды; 3, 5 - две идентичные по составу и толщине диэлектрические наноразмерные пленки; 6 - наноразмерный слой того же ферромагнитного металла, что и электроды 2 и 4

Иной путь увеличения спиновой поляризации туннелирующих электронов заключается в использовании оксидных барьеров с определенной кристаллографической поляризацией. Однако, как неоднократно отмечалось в литературе, возникающий при этом сравнительно большой разброс физических параметров делает невозможной реализацию соответствующих схем высокой интеграции в промышленных условиях. В 2013 г. в работе [5] была предложена новая магниторезистивная ячейка памяти, в которой между ферромагнитным металлическим слоем-инжектором и наноразмерной пленкой диэлектрика располагается дополнительный слой органических молекул. Гибридизация электронных состояний с соответствующими молекулярными орбиталями в ферромагнетике приводит к тому, что органические молекулы играют роль спиновых фильтров. При этом степень спиновой поляризации туннелирующих в детектор электронов существенно возрастает. В частности, его величина для контакта пермаллоя со сверхтонким слоем органических молекул достигает 38% уже при комнатной температуре [6]. Недостатком подобного устройства является присутствие органических молекул внутри магниторезистивных элементов памяти, что приводит к необходимости радикального изменения существующей технологии изготовления схем высокой интеграции. Это, в свою очередь, вызывает значительное повышение себестоимости разработки технологических линий и производства микросхем памяти.

Описание модели

С целью сохранения существующих технологических подходов, основанных на использовании многослойных структур из неорганических материалов, в данной работе предлагается использовать для увеличения спиновой поляризации туннелирующих электронов принципиально новый спиновый фильтр, основанный на эффекте размерного квантования в дополнительной ферромагнитной пленке. Он представляет собой две сверхтонкие диэлектрические пленки 3 и 5, идентичные по составу и толщине, между которыми расположен наноразмерный слой 6 ферромагнитного 3*d*-металла (рис. 1,*б*). Благодаря квантовому размерному эффекту в наноразмерной пленке 6 толщиной *l* образуются отдельные энергетические уровни. Поскольку значения фермиевских волновых векторов для электронов из зон с различной спиновой ориентацией – со спином вверх (k_F^{\uparrow}) и вниз (k_F^{\downarrow}) – значительно отличаются друг от друга ($k_F^{\uparrow} \neq k_F^{\downarrow}$), соответствующие энергетические уровни различны, и вероятность прохождения электронов через ферромагнитную пленку *b* будет зависеть от направления их спинов.

Энергетические уровни внутри наноразмерной проводящей пленки возникают для тех значений волновых векторов $k_{\rm F}^{\uparrow}$, при которых имеет место усиление электронных волн: $2k_{\rm F}^{\uparrow} l \approx 2n\pi$, где n – произвольное целое число. Известно, что электронные волны полностью ослабляют друг друга, если $2k_{\rm F}^{\downarrow} l \approx (2m+1)\pi$, где m – произвольное целое число. Путем подбора толщины l ферромагнитной пленки 6 (рис. 1, 6) и ее кристаллографической ориентации можно добиться того, что для электронов с преимущественным направлением спинов будет наблюдаться конструктивная интерференция электронных волн, а для электронов с преилов с преилового фильтра.

Вольт-амперные (I-V) характеристики слоистых гибридных структур будем рассчитывать по методике, предложенной в работе [7]. Согласно [7] транспортные свойства квантово-когерентного мезоскопического проводника при заданном напряжении смещения V полностью определяются набором вероятностей прохождения электрона со спином σ и энергией E сквозь данную структуру $D_{i,\sigma}(E,V)$. Эти вероятности являются собственными значениями матрицы перехода, представляющей собой произведение матрицы рассеяния на эрмитово-сопряженную. Индекс *i* отвечает разным каналам проводимости, в частности, в трехмерной планарной гетероструктуре он соответствует различным углам падения θ , которые образуют электронные импульсы с нормалью к границам раздела слоев. Для того чтобы оценить эффективность предложенного спинового фильтра, рассчитаем дифференциальную проводимость G(V) = dI(V)/dV гетероструктуры, изображенной на рис. 1, δ , в которой верхний электрод 4 является немагнитным металлом. При температуре T = 0 получим, что [7]:

$$G(V) = \frac{e^2}{h} \sum_{i,s} \int_{S_s} \frac{d^2 k_{\parallel}}{(2p)^2} D_{i,s}(E = eV), \qquad (1)$$

где k_{\parallel} – параллельная интерфейсам компонента волнового вектора. Заметим, что в отличие от стандартного туннельного перехода с неферромагнитными электродами в данном случае суммирование ведется по двум различным проекциям плоскостей постоянной энергии $S_{\sigma}(\sigma = \uparrow, \downarrow)$. Индекс *i* соответствует разным углам падения θ .

Рассчитаем вероятность прохождения электрона с определенным спином через спиновый фильтр, изображенный на рис. 1,*б*. Существует бесконечное множество путей перехода из одного электрода в другой через двухбарьерный участок с несверхпроводящей металлической прослойкой толщиной *l*. Простейший представляет собой прохождение через два барьера с амплитудами $t_1 = t_2 = t(\mathbf{k}) = -i\cos\theta/(Z - i\cos\theta)$, где $Z = U_0 d/(\hbar v_F)$, U_0 и d – высота и толщина барьера, v_F – фермиевская скорость. При этом набег фазы при движении заряда между барьерами $\varphi = kl \cos\theta$ [7]. Второй путь включает в себя два дополнительных отражения от барьеров с амплитудами $r_1 = r_2 = r(\mathbf{k}) = -Z/(Z - i\cos\theta)$ [7] и дополнительный набег фазы, равный 2φ ; третий вариант – четыре отражения от барьеров с набегом фазы 4 φ и т.д.

Сумма всех вкладов для определенного *i*-го канала (индекс *i* опускаем) равна

$$\tilde{t} = t_1 \exp(i\varphi)t_2(1 + r_1 \exp(2i\varphi)r_2 + r_1 \exp(2i\varphi)r_2r_1 \exp(2i\varphi)r_2 + ...) = \frac{t_1 \exp(i\varphi)t_2}{1 - r_1 \exp(2i\varphi)r_2}.$$
 (2)

Тогда вероятность туннелирования сквозь предложенный нами спиновый фильтр в *i*-м канале

$$D = \left|\tilde{t}\right|^{2} = \frac{1}{1 + \left[2 - \left|t_{1}\right|^{2} - \left|t_{2}\right|^{2} - 2\operatorname{Re}\left\{r_{1}r_{2}\exp(2i\varphi)\right\}\right] \left(\left|t_{1}\right|^{2}\left|t_{2}\right|^{2}\right)^{-1}}.$$
 (3)

Подставляя (3) в (1), получаем дифференциальную проводимость в одном из спиновых каналов. При достаточно малых напряжениях смещения она является константой.

Рассмотрим магниторезистивный элемент памяти с железом в качестве ферромагнитной пленки 6 (рис. 1,6). При комнатной температуре кристаллическая решетка железа кубическая объемноцентрированная – элементарная ячейка представляет собой куб с ребром 0.29 nm. Согласно расчетам [8] доминирующими носителями туннельного тока являются электроны *d*-зон, причем энергии Ферми двух зон с разными направлениями электронных

спинов в железе равны 2.25 eV для электронов со спинами преимущественного направления (спин вверх) и 0.35 eV – для электронов с противоположно ориентированными спинами (спин вниз). Это соответствует значениям фермиевских волновых векторов 7.6 nm⁻¹ для спинов вверх и 3.0 nm⁻¹ – для спинов вниз. Если толщина ферромагнитной прослойки 6, ориентированной вдоль одного из ребер куба, равна 13 атомным слоям (т.е. составляет 3.7 nm), то для электронов с преимущественным направлением спина имеет место конструктивная интерференция $2k_{\rm F}^{\uparrow} l \approx 2n\pi$ (где n = 9), а для электронов с противоположным спином – деструктивная интерференция с $2k_{\rm F}^{\downarrow} l \approx (2m+1)\pi$ (m = 3).

Основная трудность практической реализации описанной гетероструктуры заключается в неоднородности ферромагнитной прослойки по толщине. Методика, предложенная в [7], позволяет учесть возможный разброс параметра *l*. Результаты численных расчетов влияния шероховатости прослойки *6* (рис. 1,*б*) на эффективность спиновой фильтрации, которую мы определяем как $\gamma = (G_{\uparrow}(V) - G_{\downarrow}(V))/(G_{\uparrow}(V) + G_{\downarrow}(V))$, представлены на рис. 2. При расчете мы предположили, что исходная эффективность ферромагнитного инжектора *2* (без дополнительного фильтра) составляет 20%.



Рис. 2. Влияние разброса толщин ферромагнитной прослойки на зависимость эффективности спиновой фильтрации от средней толщины $l_0: - - l = l_0, \dots - l = (1 \pm 0.1)l_0,$ - - - $l = (1 \pm 0.2)l_0$. Основные параметры расчетов указаны в тексте

Из рис. 2 видно, что разброс толщин ферромагнитной прослойки играет незначительную роль при средних значениях $l_0 < 2$ nm, причем даже с учетом ее шероховатости степень спиновой фильтрации может возрасти в 4–5 раз. Заметим также, что с помощью предложенного спинового фильтра можно менять даже знак спиновой поляризации.

Заключение

Таким образом, теоретически обоснован новый метод создания источника спин-поляризованных электронов с помощью квантового размерного эффекта в ферромагнитной пленке наноразмерной толщины. Математическое моделирование зарядового транспорта в многослойных структурах показало, что разброс толщин такой пленки, неизбежный при промышленном производстве, существенно не влияет на величину спиновой поляризации. Благодаря этому можно значительно расширить функциональные возможности спинтронных устройств, используемых в современной вычислительной технике.

- 1. *А. Ферт*, УФН **178**, 1336 (2007).
- 2. J.S. Moodera, J. Mathon, JMMM 200, 248 (1999).
- 3. J.S. Moodera, L.R. Kinder, J. Appl. Phys. 79, 4724 (1996).
- 4. T.S. Santos, J.S. Moodera, Phys. Rev. B69, 241203 (2004).
- 5. S. Steil, N. Großmann, M. Laux, A. Ruffing, D. Steil, M. Wiesenmayer, S. Mathias, O.L.A. Monti, M. Cinchetti, M. Aeschlimann, Nature Physics 9, 242 (2013).
- 6. T.S. Santos, J.S. Lee, P. Migdal, I.C. Lekshmi, B. Satpati, J.S. Moodera, Phys. Rev. Lett. 98, 016601-1 (2007).
- 7. M. Belogolovskii, Phys. Rev. B67, 100503(R)-1 (2003).
- 8. A.H. Davis, J.M. MacLaren, J. Appl. Phys. 87, 5224 (2000).

T.A. Khachaturova, A.V. Vasilenko

MATHEMATICAL MODELING OF THE WORK OF A SPIN FILTER BASED ON THE QUANTUM SIZE EFFECT

A new method has been suggested and theoretically substantiated for enhancement of spin polarization of tunneling electrons in multi-layer structures at the rate of the quantum size effect in a ferromagnetic metal film of nanoscale thickness. Mathematical modeling of the charge transport in conducting heterostructures has demonstrated that the unavoid-able thickness modulation does not substantially affect the discussed phenomenon. This fact allows creation of new spintronic devices of much higher efficiency, as compared to the existing ones.

Keywords: mathematical modeling of the charge transport, quantum electronics, spinpolarized current, ferromagnetic films, size effect

Fig. 1. The scheme of the standard (*a*) and our (δ) magnetoresistive random access memory: *l* – substrate; *2*, *4* – ferromagnetic electrodes; *3*, *5* – two nanosized insulating films of the same composition and thickness; δ – nanosized layer of the same ferromagnetic metal, as in electrodes *2* and *4*

Fig. 2. Effect of the ferromagnetic interlayer thickness variation on the average thickness l_0 dependence of the spin-filtering efficiency: $-l = l_0, \dots - l = (1 \pm 0.1)l_0, \dots - - l = (1 \pm 0.2)l_0$. The main parameters of the calculation are indicated in the text