

PACS: 73.40.Gk, 75.50.Cc, 85.30.Mn

А.И. Хачатуров¹, В.П. Блощицкий², Т.А. Хачатурова¹

ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНУЮ ПРОВОДИМОСТЬ ТУННЕЛЬНЫХ КОНТАКТОВ С ФЕРРОМАГНИТНЫМ ЭЛЕКТРОДОМ

¹Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины
ул. Р. Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина

²Донецкий национальный технический университет
ул. Артема, 58, г. Донецк, 83001, Украина
E-mail: khach@hsts.fti.ac.donetsk.ua

Статья поступила в редакцию 6 апреля 2012 года

В рамках полуклассического приближения рассчитаны зависимости дифференциальной проводимости туннельных контактов ферромагнитный металл–изолятор–металл от напряжения смещения в зависимости от толщины изолятора. Показано, что их туннельные характеристики отражают особенности электронной структуры ферромагнитного электрода, хотя соответствующие плотности состояний электродов не входят непосредственно в расчетные формулы. В частности, при напряжении, соответствующем энергии Ферми зоны со спином вниз, на кривой дифференциальной проводимости возникает излом, форма которого меняется при приложении давления.

Ключевые слова: дифференциальная проводимость, туннельный контакт, ферромагнитный металл, зонная структура

Создание новых устройств, основанных на явлении спин-зависимого туннелирования, требует более детального изучения электронных свойств ферромагнитных металлических (FM) электродов в магниторезистивных контактах. Так, например, в работе [1] исходя из первых принципов были рассчитаны параметры зонной структуры железа. Было установлено, что в структурах Fe–Al₂O₃–Fe в переносе туннельного тока принимают участие две почти сферические *d*-зоны, причем энергия Ферми электронной зоны со спином вверх $E_{F_1} = 2.25$ eV, а зоны со спином вниз – $E_{F_2} = 0.35$ eV. Последующий анализ [2,3] продемонстрировал, что наличие на уровне Ферми малой группы носителей является необходимым условием для того, чтобы изучаемые структуры обладали отличным от нуля значением магнетосопротивления. В работах [2–4] расчеты, выполненные в рамках приближения Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна (ВКБ) для параболических зон, показали, что с ростом напряжения смещения *V* магнетосопротивление изучаемых туннельных структур должно убывать в соответствии с имеющимися экспериментальными данными.

ми (см., напр., [5]). Однако эти данные лишь косвенно подтверждают результаты зонных расчетов [1]. В настоящей работе мы показываем, что туннельные эксперименты с использованием высоких гидростатических сжатий могут служить непосредственным доказательством наличия на уровне Ферми ферромагнитного металла малой электронной группы.

Рассмотрим туннельную структуру ферромагнитный металл–изолятор–металл (FM–I–M) и вычислим зависимость ее дифференциальной проводимости $\sigma(V) = dJ(V)/dV$ от напряжения смещения V на переходе. При этом не будем выходить за рамки приближений работы [2], т.е. температуру T полагаем равной нулю, а туннелирование электронов считаем зеркальным с сохранением как полной энергии туннелирующего электрона E , так и компоненты его квазиимпульса k_{\parallel} , которая параллельна плоскости туннельного перехода. Кривая $\sigma(V)$, которую обычно называют барьерной характеристикой, как правило, полностью определяется параметрами потенциального барьера. Однако, как показано ниже, в случае контактов металл–изолятор–ферромагнитный металл это утверждение не выполняется, и наряду с барьерными свойствами $\sigma(V)$ отражает еще и особенности электронной структуры ферромагнитных электродов.

Считаем, что в металлическом электроде имеется одна вырожденная параболическая зона, энергия Ферми которой больше соответствующих величин для обеих зон ферромагнитного металла. Для определенности полагаем ее значение $E_F = 4.0$ eV, а эффективную массу электрона в такой зоне принимаем равной массе свободного электрона, $m = m_0$. Вслед за авторами работ [2,3] полагаем, что в ферромагнитном электроде участие в туннелировании принимают две зоны: со спином вверх с $E_{F_1} = 2.25$ eV и со спином вниз $E_{F_2} = 0.35$ eV. Для простоты полагаем эффективную массу электрона в металлическом электроде m , в обеих зонах ферромагнитного электрода m_1 и m_2 , а также в диэлектрической прослойке m_1 равной массе свободного электрона, т.е. $m = m_1 = m_2 = m_1 = m_0$.

Поскольку интересующие нас эффекты являются широкомасштабными по напряжению, то целесообразно положить температуру равной нулю. Полагаем, что процессы, приводящие к перевороту спина туннелирующего электрона, маловероятны. Тогда можно считать, что туннелирование в контакте FM–I–M осуществляется в двух независимых каналах и общий туннельный ток представляет собой сумму двух слагаемых

$$J(V) = J_1(V) + J_2(V), \quad (1)$$

где $J_1(V)$, $J_2(V)$ – туннельные токи, связанные с зоной со спином соответственно вверх и вниз. Считаем, что энергия Ферми металлического электрода E_F должна превышать энергии Ферми E_{F_1} и E_{F_2} ферромагнитного электрода. Учитывая это, запишем для полярности, при которой электроны из ферромагнетика туннелируют в металл:

$$J_i(V) = \int_{E_{F_i}-eV}^{E_{F_i}} P(E_z, V)(E_{F_i} - E_z) dE_z + \int_0^{E_{F_i}-eV} eVP(E_z, V) dE_z \text{ при } eV < E_{F_i}, \quad (2)$$

$$J_i(V) = \int_0^{E_{F_i}} P(E_z, V)(E_{F_i} - E_z) dE_z \text{ при } eV > E_{F_i},$$

где $P(E_z, V)$ – вероятность туннелирования, равная в полуклассическом приближении ВКБ

$$P(E_z, V) = \exp\left(-2 \int_0^d k_z(z) dz\right). \quad (3)$$

Для противоположной полярности, при которой электроны туннелируют из металла в ферромагнитный электрод, формулы для тока имеют вид

$$J_i(V) = \int_{E_F-eV}^{E_F} P(E_z, V)(E_{F_i} - E_z) dE_z + \int_{E_F-E_{F_i}-eV}^{E_F-eV} eVP(E_z, V) dE_z \text{ при } eV < E_F - E_{F_i},$$

$$J_i(V) = \int_{E_F-eV}^{E_F} P(E_z, V)(E_{F_i} - E_z) dE_z + \int_0^{E_F-eV} eVP(E_z, V) dE_z \text{ при } E_F - E_{F_i} < eV < E_F, \quad (4)$$

$$J_i(V) = \int_0^{E_F} P(E_z, V)(E_F - E_z) dE_z \text{ при } eV > E_F,$$

Дифференцируя (2) и (4) по напряжению смещения V , находим выражения для дифференциальной проводимости $\sigma(V)$:

$$\sigma_i(V) = \int_{E_{F_i}-eV}^{E_{F_i}} (E_{F_i} - E_z) \frac{\partial P}{\partial V} dE_z + e \int_0^{E_{F_i}-eV} \left[P(E_z, V) + V \frac{\partial P}{\partial V} \right] dE_z \text{ при } eV < E_{F_i}, \quad (5)$$

$$\sigma_i(V) = \int_0^{E_{F_i}} (E_{F_i} - E_z) \frac{\partial P}{\partial V} dE_z \text{ при } eV > E_{F_i}.$$

Для обратной полярности

$$\sigma_i(V) = \int_{E_F-eV}^{E_F} (E_{F_i} - E_z) \frac{\partial P}{\partial V} dE_z + e \int_{(E_F-E_{F_i}-eV)\theta(E_F-E_{F_i}-eV)}^{E_F-eV} \left[P(E_z, V) + V \frac{\partial P}{\partial V} \right] dE_z + eV^2 P(E_F - E_{F_i} - eV, V) \theta(E_F - E_{F_i} - eV) \text{ при } E_F - E_{F_i} < eV < E_F, \quad (6)$$

$$\sigma_i(V) = \int_0^{E_F} (E_F - E_z) \frac{\partial P}{\partial V} dE_z \text{ при } eV > E_F,$$

где $\theta(E_F - E_{F_i} - eV)$ – ступенчатая функция Хевисайда, равная нулю при отрицательных значениях аргумента, и единице – при положительных. Аналитическое выражение для прозрачности трапецеидального барьера приведено в работе [6]. Результаты расчетов по формулам (5) и (6) для прямоугольного потенциального барьера с фиксированной высотой $\phi_L = \phi_R = 4$ eV и переменной толщиной d представлены на рисунке. Они носят явно выраженный аномальный характер из-за отсутствия симметрии относительно нуля напряжений, хотя сам потенциальный барьер является симметричным.

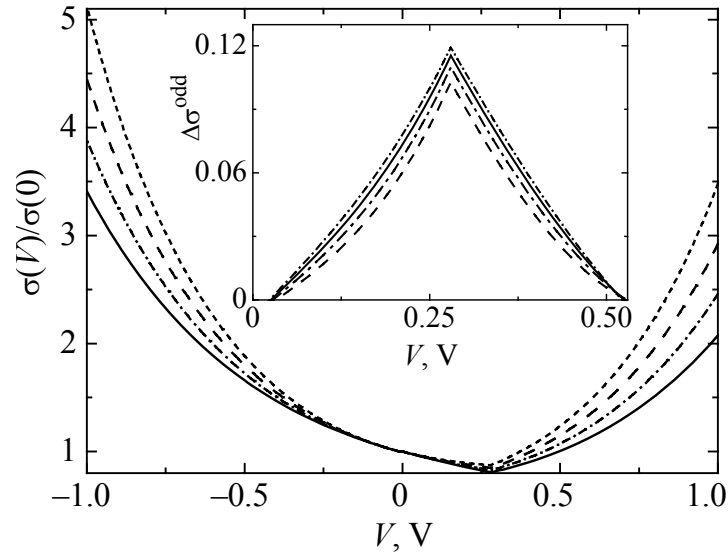


Рис. Дифференциальная проводимость FM–I–M-контакта с симметричным прямоугольным барьером $\phi_L = \phi_R = 4$ eV и фермиевскими энергиями $E_{F_1} = 2.25$ eV, $E_{F_2} = 0.35$ eV, $E_F = 4.0$ eV. На вставке показано предсказываемое увеличение амплитуды особенности, соответствующей границе электронной зоны со спином вниз в FM-электроде. Толщины туннельного барьера d составляли 1, 1.2 и 1.4 nm (сплошная, штрихпунктирная и штриховая линии соответственно)

Анализ несимметричных по напряжению эффектов удобно проводить, рассчитывая нечетную по напряжению часть дифференциальной туннельной проводимости

$$\sigma^{\text{odd}}(V) = [\sigma(V) - \sigma(-V)] / 2, \quad (7)$$

поскольку для контактов металл–изолятор–металл в случае прямоугольного барьера она должна обращаться в нуль. Согласно приближенной формуле (7) [7]:

$$\frac{\sigma(V)}{\sigma(0)} = 1 - \left(\frac{A_0 \Delta\phi}{1\bar{\phi}^{3/2}} \right) eV + \left(\frac{9}{128} \frac{A_0^2}{\bar{\phi}} \right) (eV)^2, \quad (8)$$

где $\Delta\phi = \phi_2 - \phi_1$, $A_0 = 4(2m)^{1/2} d / 3\hbar$ и $\sigma(0) = (3.16 \cdot 10^{10} \bar{\phi}^{1/2} / d) \exp(-1.25d\bar{\phi}^{1/2})$.

Однако, как следует из рисунка, для контактов FM–I–M нечетная часть

$\sigma^{\text{odd}}(V)$ существенно отличается от нуля и в области напряжений, не превышающих нескольких сотен милливольт, растет примерно по линейному закону. На вставке к рисунку приведена зависимость $\Delta\sigma^{\text{odd}} = \sigma^{\text{odd}} - \sigma_{\text{linear}}^{\text{odd}}$, где $\sigma_{\text{linear}}^{\text{odd}}$ – член, учитывающий указанный линейный рост нечетной части.

На основе вышеприведенных расчетов можно сделать вывод о том, что поведение кривых $\sigma(V)$ для контактов FM–I–M отражает особенности электронного строения ферромагнитного электрода. На первый взгляд это утверждение противоречит общепринятому положению туннельной спектроскопии о том, что в модели независимых электронов и параболических зон особенности плотности состояний не могут проявляться в туннельных характеристиках [8]. Действительно, плотности состояний электродов исследуемой туннельной структуры не входят в выражения для туннельного тока (2) и (4). При малых напряжениях $eV \ll \phi$ прозрачность барьера $P(E_z, V)$ можно считать постоянной величиной и вынести за знак интегралов, которые будут представлять собой поток частиц, падающих на плоскость потенциального барьера. Как было показано ранее [9,10], из-за зеркального характера туннелирования скорость изменения потока частиц из малой зоны в области напряжений от нуля до $eV = E_{F_i}$ линейно убывает до нуля, в то время как скорость изменения потока частиц из большой зоны в малую растет вплоть до $eV = E_F - E_{F_i}$. Это обстоятельство и является той причиной, благодаря которой особенности электронного спектра электродов проявляются в туннельных характеристиках исследуемых контактов.

Что касается контактов FM–I–M, то проведенные нами расчеты туннельных характеристик дают основание утверждать, что наличие малой зоны в электронном спектре ферромагнитного металла должно отчетливо проявлять себя в зависимости дифференциальной проводимости от напряжения как пик проводимости при напряжении $\tilde{V} = E_{F_2} / e$. Как видно из рисунка, обсуждаемый эффект достаточно чувствителен к толщине диэлектрической прослойки d , поэтому эксперименты при высоких давлениях могли бы быть хорошим методом исследования особенностей электронного спектра ферромагнитного электрода.

1. *W.H. Butler, X.-G. Zhang, T.C. Schulthess, M. MacLarren*, Phys. Rev. **B63**, 054416 (2001).
2. *A.H. Davis, J.M. MacLarren*, J. Appl. Phys. **87**, 5224 (2000).
3. *А.И. Хачатуров*, Письма в ЖЭТФ **82**, 728 (2005).
4. *А.И. Хачатуров*, ЖТФ **76**, 79 (2005).
5. *G. Feng, S. van Dijken, J.F. Feng, J.M.D. Coey, T. Leo, D.J. Smith*, J. Appl. Phys. **105**, 03916 (2009).
6. *R.B. Floyd, D.G. Walmsley*, J. Phys. C: Solid State Phys. **11**, 4601 (1978).
7. *W.F. Brinkman, R.C. Dynes, J.M. Rowell*, J. Appl. Phys. **41**, 1915 (1970).

8. *W.A. Harrison*, Phys. Rev. **123**, 85 (1961).
9. *В.М. Свистунов, А.И. Хачатуров, М.А. Белоголовский, О.И. Черняк*, ФНТ **22**, 605 (1996).
10. *А.И. Хачатуров*, ФНТ **31**, 109 (2005).

О.Й. Хачатуров, В.П. Блощицкий, Т.О. Хачатурова

ВПЛИВ ТИСКУ НА ДИФЕРЕНЦІАЛЬНУ ПРОВІДНІСТЬ ТУНЕЛЬНИХ КОНТАКТІВ З ФЕРОМАГНІТНИМ ЕЛЕКТРОДОМ

У рамках напівкласичного наближення розраховано залежності диференціальної провідності тунельних контактів ферромагнітний метал–ізолятор–метал від напруги зсуву в залежності від товщини ізолятора. Показано, що їх тунельні характеристики відображають особливості електронної структури ферромагнітного електрода, хоча відповідні щільності станів електродів не входять безпосередньо в розрахункові формули. Зокрема, при напрузі, що відповідає енергії Фермі зони зі спіном вниз, на кривій диференціальної провідності виникає злам, форма якого змінюється під тиском.

Ключові слова: диференціальна провідність, тунельний контакт, ферромагнітний метал, зонна структура

A.I. Khachaturov, V.P. Bloschitskii, T.A. Khachaturova

PRESSURE EFFECT ON THE DIFFERENTIAL CONDUCTANCE OF TUNNEL JUNCTIONS WITH THE FERROMAGNETIC ELECTRODE

In the framework of semiclassical approximation, the dependences of the differential conductance of tunnel junctions of ferromagnetic metal–insulator–metal type on the bias voltage for different insulator thicknesses were calculated. It is shown that their tunnel characteristics reflect particular features of the electronic structure of the ferromagnetic electrode, although the related densities of states of the electrodes are not included directly in the formulas. In particular, there is a kink in the differential conductance curve at the voltage corresponding to the Fermi energy of spin-down band which shape is changed under pressure.

Keywords: differential conductance, tunnel contact, ferromagnetic metal, band structure

Fig. Differential conductance of the FM–I–M-contact with the symmetrical rectangular potential barrier $\varphi_L = \varphi_R = 4$ eV and Fermi energies $E_{F_1} = 2.25$ eV, $E_{F_2} = 0.35$ eV, $E_F = 4.0$ eV. The expected increase of the amplitude of the singularity corresponding to the bottom of the spin-down electron band in the FM-electrode is shown in the inset. Potential barrier thicknesses d were equal to 1, 1.2 and 1.4 nm (solid, dashed-dotted, and dashed curves, respectively)