

ЗАВИСИМОСТИ ТУННЕЛЬНОГО МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ И ПЕРЕНОСА СПИНОВОГО МОМЕНТА ОТ РАЗМЕРОВ И КОНЦЕНТРАЦИИ НАНОЧАСТИЦ В МАГНИТНЫХ ТУННЕЛЬНЫХ НАНОКОНТАКТАХ

А. М. Исмаили^a, А. Н. Усеинов^{a,b,c*}, Н. Х. Усеинов^{a**}

^a Институт физики, Казанский (Приволжский) федеральный университет
420008, Казань, Россия

^b Department of Physics, National Tsing Hua University
300, HsinChu, Taiwan

^c Department of Materials Science and Engineering, National Tsing Hua University
300, HsinChu, Taiwan

Поступила в редакцию 4 февраля 2017 г.

Вычислены зависимости туннельного магнитосопротивления и параллельной компоненты переноса спинового момента от приложенного напряжения в магнитном туннельном контакте. Расчет выполнен в приближении баллистического транспорта электронов проводимости через изолирующий слой с внедренными в него магнитными или немагнитными наночастицами. Однobarьерный магнитный туннельный контакт с внедренной в изолятор наночастицей образует двухбарьерный магнитный туннельный контакт. Показано, что значение параллельной компоненты переноса спинового момента в двухбарьерном магнитном туннельном контакте может быть больше, чем в однobarьерном для той же самой толщины изолирующего слоя. Согласно расчетам, внедренные в туннельный контакт наночастицы повышают вероятность туннелирования электронов, создают резонансные условия и обеспечивают квантование проводимости в отличие от туннельного контакта без наночастиц. Вычисленные зависимости туннельного магнитосопротивления соответствуют экспериментальным данным, в которых наблюдаются пикообразные аномалии и подавление максимальных значений магнитосопротивления при малых напряжениях.

DOI: 10.7868/S0044451018010121

1. ВВЕДЕНИЕ

В работе [1] была предложена возможность изготовления нового вида спинтронных устройств: ячеек памяти STT-MRAM на основе магнитных туннельных контактов (МТК) с низкой критической плотностью тока переключения ($J_c \approx 4.2 \cdot 10^3$ А/см²) при комнатной температуре. Изолирующий слой MgO осаждался в дисперсной среде со встроенными наночастицами Fe различной концентрации. Одним из способов внедрения наночастиц в изолирующий слой стало использование плазменного напыления с низкой скоростью. Наночастицы вырастают из

зерен в результате процесса атомной кластеризации [2–5].

В работе [2] был синтезирован и исследован МТК с магнитной анизотропией в плоскости слоев на основе наноструктуры: Ta(10)/Ir₂₂Mn₇₈(25)/Co₇₀Fe₃₀(3.5)/Mg(0.8)/MgO(2.8)/Co₇₀Fe₃₀(7)/Ta(10), где в скобках указаны толщины слоев в нанометрах (см. дополнительную информацию к работе [2]). Изолирующий слой MgO этой структуры содержал встроенные наночастицы Co₇₀Fe₃₀. Полная наноструктура с подложкой SiO₂ имела вид SiO₂/Ta(10)/Ir₂₂Mn₇₈(25)/Co₇₀Fe₃₀(3.5)/MgO(2.5)/Co₇₀Fe₃₀(t_{NP})/Mg(0.8)/MgO(2.5)/Co₇₀Fe₃₀(7)/Ir₂₂Mn₇₈(15)/Ta(10). Наноструктуры характеризовались номинальными толщинами (размерами) t_{NP} наночастиц, которые изменялись от 0.25 до 0.75 нм. Эти значения были получены из изображений просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ,

* E-mail: arthur.useinov@gmail.com

** E-mail: nuseinov@mail.ru

англ. ТЕМ). Соответствующие средние диаметры наночастиц от 1.53 ± 0.4 нм до 3.2 ± 0.7 нм были оценены на основании трех факторов: электрической емкости сферических наночастиц, температуры блокировки магнитного момента наночастиц и функции распределения диаметров наночастиц в слое MgO, построенной из ПЭМ-изображений. В действительности наночастицы имеют произвольные размеры, и их расположение в барьере может быть проконтролировано скоростями осаждения, материалом подложки SiO₂ и отжигом.

Экспериментальные измерения туннельного магнитосопротивления (ТМС), выполненные в работах [2, 4], показали аномальное увеличение ТМС или его подавление при малых приложенных напряжениях. Эти аномалии наблюдались при низких температурах ($T \approx 2.5$ К). В частности, подавление ТМС (резкое уменьшение при нулевых напряжениях) объяснялось эффектом Кондо при туннельном режиме с размерами наночастиц $t_{NP} < 0.7$ нм, несмотря на то, что необычно высокие пики ТМС, возникающие при малых напряжениях, наблюдались при размерах наночастиц $t_{NP} \approx 1.1$ нм (номинальный размер наночастиц оказывается большим).

Результаты работы [2] были предсказаны ранее в теоретической работе [6] и интерпретировались как режим резонансного туннелирования с предположением, что пик кривой ТМС связан с резонансно-туннелирующим каналом эффекта Кондо. Интерпретация необычного поведения ТМС была дана в рамках существования последовательного туннелирования с кулоновской блокадой, резонансного и нерезонансного туннелирования с кондо-ассоциированным режимом туннелирования, которые, главным образом, зависят от номинального размера t_{NP} наночастицы. В дополнение к этому было отмечено, что кроссовер поведения ТМС от эффекта Кондо к резонансному туннелированию для размеров $t_{NP} \leq 1$ нм совпадает с порогом подавления магнитных моментов наночастиц. Если наночастица имеет магнитный момент, то она может взаимодействовать с одним из ферромагнитных (ФМ) слоев или с внешним магнитным полем. Таким образом, наночастицы могут иметь температуру блокировки магнитного момента.

В экспериментальной работе [5] магнитные туннельные контакты с перпендикулярной магнитной анизотропией были созданы на основе наноструктур Ta(25)/Co₂₀Fe₄₀B₂₀(1.3)/MgO(1)/Fe(t_{NP})/MgO(1)/Co₄₀Fe₆₀B₂₀(2.2)/Ta(5). Измерения были выполнены при фиксированной величине тока $I = 20$ мкА, при которой наблюдались аномальные холловские

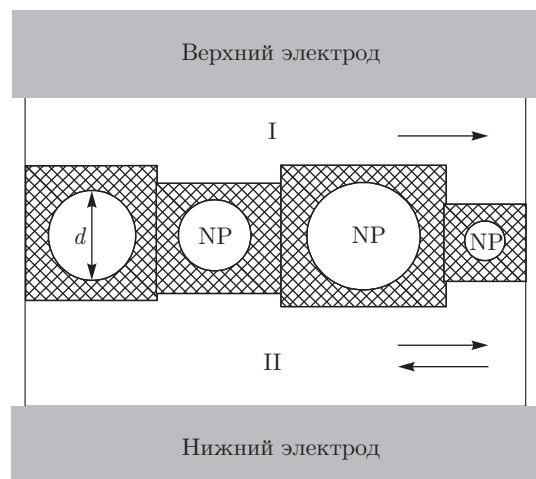


Рис. 1. Схематический вид симметричного МТК с туннельными ячейками и наночастицами (NP) разных диаметров в изолирующем среднем слое (заштриховано). Стрелки показывают параллельное (P) и антипараллельное (AP) направления намагниченностей свободного (II) и фиксированного (I) ФМ-слоев

напряжения, а также петли гистерезиса в координатах $H-R$ для различных значений t_{NP} . Показано, что толщина t_{NP} ферромагнитного слоя сильно влияет на коэрцитивность образцов. Кроме того, уменьшение коэрцитивности с дальнейшим увеличением содержания наночастиц Fe (размерами от 0.15 до 0.3 нм) приписывалось к порогу протекания и формирования связанной сети магнитных гранул, что аналогично результатам работы [7].

Также отметим, что повышение на один порядок значения ТМС наблюдалось в двухбарьерной системе MgO с наночастицами Fe номинальных размеров $t_{NP} = 0.17$ нм по сравнению с эталонной системой без наночастиц [8]. Как предполагалось в работе [8], такое увеличение ТМС может происходить от возможного усиления спиновой поляризации при уменьшении размера t_{Fe} наночастиц Fe, внедренных в изолятор MgO, а не из-за эффекта кулоновской блокады.

В разд. 2 мы рассмотрим теоретическую модель, в которой основной задачей является определение проводимости МТК в предположении, что двухбарьерное туннелирование (при когерентном туннелировании через наночастицу) доминирует над однобарьерным. Как известно, ТМС определяется различием сопротивлений МТК, которые возникают при параллельном (P) и антипараллельном (AP) направлениях намагниченностей верхнего и нижне-

го магнитных слоев (рис. 1). В нашем исследовании ТМС в МТК определяется отношением

$$R = \frac{G^P - G^{AP}}{G^{AP}},$$

где $G^{P(AP)}$ — проводимость при параллельных (антипараллельных) направлениях намагниченности верхнего и нижнего слоев.

Как уже отмечалось выше, в экспериментальных работах [2–5] наночастицы характеризовались размерами или толщинами t_{NP} . В наших исследованиях наночастицы, внедренные в изолятор MgO, характеризуются диаметрами d (см. рис. 1). Между этими величинами существует функциональная зависимость, нахождение которой является предметом дополнительного исследования. Ниже мы не затрагиваем эту тему и используем при вычислениях диаметры отдельных наночастиц.

Кроме того, отметим, что наночастицы могут иметь свои собственные независимые направления намагниченностей, которые могут дать дополнительный вклад в общее сопротивление. В вычислениях, выполненных в разд. 3, мы учитываем только два направления магнитного момента наночастиц относительно направления намагниченности свободного ФМ-слоя: параллельное или антипараллельное. Основными параметрами магнитной наночастицы являются ее диаметр d и абсолютная величина волнового вектора $k_{n,s}$, которая определяет состояния электронов проводимости с учетом спиновых степеней свободы, $s = \uparrow, \downarrow$. В случае немагнитной наночастицы электронные состояния вырождены по спину.

До настоящего времени нет достаточно полных теоретических исследований, которые объясняли бы непротиворечивым образом аномальное поведение ТМС. Целью данной работы является построение простой модели для объяснения основных результатов экспериментальных наблюдений, которые были опубликованы группами из исследовательского Центра IBM [2] и Тайваньского исследовательского Центра [5], без учета эффектов Кондо и кулоновской блокады. Отметим, что наши численные расчеты в основном сравниваются с экспериментальными данными, приведенными в статьях [2–5]. Кроме того, наш подход может быть использован для расчета переноса спинового момента в МТК со встроенными наночастицами (см. разд. 3.2).

2. МОДЕЛЬ КОГЕРЕНТНОГО ТУННЕЛИРОВАНИЯ ЧЕРЕЗ НАНОЧАСТИЦЫ

Теоретическая модель электронного транспорта через наночастицу в однобарьерном МТК аналогична модели электронного транспорта в двухбарьерном МТК. Последняя модель хорошо разработана и изложена в работах [9–11], см. также ее основные положения и подробное описание в статьях [12–14].

Эти теоретические работы описывают электронный транспорт через проводящие и туннельные (точечные или планарные) наноконтакты, магнитные доменные стенки между двумя ферромагнитными слоями (электродами) с учетом закона сохранения спин-зависимых импульсов и спин-зависимых длин свободного пробега. Авторы работ [12–14] используют квазиклассические и квантовомеханические приближения, базирующиеся на решении обобщенных кинетических уравнений для функций Грина [12]. Эта теоретическая модель также может быть использована для расчета спин-поляризованной проводимости через туннельный барьер в баллистическом пределе $l > a$ (где a — радиус контакта, l — длина свободного пробега электрона проводимости) для однобарьерных и двухбарьерных МТК [9, 15].

Для того чтобы наша модель соответствовала реальной экспериментальной ситуации, предположим, что внедренные в изолятор наночастицы имеют определенное распределение по диаметрам. Для возможности вычисления проводимости с этим распределением за конечное время ограничимся конечным числом наночастиц. Например, возьмем $N = 100$ наночастиц и разделим их на фракции. Каждая фракция содержит некоторое число частиц (не более 100) одинакового диаметра.

Для вычисления полной проводимости МТК мы используем схему параллельного подключения туннельных ячеек, где каждая ячейка содержит одну наночастицу. Схематический вид МТК с наночастицами разных диаметров в туннельных ячейках приведен выше на рис. 1. Распределение наночастиц и разделение их на фракции в МТК в зависимости от их диаметра показаны на рис. 2. Отметим, что это разделение на фракции (одного диаметра) соответствует размерам наночастиц, исследованных в работе [2] (их разброс по размерам показан в дополнительном материале к работе [2]).

Спин-поляризованные каналы проводимости через наночастицы можно сопоставить стационарным состояниям дискретного спектра в потенциальной

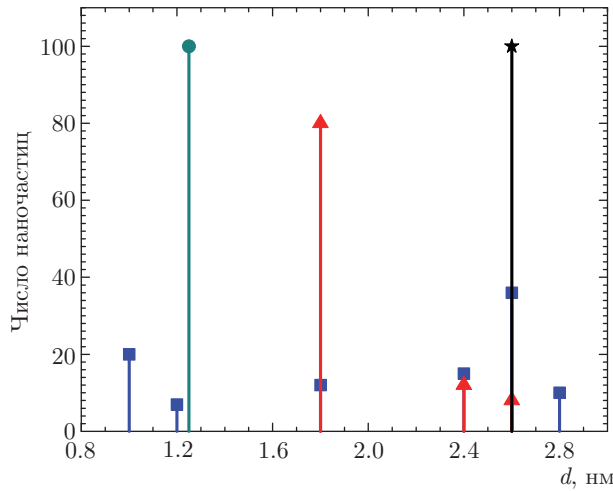


Рис. 2. (В цвете онлайн) Распределение наночастиц в МТК с заданным диаметром d . Число наночастиц с данным диаметром во фракции обозначено соответствующими знаками с линией до оси абсцисс. Эти числа и знаки соответствуют вычислениям и графикам, представленным далее на рисунках: кружок для рис. 4, звездочка для рис. 5, квадрат для рис. 6 (сплошная кривая) и треугольник для рис. 7 (сплошная кривая)

яме (квантовой яме). Эти состояния с учетом спиновых степеней свободы определяются энергиями

$$E_{n,s} = \hbar^2 k_{n,s}^2 / 2m.$$

Волновые векторы электрона проводимости в этом случае можно определить выражением

$$k_{n,s} = \sqrt{k_n^2 \pm m \Delta_0 / \hbar^2}, \quad (1)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$, $k_n = n\pi/d$ — набор значений волнового вектора в случае прямоугольной ямы [16], m — эффективная масса электрона проводимости, Δ_0 — обменная энергия, которая определяет различие между электронными спиновыми состояниями. Знак плюс или минус в выражении (1) соответствует $s = \uparrow$ или $s = \downarrow$.

Предполагается, что диаметр d может быть равен ширине квантовой ямы, т. е. расстоянию между барьерами, и пропорционален числу атомов в наночастице.

Наличие дискретных состояний в квантовой яме является важным свойством, которое определяет наблюдаемые различия между МТК с наночастицами и двухбарьерным МТК со сплошным средним ФМ-слоем.

Совокупность величин $k_{F,s}$ и $k_{n,s}$ соответственно для ФМ-слоев и наночастиц является начальным заданным набором параметров, которые характеризуют

состояние системы при малых напряжениях $V \simeq 0$ ($V = 10^{-4}$ В). В условиях приложенного напряжения, когда $V \neq 0$, состояния системы изменяются. В этом случае волновые векторы определяются формулами

$$k_{F,s'}(V) = \sqrt{k_{F,s'}^2 + cV} \quad (2)$$

для ФМ-слоев и

$$k_{n,\uparrow(\downarrow)}(V) = \sqrt{k_n^2 \pm m \Delta_0 / \hbar^2 + cMV/2} \quad (3)$$

для наночастиц в пренебрежении падением напряжения на электродах. В формулах (2) и (3) $c = (2m_0e/\hbar^2) \cdot 10^{-20} [\text{Å}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}]$ — размерный множитель, $M = m/m_0$ — отношение эффективной массы электрона проводимости в ФМ-слое к массе свободного электрона.

Приближение дискретных энергетических уровней наночастицы в области квантовой ямы является наиболее упрощенной картиной и используется в нашей модели для того, чтобы вычислить до конца наблюдаемые характеристики МТК и показать их зависимости от $k_{n,s}$, V и d .

Более точные структуры энергетических уровней или полос (электронные структуры спиновых подзон) и их квантование можно найти в различных теоретических работах, таких как формализм Кубо, теория случайных матриц [17, 18], теория возмущения Ландау [19], а также при вычислениях из первых принципов.

Используя результаты теоретических работ [9, 20], выражение для спин-поляризованной проводимости для каждой туннельной ячейки, содержащей наночастицу, запишем в следующем виде:

$$G_s^{P(AP)}(V) = G_0 \frac{\sigma k_{F,s}^2}{2\pi} \langle \cos(\theta_s) D_s^{P(AP)}(V) \rangle, \quad (4)$$

где $G_0 = e^2/h$ — квант проводимости, имеет численное значение $G_0 \approx 3.874 \cdot 10^{-5} \Omega^{-1}$, $D_s^{P(AP)}$ — коэффициенты прохождения электронов, $k_{F,s}$ — абсолютная величина волнового вектора на уровне Ферми верхнего (нижнего) ФМ-слоев в зависимости от знака приложенного напряжения V . Для простоты верхний и нижний ФМ-слои взяты одинаковыми за исключением их магнитных свойств: предполагается, что нижний ФМ-слой имеет более магнитомягкие свойства. Площадь контакта σ (в нм^2) зависит от выбора геометрии туннельной ячейки. Угловые скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают усреднение по углам:

$$\langle \dots \rangle \equiv \frac{1}{2\pi} \int_0^{\theta_{cr,s}} \sin(\theta_s) d\theta_s \int_0^{2\pi} d\varphi \left(\cos(\theta_s) D_s^{P(AP)} \right),$$

где верхний предел в первом интеграле определяется критическим углом $\theta_{cr,s}$, ограничивающим возможные траектории падения электронов на барьер согласно закону сохранения импульса. Например, когда электрон осуществляет туннельный переход (по траектории, разрешенной к прохождению через барьер) из спиновой подзоны проводимости верхнего ФМ-слоя с волновым вектором $k_{F,s}$ в одну из двух спиновых подзон нижнего ФМ-слоя с $k_{F,s'}(V)$, критический угол определяется формулой

$$\theta_{cr,s} = \arccos \left(\sqrt{|1 - [k_{F,s'}(V)/k_{F,s}]^2|} \right). \quad (5)$$

Коэффициент прохождения $D_s^{P(AP)}$ электронов через наночастицу был найден в аналитическом виде в соответствии с правилами квантовой механики, на основе послыонного решения одномерного стационарного уравнения Шредингера. Коэффициент прохождения для однобарьерной структуры получается как предельное выражение коэффициента прохождения от двухбарьерной структуры, вычисленного при $d \rightarrow 0$ и $k_{n,s} \rightarrow 0$.

Полная проводимость однобарьерного и двухбарьерного МТК с равными барьерами при когерентном туннелировании определяется выражением

$$G^{P(AP)} = \sum_s \left(\sum_i^N G_{i,s}^{P(AP)} + g_s^{P(AP)} \right), \quad (6)$$

где $G_{i,s}^{P(AP)}$ — основная (преобладающая) часть проводимости электронов со спином вверх или со спином вниз через наночастицы, а $g_s^{P(AP)}$ — спин-поляризованная часть проводимости только через изолятор без наночастиц.

Здесь необходимо отметить, что возможный режим последовательного туннелирования через наночастицу мы не рассматриваем, предполагая его пренебрежимо малый вклад при малых диаметрах наночастиц. Такой режим может доминировать для наночастиц с диаметром $d > 3.5$ нм или для гранулированных систем выше порога перколяции [7].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ

3.1. Аномалии ТМС в МТК с наночастицами

Теперь мы рассмотрим несколько эффектов, которые характеризуют МТК с внедренными наночастицами, когда намагниченности ФМ-слоев локализованы в плоскости контакта. Прежде всего вычислим проводимости G^P и G^{AP} при параллельной

и антипараллельной ориентации намагниченностей ФМ-слоев. Расчет выражений (4) и (6) для получения кривых на рис. 3 был выполнен в предположении небольших величин волновых векторов k_n электронов в наночастицах относительно значений волновых векторов в ФМ-слоях. Исходные параметры были следующие: $k_{F,\uparrow} = 1.09 \text{ \AA}^{-1}$, $k_{F,\downarrow} = 0.421 \text{ \AA}^{-1}$, $M = 0.8$, высоты барьеров $U_B = 1.2 \text{ эВ}$, толщины барьеров $L_{1,2} = 1 \text{ нм}$, эффективные массы электронов проводимости в барьерах $0.4m_0$, туннельная ячейка имела площадь $\sigma = 20.0 \text{ нм}^2$. Значения этих параметров соответствуют экспериментальным данным см., например, работы [21, 22], а также теоретические оценки в работах [9, 15, 23].

На рис. 3 видно, что величины G^P и G^{AP} растут, формируя ступенчатый характер зависимости от напряжения, когда угол падения электрона на барьер соответствует открытым каналам проводимости. Это явление известно как режим квантования проводимости. В данном случае это связано с ограниченной геометрией наночастицы. Когда ступеньки проводимости локализованы непосредственно в области низких напряжений $V \approx 10^{-4} \text{ В}$ (и когда $G^P \approx G^{AP}$), возникает быстрое уменьшение ТМС (см. штриховую кривую 2 на рис. 3).

Аномальное поведение ТМС показано на рис. 3, который воспроизводит пикообразные зависимости ТМС и их подавление при нулевых напряжениях $V \simeq 0$ ($V = 10^{-4} \text{ В}$). Такие области ТМС будем обозначать с индексом «нуль» (ТМС₀). На рис. 3 видно, что ТМС₀ может принимать даже отрицательные значения. Аналогичные зависимости ТМС ранее были продемонстрированы в экспериментальных работах [2–4].

Отметим, что резкое уменьшение ТМС₀ наблюдается в экспериментах только при низких температурах. В наших вычислениях это соответствует состояниям с малыми волновыми векторами $k_n \approx 0.1\text{--}0.36 \text{ \AA}^{-1}$, которые характерны для состояний в квантовой яме. Влияние температуры на величину ТМС в нашей модели не обсуждается, поскольку при выводе выражения для проводимости $G_s^{P(AP)}(V)$ предполагается, что рабочие температуры намного меньше характерной температуры Ферми E_F/k_B , где k_B — постоянная Больцмана.

Кроме того, ТМС₀ становится отрицательным при $k_n < \pi/d$ (см. рис. 3, кривая 2). Такие значения ТМС₀ возможно наблюдать и в эксперименте за счет влияния интерфейсов и неравномерной толщины барьеров, а также анизотропной формы наночастиц, например, за счет отклонения квантовой ямы от идеальной формы, когда волновой вектор

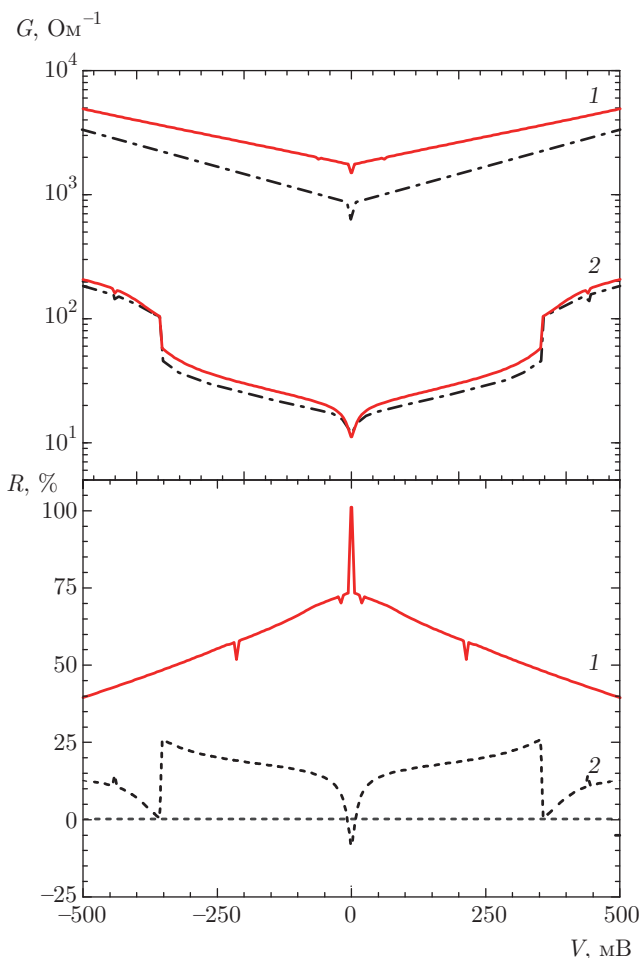


Рис. 3. (В цвете онлайн) Зависимости $G^{P(AP)}$ и ТМС от приложенного напряжения. Кривые 1 и 2 на верхнем рисунке соответствуют квантовым проводимостям при параллельной (сплошная линия) и антипараллельной (штрихпунктирная линия) ориентациях намагниченностей ФМ-слоев. На нижнем рисунке кривая 1 имеет пик при нулевых значениях напряжения и совпадает с кривой 2, изображенной на рис. 5. Кривая 1 получена для МТК с немагнитными наночастицами при значениях волновых векторов $k_n = 0.4508 \text{ \AA}^{-1}$ и диаметрах $d = 2.6 \text{ нм}$. Кривая 2 показывает отрицательное значение $R_0 = -8\%$ и была получена при $k_n = 0.115 \text{ \AA}^{-1}$

описывается формулой

$$k_n = \frac{n\pi}{d} - \Phi,$$

где Φ — добавка к волновому вектору, определяемая формой потенциальной ямы. Вычисление коэффициента прохождения $D_s^{P(AP)}$ при малых $k_{n,s}$ включает также решения, в которых возможен быстрый рост туннельной прозрачности за счет открытых траекторий в разрешенных углах θ_s при пороговых

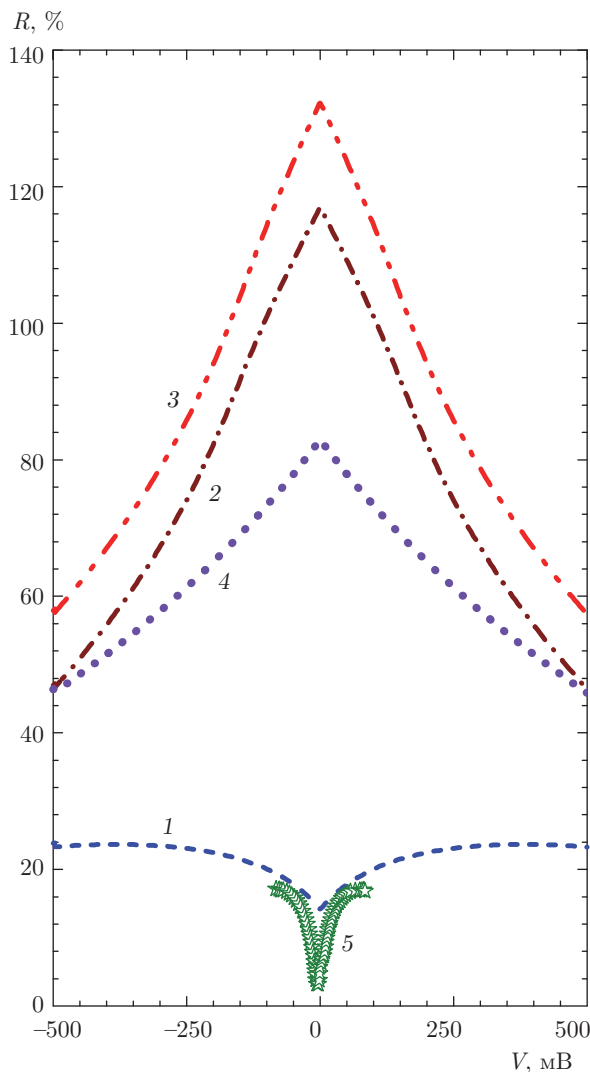


Рис. 4. (В цвете онлайн) Зависимости ТМС от приложенного напряжения. Значения волновых векторов и другие параметры МТК, использованные при вычислении кривых, приведены в основном тексте. Кривые 1 и 2 показывают изменение зависимостей ТМС в случае ста немагнитных наночастиц с волновыми векторами соответственно $k_n = 0.251 \text{ \AA}^{-1}$ и $k_n = 0.5026 \text{ \AA}^{-1}$. Кривая 3 получена при тех же параметрах, что и кривая 1, но для магнитных наночастиц. Кривая 4 показывает зависимость ТМС в случае однобарьерного МТК. Кривая 5 — экспериментальные данные работы [2]

напряжениях, поскольку $k_{n,s}(V)$ возрастает с ростом напряжения, см. формулу (3).

Далее представим результаты вычислений ТМС для МТК с характерными волновыми векторами $k_{F,\uparrow} = 1.09 \text{ \AA}^{-1}$ и $k_{F,\downarrow} = 0.421 \text{ \AA}^{-1}$ спиновых подзон ФМ-слоев и наночастицами с диаметрами $d = 1.25 \text{ нм}$ и $d = 2.6 \text{ нм}$ (соответственно рис. 4 и

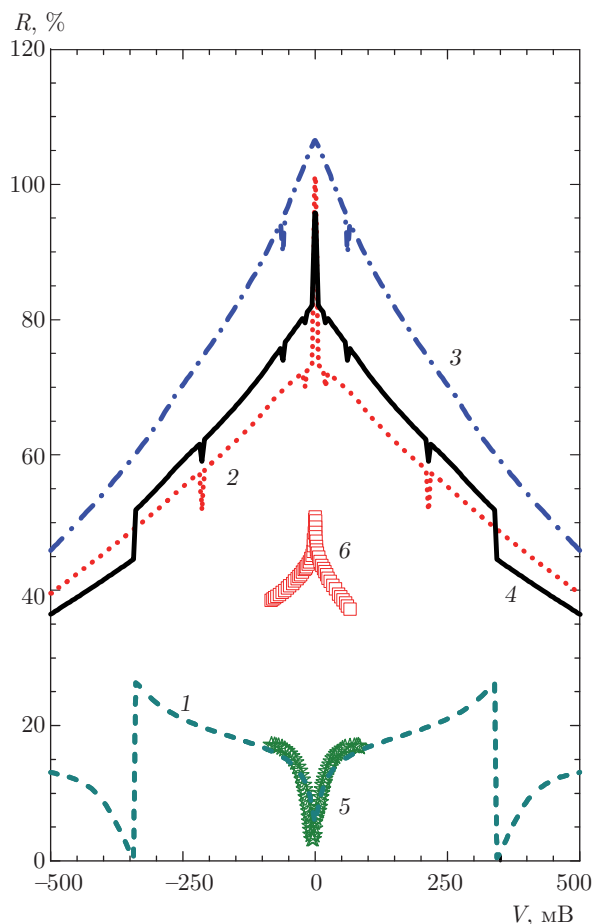


Рис. 5. (В цвете онлайн) Зависимости ТМС от приложенного напряжения в МТК с немагнитными наночастицами. Кривые 1, 2 и 3 получены при значениях волновых векторов наночастиц соответственно $k_n = 0.121 \text{ \AA}^{-1}$, $k_n = 0.4508 \text{ \AA}^{-1}$ и $k_n = 0.483 \text{ \AA}^{-1}$. Кривая 2 совпадает с кривой 1, изображенной на рис. 3. Сплошная кривая 4 соответствует распределению ста наночастиц по состояниям (см. основной текст). Кривая 5 совпадает с кривой 5 на рис. 4. Кривая 6 — экспериментальные данные работы [2]

рис. 5). Кривые характеризуются значениями волновых векторов различных квантовых состояний в наночастицах, где наименьшее значение TMR_0 соответствует решению $k_n = n\pi/d$ при $n = 1$. Например, кривые 1, полученные при $k_{n=1} = 0.251 \text{ \AA}^{-1}$ (рис. 4) и $k_{n=1} = 0.121 \text{ \AA}^{-1}$ (рис. 5), моделируют сильное подавление TMR_0 и коррелируют с экспериментальными данными (см. кривые 5). Эти зависимости ТМС взяты из работы [2] и приведены здесь для сравнения.

В случае занятых энергетических уровней в квантовой яме с $n = 2$ ($d = 1.25 \text{ нм}$) или $n = 3$ ($d = 2.6 \text{ нм}$) поведение ТМС изменяется на обычное,

которое было получено в планарных двухбарьерных МТК [9]. Например, изменение уровней в квантовой яме с $n = 1$ на $n = 2$ при $d = 1.25 \text{ нм}$ меняет поведение ТМС (см. кривые 1 и 2 на рис. 4). Аналогичное изменение поведения ТМС видно на рис. 5 (см. кривые 1 и 3) при изменении уровней с $n = 1$ на $n = 4$ при $d = 2.6 \text{ нм}$.

Также вполне вероятно, что обменное взаимодействие между магнитными ФМ-слоями может превратить немагнитную наночастицу в магнитную. Кривая 3 на рис. 4 получена при условии спинового расщепления волновых векторов $k_{n=2,\uparrow} = 0.5051 \text{ \AA}^{-1}$, $k_{n=2,\downarrow} = 0.5001 \text{ \AA}^{-1}$ в магнитных наночастицах.

Кривая 4 на рис. 4 соответствует однобарьерному контакту с толщиной барьера 1.0 нм , являясь предельным случаем при $d \rightarrow 0 \text{ нм}$, и приведена здесь для сравнения с другими зависимостями ТМС.

Следующее необычное поведение ТМС с пиком при нулевых напряжениях возникает, когда параметры ста наночастиц имеют значения $d = 2.6 \text{ нм}$ и $k_n = 0.4508 \text{ \AA}^{-1}$ (см. кривую 1 на рис. 3 и кривую 2 на рис. 5). Как видно на рис. 5, ширина пика ТМС лежит в пределах нескольких милливольт, что аналогично экспериментальной зависимости, полученной в работе [2]. Для удобства сравнения эта зависимость (см. кривую 6) также приведена на рис. 5.

Необычное поведение ТМС показывает и сплошная кривая 4 на рис. 5, которая была вычислена при распределении ста наночастиц по трем состояниям 1(80), 2(12), 3(4) с волновыми векторами соответственно $k_n = 0.121 \text{ \AA}^{-1}$, $k_n = 0.4508 \text{ \AA}^{-1}$, $k_n = 0.483 \text{ \AA}^{-1}$, где цифры в скобках обозначают число наночастиц с равными значениями волновых векторов, относящихся к данному состоянию. Как видно, кривая 4 на рис. 5 отражает все особенности кривых 1, 2, 3 при соответствующих напряжениях.

Происхождение особенностей (пиков и ступенек) на кривой ТМС связано с режимом квантования проводимости благодаря ограниченной геометрии наночастицы (см. верхние зависимости G^P и G^{AP} на рис. 3). Например, в нашем случае, изменяя значения k_n и находя пикообразные значения ТМС, мы обнаружили, что хорошо определенный пик возникает в очень узком интервале значений $0.4504 \text{ \AA}^{-1} < k_n < 0.4509 \text{ \AA}^{-1}$ (при $d = 2.6 \text{ нм}$), что говорит о резонансном характере ТМС. Небольшие резонансные «отрицательные» пики ТМС можно также наблюдать при других конечных напряжениях (см. кривые 2 и 3 на рис. 5, а также кривые на приведенном ниже рис. 7).

Резонансный пик ТМС наблюдается вследствие квантования спин-поляризованных каналов проводимости при параллельной и антипараллельной конфигурациях намагниченности ФМ-слоев и наночастицы. Некоторые из каналов проводимости остаются все еще закрытыми при антипараллельной конфигурации, в то время как они могут быть частично открыты при параллельной конфигурации. Часть каналов проводимости за счет открытых траекторий в разрешенных углах θ_s для антипараллельной конфигурации ограничены больше по сравнению с параллельной конфигурацией. Амплитуда вероятности переноса электронной волны подавляется при обеих конфигурациях намагниченностей из-за рассогласования электронных волновых функций на границе раздела сред ферромагнетик/изолятор/наночастица. Резонансное подавление ТМС₀ соответствует противоположной ситуации, т. е. при параллельной конфигурации проводимость МТК становится меньше по сравнению с проводимостью антипараллельной конфигурации. Положительные (отрицательные) значения ТМС получаются при $G^P > G^{AP}$ ($G^P < G^{AP}$). Более того, роль наночастиц для резонансного состояния является чрезвычайно важной, потому что они обеспечивают условия для больших значений ТМС.

Интересно отметить, что наблюдаемое квантование проводимостей G^P и G^{AP} и, соответственно, связанное с этим резонансное ТМС близки к баллистической проводимости [24] и гигантскому магниторезистивному эффекту, которые наблюдаются в металлических наноконтактах [13, 25]. С этой точки зрения, аномальное ТМС является эффектом гигантского магнитосопротивления.

Изменение зависимостей ТМС от приложенного напряжения при различных диаметрах наночастиц показано на рис. 6 и 7. Все кривые на рис. 6 соответствуют значению волнового вектора немагнитных наночастиц $k_n = 1.1 \text{ \AA}^{-1}$. Отметим, что здесь k_n совпадает со значением волнового вектора в объеме нормального металла. Такой набор параметров в МТК может объяснить гигантские величины ТМС (см. например, кривую для $d = 1.0 \text{ нм}$). Это соответствует нерезонансному случаю прохождения электронов МТК с наночастицами, т. е. туннелирование электронов связано с дифракцией волн де Бройля на границах раздела сред для каждого спинового канала проводимости. Одиночных состояний в глубине квантовой ямы нет, они размываются в полосы, и электрон проводимости проходит двухбарьерный МТК над энергетическими барьерами. Однако различие между спиновыми каналами проводи-

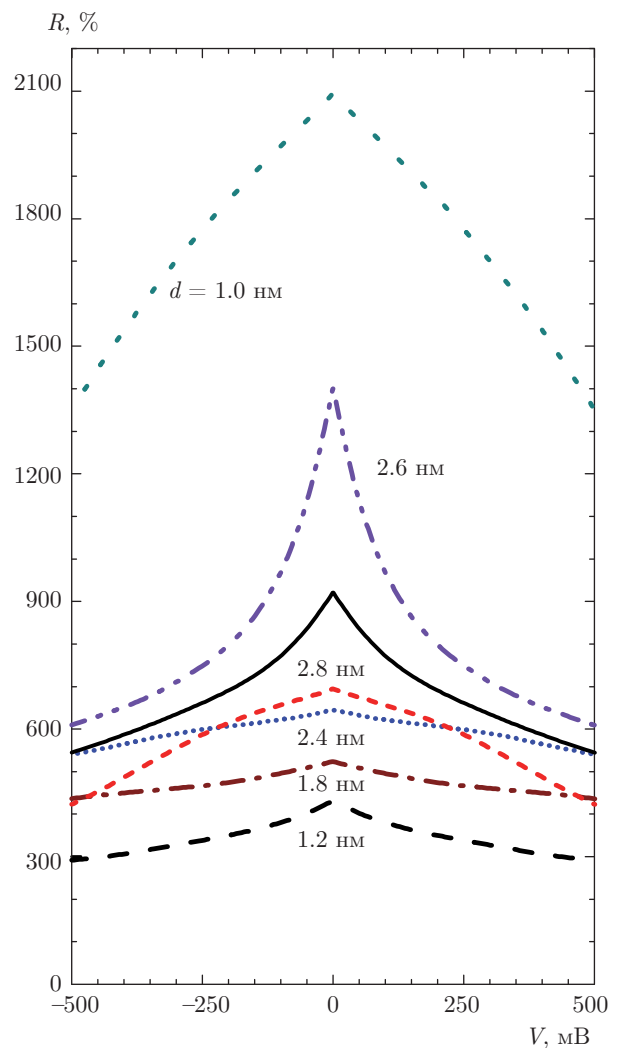


Рис. 6. (В цвете онлайн) Зависимости ТМС от приложенного напряжения при разных диаметрах немагнитных наночастиц. Все кривые были получены при фиксированном значении волнового вектора наночастиц: $k_n = 1.1 \text{ \AA}^{-1}$. Другие параметры МТК при расчете кривых имели те же самые значения, что и на предыдущих рисунках; сплошная линия — см. текст

мости при параллельной и антипараллельной конфигурациях ФМ-слоев и при малых напряжениях смещения остается большим. Это и приводит к гигантским значениям ТМС (см. рис. 6). Сплошная линия на рис. 6 вычислена при распределении ста наночастиц по шести фракциям с диаметрами, приведенными на рис. 6 (см. также квадраты на рис. 2). На рис. 6 также показано аномально большое значение ТМС₀, которое имеет выделенный максимум при диаметрах наночастиц $d = 2.6 \text{ нм}$. В других случаях этого не происходит, хотя значения ТМС остаются большими. Это обстоятельство качествен-

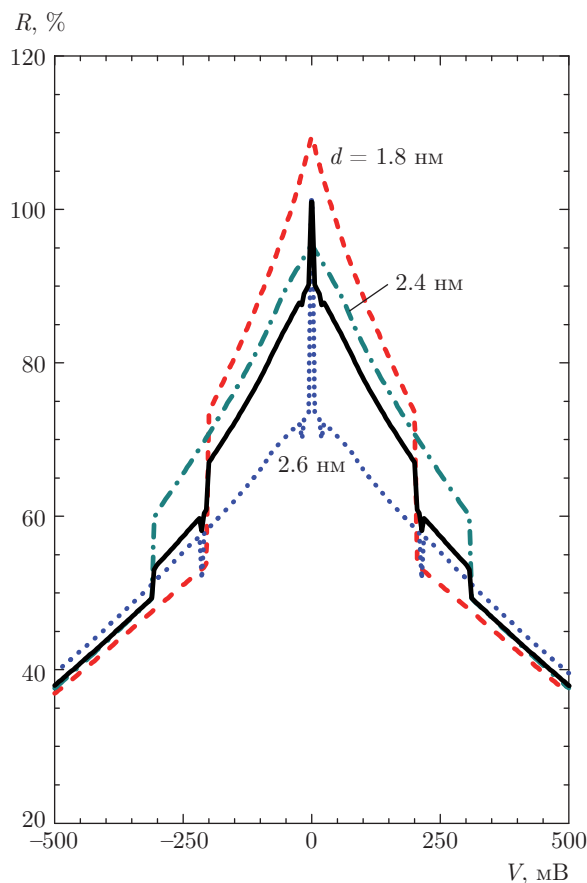


Рис. 7. (В цвете онлайн) Зависимости ТМС от приложенного напряжения при трех разных диаметрах наночастиц. Кривые получены при значении волнового вектора наночастиц $k_n = 0.4508 \text{ \AA}^{-1}$. Другие параметры МТК при расчете кривых имели те же самые значения, что и на предыдущем рисунке; сплошная линия — см. текст

но соответствует экспериментальной ситуации при наблюдении пика ТМС (см. рис. 4 в работе [2]).

На рис. 7 показаны зависимости ТМС от приложенного напряжения для некоторых диаметров d наночастиц, приведенных на рис. 6, но при другом волновом векторе $k_n = 0.4508 \text{ \AA}^{-1}$. Видно существенное отличие поведения графиков от плавных зависимостей ТМС, показанных на рис. 6. При общем понижении значений ТМС (максимальное значение 110%) на рис. 7 имеются скачки, которые, напомним, связаны с квантованием проводимости при определенных напряжениях. Пунктирная линия (при $d = 2.6 \text{ нм}$) на рис. 7 соответствует кривой 2 на рис.5 и качественно объясняет anomalous поведение TMR_0 , наблюдаемое в эксперименте [4]. Сплошная линия на рис. 7 имеет пик при нулевых напряжениях и два резких скачка. Эта кривая вычислена при распределении ста наночастиц по трем фрак-

циям (см. треугольники с линиями на рис. 2). При распределении ста наночастиц по большему числу фракций (наночастиц, имеющих разные диаметры) появляется большее число ступенек на кривой ТМС. В этом случае характер зависимостей $G^{P(AP)}$ от напряжения будет напоминать кулоновские ступеньки, наблюдаемые в вольт-амперных характеристиках одноэлектронных транзисторов с ферромагнитными электродами [26].

Однако, как видно из нашей модели, возникающие ступеньки на зависимостях ТМС связаны не с кулоновской блокадой, а с чисто квантовыми эффектами и с пространственными ограничениями размеров наночастиц. Таким образом, можно сделать вывод, что на характер аномальных особенностей ТМС сильное влияние оказывают состояния наночастиц, т. е. значения их волновых векторов и размеры (в частности, диаметры). Этим, кстати, объясняется огромное разнообразие зависимостей ТМС и их неповторяемость при создании идентичных МТК с наночастицами.

На рис. 8 показаны зависимости ТМС от приложенного напряжения при наличии в МТК магнитных наночастиц диаметром $d = 1.82 \text{ нм}$. Максимальные значения TMR_0 при нулевых напряжениях достигают 122% для кривой 1 и 92% для кривой 2 соответственно для наночастиц с различными магнитными свойствами. Вертикальная линия показывает значения ТМС при напряжении $V = 50 \text{ мВ}$, совпадающие с экспериментальными результатами работы [5]. Для получения этих зависимостей мы использовали следующие значения волновых векторов: $k_{F,\uparrow} = 1.01 \text{ \AA}^{-1}$, $k_{F,\downarrow} = 0.45 \text{ \AA}^{-1}$ в ФМ-слоях; $k_{n,\uparrow} = 0.542 \text{ \AA}^{-1}$, $k_{n,\downarrow} = 0.538 \text{ \AA}^{-1}$ для магнитных наночастиц, направления магнитных моментов которых совпадают с направлением намагниченности свободного ФМ-слоя (кривая 1). Для магнитных наночастиц с противоположной системой спиновых состояний и направлений магнитных моментов наночастиц относительно направления намагниченности ФМ-слоя (кривая 2) мы использовали векторы $k_{n,\uparrow} = 0.538 \text{ \AA}^{-1}$ и $k_{n,\downarrow} = 0.542 \text{ \AA}^{-1}$.

При $n \geq 3$ величины $k_{n,s}$ могут быть сопоставлены со значениями k_F . В этом случае выражение (3) упрощается:

$$k_n(V) = \sqrt{k_n^2 + cMV/2}.$$

Расчеты по этой формуле коэффициента прохождения, проводимости (4), а затем ТМС приводят к кривой 3 на рис. 8, что соответствует случаю МТК с немагнитными наночастицами, когда $k_n = 0.54 \text{ \AA}^{-1}$.

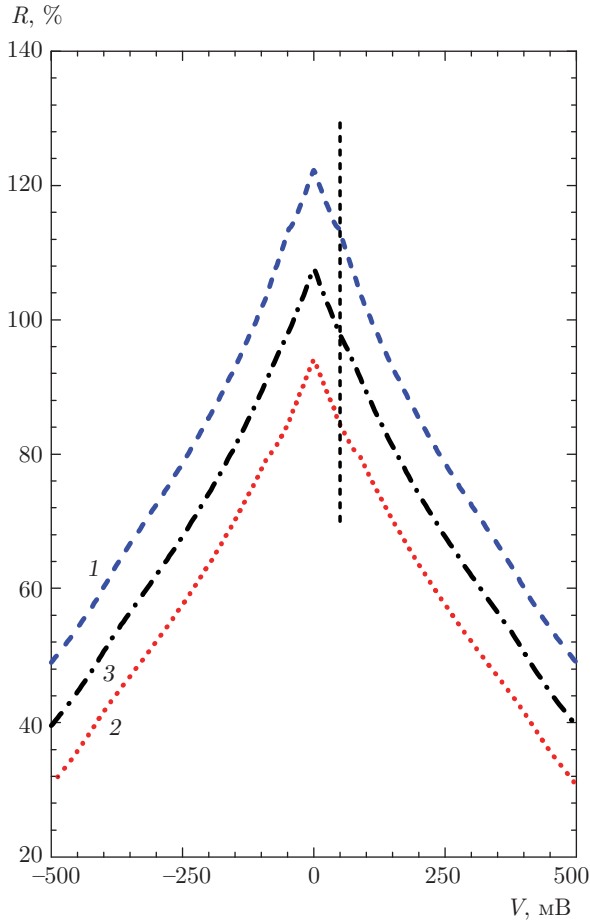


Рис. 8. (В цвете онлайн) Зависимости ТМС от приложенного напряжения и магнитных свойств наночастиц. Кривые 1 и 2 различаются на 23%. Параметры расчета следующие: $k_{F,\uparrow} = 1.01 \text{ \AA}^{-1}$, $k_{F,\downarrow} = 0.45 \text{ \AA}^{-1}$ — волновые векторы в ФМ-слоях, $k_{n,\uparrow(\downarrow)} = 0.54 \pm 0.002 \text{ \AA}^{-1}$ для кривой 1; $k_{n,\uparrow(\downarrow)} = 0.54 \mp 0.002 \text{ \AA}^{-1}$ для кривой 2, $d = 1.82 \text{ нм}$. Кривая 3 получена для случая немагнитной наночастицы при значении волнового вектора $k_n = 0.54 \text{ \AA}^{-1}$. Остальные параметры такие же, как и для предыдущих рисунков

При этом другие параметры, такие как эффективные массы и высоты барьеров, были взяты такими же, как и в предыдущих вычислениях. Таким образом, видно, что максимальное значение ТМС зависит от сонаправленной или антинаправленной взаимных конфигураций намагнитченностей магнитного момента наночастицы и намагнитченности ФМ-слоев.

Различие 0.004 \AA^{-1} между значениями $k_{n,\uparrow}$ и $k_{n,\downarrow}$ является некоторым приближением магнитного состояния наночастицы в присутствии магнитного поля (внешнего или внутреннего за счет ФМ-слоев), если предположить, что начальное состояние на-

ночастицы было парамагнитным. Спин-зависимые волновые векторы $k_{n,s}$ открывают дополнительные спин-зависимые каналы электронного рассеяния на наночастицах, возбуждая электроны со спином вверх и со спином вниз, что приводит к большому различию коэффициентов прохождения для каждого направления спина.

В реальных системах всегда существует несколько факторов, уменьшающих теоретически предполагаемые значения ТМС: сложная зонная структура закона дисперсии электронов в ограниченной геометрии, электрон-фононное взаимодействие, неоднородность интерфейса слоев и внутреннее разупорядочение, рассеивание электронов с переворотом спина и т. д.

3.2. Перенос спинового момента

Важнейшим свойством, которым можно охарактеризовать ТМК, является эффект переноса спинового момента (ПСПМ), см. работы [27–29]. Перенос спинового момента определяется вектором, который обычно представляется в виде двух компонент: T_{\parallel} — обычный вклад в ПСПМ, который называется параллельным вращательным моментом, и T_{\perp} — перпендикулярный вращательный момент, определяемый межслойным обменным взаимодействием. Параллельная компонента T_{\parallel} исчезает при нулевом приложенном напряжении и лежит в плоскости интерфейса барьеров и ФМ-слоев, тогда как компонента T_{\perp} существует даже без наличия тока и перпендикулярна к этим слоям. Далее мы рассмотрим только параллельную компоненту ПСПМ.

Теоретическое выражение, позволяющее вычислить параллельную компоненту ПСПМ в МТК, можно получить на основе формул для спин-поляризованной проводимости, которые мы неоднократно использовали в предыдущих вычислениях. Наиболее ясно выражение для T_{\parallel} представлено в работах [30, 31]:

$$T_{\parallel} = \frac{\sin \gamma}{2} \left(I_z^{(s),P} - I_z^{(s),AP} \right), \quad (7)$$

где

$$I_z^{(s),P(AP)} = \frac{\hbar}{2e} \left(J_{\uparrow}^{P(AP)} - J_{\downarrow}^{P(AP)} \right)$$

— спиновая плотность тока, γ — угол между направлениями намагнитченностей верхнего и нижнего ФМ-слоев, $J_{\uparrow\downarrow}^{P(AP)}$ — спин-поляризованные плотности тока электронов проводимости, которые определяются выражением

$$J_s^{P(AP)} = \left(G_s^{P(AP)} + g_s^{P(AP)} \right) V/\Omega,$$

где

$$\Omega = \frac{\pi}{4} \sum_i [d_i]^2$$

— площадь МТК с наночастицами.

Параллельная компонента T_{\parallel} была вычислена для случая, когда направления намагниченностей верхнего и нижнего ФМ-слоев перпендикулярны друг другу, т.е. $\gamma = \pi/2$. Отметим, что величина T_{\parallel} имеет максимальное значение, когда направление магнитного момента наночастицы следует за направлением (или совпадает с направлением) намагниченности нижнего ФМ-слоя. Благодаря одинаковому определению спин-поляризованной проводимости в однобарьерных МТК и в МТК с наночастицами при баллистическом туннелировании электронов, в обоих случаях параллельная компонента ПСМ была вычислена аналогичным способом при помощи уравнения (7).

На рис. 9 показаны зависимости T_{\parallel} от приложенного напряжения для МТК с наночастицами в разных состояниях (кривые 1–3) и для однобарьерного МТК (кривая 4). Значения параметров, при которых были получены зависимости, соответствуют рис. 4.

Видно быстрое и почти линейное увеличение T_{\parallel} для МТК с наночастицами, имеющими диаметр $d = 1.25$ нм (кривая 2). Здесь, аналогично случаю рис. 4, для магнитных наночастиц значения T_{\parallel} показывают наибольший рост с напряжением (кривая 3). Кроме того, расчеты показывают, что если толщина МТК с немагнитными наночастицами равна $t = 3.25$ нм, где $t = 2L + d$, то значение T_{\parallel} сопоставимо с ее значением в однобарьерном МТК с толщиной барьера 1.0 нм (кривая 4). Это значение T_{\parallel} может оказаться даже больше в случае магнитной наночастицы (кривая 3 на рис. 9). Значение T_{\parallel} , вычисленное для однобарьерного МТК с $t = 3.25$ нм и $d \simeq 0$ нм, оказывается пренебрежимо малым, т.е. $T_{\parallel} \simeq 10^{-6}$ эВ/мкм² при напряжении $V = 250$ мВ (на рис. 9 не показано).

Таким образом, мы приходим к выводу, что в случае МТК с магнитными наночастицами большое значение параллельной компоненты ПСМ может увеличить флуктуации двух величин: магнитного момента наночастицы и намагниченности магнитомягкого ФМ-слоя (без учета влияния температуры). В результате этот эффект может также уменьшить величину переключения критического тока в ячейке памяти (STT-MRAM), работающей на эффекте переноса спинового момента, что согласуется с экспериментальными данными (например, работа [32]).

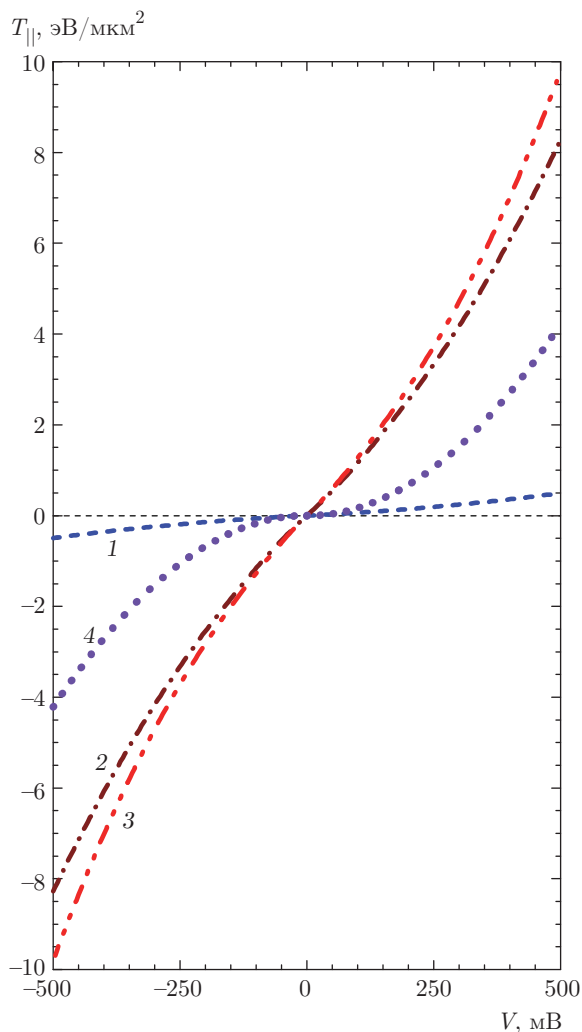


Рис. 9. (В цвете онлайн) Зависимости параллельной компоненты ПСМ от приложенного напряжения для МТК с наночастицами (кривые 1 и 2) и для однобарьерных МТК (кривая 4). Значения параметров, при которых были получены кривые, соответствуют рис. 4. Кривая 3 показывает зависимость ПСМ от V для магнитных наночастиц, когда $k_{n,\uparrow(\downarrow)} = 0.5026 \pm 0.0025 \text{ \AA}^{-1}$

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенное в работе развитие теории спин-поляризованного транспорта электронов при учете процессов квантования в магнитных наноструктурах основано на применении квантовомеханических и квазиклассических методов. Использование представления о двухбарьерных МТК (или переходах) с квантовыми ямами позволило вычислить проводимость и качественно воспроизвести аномалии ТМС, продемонстрированные в экспериментах [2–5]. Низкие электронные состояния в квантовых ямах и

небольшие значения волновых векторов наночастиц играют важную роль для наблюдения квантованного режима проводимости.

Аномалии ТМС, такие как гигантские величины ТМС (порядка $10^3\%$), пикообразное поведение или подавление их максимального значения (отрицательные значения ТМС) при низких напряжениях, получаются и объясняются в предположении когерентного режима туннелирования на основе фиксированных значений волнового вектора k_n с учетом различных значений диаметра наночастицы. Кроме того, изменение максимальной величины ТМС₀ было изучено в МТК с магнитными наночастицами для двух возможных случаев обменного взаимодействия — при сонаправленной и антинаправленной ориентациях магнитного момента наночастицы и намагнитченности магнитомягкого ФМ-слоя. Сонаправленная ориентация указанных выше намагнитченностей приводит к повышению значений ТМС как функции приложенного напряжения.

Изложенная выше теоретическая модель также предсказывает достаточно большой эффект переноса спинового момента в туннельных контактах со встроенными наночастицами. Это указывает на то, что в таких системах можно добиться уменьшения критической плотности тока для переключения намагнитченности ФМ-слоев. Проведенные расчеты показали, что изучаемые контакты являются сложными системами, в которых при определенных параметрах могут реализоваться различные зависимости (в частности, резонансные) ТМС от приложенного напряжения, а также энергетически эффективный ПСМ, приводящий к переключению намагнитченности ФМ-слоя.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности. Один из авторов (А. Н. У.) благодарит программу повышения конкурентоспособности Казанского федерального университета, финансируемую правительством РФ.

ЛИТЕРАТУРА

1. С. Н. Gao, Y. X. Yang, Y. Q. Xiong, and P. Chen, *J. Phys. D* **47**, 045003 (2014).
2. Н. Yang, S. H. Yang, and S. S. Parkin, *Nano Lett.* **8**, 340 (2008).
3. Н. Yang, S. H. Yang, G. Ilnicki et al., *Phys. Rev. B* **83**, 174437 (2011).
4. D. Ciudad, Z.-C. Wen, A. T. Hindmarch et al., *Phys. Rev. B* **85**, 214408 (2012).
5. L. Ye, C. Lee, C. Chiou et al., *IEEE Trans. Magn.* **50**, 4401203 (2014).
6. S. Takahashi and S. Maekawa, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1758 (1998).
7. A. García-García, A. Vovk, J. A. Pardo et al., *J. Appl. Phys.* **107**, 033704 (2010).
8. T. V. Pham, S. Miwa, D. Bang et al., *Sol. St. Comm.* **183**, 18 (2014).
9. A. N. Useinov, J. Kosel, N. K. Useinov, and L. R. Tagirov, *Phys. Rev. B* **84**, 085424 (2011).
10. Н. Х. Усеинов, *ФТТ* **55**, 602 (2013).
11. N. Kh. Useinov, D. A. Petukhov and L. R. Tagirov, *J. Magn. Magn. Mater.* **373**, 27 (2015).
12. L. R. Tagirov, B. P. Vodopyanov, and K. B. Efetov, *Phys. Rev. B* **63**, 104428 (2001).
13. A. N. Useinov, R. G. Deminov, L. R. Tagirov, and G. Pan, *J. Phys.: Cond. Mat.* **19**, 196215 (2007).
14. Н. Х. Усеинов, *ТМФ* **183**, 301 (2015).
15. A. N. Useinov, R. G. Deminov, N. Kh. Useinov, and L. R. Tagirov, *Phys. Stat. Sol. B* **247**, 1797 (2010).
16. В. П. Драгунов, И. Г. Неизвестный, В. А. Гридчин, *Основы наноэлектроники*, Учебное пособие, Унив. книга, Логос; Физматкнига, Москва (2006), с. 496.
17. R. Kubo, A. Kawabata, and S. Kobayashi, *Electronic Properties of Small Particles*, *Ann. Rev. Mater. Sci.* **14**, 49 (1984).
18. S. K. Ghosh, *Assam University Journal of Science and Technology: Physical Sciences and Technology* **7**, 114 (2011).
19. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика, нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1989).
20. N. Kh. Useinov and L. R. Tagirov, *Phys. Proc.* **75**, 995 (2015).
21. F. Himpsel, K. Altmann, G. Mankey et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **200**, 456 (1999).
22. J. Faure-Vincent, C. Tiusan, C. Bellouard et al., *Phys. Rev. Lett.* **89**, 107206 (2002).
23. L. Tagirov and N. Garcia, *Superlatt. and Microstruct.* **41**, 152 (2007).

24. G. Tatara, Y.-W. Zhao, M. Munoz, and N. Garcia, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2030 (1999).
25. L. R. Tagirov, B. P. Vodopyanov, and B. M. Garipov, *J. Magn. Magn. Mater.* **258**, 61 (2003).
26. J. Martinek, J. Barnaś, A. Fert et al., *J. Appl. Phys.* **93**, 8265 (2003).
27. A. Manchon, N. Ryzhanova, N. Strelkov et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 165212 (2007).
28. I. Theodonis, A. Kalitsov, and N. Kioussis, *Phys. Rev. B* **76**, 224406 (2007).
29. X. Chen, Q.-R. Zheng, and G. Su, *Phys. Rev. B* **78**, 104410 (2008).
30. I. Theodonis, N. Kioussis, A. Kalitsov et al., *Phys. Rev. Lett.* **97**, 237205 (2006).
31. A. Kalitsov, W. Silvestre, M. Chshiev, and J. P. Velev, *Phys. Rev. B* **88**, 104430 (2013).
32. Z. Diao, A. Panchula, Y. Ding et al., *Appl. Phys. Lett.* **90**, 132508 (2007).