

处理具有任意形状势垒的磁性隧道结中 电子运输的一个简单方法*

谢征微 李伯臧

(中国科学院物理研究所和凝聚态物理中心, 北京 100080)

(2001 年 3 月 13 日收到, 2001 年 4 月 16 日收到修改稿)

在 Slonczewski 自由电子模型的基础上, 提出了一个可用于处理具有任意形状势垒的磁性隧道结中磁电子运输的简单方法, 并以三种常见构形的势垒, 即梯形势垒, 计入了镜像势的梯形势垒和抛物线势垒为例, 讨论了势垒形状对隧穿磁电阻及其随偏压变化的影响.

关键词: 磁性隧道结, 隧穿磁电阻, 任意形状势垒, 非零偏压

PACC: 7340G, 7570

1 引 言

近年来对非磁层为绝缘体或半导体的磁性多层膜即磁性隧道结的研究, 引起了人们的极大关注^[1-4]. 这种磁性隧道结在横跨绝缘层的电压(以下称为偏压)作用下, 其隧道电流和隧道电阻依赖于两个铁磁层磁化强度的相对取向. 当此相对取向在外磁场的作用下发生改变时, 可观测到大的隧穿磁电阻(TMR). 与金属磁性多层膜相比, 磁性隧道结具有磁电阻大, 灵敏度高以及能耗小的特点, 同时由于高的隧道电阻也使其性能更加稳定. 因而 TMR 在传感器和磁记录读写器件等方面有重要的应用. TMR 来源于自旋极化电子的隧道效应, 故对 TMR 和磁性隧道结的其他运输特性的研究, 有助于了解自旋极化电子的隧穿机制及隧道效应本身.

目前, 在关于磁性隧道结中自旋极化电子隧穿运输的实验研究方面, 随着溅射和分子束外延等实验技术的发展, 人们已能制备出高质量的隧道结, 在偏压很小时其 TMR 可达到 40% 以上^[5], 并发现了许多和自旋极化电子隧穿有关的新的物理现象, 如对于三层结构的磁性隧道结, 普遍存在着 TMR 随着外加偏压的增加迅速减小的现象, 并且当偏压逐步增大时还可观察到负的 TMR^[6,7]. 对这些现象的研究

将进一步加深对自旋极化运输现象的了解和促进磁性隧道结的开发与应用.

在关于磁性隧道结中自旋极化电子隧穿运输的理论工作方面, 主要是零偏压下的 Julliere 的隧穿概率理论^[8]和 Slonczewski 的自由电子理论模型^[9]. Julliere 假设电子穿越绝缘体时能量和自旋方向保持不变, 但隧穿概率只与能量有关, 得出当偏压很小时 ($V \approx 0$), TMR 和两个铁磁电极中电子在费米面上的自旋极化率的乘积成正比, 因而两个铁磁电极的自旋极化率越大, TMR 也越大. 而 Slonczewski 的自由电子模型认为铁磁金属中自旋向上和自旋向下的电子具有不同的波矢, 而隧穿概率与自旋方向和波矢都有关, 其结果表明势垒高度对 TMR 也有重要影响. 对于磁性隧道结在非零偏压下的运输问题的研究工作则主要有 Zhang 等^[10]在 Slonczewski 的理论的基础上利用 Airy 函数的转移矩阵方法, Chuf^[11]的电子-电子关联理论, 和 Heide^[12]等的非平衡态 Green 函数理论. 上述模型虽然采用的理论方法各不相同, 但对势垒的处理都是以梯形(在零偏压下成为矩形)势垒来代替真实的势垒. 只有当各构成层厚而均匀, 层面界面清晰, 以及镜像势可忽略不计时, 这种代替才是有效的. 但是实际的磁性隧道结中, 绝缘(半导)层的厚度仅为纳米级, 而且不可能制造得均匀和以清晰界面与铁磁金属层分开. 因此实际的势垒不可能是梯形的. 即使在理想情况, 镜像势也会使梯形势

* 国家自然科学基金(批准号: 10074075)资助的课题.

垒发生变化.为此我们基于 Slonczewski 自由电子模型,提出一种简单方法,并将其用于非零偏压下磁性隧道结输运问题的研究.和上述方法不同的是,我们的方法不仅能适用于处理梯形势垒的情况,而且对非梯形势垒的情况也能进行处理. Slonczewski 的自由电子模型虽然简单,但基于此模型所得到的计算结果,在一定程度上仍有助于人们得到对自旋极化电子隧穿输运特性的了解^[10,13,14].因此,我们所提出的方法将是有一定的实际意义的.

本文给出针对任意形状的势垒的计算方法,并将此方法应用于梯形势垒、考虑了镜像势修正的梯形势垒和抛物线势垒等情形,以此研究势垒形状对零和非零偏压下 TMR 影响.

2 针对任意形状势垒的计算方法

在隧道效应问题的研究中,非梯形势垒往往会给计算带来困难.对于非磁性隧道结,克服上述困难的一个途径,是将其分割成许多相邻接的薄矩形势垒,通过不断增加分割数,以使这些薄矩形势垒高度的包络线与实际的势垒相符,从而得到收敛的计算结果^[15].下面我们将该方法进行改进,以便适用于对磁性隧道结的计算.

我们假设一由铁磁金属/非磁绝缘层(半导体)/铁磁金属(FM/(S)/FM)构成的磁性隧道结,其势垒形状(在外加偏压的作用下)的轮廓如图 1 所示.首先将其近似为小矩形势垒的并列,各矩形势垒区域分别用 1, 2, 3, ..., N 表示.图中 \mathbf{h}_L 和 \mathbf{h}_R 分别表示左、右 FM 中电极的分子(磁)场, θ 表示它们之间的夹角,设势垒宽度为 d ,并假定其势能仅随垂直于膜面方向的坐标 x 变化,以 $U(x)$ 记之.在与膜面平行的方向上,波矢 k_{\parallel} 在隧穿过程中保持不变,其贡献只在最后电流及电导的计算中计入^[9].计算中零点选为左边铁磁电极的能带底.

该系统在 x 方向的哈密顿量为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) - \mathbf{K}(x) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (1)$$

式中 $\boldsymbol{\sigma}$ 为 Pauli 矩阵.用并列的薄矩形势垒来近似势能 $U(x)$ 则有

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U(x_{j-1}), & x_{j-1} \leq x < x_j, \\ -eV, & x \geq d, \end{cases} \quad (2)$$

其中 $x_j = jd/N$, $j = 1, 2, \dots, N$, e 和 V 分别为电子电

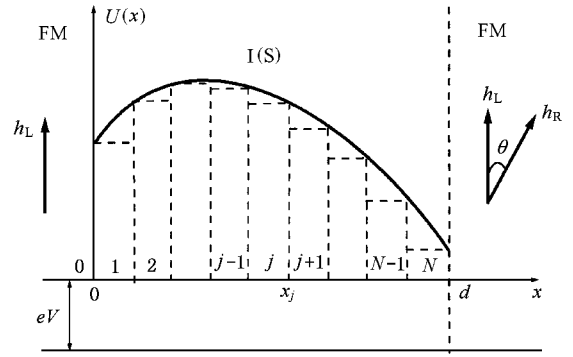


图 1 将任意形状的势垒(实线)分割成等宽度的 N 个薄矩形势垒(虚线)

荷和加于结上的偏压,

$$\mathbf{K}(x) = \begin{cases} \mathbf{h}_L, & x < 0, \\ 0, & 0 \leq x \leq d, \\ \mathbf{h}_R, & x > d. \end{cases} \quad (3)$$

为简单起见,我们以下取 $|\mathbf{h}_L| = |\mathbf{h}_R| = h_0$.于是沿 x 方向,每个区域内不同自旋方向的电子的能量为 E 的本征波函数为,

当 $x < 0$ 时,

$$\begin{aligned} \psi_{L\sigma}(x) &= A_{L\sigma} e^{ik_{L\sigma}x} + B_{L\sigma} e^{-ik_{L\sigma}x}, \\ k_{L\sigma} &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E + h_0\sigma)}. \end{aligned} \quad (4)$$

当 $x_{j-1} \leq x \leq x_j$ ($j = 1, 2, \dots, N$) 时,

$$\begin{aligned} \psi_{j\sigma}(x) &= A_{j\sigma} e^{ik_{j\sigma}x} + B_{j\sigma} e^{-ik_{j\sigma}x}, \\ k_{j\sigma} &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x_j))}. \end{aligned} \quad (5)$$

而当 $x > d$ 时,

$$\begin{aligned} \psi_{R\sigma}(x) &= A_{R\sigma} e^{ik_{R\sigma}x} + B_{R\sigma} e^{-ik_{R\sigma}x}, \\ k_{R\sigma} &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E + h_0\sigma + eV)}. \end{aligned} \quad (6)$$

其中 $A_{L\sigma}, A_{R\sigma}, B_{L\sigma}, B_{R\sigma}, A_{j\sigma}, B_{j\sigma}$ 为待求系数, $\sigma = \pm$ 分别对应于 $\sigma = \uparrow$ 和 \downarrow 自旋电子, m 和 \hbar 分别是电子质量和 Planck 常数.

不同自旋方向波函数在磁性金属与绝缘体界面处连续的条件为

$$\begin{aligned} \psi_{L\sigma}(x_0) &= \psi_{1\sigma}(x_0), \\ \dot{\psi}_{L\sigma}(x_0) &= \dot{\psi}_{1\sigma}(x_0); \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \psi_{j\sigma}(x_j) &= \psi_{j+1\sigma}(x_j), \\ \dot{\psi}_{j\sigma}(x_j) &= \dot{\psi}_{j+1\sigma}(x_j), \end{aligned} \quad (8)$$

这里 $\dot{\psi}_{j\sigma}(x) = \frac{d\psi_{j\sigma}}{dx}$, $j = 1, 2, \dots, N-1$;

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \psi_{N\uparrow}(x_N) \\ \psi_{N\downarrow}(x_N) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & \sin \frac{\theta}{2} \\ -\sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{R\uparrow}(x_N) \\ \psi_{R\downarrow}(x_N) \end{bmatrix}, \\ \begin{bmatrix} \dot{\psi}_{N\uparrow}(x_N) \\ \dot{\psi}_{N\downarrow}(x_N) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & \sin \frac{\theta}{2} \\ -\sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\psi}_{R\uparrow}(x_N) \\ \dot{\psi}_{R\downarrow}(x_N) \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (9)$$

由上述波函数的边界条件可得

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} A_{L\uparrow} \\ B_{L\uparrow} \\ A_{L\downarrow} \\ B_{L\downarrow} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} T_{0\uparrow} & 0 \\ 0 & T_{0\downarrow} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{1\uparrow} & 0 \\ 0 & T_{1\downarrow} \end{bmatrix} \\ \dots \begin{bmatrix} T_{N-1\uparrow} & 0 \\ 0 & T_{N-1\downarrow} \end{bmatrix} &\begin{bmatrix} T_{N\uparrow} & T'_{N\uparrow} \\ T'_{N\downarrow} & T_{N\downarrow} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{R\uparrow} \\ B_{R\uparrow} \\ A_{R\downarrow} \\ B_{R\downarrow} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (10)$$

其中

$$T_{0\sigma} = \frac{1}{2ik_{L\sigma}} \begin{bmatrix} ik_{L\sigma} + ik_{1\sigma} & ik_{L\sigma} - ik_{1\sigma} \\ ik_{L\sigma} - ik_{1\sigma} & ik_{L\sigma} + ik_{1\sigma} \end{bmatrix}, \quad (11)$$

$$T_{j\sigma} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} e^{(k_{j+1\sigma} - k_{j\sigma})x_j} \left(1 + \frac{k_{j+1\sigma}}{k_{j\sigma}}\right) & e^{-(k_{j+1\sigma} + k_{j\sigma})x_j} \left(1 - \frac{k_{j+1\sigma}}{k_{j\sigma}}\right) \\ e^{(k_{j+1\sigma} + k_{j\sigma})x_j} \left(1 - \frac{k_{j+1\sigma}}{k_{j\sigma}}\right) & e^{-(k_{j+1\sigma} - k_{j\sigma})x_j} \left(1 + \frac{k_{j+1\sigma}}{k_{j\sigma}}\right) \end{bmatrix}, \quad (12)$$

这里 $i = 1, 2, \dots, N-1$;

$$T_{N\sigma} = M_{N\sigma} Q_{\sigma}, \quad (13)$$

$$M_{N\sigma} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} e^{-ik_{N\sigma}x_N} & \frac{1}{ik_{N\sigma}} e^{-ik_{N\sigma}x_N} \\ e^{ik_{N\sigma}x_N} & \frac{-1}{ik_{N\sigma}} e^{ik_{N\sigma}x_N} \end{bmatrix}, \quad (14)$$

$$Q_{\sigma} = \begin{bmatrix} e^{ik_{R\sigma}x_N} \cos \frac{\theta}{2} & e^{-ik_{R\sigma}x_N} \cos \frac{\theta}{2} \\ ik_{N\sigma} e^{ik_{R\sigma}x_N} \cos \frac{\theta}{2} & -ik_{N\sigma} e^{-ik_{R\sigma}x_N} \cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix}, \quad (15)$$

$$T'_{N\sigma} = \sigma M_{N\sigma} Q'_{-\sigma}, \quad (16)$$

$$Q'_{\sigma} = \begin{bmatrix} e^{ik_{R\sigma}x_N} \sin \frac{\theta}{2} & e^{-ik_{R\sigma}x_N} \sin \frac{\theta}{2} \\ ik_{R\sigma} e^{ik_{R\sigma}x_N} \sin \frac{\theta}{2} & -ik_{R\sigma} e^{-ik_{R\sigma}x_N} \sin \frac{\theta}{2} \end{bmatrix}. \quad (17)$$

若设

$$S = \begin{bmatrix} T_{0\uparrow} & 0 \\ 0 & T_{0\downarrow} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{1\uparrow} & 0 \\ 0 & T_{1\downarrow} \end{bmatrix}$$

$$\dots \begin{bmatrix} T_{N-1\uparrow} & 0 \\ 0 & T_{N-1\downarrow} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{N\uparrow} & T'_{N\uparrow} \\ T'_{N\downarrow} & T_{N\downarrow} \end{bmatrix}, \quad (18)$$

则有

$$\begin{bmatrix} A_{L\uparrow} \\ B_{L\uparrow} \\ A_{L\downarrow} \\ B_{L\downarrow} \end{bmatrix} = S \begin{bmatrix} A_{R\uparrow} \\ B_{R\uparrow} \\ A_{R\downarrow} \\ B_{R\downarrow} \end{bmatrix}. \quad (19)$$

由上式可得 $A_{L\sigma}, A_{R\sigma}, B_{L\sigma}, B_{R\sigma}, A_{j\sigma}, B_{j\sigma}$ 等系数, 据此可得隧穿系数. 用 T_{σ} 表示 σ 自旋电子的隧穿系数, 它们依赖于势垒形状, 分子场以及波矢(从而能量). 则据(19)式, 对于入射电子自旋为 \uparrow 时的隧穿系数为

$$T_{\uparrow} = \frac{k_{R\uparrow}}{k_{L\uparrow}} |A_{\uparrow}|^2 + \frac{k_{R\downarrow}}{k_{L\downarrow}} |A_{\downarrow}|^2, \quad (20)$$

其中

$$A_{\uparrow} = -\frac{s_{33}}{s_{13}s_{31} - s_{11}s_{33}}, \quad (21)$$

$$A_{\downarrow} = \frac{s_{31}}{s_{13}s_{31} - s_{11}s_{33}}. \quad (22)$$

同理, 对于入射电子自旋为 \downarrow 时隧穿系数为

$$T_{\downarrow} = \frac{k_{R\uparrow}}{k_{L\downarrow}} |A'_{\uparrow}|^2 + \frac{k_{R\downarrow}}{k_{L\downarrow}} |A'_{\downarrow}|^2, \quad (23)$$

其中

$$A'_{\uparrow} = -\frac{s_{13}}{s_{11}s_{33} - s_{31}s_{13}}, \quad (24)$$

$$A'_{\downarrow} = \frac{s_{11}}{s_{11}s_{33} - s_{31}s_{13}}. \quad (25)$$

在得到隧穿系数的基础上, 便可计算隧穿电导和隧穿电流. 对于磁性隧道结, 单位面积的隧穿电流的计算公式为^[16]

$$J_{\sigma}(\theta) = \frac{em}{4\pi^2 \hbar^3} \int_{-h_0\sigma}^{E_F} (E_F - E) T_{\sigma}(\theta) dE, \quad eV > E_F, \quad (26)$$

$$\begin{aligned} J_{\sigma}(\theta) &= \frac{em}{4\pi^2 \hbar^3} \left[eV \int_{-h_0\sigma}^{E_F} T_{\sigma}(\theta) dE \right. \\ &\quad \left. + \int_{E_F - eV}^{E_F} (E_F - E) T_{\sigma}(\theta) dE \right], \quad eV < E_F, \end{aligned} \quad (27)$$

通过磁性隧道结单位面积的总电流为

$$J(\theta) = J_{\uparrow}(\theta) + J_{\downarrow}(\theta). \quad (28)$$

相应的平均电导为

$$\alpha(\theta) = \frac{K(\theta)}{V}, \quad (29)$$

隧穿磁电阻 $R_{\text{TM}}(\theta)$ (TMR) 为

$$R_{\text{TM}}(\theta) = \frac{\alpha(\theta = 0) - \alpha(\theta)}{\alpha(\theta = 0)}. \quad (30)$$

3 势垒形状对磁性隧道结中磁电子输运的影响

确定实际隧道结中势垒的形状是一件困难的工作,这有待于深入的研究.本文以 Fe/K(S)/Fe 为例,仅针对绝缘(半导)层形成梯形势垒,计入了镜像势修正后的梯形势垒和抛物线形势垒三种情况,分别来计算零和非零偏压下的磁电阻,示例性地看一看势垒形状对自旋极化电子隧道结输运性质的影响.计算中,电子的有效质量取为自由电子的质量,费米能 E_F 为 2.6eV,分子场 h_0 为 1.9eV,势垒宽度 d 取为 1.0nm,零偏压时势垒顶端的高度 U_0 为 4.7eV(从费米能处计算则为 2.1eV)^[13].为了简单,我们只计算了 $\theta = \pi$ 时的磁电阻,即(30)式中的 $R_{\text{TM}}(\pi)$,以下简记为 R_{TM} .

3.1 梯形势垒

梯形势垒是人们在计算磁性隧道结的输运特性时所常采用的,势能随 x 的变化为(当 $0 \leq x \leq d$ 时)

$$U(x) = U_0 - \frac{eVx}{d}, \quad (31)$$

见图 2.

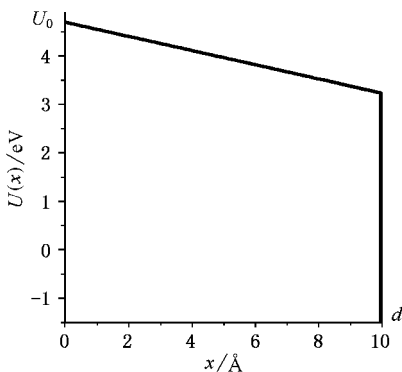


图 2 高度为 U_0 的矩形势垒加电压后变为梯形势垒

3.2 镜像势修正

在计入镜像势时,作为示例,略去自旋的影响,从而镜像势可表达为^[15]

$$-\frac{1.15\lambda d^2}{x(d-x)}, \quad (32)$$

其中

$$\lambda = \frac{e^2 \ln 2}{8\pi\epsilon_0\epsilon_r d}, \quad (33)$$

此处 ϵ_0 为真空介电常数, ϵ_r 为相对介电常数(计算中 ϵ_r 取为 4.0).

计入了镜像势的修正后,梯形势垒的形状变为

$$U(x) = U_0 - \frac{eVx}{d} - \frac{1.15\lambda d^2}{x(d-x)}, \quad (34)$$

如图 3 所示.由于镜像势的影响,梯形势垒的顶角变得“圆滑”了.

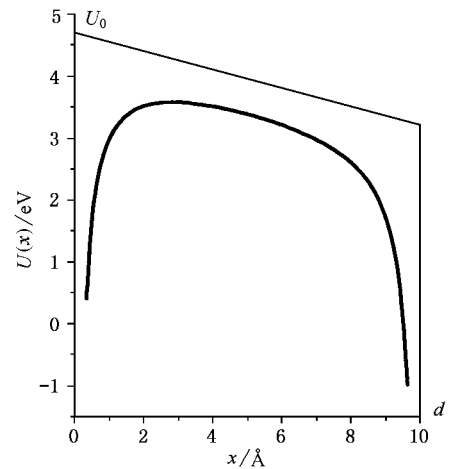


图 3 梯形势垒受到镜像势修正后势垒形状示意图

3.3 抛物线势垒

如规定在零偏压时,抛物线势在沿 x 方向 $x=0$ 和 $x=d$ 处的值为零,在 $x = \frac{d}{2}$ 处的值为 U_0 ,这样在加上偏压后,满足以上条件的抛物线势垒由下式表示:

$$U(x) = \frac{-4U_0}{d^2} \left(x - \frac{d}{2}\right)^2 + U_0 - \frac{eVx}{d}, \quad (35)$$

其形状如图 4 所示.

3.4 R_{TM} 计算结果

按照第 2 节中所提出的简单方法,对于以上三种势垒形状的 R_{TM} 的计算结果如图 5 所示,这里,三

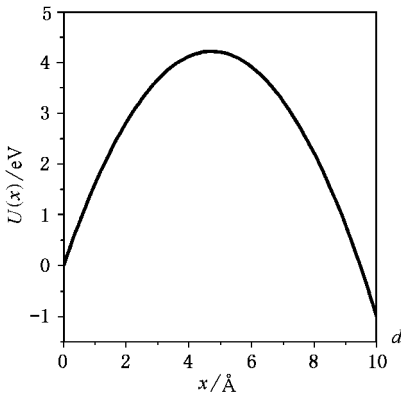


图4 抛物线势垒示意图

种势垒表达式中的 d ($d = 1.0\text{nm}$) 和 U_0 ($U_0 = 4.7\text{eV}$) 是相同的。

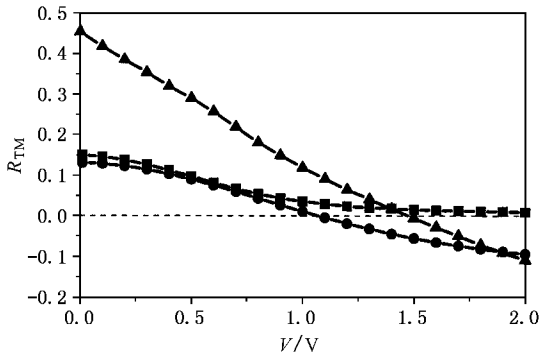


图5 三种势垒形状下磁电阻 R_{TM} 随偏压 V 的变化关系(其中 \blacktriangle 表示抛物线势垒, \blacksquare 表示计入了镜像势修正的梯形势垒, \bullet 表示梯形势垒)

从图5中可以看出,对于上述三种不同形状的势垒,随着偏压的增大, R_{TM} 值都随偏压增大而下降,并且随着偏压的增大, R_{TM} 可变为负值(对于计入了镜像势修正的梯形势垒,当偏压高于 $\sim 0.8\text{V}$ 后,其 R_{TM} 的变化甚平缓,在 $V \approx 2.4\text{V}$ 时由正变负,但此种变号未在图上画出)。 R_{TM} 随偏压的这种变化趋势,与迄今的实验观测结果是一致的。但三种不同的势垒形状下的 R_{TM} 值随偏压的变化明显不同。对于抛物线势垒,其 R_{TM} 值随偏压变化和梯形势垒及考虑了镜像势作用后的梯形势垒差别较大,而后两种情况的 R_{TM} 值在一定偏压范围内的变化则较为接近,但随着偏压的增加,其差别也逐渐显现出来。对上述结果简单理解可从图2.3.4得出。从图4中,可以看出,在零和非零偏压下,抛物线势垒的轮廓及有效宽度(势垒曲线下的面积)与梯形势垒相差均较

大,特别是前者的有效宽度显著小于后者,从而在一定的偏压范围内,前者的 R_{TM} 大于后者。而如图2.3所示,梯形势垒在计入镜像势后,在偏压较小时,变化不大,因而二者的 R_{TM} 值随偏压的变化关系及大小差别均较小,但随着偏压的进一步增大,镜像势对梯形势垒的修正也进一步加大,相应地二者的 R_{TM} 值随偏压的变化关系及大小差别也进一步加大。上述情况说明,在磁性隧道结运输问题的理论研究中,势垒形状的选择对 R_{TM} 的确有较大的影响。另外也可看出在研究磁性隧道结在高偏压下的运输问题时,镜像势会有较大的影响,此情况和非磁性隧道结中镜像势对运输问题的影响的结论是一致的^[15]。

在上面计算中对绝缘层所采用的抛物线势垒,其在零偏压下的宽度与顶点高度分别与梯形势垒(零偏压下为矩形势垒)的宽度和高度相等,从而前者势垒曲线下的面积比后者小。但是按对非磁性隧道结中的隧道效应研究中得到的经验,当势垒宽度较小(本文取为 $d = 1.0\text{nm}$,应被视为较小)时,隧穿系数主要是由势垒曲线下面积决定的。因此,为了进一步了解势垒形状对 R_{TM} 的影响,在零偏压下,我们令两者的宽度和势垒曲线下的面积均相等,这样确定的抛物线势垒的顶点高度就高于梯形势垒高度。对后一种抛物线势垒的 R_{TM} 值随偏压的变化关系的计算结果以及与梯形势垒的相应结果的比较如图6所示。

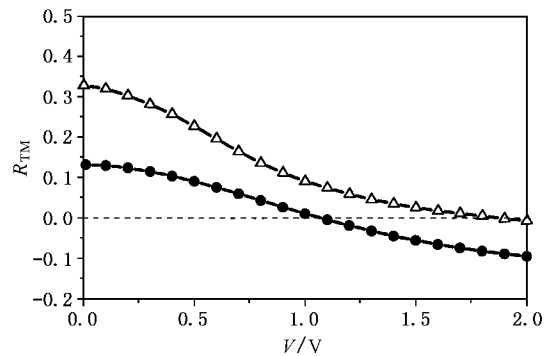


图6 零偏压下宽度和势垒曲线下面积均相等的抛物线势垒和梯形势垒的磁电阻 R_{TM} 值随偏压 V 的变化(其中 \triangle 表示抛物线势垒, \bullet 表示梯形势垒)

从图6中可以看到,后一种抛物线势垒的 R_{TM} 值随偏压的变化趋势和梯形势垒的情况类似,但二者的 R_{TM} 值差别较大,并且 R_{TM} 由正到负的所对应的偏压值也不同。这说明对于磁性隧道结中的自旋极化电子隧穿,即使 d 较小且势垒曲线下面积相

同,势垒形状的影响也是不可忽略的.

通过上面的分析,可看出 R_{TM} 及其对偏压的依赖特性,除了与势垒宽度,高度,以及势垒曲线下的面积等因素有关外,势垒的形状也有重要影响.

4 结论和讨论

在关于处理磁性隧道结在偏压下的输运问题,我们在 Slonczewski 自由电子模型的基础上提出了一个可应用于任意势垒形状的简单方法,并针对 Fe/I(S)Fe 铁磁隧道结,对三种不同形状的势垒在零和非零偏压下的 R_{TM} 进行了示例性的计算.从计算结果中可以看出,三种情况下的 R_{TM} 都随偏压的增加而减小,在大的偏压下, R_{TM} 会出现负值.但 R_{TM} 的大小以及与偏压的具体关系,是与势垒形状的选取有关的.由于真实的势垒不可能是简单的矩形或梯形

势垒,其形状应随研究对象的不同而不同,因而本方法对探讨真实势垒对 R_{TM} 偏压特性以及对磁性隧穿的其他输运特性的影响,应当是具有实际用途的.

以上结果表明,当我们去拟合 R_{TM} (尤其是它随偏压的变化)等自旋极化电子隧穿输运性质的实验结果时,应慎重选择势垒的形状与大小.当然,如何确定具体隧道结中的势垒,是一件困难的工作,尚待深入研究.

最后指出,对于矩形势垒(零偏压下),不必再划分成小矩形势垒的并合.事实上,划分成任意数目的小矩形势垒后(18)式亦自动简化为仅有一个矩形势垒的情况.对此我们做过数值检验,并用以证明本文方法的有效性.至于梯形势垒,前面已提及,可以用 Airy 函数来展开势垒的波函数,但对 R_{TM} 等性质,仍须做数值计算,而从数值计算的角度看,用本文的方法似乎更简单.

- [1] Li B Z 1999 *Several Thin Layered Materials of New Type* (eds Wu J L and Wu Q D [Beijing :Peking Univ. Press)51(in Chinese) 李伯臧 1999 几种新型薄膜材料(北京 北京大学出版社)
- [2] Moodera J S , Kinder L R , Wong T M and Meservey R 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 3273
- [3] Moodera J S , Kinder L R 1996 *J. Appl. Phys.* **79** 4724
- [4] Miyazaki T , Tezuka N 1995 *J. Magn. Magn.* **139** 1231
- [5] Sousa R C , Sun J J , Soares V *et al* 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 3288
- [6] Shama M , Wang S X , Nickel J H 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 616
- [7] Miyazaki T , Tezuka N , Kumagai S *et al* 1998 *J. Phys.* **D31** 630
- [8] Julliere M 1975 *Phys. Lett.* **54A** 225

- [9] Slonczewski J C 1989 *Phys. Rev.* **B39** 6995
- [10] Zhang X , Li B Z , Sun G , Pu F C 1997 *Phys. Rev.* **B56** 5484
- [11] Chui S T 1997 *Phys. Rev.* **B55** 5600
- [12] Heide C and Elliott R J 1999 *Phys. Rev.* **B59** 4287
- [13] Stearns M B 1977 *J. Magn. Magn. Matter.* **5** 167
- [14] Wang J Z , Li B Z and Gao J S 1999 *Acta Phys. Sin.* (Overseas Ed.) **8** 919
Wang J Z , Li B Z and Hu Z N 1999 *Phys. Lett.* **A261** 371
- [15] Wolf E L 1985 *Principles of Tunneling Spectroscopy* (New York :Oxford Univ. Press)
- [16] Tsu R and Esaki L 1973 *Appl. Phys. Lett.* **22** 562

A simple method for studying the electron transport properties in the magnetic tunnel junction with an arbitrary barrier shape^{*}

Xie Zheng-Wei Li Bo-Zang

(*Institute of Physics and Center for Condensed Matter Physics , Chinese Academy of Sciences , Beijing 100080 , China*)

(Received 13 March 2001 ; revised manuscript received 16 April 2001)

Abstract

Based on the Slonczewski 's free electron model ,we present a simple method that can be used to study the electron transport properties in a magnetic tunnel junction with an arbitrary barrier shape .As examples ,the TMR for three familiar barrier shapes , *i . e .* ,the trapezoidal barrier ,the barrier with mirror potential taken into account ,and the parabolic barrier ,has been calculated .

Keywords : magnetic tunnel junction , tunneling magnetic resistance , arbitrary barrier shape , none zero bias

PACC : 7340G , 7570

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No.10074075).