

隧道磁电阻效应中的两种不同的理论方法

高 鹏 郑之明 邢定钰

(南京大学物理系 ,南京 210093)

(2002 年 2 月 4 日收到 2002 年 5 月 21 日收到修改稿)

使用两种不同的理论方法来计算磁性隧道结中的隧道磁电阻.结果显示,Slonczewski 模型得出的隧道磁电阻比 Julliere 公式得到的要大得多.在 Slonczewski 模型中,当两边铁磁体的磁化方向相反时,为了确保平行于界面方向上的动量守恒,费米面上的电子只有一部分参与了隧穿过程,而在隧道哈密顿方法中,则假设费米面上所有的电子都参与了.还发现,在 Slonczewski 模型中,使用 δ 势垒与使用方势垒所求得的隧道磁电阻的差别是不大的.

关键词:隧道磁电阻, Slonczewski 模型, 隧道哈密顿方法, 势垒

PACC: 7210

1. 引 言

磁致电阻效应是指在材料中,电阻率随外加磁场的变化而变化的现象.由于磁致电阻效应能够把外磁场信号转化为电信号,所以它在磁读写、磁储存器件和磁性传感器等领域有广泛的应用.但在早期,材料的磁致电阻变化幅度过小,这给它的应用带来了困难.1988 年, Baibich 等人^[1]发现,在 4.2K, 2T 磁场下,在 Fe/Cr 多层膜结构中,电阻率可以下降到无外加磁场时的一半,被称为巨磁电阻效应(GMR).这引起了人们很大的兴趣.另外,除了在 Fe/Cr 多层膜结构这种由铁磁金属/非磁金属构成的异质结构中,在其他许多具有反铁磁耦合的磁性多层膜结构中和由散落在非磁金属基底(如 Cu, Ag 等)中的铁磁单畴颗粒(如 Fe, Co, Ni 等)组成的合金颗粒膜系统中,也同样观察到巨磁电阻效应^[2-4]. 1994 年,在类钙钛矿结构的 La-Ca-Mn-O 结构中发现了比 GMR 更大的磁致电阻材料^[5],被称为庞磁电阻效应(CMR).随后在许多其他具有钙钛矿结构的掺杂稀土锰氧化物中也发现了这一现象.同时,人们在由两层铁磁金属和中间绝缘层构成的磁性隧道结中也发现了磁致电阻效应,被称为隧道磁致电阻效应(Tunneling magnetoresistance, TMR).与 GMR 不同在于, GMR 效应来源于铁磁/非铁磁界面和铁磁体内部的自旋相关散射过程,而 TMR 来源于自旋相关的隧道过程.虽然隧道结的电阻比全金属多层结构的电阻大的多,但却可以得到与全金属多层结构相当的磁致电阻效应.

Miyazaki 和 Tezuka^[6]以及 Moodera 等人^[7]分别在 Fe/Al₂O₃/Fe 和 CoFe/Al₂O₃/Co 组成隧道结中获得了较高的 TMR.由于研究表明, TMR 与两边铁磁层的自旋极化率有关,于是两边的铁磁性金属被换成自旋极化率更高的钙钛矿结构的物质如 La_{0.67}Sr_{0.33}MnO₃, 因为锰氧化物具有几乎完全自旋极化的传导电子, TMR 大大增加. Lu 等人^[8]发现在由 La_{0.67}Sr_{0.33}MnO₃/SrTiO₃/La_{0.67}Sr_{0.33}MnO₃ 组成的隧道结中,在只有几十个高斯的饱和外磁场下,磁电阻率高达 83%. 同时对其颗粒膜也进行了研究^[9]. 另外,铁磁-超导隧道结中的 TMR 也是研究的一个热点^[10].

1975 年, Julliere^[11]首先报道在铁磁体/绝缘体/铁磁体结构的磁性隧道结 Fe/Ge/Co 中就发现了 TRM, 并给出了一个简单的计算 TMR 的公式

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{R_{AP} - R_P}{R_{AP}} = \frac{2PP'}{1 + PP'} \quad (1)$$

其中 R_P 和 R_{AP} 分别代表两铁磁层磁化方向平行和反平行时的电阻, P 和 P' 分别为两边铁磁层中传导电子的自旋极化率, $P = (N_{\uparrow}(E_F) - N_{\downarrow}(E_F)) / (N_{\uparrow}(E_F) + N_{\downarrow}(E_F))$, $N_{\uparrow}(E_F)$ 和 $N_{\downarrow}(E_F)$ 分别代表费米面附近自旋向上和向下的电子密度.使用隧道哈密顿方法可以得到 Julliere 的公式.(1)式与一些实验符合得很好,后来的很多研究也是从此公式出发或以此为基础发展出来的.之后, Gu 等人^[12]用隧道哈密顿方法考虑了自旋翻转效应之后,发现自旋翻转效应总是减小 TMR, 并给出了改进了的公式

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{2PP'}{1 + PP' + \alpha} \quad (2)$$

其中 $\alpha = 2\gamma/(1 - \gamma)$, γ 是自旋翻转隧穿矩阵元与自旋守恒隧穿矩阵元模平方之比. 显然, 当不考虑自旋翻转效应时, γ 等于 0, 此式约化为 Julliere 的公式. 另外有人分别考虑了磁性杂质、表面态、库仑阻塞效应等因素, 得到了与实验符合较好的结果^[13-16].

1989 年, Slonczewski^[17] 提出了另一种计算 TMR 的理论方法, 我们称之为量子力学的隧穿方法. 通过自旋极化的自由电子模型模拟两边的铁磁金属, 并用一方形势垒描述中间的绝缘层, 在给出入射波函数、反射波函数和透射波函数的形式后, 保持隧穿前后电子的能量和平行动量守恒, 使用隧穿方法计算出极化电流和 TMR. 这种方法被广泛的用于计算 TMR, 并取得了很大的成功^[18-21].

量子力学隧穿方法和隧道哈密顿方法都被广泛应用于隧道输运现象的研究中. 从实验上看, 它们都是和一部分实验符合得很好, 而与另一部分实验结果相差较大. 先后有人研究过这两种方法的关系. Maclaren, Zhang 与 Bulter^[22] 和 Qi 等人^[23] 都分别讨论了两方法的联系. 但他们的讨论大多着重于两种方法在数值上的差别, 而对于两种方法在物理机理上的讨论较少. 本文在对这两种方法之间进行比较时, 将重点讨论它们在物理上的差别和联系. 为了得到一个简洁的隧穿矩阵元的解析表达式, 便于两种方法之间的比较, 我们用 δ 型势垒代替方势垒来描述绝缘层. 为了说明这一近似的合理性, 还将比较这两种不同势垒之间的差别, 说明这两种不同的势垒在细节上的差别并不影响基本物理结果上的一致.

2. 计算与结果

首先, 我们用隧穿方法来计算隧穿矩阵元, 采用与 Slonczewski 相同的假设, 保持隧穿前后电子的能量和平行动向上的动量守恒, 中间的绝缘层平行于 x - y 平面, 在自旋极化的传导电子的自由电子近似下, 单电子的哈密顿可以写成

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \partial^2}{2m \partial r^2} + U(r) - \hbar \mathbf{k}(z) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (3)$$

这里用一个 δ 型势垒 $U(r) = U_0 \delta(z)$ 来处理中间的绝缘层, 为了明确起见, 仅考虑两边自旋平行和反平行时的情况, 势垒两边的波函数可以写成

$$\psi_L(z) = e^{+ik_{zs} \cdot z} + R \cdot e^{-ik_{zs} \cdot z},$$

$$\psi_R(z) = C \cdot e^{ik_{zs'} \cdot z}, \quad (4)$$

其中 $k_{z\uparrow} = \sqrt{2m(E/\hbar^2 - k_{\parallel}^2)}$, $k_{z\downarrow} = \sqrt{2m(E - \Delta)/\hbar^2 - k_{\parallel}^2}$ 分别代表入射电子在 z 方向上的动量, $\Delta = 2h_0$ 代表两边铁磁态中电子的自旋交换能. 在 $z = 0$ 处, 由边界条件 $\psi_L(0) = \psi_R(0)$ 和 $(\partial \psi_L(z)/\partial z)_{z=0} + \psi_L(0) \cdot 2mU_0/\hbar^2 = (\partial \psi_R(z)/\partial z)_{z=0}$ 可以很容易地得到

$$T_{ss'} = |C|^2 \cdot \frac{k_{zs'}}{k_{zs}} = \frac{4k_{zs}k_{zs'}}{(k_{zs} + k_{zs'})^2 + Q^2}, \quad (5)$$

其中 $Q = 2mU_0/\hbar^2$. 显然, 当自旋平行时 $T_{\uparrow\uparrow} = T_{\downarrow\downarrow} = 0$, 自旋反平行时 $T_{\uparrow\downarrow} = T_{\downarrow\uparrow} = 0$. 对于三维系统, 在无外加电压的情况下, 两边电子处于平衡态, 隧道结上净电流为 0, 当加上一很小的电压 V 时, 就会产生隧穿电流^[24]

$$J = -e^2 V \left[\int \frac{d^3 k_{\uparrow}}{(2\pi)^3} \frac{\partial f_0(E_{\uparrow})}{\partial E_{\uparrow}} (T_{\uparrow\uparrow} + T_{\uparrow\downarrow}) v_{z\uparrow} + \int \frac{d^3 k_{\downarrow}}{(2\pi)^3} \frac{\partial f_0(E_{\downarrow})}{\partial E_{\downarrow}} (T_{\downarrow\uparrow} + T_{\downarrow\downarrow}) v_{z\downarrow} \right]. \quad (6)$$

显然, 这时隧穿的电子主要集中在费米面附近, 因为自旋交换能 Δ 的存在, 当两边铁磁体磁化方向相反时, 对于入射方费米面附近自旋向上的电子, 当 $E_F - 2mk_{\parallel}/\hbar^2 < \Delta$ 时, 在隧穿过程中会发生全反射现象. 隧穿电导 $\sigma = j/V$, 所以有

$$\alpha(0) = \frac{e^2 k_F^2}{\pi^2 \hbar} \left[\int_0^1 \frac{u^3 du}{4u^2 + q^2} + \int_0^\eta \frac{u^3 du}{4u^2 + q^2} \right], \quad (7)$$

$$\alpha(\pi) = \frac{2e^2 k_F^2}{\pi^2 \hbar} \left[\int_0^\eta \frac{u^2 \sqrt{u^2 + \mu} du}{(u + \sqrt{u^2 + \mu})^2 + q^2} \right], \quad (8)$$

其中 $q = Q/k_F$, $k_F = \sqrt{2mE_F/\hbar^2}$, $\mu = \Delta/E_F$, $\eta = \sqrt{1 - \Delta/E_F}$.

若用方势垒来处理中间的绝缘层, 我们用 V 和 a 分别表示方势垒的高度和宽度, 则波函数可以表示成

$$\begin{aligned} \psi_L(z) &= e^{ik_{zs} \cdot z} + R \cdot e^{-ik_{zs} \cdot z}, \\ \psi_M(z) &= A \cdot e^{\kappa \cdot z} + B \cdot e^{-\kappa \cdot z}, \\ \psi_R(z) &= C \cdot e^{ik_{zs'} \cdot z}, \end{aligned} \quad (9)$$

其中 $\kappa = \sqrt{2m(V - E)/\hbar^2 + k_{\parallel}^2}$, 势垒中的电子处于衰减态. 由此可得

$$T_{ss'} = \frac{4k_{zs}^2 k_{zs'}}{(\kappa^2 + k_{zs}^2)(\kappa^2 + k_{zs'}^2) \sinh^2(\kappa a) + \kappa^2(k_{zs} + k_{zs'})^2}, \quad (10)$$

$$\alpha(0) = \frac{e^2 k_F^2}{\pi^2 \hbar} \left[\int_0^1 \frac{(v - u^2) u^3 du}{v^2 \sinh^2(\sqrt{v - u^2} \cdot d) + 4 \cdot (v - u^2) \cdot u^2} + \int_0^\eta \frac{(v - \mu - u^2) u^3 du}{(v - \mu)^2 \sinh^2(\sqrt{v - \mu - u^2} \cdot d) + 4 \cdot (v - \mu - u^2) \cdot u^2} \right], \quad (11)$$

$$\alpha(\pi) = \frac{2e^2 k_F^2}{\pi^2 \hbar} \int_0^\eta \frac{(v - \mu - u^2) \cdot u^2 \sqrt{u^2 + \mu} du}{u(v - \mu) \sinh^2(\sqrt{v - \mu - u^2} \cdot d) + (v - \mu - u^2) (u + \sqrt{u^2 + \mu})^2}, \quad (12)$$

其中 $v = V/E_F$, $d = a \cdot k_F$.

3. 讨 论

对比隧道哈密顿方法和量子力学的隧穿方法, 可以看出, 首先, 隧穿方法是一种微观方法, 在隧穿方法中, 隧道两边的量子态是严格的一一对应的, 电子在隧穿过程中保持了能量和平行方向上的动量守恒, 并且包含了折射、反射、全反射等丰富的物理现象, 所以它比较适合于处理相干的隧道过程. 而隧道哈密顿方法不涉及隧穿过程的具体细节问题, 只是要求隧穿前后电子能量守恒. 当绝缘层比较厚, 界面和材料纯度并不理想时, 电子在隧穿过程中经历了多次的散射, 穿透前和穿透后的状态基本没有什么联系, 这种非相干的隧道过程比较适合于用隧道哈密顿方法. 比较这两种方法发现, 在隧道哈密顿方法中, 所有处在费米面附近的电子都参与了隧穿过程. 而在量子力学的隧穿方法中, 不考虑隧穿过程中的自旋翻转效应, 当两边铁磁体的磁化方向相同时, 费米面附近的电子也都参加了隧穿过程, 而当两边铁磁体的磁化方向相反时, 对于自旋向上的电子, 因为确保电子自旋交换能 Δ 的存在, 当 $E_F - 2mk_{\parallel}/\hbar^2 < \Delta$ 时, 保持电子能量和平行方向上的动量守恒的前提假设下, 入射电子无法从一边自旋向上的态隧穿到另一边自旋向下的态, 于是这部分电子无法穿过隧道结, 于是产生了一种类似全反射的现象. 由于这种全反射现象的存在, 量子力学隧穿方法的隧穿电流取决于隧道结两边态密度较小的一边, 相对于隧道哈密顿方法, 当两边磁化方向相反时, 因为有一部分电子无法穿过隧道结, 导致量子力学隧穿方法的反平行隧穿电流减小, 使得它的 TMR 较隧道哈密顿方法的会大一些. 对照图 1, 可以看出, 在 P 相同的情况下, 隧穿方法的 TMR 的值确实明显高于隧道哈密顿方法所求得值. 由此, 可以得到结论, 在两边铁磁层极化率不变的情况下, 相干型的隧道结的 TMR 比非相干型隧道结的 TMR 要大一些, 也就是

说, 通过提高界面的平整度和材料的纯度, 减小中间绝缘层的厚度, 增加隧道过程的相干性, 可以进一步提高隧道结的 TMR.

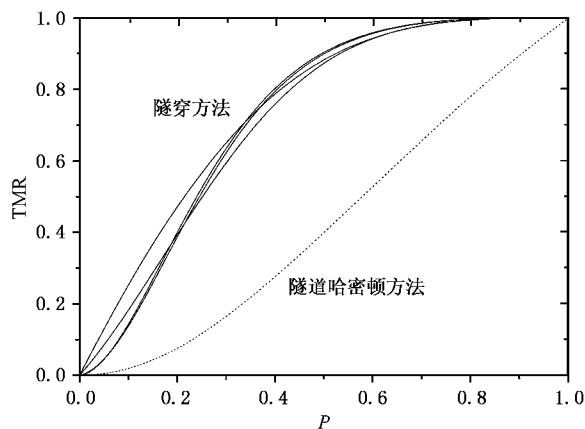


图 1 隧道哈密顿方法与隧穿方法的 TMR 随极化率 P 的变化 (虚线为隧道哈密顿方法的结果, 4 条实线代表隧穿方法中 δ 势垒的高度 $U_0 = 0, 0.5, 2.5$ 和 ∞ 时的结果)

其次, 隧道哈密顿方法的隧穿矩阵元是唯象的给出的, 它的 TMR 与中间势垒的形状及隧穿电子的自旋方向等参数无关, 而是完全取决于两边铁磁体的自旋极化率. 而量子力学隧穿方法的隧穿矩阵元与势垒高度等参数是相关的. 在 δ 势垒的近似下, 对于隧穿方法, 隧穿矩阵元随势垒高度的变化而变化. 但是, 从图上我们也可以看出, 总的来说, 隧穿方法中不同势垒高度导致的 TMR 的变化比采用两种不同方法而导致的 TMR 的差异要小的多, 而且当势垒高度增大到一定程度时, 势垒高度的变化对 TMR 的影响迅速减小, TMR 的值趋向一常量. 所以, 相对来说, 两种方法的差别主要在于隧道的相干性上, 而隧穿矩阵元上的差异对最后结果的影响相对较小.

图 2 比较了 δ 势垒和方势垒, 为了保证两种势垒之间的可比性, 我们规定 $U_0 = V \cdot a$. 图中我们可以清楚地看出, 当势垒比较低时, 两种方法基本一致. 随着势垒高度的增加, 两者之间出现一定差别, 但当势垒继续增加时, 两者的差别又会逐渐减小. 在

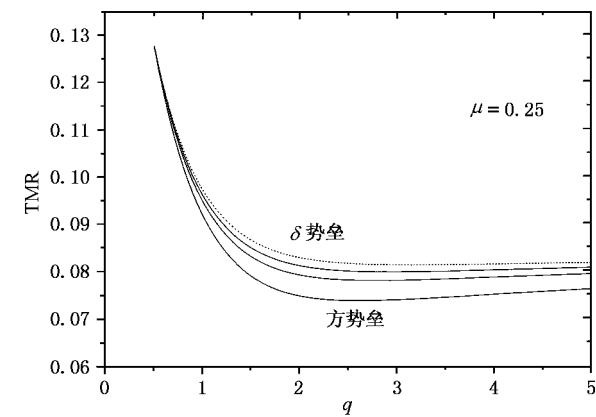


图 2 隧穿方法中使用 δ 势垒和使用方势垒的差别 ($U_0 = V \cdot a$, $\mu = 0.25$, 虚线为使用 δ 势垒的结果, 3 条实线自上而下分别代表使用方势垒时宽度 $d = 0.1, 0.2, 0.4$ 时的结果)

势垒较高的时候, 用两种不同势垒所求得的 TMR 都基本不受势垒宽度的影响而趋向一定值. 由图 3, 我们也可以看出, 只有当方势垒的宽度很大时, 两种势垒的差别才比较明显, 当方势垒的宽度减小时, 方

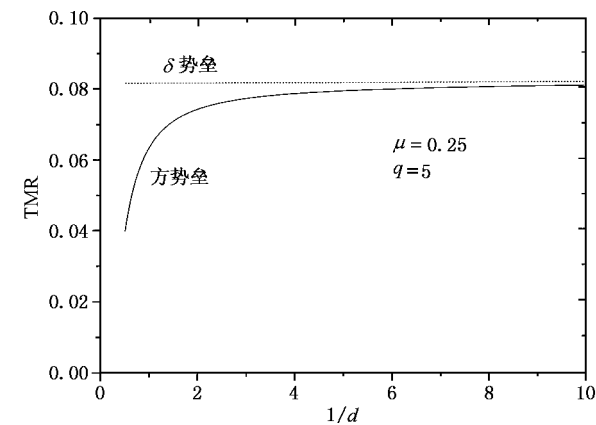


图 3 隧穿方法中使用 δ 势垒和使用方势垒的差别 ($U_0 = V \cdot a$, $\mu = 0.25$, $q = 5$, 虚线为使用 δ 势垒的结果, 实线代表使用方势垒时的结果)

势垒的 TMR 迅速趋向于 δ 势垒的 TMR. 所以可以说, 虽然 δ 势垒方法的 TMR 的值比方势垒方法的略大, 但较之隧道哈密顿方法与量子力学的隧穿方法之间的差异而导致 TMR 的变化要小得多, 并不会影响到“隧穿方法的 TMR 的值明显高于隧道哈密顿方法所求得值”这一结论. 在隧穿方法中, 用 δ 势垒代替方势垒是合理的.

4. 结 论

在用隧道哈密顿方法和量子力学的隧穿方法处理 TMR 问题时, 后者所求得的 TMR 总是比前者大得多, 这主要源于隧穿过程相干性上的差异. 隧道哈密顿方法假设所有费米面上的电子都参与了隧穿过程, 而在用量子力学的隧穿方法处理相干型的隧道结时, 隧道结两边的量子态是严格一一对应的, 为了确保隧穿过程中的能量和水平方向上的动量守恒, 于是在两边铁磁体磁化方向相反时, 一部分费米面附近自旋向上的电子无法隧穿到达另一边自旋向下的态, 隧穿电流取决于态密度较小的一边, 这导致反向电流减小, 进而使隧穿方法的 TMR 增大. 另外, 虽然势垒高度的变化会引起量子力学隧穿方法的 TMR 的变化, 但影响并不大. 在对两种方法比较时, 只是次要因素. 同时, 我们比较了在量子力学隧穿方法使用 δ 势垒与方势垒的差别, 发现只有在方势垒的宽度很大时, 两种势垒所求得的 TMR 才存在明显差别, 当方势垒宽度减小时, 两种势垒的差异迅速减小. 总的来说, 这两种势垒的差别是不大的, 不会影响到两种方法的比较.

[1] Baibich M N, Broto J M, Fert A, Nguyen Van Dau F, Petroff F, Eitenne P, Creuzet G, Friederich A and Chazelas J 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 2472

[2] Xiao G, Jiang J S and Chien C C 1992 *Phys. Rev. Lett.* **68** 3749

[3] Berkowitz A E, Mitchell J R, Carey M J, Young A P, Zhang S, Spada F E, Parkar F T, Hutten A and Thomas G 1992 *Phys. Rev. Lett.* **68** 3745

[4] Xu Q Y, Ni G, Gu K M, Sang H, Chen H, Lu J and Du Y W 2001 *Acta Phys. Sin.* **49** 128 (in Chinese) 徐庆宇、倪刚、谷坤明、桑海、陈浩、陆钧、都有为 2001 物理学报 **49** 128]

[5] Jin S, Tiefel T H, McCormack M, Fastnact R A, Ramesh R and Chen L H 1994 *Science* **264** 413
Jin S et al 1994 *J. Appl. Phys.* **76** 6929

[6] Miyazaki T, Tezuka N 1995 *J. Magn. Magn. Mater.* **139** L231

- [7] Moodera J S , Kinder L R , Wong T M and Meservey R 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 3273
Moodera J S and Kinder L R 1996 *J. Appl. Phys.* **79** 4724
- [8] Lu Y , Li X W , Gong G Q , Xiao G , Gupta A , Lecoer P , Sun J Z , Wang Y Y and Dravid V P 1996 *Phys. Rev. B* **54** 8357
- [9] Chen W , Zhong W , Pan C F , Chang H and Du Y W 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 319 (in Chinese) [陈 伟、钟 伟、潘成福、常虹、都有为 2001 物理学报 **50** 319]
- [10] Dong Z C , Xing D Y and Dong J M 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 556 (in Chinese) [董正超、邢定钰、董锦明 2001 物理学报 **50** 556]
- [11] Julliere M 1975 *Phys. Lett. A* **54** 225
- [12] Gu R Y , Xing D Y and Dong J 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 7163
- [13] Milner A , Gerber A , Groisman B , Karpovsky M and Gladkikh A 1996 *Phys. Lett.* **76** 475
- [14] Merservey R and Tedrow P M 1994 *Phys. Rep.* **238** 174
- [15] Zhang S , Levy P M , Marley A C and Parkin S S P 1997 *Phys. Lett.* **79** 3744
- [16] Zhang S F 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 640
- [17] Slonczewski J C 1989 *Phys. Rev. B* **39** 6995
- [18] Mathon J 1997 *Phys. Rev. B* **56** 11810
- [19] Barnas J and Fert A 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 1058
- [20] Zhang X D , Li B Z , Sun G and Pu F C 1997 *Phys. Rev. B* **56** 5484
- [21] Zhang X D , Li B Z , Zhang W S and Pu F C 1998 *Phys. Rev. B* **57** 1090
- [22] Maclaren J M , Zhang X G and Butler W H 1997 *Phys. Rev. B* **56** 11827
- [23] Qi Y N , Xing D Y and Dong J M 1998 *Phys. Rev. B* **58** 2783
- [24] Blonder G E , Tinkham M and Klapwijk T M 1982 *Phys. Rev. B* **25** 4515

Two different approaches in the magnetic tunneling junctions

Gao Peng Zheng Zhi-Ming Xing Ding-Yu

(Department of Physics , Nanjing University , Nanjing 210093 , China)

(Received 4 February 2002 ; revised manuscript received 21 May 2001)

Abstract

In this paper we use two different approaches to calculating the tunneling magnetoresistance (TMR) in magnetic tunnel junctions. It is found that the result for TMR calculated from the Slonczewski model is always greater than that of from the Julliere formula. In the Slonczewski model only a part of electrodes at the Fermi level participate in the tunneling process with the momentum parallel to the interface conserving if the magnetizations of two ferromagnetic electrodes are antiparallel to each other, while in the tunneling Hamiltonian approach all the electrodes at the Fermi level are assumed to participate in the tunneling process. Beside, there is only small difference between the magnitude of TMR calculated by using the δ -type barrier and the rectangular one in the Slonczewski model.

Keywords : tunneling magnetoresistance , the Slonczewski model , the tunneling Hamiltonian approach , barrier

PACC : 7210