自旋极化电子从铁磁金属注入 半导体时自旋极化的计算

李统藏¹^{*} 刘之景¹^{*} 王克逸²

¹(中国科学技术大学近代物理系,合肥 230026)
 ²(中国科学技术大学精密机械与精密仪器系,合肥 230027)
 (2003 年 1 月 17 日收到 2003 年 3 月 10 日收到修改稿)

对自旋极化电子从铁磁金属通过绝缘层薄膜注入半导体时的自旋极化率与绝缘层厚度以及所加偏压的关系 等作了计算.所得结果与最新实验结果相符,并发现偏压适中、绝缘层较厚时有较大的电流自旋极化率,偏压很小 时电流自旋极化率几乎为零.

关键词:自旋极化电子注入 *Slonczewski* 模型 隧道磁电阻 非零偏压 **PACC**: 7570, 7210, 7340Q

1.引 言

最近几年,自旋电子学(spintronics)得到了迅猛 发展.巨磁电阻效应(GMR)在信息存储上的应用,已 经形成了数十亿美元的工业^[12].其后发现的室温隧 道巨磁电阻(TMR)效应已用于制造新的随机存储器 (MRAM),它正在形成另一个数十亿美元的工业.但 这些还仅是自旋电子学的初步应用.目前,自旋极化 (SP)电子在半导体中的有效传输^[3]和操纵^[4]已基本 实现.文献 5 服道了利用电子自旋特性制作亚微米 尺寸磁性"非门"和寄存器.利用电子自旋还可以制 作自旋电子器件,来实现量子计算、量子通讯.

实现这些设想的前提之一是能把自旋电子高效 注入半导体.在室温下实现自旋电子的高效注入已 成为自旋电子学发展的瓶颈,一旦自旋极化电子能 高效注入半导体,自旋电子学必将引发微电子革命, 并使得量子计算机的实现更加可能.用铁磁半导体 产生的自旋极化电子注入普通半导体的效率较 高^[6],但是由于目前铁磁半导体的居里点太低(一般 小于 20K),无法实用化.而铁磁金属的居里点一般 在室温以上,成为产生自旋极化电子的最佳候选者 之一,但目前的注入效率仍较低,自旋极化电子从铁 磁金属通过欧姆接触注入半导体后其自旋极化率一

为此 本文对自旋极化电子从铁磁金属通过绝 缘层薄膜 10]注入半导体时的自旋极化率作了计算, 得到了较满意的结果,本文在金属内部和半导体内 部用经典的欧姆定律和扩散公式来描述各不同自旋 方向的电子流¹¹,而在绝缘层附近则基于 Slonczewski近自由电子量子隧穿模型^[12,13],用梯形势垒模 拟有偏压时金属和半导体之间的绝缘层.Slonczewski 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.该模型自 1989 年提出以来已广泛用于铁磁隧道 结巨磁电阻的计算[14-17],并取得很大成功.基于我 们的模型 利用可处理任意形状势垒的磁性隧道结 中电子输运的方法^{18]}计算了电流通过铁磁金属/绝 缘层/半导体隧道结注入半导体时的自旋极化率和 绝缘层厚度及所加偏压的依赖关系,所得结果与最 新实验结果相符 并发现偏压很小时 半导体内电流

般只有 0.1% —1%^[7],因而从理论上研究如何提高 其注入效率,为实验提供指导作用就显得尤为重要. 最近,Rashba^[8]和 Ferf^{9]}等人各自提出在铁磁金属和 半导体之间加一势垒,利用自旋相关隧穿电阻克服 这一缺陷,可大大提高自旋电子的注入效率.但他们 着重于讨论这种方法的可行性,而对电流自旋极化 率与势垒宽度以及所加偏压的关系等在实际应用时 非常重要的问题未作讨论.

^{*}中国科学技术大学物理系在读学生.

^{*} 通讯联系人. E-mail zjliu@ustc.edu.cn

自旋极化率几乎为零;当偏压适中、绝缘层较厚时, 有较大的电流自旋极化率,极值达到了20%.这些 结果将有助于人们选择恰当的绝缘层厚度以及偏 压,以获得更高的注入效率.

2. 电流经过铁磁金属/绝缘层/半导体 异质结注入半导体时自旋极化的计 算公式

由于自旋-轨道耦合,电子的实际布洛赫态不是 自旋本征态,而是它们的叠加.这导致当电子波函数 的空间部分由于散射而发生改变时,即使该过程中 的相互作用与自旋无关,电子的自旋状态也有一定 的翻转概率,这就是自旋翻转的 Yafe^[19]机理.在金 属中,电子自旋状态的改变主要由于这种机理.由电 子自旋共振实验测得在 Cu 中 τ_{st}/τ_{p} 为 100— 1000^[20],其中 τ_{st} 表示自旋弛豫时间, τ_{p} 表示动量弛 豫时间.在半导体中,导致自旋翻转的机理更为复 杂,由实验测得在 GaAs 中电子的自旋弛豫时间约为 100ns^[21],远大于动量弛豫时间.由此,可以用经典欧 姆定律和扩散公式来描述铁磁金属和半导体内不同 自旋方向的电子流.设各自旋方向电子的化学势分 别为 u_{+} 和 u_{-} (下角标'+'和'-"分别表示自旋向 上和向下),电子流为 z 方向,则有^[11]

$$\frac{\partial u_{+(-)}}{\partial z} = -\frac{ej_{+(-)}}{\sigma_{+(-)}}, \qquad (1)$$

$$j = j_{+} + j_{-};$$
 (2)

$$\frac{u_{+} - u_{-}}{\tau_{\rm sf}} = \frac{D\partial^{2}(u_{+} - u_{-})}{\partial z^{2}}, \qquad (3)$$

其中 $j_{+(-)}$ 为各自旋方向的电子流密度 $\sigma_{+(-)}$ 为各 自旋方向电子的电导率 j 为总电子流密度 D 为各 自旋方向电子扩射系数的加权平均值 τ_{s} 为自旋弛 豫时间.定义 $l_{s} = \sqrt{D\tau_{s}}$ 为电子自旋自由程 表征自 旋状态不发生改变时电子扩散的距离.

假设金属在左半空间,半导体在右半空间,交界 面处有一绝缘层薄膜,由于绝缘层厚度仅约为1nm, 远小于电子的自旋自由程,故可不考虑在绝缘层内 的自旋翻转,而仅把它作为边界条件处理.这里先不 考虑绝缘层厚度 *L*(即 *L*→0),且设绝缘层坐标 *z* = 0,再详细讨论绝缘层.假设绝缘层薄膜引起的对各 自旋方向电子的隧穿电阻为

$$R_{+(-)} = 2R_{\rm b}^{*} [1 - (+)\gamma], \qquad (4)$$

其中 $R_{b}^{*} = \frac{1}{Q(1-\gamma)}$, *C* 为电导, γ 的大小和势垒性 质以及偏压有关. 在铁磁金属内, 各自旋方向电子的 电阻率可写为

$$\rho_{+(-)} = 2 \left[1 - (+) \beta \right] \times \rho_{\rm F}^{*}$$
, (5)

β 为铁磁金属内电子的自旋极化率,铁磁金属的实际电阻率为(1 – $β^2$) $ρ_F^*$.半导体内各自旋方向电子的电阻率可写为 $ρ_{+(-)}=2 \times ρ_N^*$.定义铁磁金属和半导体的自旋特征电阻分别为

$$r_{\rm F} = \rho_{\rm F}^* \times l_{\rm sf}^{\rm F} , \qquad (6)$$

$$r_{\rm N} = \rho_{\rm N}^* \times l_{\rm sf}^{\rm N} , \qquad (7)$$

*l*_s^r和 *l*_s^N分别为铁磁金属和半导体内的电子自旋自 由程.

方程(1)--(3)的边界条件为

$$j_{+(-)}(z = 0^{+}) = j_{+(-)}(z = 0^{-}); \quad (8)$$

$$u_{+(-)}(z = 0^{+}) - u_{+(-)}(z = 0^{-})$$

$$= R_{+(-)}ej_{+(-)}(z = 0). \quad (9)$$

由以上公式和边界条件,可以解得电流注入半导体 时的自旋极化率为^[9]

$$(SP)_{I} = \frac{j_{+} - j_{-}}{j} = \frac{\beta r_{F} + \gamma R_{b}^{*}}{r_{F} + r_{N} + R_{b}^{*}}.$$
 (10)

在半导体内自旋极化率会逐渐变小,最后趋于零,衰减的特征长度为 l_{st}^{N} .若没有绝缘层薄膜 $R_{b}^{*} = 0$ 则

$$(SP)_I = \frac{\beta r_F}{r_F + r_N}.$$
 (11)

一般的铁磁金属 ,如 Co 的 $l_{sf}^{F} = 59$ nm ,自旋特征 电阻 $r_{co} = 4.5 \times 10^{-15} \Omega m^2$,而半导体的自旋特征电 阻较大 ,一般的 n 型 GaAs , $l_{sf}^{N} \approx 1.83 \mu m$, $r_{N} \approx 4.4 \times 10^{-9} \Omega m^{2[9]}$.因此从铁磁金属通过欧姆接触注入半导体的电流自旋极化率很小.而绝缘层薄膜的 R_{b}^{*} 可以很大 ,故在铁磁金属和半导体之间加一绝缘层薄 膜可大大提高电流的自旋极化率.略去 r_{F} ,则注入 半导体时的电流自旋极化率可写为

$$(SP)_{I} = \frac{\gamma}{r_{N}/R_{b}^{*} + 1}$$
 (12)

3. 绝缘层薄膜等效隧穿电阻的计算 方法

铁磁金属/绝缘层/半导体的势垒模型如图 1 所示.

该系统在 z 方向的哈密顿量为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + U(z) - \boldsymbol{h}_{(z)} \cdot \boldsymbol{\sigma} , \quad (13)$$



图 1 铁磁金属/绝缘层/半导体的势垒模型示意图 E_F 为铁磁 金属的费米能级 , h_0 为分子场大小 , V_0 为所加偏压 , U_0 为无偏 压时的势垒高度 ,半导体的导带底离半导体的准费米能级为 ΔE .无偏压时半导体的准费米能级和铁磁金属的费米能级相 等 ,势垒宽度为 L

$$U(z) = \begin{cases} 0 & z < 0, \\ U_0 - eV_0 z/L & 0 \le z \le L, (14) \\ - eV_0 + \Delta E + E_0, & z > L, \end{cases}$$

其中 σ 为 Pauli 矩阵 $h_{(z)}$ 为分子场 ,在 z < 0 处满足 $|h_{(z)}| = h_0 = \text{const}$,在 $z \ge 0$ 处 , $|h_{(z)}| = 0$, E_F 为铁 磁金属的费米能级 , V_0 为所加偏压 , U_0 为无偏压时 的势垒高度 ,半导体的导带底离准费米能级为 ΔE , 无偏压时半导体准费米能级和铁磁金属的费米能级 相等 ,L 为势垒宽度 ,e 和 m 分别为电子的电荷和有 效质量 .应当指出 (13)式中哈密顿量仅是其 z 分 量 ,加上 x 和 y 分量后才是总哈密顿量.

按照可处理任意形状势垒的磁性隧道结中电子 输运的方法^[18],首先将绝缘层势垒区域分割为许多 相邻的薄矩形势垒区域,然后利用不同自旋方向波 函数及其对z的一阶微商在不同区域交界处的连续 性条件,建立起入射系数和透射系数的矩阵关系式, 从而得到隧穿系数.在得到隧穿系数的基础上,便可 计算隧穿电流,从而计算隧穿电阻.对于由铁磁金 属、绝缘层和等能面为球面的半导体(如广泛应用的 半导体材料 GaAs)构成的磁性隧道结,各自旋方向 电子流密度的计算公式为^[2]

$$j_{+(-)} = \frac{mkT}{4\pi^2 \hbar^3} \int_{E_{+(-)}}^{\infty} T_{+(-)} \times \ln\left(\frac{1 + \exp[(E_{\rm F} - E_{\tau})/kT]}{1 + \exp[(E_{\rm F} - E_{\tau} - eV_0)/kT]}\right) dE_{\tau} ,$$
(15)

$$E_{+(-)} = \max(-(+)h_0 - eV_0 + \Delta E + E_F) (16)$$

 $i - i$

$$\gamma = \frac{j_{+} - j_{-}}{j_{+} + j_{-}}, \qquad (17)$$

$$R_{\rm b}^{*} = V_0 \left[e_0 \left(1 - \gamma^2 \right) \right], \qquad (18)$$

其中 $T_{+(-)}$ 为各自旋方向电子的隧穿系数 ,k 为玻 尔兹曼常数 ,T 为温度 ,m 为铁磁金属内的有效电 子质量.



图 2 简化等效电路示意图

由(10)和(17)式可以看到(SP), 与 γ 的表达式 相同,但我们把由(17)和(18)式求得的 γ 和 B_b^* 代 入(12)式来计算(SP),。实际上,当 $R_b^* \gg r_N$ 时,由 (12)式有(SP), = γ,这时不存在差别.但当 $R_b^* = r_N$ 大小接近时,由于 r_N 的分压作用,不同自旋方向电 子在绝缘层处的电压降有微小差别(如图 2),而由 (17)式算得的 γ 表示各自旋方向电子在绝缘层处 的电压降都为 V_0 时的电流自旋极化率,因此(SP), $\neq \gamma$.此时由(17)和(18)式求得的 γ 和 R_b^* 代入(4) 式计算得到的 $R_{+(-)}$ 与真实值也有微小差别.考虑 一级修正:

 $R_{+(-)} = 2R_{b}^{*}[1 - (+)\gamma] \times [1 + (-)c], (19)$ $(SP)_{i} = \frac{\gamma - c}{r_{N}/R_{b}^{*} + 1 - c\gamma}, (20)$

c 为修正因子,满足 $0 < c/\gamma < 1$,其大小与不同自旋 方向电子在绝缘层处的电压降比值有关.若 c/γ 很 小(20)式即(12)式.因此,我们把由(17)和(18)式 求得的 γ 和 R_b^* 代入(12)式来计算(SP),相当于考 虑了不同自旋方向电子在绝缘层处的电压降有微小 差别.这样算得的(SP),在 R_b^* 很小时会比实际值略 大.若 $R_b^* \ll r_N$ (实际应用时不会碰到)(SP),的相 对误差将较大,但此时(SP),已经很小,绝对误差很 小,因此不影响分析.

由计算结果可知,当绝缘层厚度和偏压满足 L

= 1.4nm, $V_0 < 2.25V$; L = 1.2nm, $V_0 < 1.5V$; L = 1.0nm, $V_0 < 0.7V$; L = 0.8nm, $V_0 < 0.4V$ 时, 有 $R_b^* > 100r_N$ 此时算得的(SP), 是准确的. 当 V_0 很大、 R_b^* 很小时, 算得的(SP), 会比实际值略大. 对以上分析 我们已根据隧道结的伏安曲线(如图 3)和 $2r_N e_{j+(-)} = U - V_0(U$ 为总压降, 见图 2)用图解法计算(SP), 作了验证.

综上所述 ,图 4 中曲线 SP), 随偏压增大上升部 分是准确的 ,随偏压继续增大而下降的部分其下降 速度比实际略小.但这并不影响我们由图 4 得出偏 压很小时 ,半导体内电流自旋极化率几乎为零 ;当偏 压适中、绝缘层较厚时有较大的电流自旋极化率的 结论.

4.(SP) 的计算结果与讨论

根据以上方法,我们对注入半导体时的电流自 旋极化率与绝缘层势垒宽度以及所加偏压的关系作 了计算.计算时取铁磁金属内 $E_{\rm F} = 2.5 {\rm eV}$, $h_0 =$ $1.7 {\rm eV}^{123}$ (波矢分别为 $k_+ = 1.05 \times 10^8 {\rm cm}^{-1}$ 和 $k_- =$ $0.44 \times 10^8 {\rm cm}^{-1}$).对于中等浓度掺杂的 n 型 GaAs,可 取导带底距半导体的准费米能级为 $\Delta E = 0.32 {\rm eV}$. 取铁磁金属和绝缘层内有效电子质量 $m = m_e$,半导 体取 GaAs,其内 $m = 0.072 m_e$ (m_e 为自由电子质 量), $r_{\rm N} = 4.4 \times 10^{-9} \Omega {\rm m}^{2[9]}$, $U_0 = 4.7 {\rm eV}^{[18,24]}$, T =80K.



图 3 隧穿电流与偏压的关系(L=1.0nm)

由图 3 可以看出,随偏压增加,隧穿电流迅速增 大,电阻将很快下降,因此为了保证 R_b* 值不会太 小,偏压不能过大.

图 4 显示了当绝缘层厚度分别为 0.8,1.0,1.2

和 1.4nm 时(SP), 和偏压的关系.由图 4 可以看出, 绝缘层较厚时可以得到较大的(SP), ,且对应的偏压 范围也较大. L = 1.2nm, $V_0 = 1.5$ V 时(SP), 达到 20%. L = 1.4nm 时(SP), 的峰值虽然稍有下降, (但 随偏压的变化更平稳,更有利于实际应用(实际应用 时可用偏压来控制电路的其他参数^{[251}).



图 4 注入半导体时的电流自旋极化率(SP), 与绝缘层势垒宽度 以及所加偏压的关系

在偏压很小时 (SP), 几乎为零, 自旋极化电子 无法注入半导体;随偏压增大(SP)迅速增大.这 与普通的铁磁金属/绝缘层/铁磁金属隧道结巨磁电 阻随偏压增大而下降明显不同.这是由于铁磁金属 和半导体导带底能级的差别引起的(如图1所示)。 虽然铁磁金属中自旋向上的电子数比自旋向下的电 子数多 但是自旋向上的电子平均能量比自旋向下 的电子小,由于半导体的导带底能级比铁磁金属高, 大部分自旋向上的电子由于能量太小而无法注入半 导体 因此注入的电流自旋极化率几乎为零.随偏压 增大,铁磁金属和半导体之间导带底能级的差别逐 渐变小 (SP) 逐渐增大.这和最近发现的在 GaAs/ ZnSe 异质结 该实验中自旋极化电流由圆偏振激光 照射 GaAs 产生,异质结上也存在类似的势垒,因而 有可比性)上施加偏置电压后使得自旋极化电流产 出率提高几十倍的实验结果^[26]相符,与 n 型铁磁半 导体和 p 型普通半导体构成的异质结在偏压小于 0.8V 时自旋极化电流无法从铁磁半导体注入普通 半导体的情况相似^[27].当偏压继续增加时, γ 会变 小,同时 R_b^{*} 值迅速下降 (12)式中分母变大,导致 (SP) 反而减小.

文献 28 报道了利用 1.4nm 厚的 AlO_x 薄膜作 为绝缘层,以 CoFe 为铁磁金属,在 80K 温度和 3V 电 压下在半导体中得到了自旋极化率为 9.2% 的电

流,如图 3 所示 L = 1.4 m、偏压为 3V 时我们的计 算结果为 10.7% 和实验结果非常接近,计算结果 比实验结果略大主要是由于我们的理想势垒模型毕 竟和该实验实际所用多层膜结构有些差别,同时在 该电压下,已不满足 $R_{h}^{*} \gg r_{N}$,我们的计算结果偏大 也在预料之中. Motsnvi 等人还指出可以通过适当降 低他们所用的偏压以提高自旋极化,这也与我们的 计算结果相符.另外,Hanbicki 等人^[29]利用 Fe 和半 导体之间形成的 Schottky 势垒,在 1.8V 反向偏压下 在半导体中也得到了自旋极化率达 13% 的电流 (Schottky 势垒形状和本文所用的梯形势垒不同,因 此实验数据不能与计算结果逐一直接比较)这些实 验结果说明利用自旋相关隧穿电阻确实可以大大提 高注入半导体的电流自旋极化率 从实验所用较高 的偏压也可以看出自旋极化随偏压的变化与普通的 铁磁金属/绝缘层/铁磁金属隧道结巨磁电阻随偏压

增大而迅速下降不同,这些都与本文的计算结果符 合.

5.结 论

本文就自旋极化电流从铁磁金属通过绝缘层势 垒注入半导体时的自旋极化率与绝缘层厚度以及所 加偏压的关系等作了计算,所得结果与最新实验相 符,并发现偏压很小时,自旋极化电流无法从铁磁金 属通过绝缘层势垒注入半导体,而偏压适中、绝缘层 较厚时注入半导体的电流自旋极化率较高,极值达 到 20%,且随偏压变化较平稳.这些结果将有助于 人们选择更加恰当的绝缘层厚度以及偏压,以获得 更高的注入效率,为自旋电子器件的研制打下更加 坚实的基础.

- [1] Wolf S A et al 2001 Science 294 1488
- [2] Lai W Y 2002 Wuli(Physics) 31 437(in Chinese] 赖武彦 2002 物理 31 437]
- [3] Sanada H et al 2002 Appl. Phys. Lett. 81 2788
- [4] Grundler D 2000 Phys. Rev. Lett. 84 6074
- [5] Allwood D A et al 2002 Science 296 2003
- [6] Filip A T et al 2002 Appl. Phys. Lett. 81 1815
- [7] Hammer P R et al 1999 Phys. Rev. Lett. 83 203
- [8] Rashba E I 2000 Phys. Rev. B 62 R16267
- [9] Fert A and Jaffres H 2001 Phys. Rev. B 64 184420
- [10] Liu C Y et al 2002 Chin. Phys. 11 66
- [11] Schmidt G et al 2000 Phys. Rev. B 62 R4790
- [12] Slonczewski J C 1989 Phys. Rev. B 39 6995
- [13] Gao P, Zheng Z M and Xing D Y 2002 Acta. Phys. Sin. 51 2128
 (in Chinese] 高 鹏、郑之明、邢定钰 2002 物理学报 51 2128]
- [14] Mathon J 1997 Phys. Rev. B 56 11810

- [15] Barnas J and Fert A 1998 Phys. Rev. Lett. 80 1058
- [16] Zhang X D et al 1998 Phys. Rev. B 57 1090
- [17] Xie Z W , Li B Z and Li Y X 2002 Chin . Phys. 11 1060
- [18] Xie Z W and Li B Z 2002 Acta. Phys. Sin. 51 399(in Chinese) [谢征微、李伯臧 2002 物理学报 51 399]
- [19] Yafet Y 1968 J. Appl. Phys. 39 853
- [20] Beuneu F and Monod P 1978 Phys. Rev. B 18 2422
- [21] Kikkawa J and Awschalom D 1999 Nature 397 139
- [22] Tsu R and Esaki L 1973 Appl. Phys. Lett. 22 562
- [23] Grundler D 2001 Phys. Rev. B 63 161307
- [24] Stearns M B 1977 J. Magn. Magn. Mater. 5 167
- [25] Smet J H , Deutschmann R A and Ertl F 2002 Nature 415 281
- [26] Malajovich I et al 2001 Nature 411 770
- [27] Žutic I , Fabian J and Sarma S D 2002 Phys. Rev. Lett. 88 66603
- [28] Motsnyi V F et al 2002 Appl. Phys. Lett. 81 265
- [29] Hanbicki A T et al 2002 Appl. Phys. Lett. 80 1240

Calculations of the spin-polarization of the electronic current injected from a ferromagnetic metal into a semiconductor

Li Tong-Cang¹) Liu Zhi-Jing¹) Wang Ke-Yi²)

¹) (Department of Modern Physics , University of Science and Technology of China , Hefei 230026 , China)

² (Department for Precise Mechanic and Precise Instrument , University of Science and Technology of China , Hefei 230027 , China)

(Received 17 January 2003; revised manuscript received 10 March 2003)

Abstract

In this paper, we calculate the relationships both between the width of the tunnel barrier and the spin-polarization (SP) of the electronic current when it is injected from a ferromagnetic metal into a semiconductor through a tunnel barrier and between the bias and SP. The results agree with the latest experimental results. We found that a moderate bias and tunnel barrier width allow a giant SP and there is little spin injection at very low bias.

Keywords : electronic spin injection , Slonczewski model , tunneling magnetresistence , none zero bias PACC : 7570 , 7210 , 7340Q