

IrMn 基反铁磁自旋阀的巨磁电阻效应*

贾兴涛 夏 钊†

(北京师范大学物理学系, 北京 100875)

(2011年2月12日收到; 2011年5月26日收到修改稿)

用第一性原理方法研究了在微观尺度具有三重对称磁结构的 IrMn 合金的反铁磁自旋阀(AFSV)的电子输运. 研究表明:基于有序 $L1_2$ 相 IrMn 合金的 Co/Cu/IrMn 自旋阀的巨磁电阻(GMR)效应具有三重对称性,可以利用这一特性区分反铁磁材料的 GMR 与传统铁磁材料的 GMR. 基于无序 γ 相 IrMn 合金的 IrMn(0.84 nm)/Cu(0.42 nm)/IrMn(0.42 nm)/Cu(0.42 nm) (111) AFSV 的电流平行平面构型的 GMR 约为 7.7%, 大约是电流垂直平面构型的 GMR(3.4%)的两倍, 明显大于实验中观测到的基于共线磁结构的 FeMn 基 AFSV 的 GMR.

关键词: 反铁磁自旋阀, 巨磁电阻效应, 非共线磁结构, 电流平行平面结构

PACS: 72.25. Ba, 75.50. Ee, 75.47. De

1. 引言

铁磁(FM)异质结构的巨磁电阻(GMR)效应^[1]和自旋转矩(STT)效应^[2,3]都源于传导电子和磁矩的相互作用. GMR效应在实验上可以用来探测 FM 异质结构的磁构型, 而 STT 效应可以用电学的方法来控制 FM 异质结构的磁构型. 当温度处于 Néel 温度以下, 反铁磁(AFM)材料也是磁有序的, 但 AFM 材料往往具有多个不同指向的磁矩, 且这些磁矩的总体效应为零磁矩. 与电流通过传统的 FM 材料类似, 电流通过 AFM 材料时也会在原子尺度产生自旋极化. 电流流过 AFM 异质结构时也会产生类似于流过 FM 异质结构的 GMR 效应和 STT 效应.

相对于传统 FM 材料, AFM 材料的漏磁场很小, 这是由于这种材料具有零净磁矩. AFM 材料已经被用做自旋极化扫描隧道显微镜的探头, 用于探测纳米尺度的磁畴^[4]. 采用 AFM 材料制备的探头极大地减小了外磁场的扰动对探测软磁材料或者超顺磁材料的影响. 此外, AFM 材料广泛应用于铁磁自旋阀(FMSV)的钉扎层^[5]. AFM 材料在微观尺度具有和 FM 材料相同的自旋相关散射效应, 因此可以采用 AFM 材料制做反铁磁自旋阀

(AFSV).

研究表明, 反铁磁/非磁/反铁磁(AFM/NM/AFM)三明治结构的平行结构(PC)与反平行结构(APC)的 AFM 自旋密度波会产生一个周期的相位差并产生电阻的改变^[6]. 基于第一性原理的计算也证实了 AFM/NM 界面具有强烈的 STT 效应^[7]. 但理论预期 AFSV 中的磁电阻效应比 FMSV 要小. 实验和理论上广泛研究的 AFM 材料是 γ 相 FeMn. 这种 AFM 材料的原胞中两个相邻磁矩的相位差为 π , PC 与 APC 都具有较普通 FM 异质结构材料更大的电阻且两种磁结构的电阻差异较小. 最近, Wei 等^[8]研究了电流垂直平面(CPP)构型的 FeMn 的 AFSV 的磁电阻效应, 他们观察到从 PC 到 APC 的磁电阻变化只有 0.04%, 而没有观察到理论预言的 GMR 效应. 实验上基于 FeMn 的 AFSV 难以观察到理论上预期的 GMR 效应, 其主要原因是 AFM 材料的电阻率比传统 FM 材料高 3 个数量级, 导致界面散射的效应很难被观测到. 另一方面, 共线的 AFM 材料的磁矩指向是两重对称的, 其 PC 和 APC 两种磁构型的信号难以分辨. 因此, 如果一种 AFM 材料在原子尺度具有非共线的磁结构, 其对称性将有别于 0° — 180° 的二重对称, 在这种情况下 GMR 的信号将会较易分辨.

在对 CPP 构型的电流测量中, 由于器件的电

* 中央高等学校基本科研基金(批准号:101-105115)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: kexia@bnu.edu.cn

阻主要由 AFM 材料决定,故难以观察到 PC 和 APC 两种构型的不同界面散射带来的少量电阻差异.相对于 CPP 构型,电流平行平面(CIP)构型电学测量中,电流将主要通过电阻较小的区域,这时 AFSV 的电阻率主要由 AFM/NM 界面散射决定.如果 NM 层较薄,NM 层两边的 AFM 材料之间的耦合对电导的影响可以达到能观察的程度.

本文采用无自由可调参数的第一性原理方法,研究了在微观尺度具有三重对称磁结构的 IrMn 合金的 AFSV 的输运.研究表明:基于有序 $L1_2$ 相 IrMn 合金的 Co/Cu/IrMn 自旋阀的 GMR 具有三重对称性.基于无序 γ 相 IrMn 合金的 IrMn(0.84 nm)/Cu(0.42 nm)/IrMn(0.42 nm)/Cu(0.42 nm) (111) 的 CIP 构型的 GMR 约为 7.7%,约为 CPP 构型的 GMR (3.4%) 的两倍.

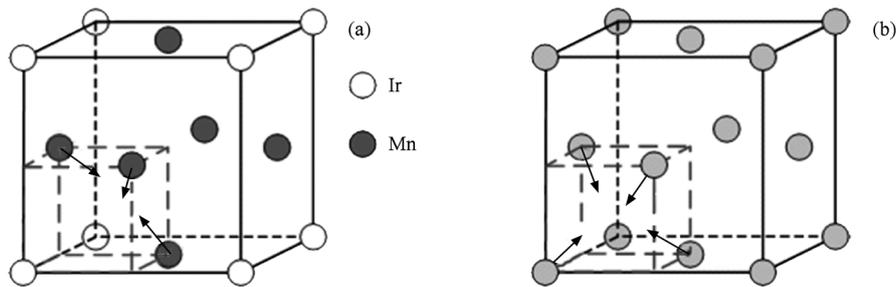


图1 IrMn 合金的晶胞结构 (a) $L1_2$ 相有序结构,(b) γ 相无序结构

与传统的自旋阀材料只有两种磁构型不同,IrMn 基 AFSV 具有多种相对的磁结构.本文定义固定层和自由层等价位置上的原子具有相同的磁矩指向的磁结构为 PC,在此基础上翻转 180° 的构型定义为 APC.图 2 给出了本文研究的 AFSV 结构.图 2 (a)左侧为基于 $L1_2$ 相有序结构 Co/Cu/IrMn (111) 的 AFSV,其中 IrMn 为钉扎层,Co 为自由层;图 2 (a)右侧为 $L1_2$ 相有序结构 IrMn 的磁结构,这里定义 Co 的磁矩和 IrMn 的任一磁矩(例如向上的磁矩)指向相同为 PC,相反为 APC.图 2(b)左侧为基于 γ 相无序结构 IrMn 的 Cu/IrMn/Cu/IrMn(111) 的 AFSV,其中 IrMn 作为钉扎层和自由层;图 2(b)右侧给出了 PC 和 APC 两种结构.这里定义自由层和钉扎层的相同原子位置具有相同的磁结构为 PC,相反为 APC.实际上,APC 可以由 PC 沿 $[\bar{1}11]$ 方向平移 $\sqrt{3}/2$ 晶格并旋转 45° 得到.IrMn 的晶格常数采用实验值(0.379 nm).

2. AFM IrMn 的磁结构

实验上观察到 Ir_1Mn_3 合金具有两种晶体结构,即 γ 相无序结构和 $L1_2$ 相有序结构^[9].前者具有四个不等价位置且每个位置上 Ir 和 Mn 的含量分别为 25% 和 75%;后者也具有四个不等价位置,其中一个被 Ir 占据另外三个被 Mn 占据.图 1 给出了稳定的 γ 相无序结构和 $L1_2$ 相有序结构的晶胞结构.如图 1(a)所示, $L1_2$ 相的有序合金的一个 Ir 原子位于四面体的一个顶点,另外三个四面体顶点被三个磁矩方向指向三角形中心的 Mn 原子占据.如图 1(b)所示, γ 相无序结构的稳定磁结构具有 3Q 自旋密度波结构^[9,10],它的四个不等价原子位置的磁矩指向四面体的中心.

计算采用的电子结构基于局域密度近似(LDA)的精确糕模轨道(EMTO)^[11-13]方法得到.采用基于 Vosko, Wilk, 和 Nusair^[14]提出的 VWN 形式的交换关联能,利用相干势近似方法处理替位掺杂^[15].磁矩研究表明, γ 相 IrMn 中的 Mn 和 Ir 原子的磁矩分别为 $2.65\mu_B$ 和 $0.33\mu_B$; $L1_2$ 相的 Mn 原子的磁矩为 $2.90\mu_B$.采用基于波函数连续的紧束缚糕模轨道方法来计算散射矩阵求解 Landauer 输运方程获得体系的电导^[16-18]

3. AFM IrMn 自旋阀的输运

这里首先采用输运方法探讨 IrMn 的磁结构,然后探讨 CIP 构型的 IrMn 基 AFSV 的输运.与传统的自旋阀一样,本文定义 IrMn 基 AFSV 的 GMR 为 $(G_{PC} - G_{APC})/G_{APC}$,其中 G_{PC} 和 G_{APC} 分别为 PC 和 APC 的电导.

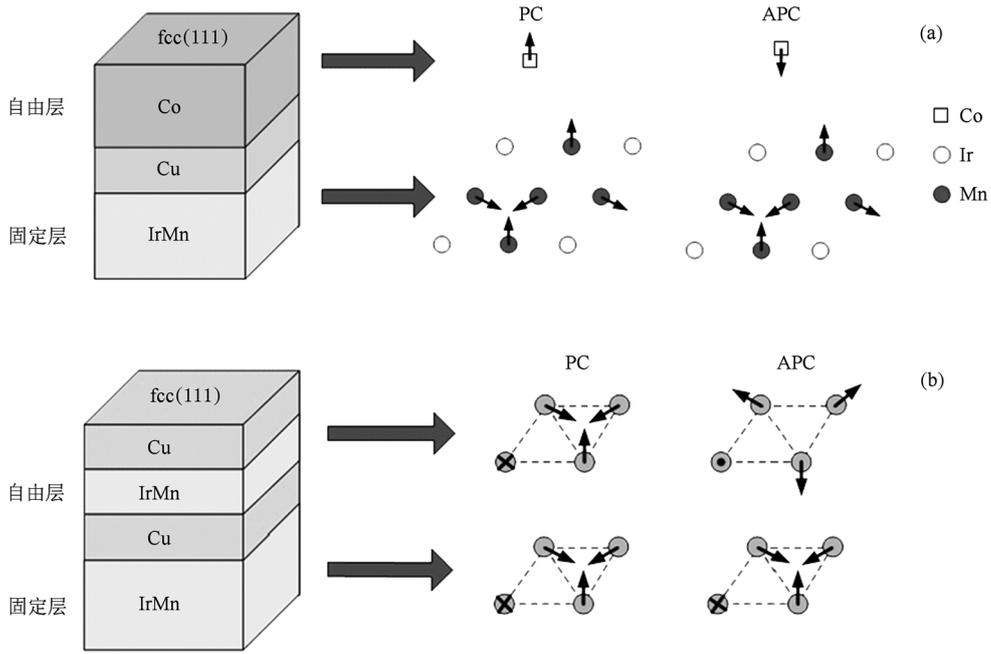


图2 IrMn合金AFSV结构及磁结构示意图 (a)基于 L_{12} 相IrMn的Co/Cu/IrMn(111), (b)基于 γ 相IrMn的Cu/IrMn/Cu/IrMn/Cu(111)

相比于CIP,采用CPP构型更容易探讨IrMn的磁结构.由于 γ 相IrMn是无序的,实验上观测其磁结构会比较困难,但观测有序的 L_{12} 相IrMn就会容易一些.因此,本文采用CPP构型探讨 L_{12} 相IrMn的磁结构.本文设计了一个如图2(a)所示的Co/Cu/IrMn(111)自旋阀.图3(a)给出了基于有序 L_{12} 相IrMn合金的不同非磁层(Cu)厚度(0.84—2.52 nm)的Co/Cu/IrMn(111)的CPP构型自旋阀的电导 G 随 θ 角的变化.由图3(a)可见,随着Cu层厚度的增加,体系电导呈现振荡减小的趋势,当Cu层厚度为1.68 nm(8个原子层(ML),1 ML=0.21 nm)时体系电导达

到最小值.虽然体系电导随非磁层厚度呈振荡减小趋势,但不同的Cu层厚度下电导对角度的依赖性基本一致.当Cu层厚度为0.84 nm时,电导的最大值与最小值的差异为0.2%,当厚度为1.68 nm时,两者的差异为0.4%.图3(b)给出了Cu层厚度为0.84 nm时体系电导与角度 θ 的关系.显然,体系的电导具有三重对称性,体系在 θ 为 30° 时具有最小电导,而在 θ 为 90° 时具有最大电导.Co/Cu/IrMn(111)的输运性质研究直观地给出了IrMn的AFM结构的三重对称性信息.相比其他实验方法,通过观察自旋阀结构的磁电阻来获取AFM材料的磁结构信息是比较容易的.

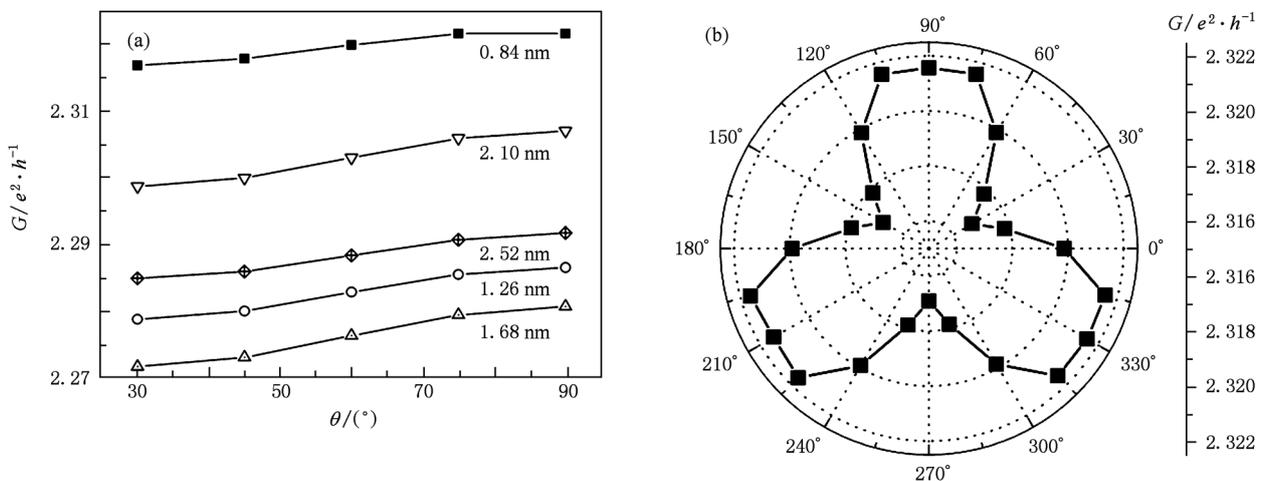


图3 基于有序 L_{12} 相IrMn合金的Co/Cu/IrMn(111)的CPP构型自旋阀的电导 G 随 θ 角的变化 (a)不同Cu层厚度, (b)Cu层厚度为0.84 nm时的全角度分布

在实验上,无序的 γ 相 IrMn 合金较容易制备. 考虑到 CPP 构型的电阻主要来自于 AFM 材料,不同磁结构间的耦合产生的电阻差远小于 AFM 材料本身的电阻,难以观察到 PC 和 APC 两种磁结构之间的磁电阻差异. 而 CIP 构型的电阻主要来自于 AFM/NM 的界面散射以及 AFM 和 AFM 层间的耦合,有可能在这个体系中观察到明显的磁电阻效应. 因此,本文设计了如图 4 所示的 CIP 构型的 Cu/IrMn/Cu/IrMn/Cu(111) 自旋阀,其中 d 为横向超胞的厚度;采用横向超胞来模拟无序合金构成的多层膜,电流 I 在面心立方 (fcc) 的 (111) 面沿 fcc [110] 方向流动. 在 CIP 构型下,电流流过的空间一般都远大于电子的平均自由程,此时电子的扩散输运占据主导地位. 可以预期,在这种情况下体系输运遵循欧姆定律.

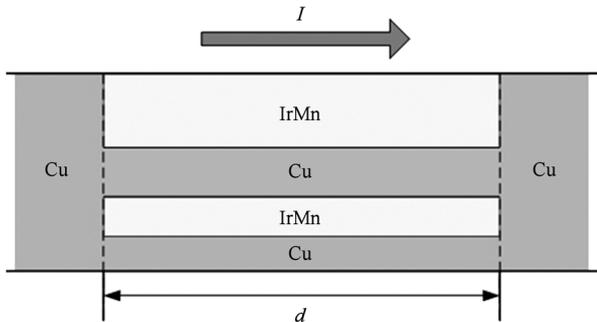


图 4 基于无序 γ 相 IrMn 合金的 CIP 构型 Cu/IrMn/Cu/IrMn/Cu(111) 自旋阀结构示意图

首先探讨体相的无序 γ 相 IrMn 合金的界面电阻 (SR), 然后探讨 IrMn/Cu 多层膜的电阻. 考虑实验上常用的 Ir 含量为 25% 的 IrMn 合金, 并且 IrMn 和 Cu 采用统一的晶格常数. 本文在计算中采用如图 4 所示的结构. 对于体相结构, 将 IrMn/Cu 多层膜替换为纯净的 IrMn 合金. 图 5 给出了计算得到的无序 γ 相 IrMn 合金和基于无序 γ 相 IrMn 合金的 IrMn(0.84 nm)/Cu(0.42 nm)/IrMn(0.42 nm)/Cu(0.42 nm) (111) AFSV 的 PC 和 APC 构型沿 fcc [110] 方向输运的 SR 及线性拟合结果. 显然, 这两种情况下体系的 SR 与电子流过的长度呈线性关系, 与欧姆定律符合很好. 通过线性拟合, 得出体相的无序 γ 相 IrMn 合金的电阻率为 $(66.7 \pm 0.467) \mu\Omega\text{cm}$, 小于实验观察值 (约 $200 \mu\Omega\text{cm}$). IrMn/Cu 多层膜的 PC 和 APC 构型的电阻率分别为 $(97.2 \pm 1.13) \mu\Omega\text{cm}$ 和 $(104.7 \pm 2.67) \mu\Omega\text{cm}$, 体系的 GMR 约为 7.7%. IrMn/Cu 的 SR 为 $(0.45 \pm 0.01) \text{f}\Omega\text{m}^2$.

此外, 本文还研究了 CPP 构型沿 fcc [111] 方向的输运, 无序 γ 相 IrMn 合金的电阻率为 $(85.99 \pm 1.67) \mu\Omega\text{cm}$, IrMn(0.84 nm)/Cu(0.42 nm)/IrMn(0.42 nm)/Cu(0.42 nm) (111) 的 GMR 为 3.4%. 由此可见, CIP 构型比 CPP 构型表现出更强的 GMR 效应, 并且明显大于实验中观察到的基于共线磁结构的 FeMn AFSV 的磁电阻.

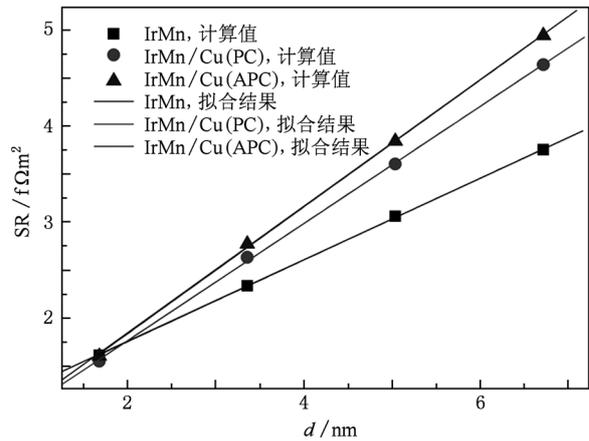


图 5 体相的无序 γ 相 IrMn 合金及 IrMn/Cu 多层膜的 SR 随横向超胞厚度 d 的变化

此外, 本文注意到 Wang 等^[19] 采用 CIP 构型研究了 IrMn(8 nm)/Cu(2.8 nm)/IrMn AFSV, 他们只观察到约为 0.5% 的 GMR 并把其归因于 Cu/IrMn 界面的不饱和磁矩而非 AFM 层间的耦合. 本文认为, 这种差异来源有两点. 第一是实验中大量存在的缺陷掩盖了界面散射效应; 第二是较厚的非磁层导致的短路效应会掩盖 PC 和 APC 两种构型的不同界面散射带来的少量电阻差异. 在 AFSV 中, 只有在非磁层的电阻与界面散射产生的电阻可以比较的情况下才会观察到明显的 GMR 效应. 为了验证这个观点, 本文计算了非磁 Cu 插层厚度分别为 0.84 nm (4 ML) 和 1.26 nm (6 ML) 的 IrMn/Cu/IrMn/Cu 多层膜. 当非磁 Cu 插层厚度为 0.84 nm 时, PC 和 APC 的电阻率分别为 $(58.93 \pm 2.16) \mu\Omega\text{cm}$ 和 $(61.055 \pm 1.01) \mu\Omega\text{cm}$, 体系的 GMR 约为 3.6%; 当非磁 Cu 插层厚度为 1.26 nm 时, PC 和 APC 的电阻率分别为 $(44.034 \pm 1.15) \mu\Omega\text{cm}$ 和 $(44.766 \pm 1.31) \mu\Omega\text{cm}$, 体系的 GMR 约为 1.7%. 结果表明, 体系的电阻率和 GMR 都随非磁 Cu 插层厚度的增加而快速减小, 当非磁 Cu 插层较薄时才有较强的 GMR 效应.

尽管本文中理论计算给出了当非磁 Cu 层较薄

时在 IrMn/Cu/IrMn AFSV 中存在相当可观的 GMR 效应,但我们注意到,当非磁 Cu 层很薄时体系中的交换耦合作用可能会很大^[20,21],有可能会影响到实验对 GMR 效应的观测.

4. 结 论

基于 EMTO 方法以及 LDA 下的密度泛函理论获得电子结构,采用波函数连续的方法计算散射矩阵并通过 Landauer 输运公式计算体系电导,研究了在微观尺度具有三重对称磁结构的 IrMn 合金的 AFSV 的输运. 研究表明,基于有序 L1₂ 相 IrMn 合金的 Co/Cu/IrMn 自旋阀的 GMR 具有三重对称性,

AFM 的信号易于分辨出来,电子输运测量可以用来探讨非共线 AFM 材料原子尺度的磁结构. 基于无序 γ 相 IrMn 合金的 IrMn(0.84 nm)/Cu(0.42 nm)/IrMn(0.42 nm)/Cu(0.42 nm) 的 CIP 构型的 GMR 约为 7.7%,是 CPP 构型的 GMR(3.4%)的两倍左右. 采用 CIP 构型可更容易观察到 AFM 材料的 GMR 效应. 此外,基于 IrMn AFSV 的 GMR 明显大于实验中观察到的基于共线磁结构的 FeMn AFSV 的 GMR.

本文在电子结构计算中使用了瑞典皇家理工学院的 L. Vitos 博士和 A. V. Ruban 博士所开发的第三代 LMTO 代码 (EMTO),谨表谢意. 同时感谢徐源博士做出的前期工作.

-
- [1] Parkin S S 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 3598
- [2] Slonczewski J C 1996 *J. Magn. Magn. Mater.* **159** L1
- [3] Berger L 1996 *Phys. Rev. B* **54** 9353
- [4] Kubetzka A, Bode M, Pietzsch O, Wiesendanger R 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 057201
- [5] Meiklejohn W H, Bean C P 1956 *Phys. Rev.* **102** 1413
- [6] Nunez A S, Duine R A, Haney P, MacDonald A H 2006 *Phys. Rev. B* **73** 214426
- [7] Xu Y, Wang S, Xia K 2007 *Phys. Rev. Lett.* **100** 6602
- [8] Wei Z, Sharma A, Bass J, Tsoi M 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 07D113
- [9] Sakuma A, Fukamichi K, Sasao K, Umetsu R Y 2003 *Phys. Rev. B* **67** 024420
- [10] Vitos L, Skriver H L, Johansson B, Kollar J 2000 *Comput. Mater. Sci.* **18** 24
- [11] Vitos L 2001 *Phys. Rev. B* **64** 014107
- [12] Pourovskii L V, Ruban A V, Vitos L, Ebert H, Johansson B, Abrikosov I A 2005 *Phys. Rev. B* **71** 094415
- [13] Andersen O K, Jepsen O, Krier G 1994 *Lecture on Methods of Electronic Structure Calculations* (Singapore: World Scientific) p63
- [14] Vosko S H, Wilk L, Nusair M 1980 *Can. J. Phys.* **58** 1200
- [15] Ruban A V, Simak S I, Korzhavyi P A, Skriver H L 2002 *Phys. Rev. B* **66** 024202
- [16] Datta S 1995 *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge: Cambridge University Press) p1
- [17] Xia K, Zwierzycki M, Talanana M, Kelly P J, Bauer G E W 2006 *Phys. Rev. B* **73** 064420
- [18] Schep K M, van Hoof J B A N, Kelly P J, Bauer G E W, Inglesfield J E 1997 *Phys. Rev. B* **56** 10805
- [19] Wang L, Wang S G, Rizwan S, Qin Q H, Han X F 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 152512
- [20] Gokemeijer N J, Ambrose T, Chie C L 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 4270
- [21] Cai J W, Lai W Y, Teng J, Shen F, Zhang Z, Mei L M 2004 *Phys. Rev. B* **70** 214428

Giant magnetoresistance in IrMn based antiferromagnetic spin valve^{*}

Jia Xing-Tao Xia Ke[†]

(Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China)

(Received 12 February 2011; revised manuscript received 26 May 2011)

Abstract

According to the parameter-free first principles calculations, we investigate the spin polarized transport in antiferromagnetic spin valve (AFSV) based on noncollinear IrMn. The giant magnetoresistance (GMR) in Co/IrMn/Cu (111) with L1₂-type IrMn shows three-fold rotational symmetry, which is easy to be distinguished from the GMR of normal ferromagnetic spin valves. Moreover, GMR based on γ -phase IrMn with current-in-plane (CIP) structure shows that GMR is 7.7%, around two time larger than that in current-perpendicular-to-plane (CPP) structure (3.4%). Our study demonstrates that the AFSV CIP structure possesses a larger GMR effect than the CPP structure, and the GMR effect in AFSV based on noncollinear antiferromagnetic structure is larger than that based on collinear antiferromagnetic structure such as FeMn.

Keywords: antiferromagnetic spin valve, giant magnetoresistance effect, noncollinear magnetic structure, current in plane

PACS: 72.25.Ba, 75.50.Ee, 75.47.De

^{*} Project supported by the Fundamental Scientific Research Foundation for the Central Universities of China (Grant No. 101-105115).

[†] Corresponding author. E-mail: kexia@bnu.edu.cn