

GaMnN 铁磁共振隧穿二极管自旋电流输运 以及极化效应的影响*

汤乃云†

(上海电力学院, 上海 200090)

(2008 年 3 月 20 日收到, 2008 年 11 月 15 日收到修改稿)

通过理论计算研究 GaMnN 铁磁共振隧穿二极管自旋电流输运特性. 理论结果表明在电流特性曲线上出现两个明显的自旋分裂峰. 该电流自旋分裂峰和相应的自旋极化随温度的升高而逐渐减小消失. 当进一步考虑到 GaN 异质结界面极化电荷影响时, 自旋向下的电流共振峰得到明显增强, 同时电流的自旋极化也得到相应的提高. 在一定的极化电荷条件下, 可以获得较高的自旋极化电流.

关键词: GaMnN, 共振隧穿, 自旋电流, 极化电荷

PACC: 7225, 7550P, 7335A

1. 引 言

近年来, 磁性半导体材料引起人们极大的兴趣, 除了可以利用材料的本征电荷特性外, 还可以利用其自旋性质, 制备出集磁、光、电一体的新型半导体器件^[1-3]. Egues 利用 Mn 原子掺杂的 II-VI 族半导体材料制备磁性共振隧穿二极管 (resonant tunneling diode, RTD) 模型^[4], 以此来分开两种不同自旋的电子, 提高自旋电子的注入效率. 随后 Slobodskyy 等人通过分子束外延的方法制备了 ZnMnSe/ZnBeSe RTD^[5]. 在实验过程中, 观察到 RTD 电流特性曲线上出现两个明显的共振峰, 经证实该共振峰是由外磁场下电子巨大的自旋塞曼分裂所产生的. 虽然该器件展示了独特的电子自旋选择性, 但是只能工作在强磁场和极低温下. 因此, 这些苛刻的外界条件成为半导体自旋电子器件应用的障碍.

InMnAs^[6]和 GaMnAs^[7]等铁磁半导体的出现为自旋电子器件的应用注入一股新的活力, 激发起新一轮研究热潮. 1998 年 Ohno 等人将具有铁磁性 GaMnAs 薄膜材料应用到 RTD 中^[7], 在无外加磁场的情况下观察到由电子自旋分裂所引起的双共振峰

结构. 但是, 稀磁半导体材料中的铁磁序会随温度变化而改变, 当温度超过材料本身的居里温度时, 材料会发生铁磁—顺磁相变, 导致电子零磁场自旋分裂现象消失. 因此如何提高铁磁半导体材料的居里温度成为目前所关心的一个重要问题. 最近的实验和理论研究发现 GaMnN 材料具有室温铁磁性, 其居里温度远远超过室温^[8], 但是所观察到的铁磁性是否来源于载流子与 Mn 磁矩之间的交换相互作用还是存在其他难以观察到的具有磁性的合金团簇, 一直存在着较大的争议^[9,10]. 此外, 实验还发现 GaMnN 材料中电子的导带自旋分裂能大约在几十个 meV^[11], 其铁磁相甚至在几个 nm 厚的原子层上也还存在^[12]. 因此, 利用 GaMnN 材料来制备室温下自旋 RTD 是非常有希望的.

自从上个世纪 70 年代 Esaki 提出 RTD 模型以来^[13], 有关的实验和理论研究发展相当迅速, 因而本文拟采用成熟的相干隧穿理论来研究铁磁 RTD 中, 自旋电子的共振隧穿现象. 本文所研究的 RTD 器件为 GaN/AlGaIn 双势垒结构, 铁磁性 GaMnN 材料为发射极和集电极. 通过自洽计算 RTD 的电流-电压特性曲线, 来研究自旋电流输运以及随温度的变化关系, 此外, 还研究 GaN 异质界面处极化电荷对

* 上海市教委科研创新项目(批准号: 081Z142), 上海高校选拔培养优秀青年教师科研专项基金(批准号: B01601), 上海市重点学科建设项目(批准号: P1303)资助的课题.

† E-mail: naiyuntang@126.com

自旋极化的影响.

2. 理论模型

为了研究铁磁性 RTD 的电流输运特性,本文采用经典的隧穿输运理论,即在器件范围内认为电子是相干隧穿并且忽略电子的自旋散射^[14,15].这是因为在实验中发现电子的自旋散射长度大于 RTD 的结构尺度^[16].由于电子的哈密顿量在垂直于异质结平面具有平移对称性,因此薛定谔方程可以简化为一维形式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} + U_o(z) \right] \psi_o(z) = E \psi_o(z), \quad (1)$$

其中 $U_o(z) = E_c(z) - e\phi(z) + \sigma\Delta_{ex}(z)$.

这里, m 表示电子的有效质量, E 为电子纵向能量, $E_c(z)$ 为沿着电流方向电子导带不连续, $\phi(z)$ 为势能, Δ_{ex} 为导带自旋分裂能, σ 为自旋量子数 ($\pm 1/2$). 电子势能 $\phi(z)$ 可以通过求解泊松方程得到:

$$\frac{d}{dz}\epsilon(z) \frac{d}{dz}\phi(z) = \frac{e}{\epsilon_0} [n(z) - N_d(z)], \quad (2)$$

ϵ 表示相对介电常数, N_d 和 n 分别为掺杂浓度和电子密度,其中电子密度为

$$n(z) = \frac{1}{4\pi} \sum_{i,\sigma} \int_{U_{i,\sigma}}^{\infty} dE f_i(E) |\psi_{i,\sigma}^i(z)|^2 \frac{1}{\hbar v_{i,\sigma}}, \quad (3)$$

其中 f_i 是费米-狄拉克分布对所有电子横向动量的积分表达式,

$$f_i(E) = \frac{mk_B T}{\pi \hbar^2} \ln(1 + \exp((\mu_i - E)/k_B T)),$$

$U_{i,\sigma}$ 和 $v_{i,\sigma}$ 分别表示发射极和集电极中与自旋有关的势能以及电子纵向速度, μ_i 为化学势. 通过自洽求解薛定谔方程和泊松方程,可以得到器件的势能分布和电子密度. 最后根据 Landauer-Buttiker 公式可以获知器件在不同电压 V_a 时的电流密度

$$J = \sum_{\sigma} \frac{e}{4\pi\hbar} \int_{U_{i,\sigma}}^{\infty} dE T_{\sigma} [\mathcal{J}(E) - \mathcal{J}(E + eV_a)], \quad (4)$$

其中 T_{σ} 为电子的传输矩阵.

3. 计算结果和分析

我们所计算的 RTD 为 $Al_xGa_{1-x}N/GaN/Al_xGa_{1-x}$

N 双势垒单量子阱结构, Al 的组分为 10%. 因此相对应的 AlGaN 与 GaN 之间的导带不连续为 110 meV ^[17]. AlGaN 势垒和 GaN 量子阱的宽度分别为 3 nm 和 5 nm. 整个双势垒结构被 n 型掺杂的 GaMnN 所包围, 掺杂浓度为 $4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. 图 1 为 GaMnN 铁磁 RTD 的能带示意图. 在理论计算中, 认为 GaMnN 的能带结构与 GaN 的一致, 电子有效质量和相对介电常数分别取为 $0.228m_0$ 和 9.5, 电子自旋分裂能 Δ_{ex} 假定为 10 meV .

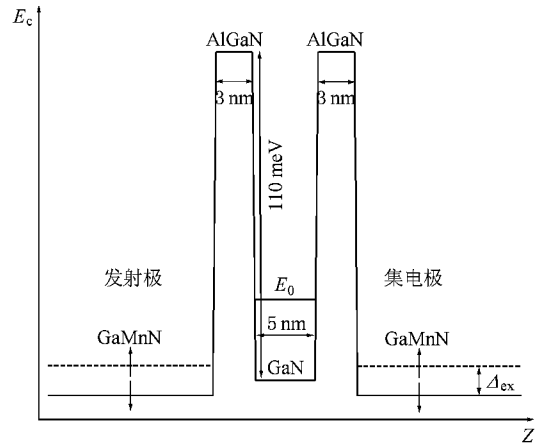


图 1 具有铁磁 GaMnN 发射极/集电极的 RTD 导带示意图(箭头表示自旋方向)

由于 GaMnN 中电子的自旋分裂导致发射极和集电极的导带分裂成自旋向上和自旋向下的子带. 但是 AlGaN 与 GaN 之间的势垒高度差不依赖于电子自旋, 所以 GaN 量子阱中的共振束缚态对于自旋向上和向下的电子是一致的. 计算结果显示电子第一共振子能级 E_0 位于 GaN 导带底以上 28.1 meV . 由于发射极电子的自旋分裂, 共振束缚能级更靠近自旋向上的子带. 随着外加电压的变化, 对应于电子自旋向上的共振电流会首先出现, 接着才是自旋向下的电流. 因此, 自旋向上和自旋向下的电流会彼此分开, 产生自旋极化, 电流的自旋极化定义为

$$P = (J_{\uparrow} - J_{\downarrow}) / (J_{\uparrow} + J_{\downarrow}).$$

图 2 给出了不同温度情况下 RTD 的电流-电压曲线, 可以看出在低温下 ($< 100 \text{ K}$), 出现两个十分明显的自旋分裂峰. 在低电压的情况下, 由于量子阱共振能级更靠近发射极自旋向上的子带, 导致自旋向上的电流在 60 mV 以下占主导, 因此电子自旋极化在低于 10 K 的温度下几乎完全极化, 接近于 100% (如图 3 所示). 随着电压增加, 共振能级逐步下降, 导致电子自旋向下的电流开始增加, 自旋极化

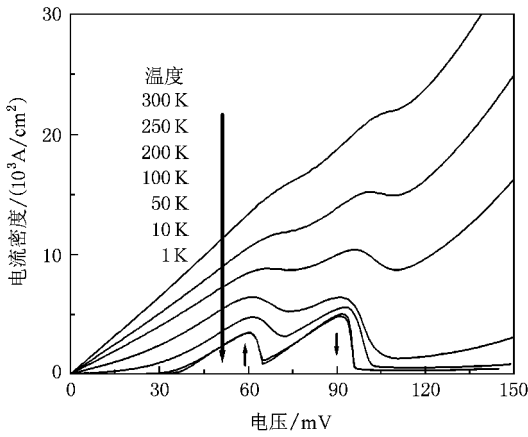


图 2 不同温度下的电流-电压曲线

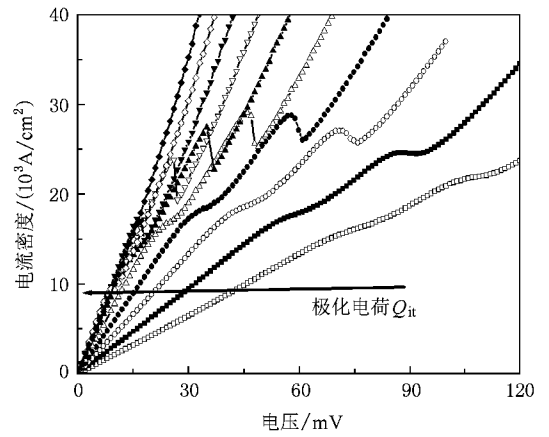


图 4 300 K 温度下,不同极化电荷密度对电流-电压曲线的影响 (Q_{it} 从 0 增加到 $9 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, 间隔 $1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$)

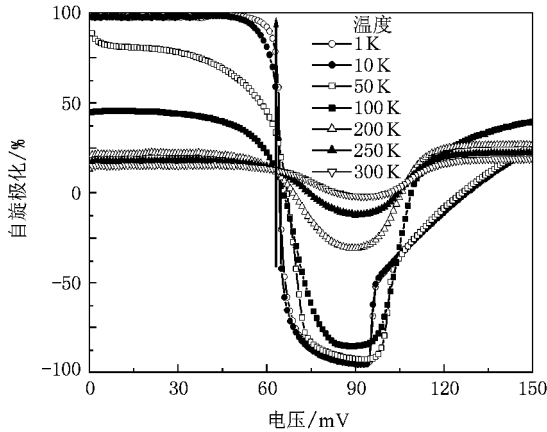


图 3 自旋极化随温度的变化关系

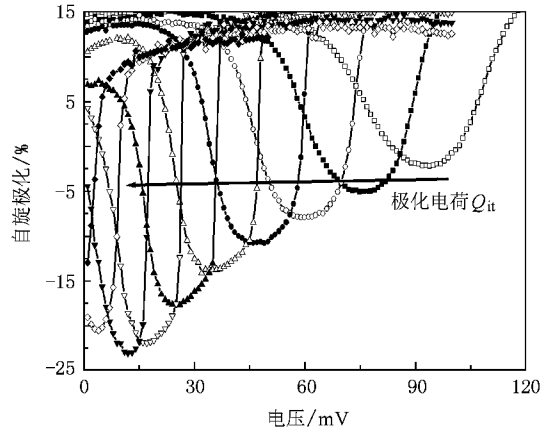


图 5 300 K 温度下,不同极化电荷密度对自旋极化的影响 (Q_{it} 从 0 增加到 $9 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, 间隔 $1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$)

逐渐减小.当电压增加到共振能级位置位于自旋向上和自旋向下的子带之间时,只有自旋向下的电子才能通过双势垒结构,因为自旋向上的电子不能同时满足动量和能量守恒而被抑制.这时电流的自旋极化接近 -100% .因此,通过外界的电压变化可以任意控制电流的自旋极化方向.这些结果基本上与 ZnMnSe/ZnBeSe RTD 的实验结果相一致^[5],不过该实验的自旋分裂是由外加磁场引起的.随着温度的升高,电流曲线上的自旋分裂峰逐渐减弱消失,自旋极化也相应减小.这是因为电子的能级展宽随着温度升高而增加,导致发射极自旋向上和向下的电子态互相重叠,减弱电子的自旋极化.在室温下,电流共振区的自旋极化仅为 -2% ,其他地方的自旋极化为 15% .

然而,在上面的计算过程中忽略了界面处极化电荷的影响.在极性半导体异质结中,由于极化强度的差异,比如 AlN 和 GaN 材料,在其界面处会产生

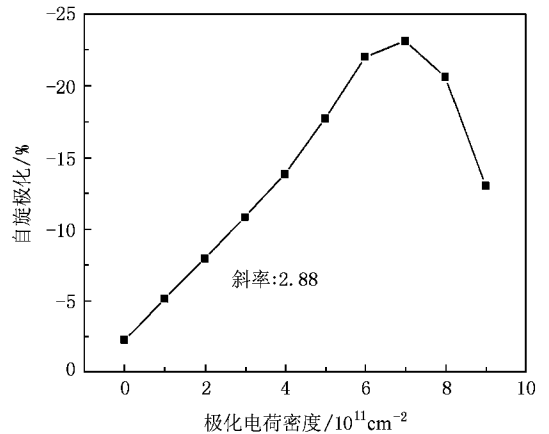


图 6 图 5 中自旋极化强度最大值随极化电荷密度的变化

极化电荷,该极化电荷对电子能带结构以及电荷的

分布会产生一定的影响^[18,19].为了研究界面极化效应的影响,我们在泊松方程中加入了极化电荷面密度 Q_{it} .在理论计算过程中,认为 GaN 半导体材料是 Ga 面极化,因为不同的极化面所产生的极化电荷的极性是不一样的^[17].图 4 给出了在不同极化电荷密度下的电流-电压曲线.从中可以看出随着极化电荷密度的增加,自旋向下的电流共振峰逐渐增强.这是因为界面处的极化电荷导致 GaN 量子阱的导带向下弯曲.结果,量子阱中的共振能级也随之下落,当极化电荷增加到共振子能级位于发射极自旋向上和向下的子带时,自旋向上的电子无法在外界电压的条件下发生共振隧穿.此时,只有自旋向下的电子才能共振隧穿,导致电流共振区自旋向下的电流极化得到增强.图 5 显示出当极化电荷为 $7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 时,与无极化效应相比,电流的自旋极化增加 10 倍,约为 -22%.如果进一步增加极化电荷,共振子能级就会低于所有的自旋子带,电子的共振隧穿消失,自旋极化也随之减小.图 6 给出了共振区自旋极化最大值随极化电荷密度的变化,可以看出在低极化强度的情况下,自旋极化与极化电荷密度成线性关系,

极化电荷每增加 10^{11} cm^{-2} ,自旋极化则相应增加 -2.88%.因此,通过上面的计算分析得知在存在一定的界面极化电荷的情况下,可以获得较高的室温自旋极化电流.这对于研制铁磁 RTD 具有十分重要的意义.

4. 结 论

本文通过自洽求解薛定谔方程和泊松方程研究 GaMnN 铁磁共振隧穿二极管中自旋电流输运特性.研究结果发现在电流曲线上出现来自电子自旋分裂的双共振峰.该双共振峰随温度升高而逐渐消失,导致相应的自旋极化也逐渐减小.当考虑到异质结界面极化电荷影响时,自旋向下的电流共振峰得到明显的增强.自旋极化强度随着极化电荷的增加而增加,当极化电荷超过 $7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 时,由于量子阱共振子能级位于所有发射极自旋导带以下,导致自旋极化强度衰减.因此,在一定的界面极化电荷的情况下,可以得到较高的室温自旋极化电流.这对自旋电子器件的研究提供一定的理论根据.

- [1] Yuasa S, Nagahara T, Suzuki Y 2002 *Science* **297** 234
- [2] Chiba D, Yamanouchi M, Matsukura F, Ohno H 2003 *Science* **301** 943
- [3] Zutic I, Fabian J, Das Sarma S 2004 *Rev. Mod. Phys.* **76** 323
- [4] Carlos Egues J 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 4578
- [5] Slobodskyy A, Gould C, Slobodskyy T, Becker C R, Schmidt G, Molenkamp L W 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 246601
- [6] Ohno H, Munekata H, Penney T, von Molnár S, Chang L L 1992 *Phys. Rev. Lett.* **68** 2664
- [7] Ohno H, Akiba N, Matsukura F, Shen A, Ohtani K, Ohno Y 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 363
- [8] Ando K 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 100
- [9] Liu C, Yun F, Morkoc H 2005 *J. Mater. Sci. : Mater. Electron.* **16** 555
- [10] Jungwirth T, Sinova J, Masek J, Kucera J, MacDonald A H 2006 *Rev. Mod. Phys.* **78** 809
- [11] Ertler C, Fabian J 2007 *Phys. Rev. B* **75** 195323
- [12] Priour D J, Jr, Hwang E H, Das Sarma S 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 37201
- [13] Tsu R, Esaki L 1973 *Appl. Phys. Lett.* **22** 562
- [14] Vassell M O, Lee J, Lockwood H F 1983 *J. Appl. Phys.* **54** 5206
- [15] Cahay M, McLennan M, Datta S, Lundstrom M S 1987 *Appl. Phys. Lett.* **50** 612
- [16] Ohya S, Hai P N, Tanaka M 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 012105
- [17] Ambacher O, Majewski J, Miskys C, Link A, Hermann M, Eickhoff M, Stutzmann M, Bernardini F, Fiorentini V, Tilak V, Schaff B, F. Eastman L 2002 *J. Phys. : Condens. Matter* **14** 3399
- [18] Hermann M, Monroy E, Helman A, Baur B, Albrecht M, Daudin B, Ambacher O, Stutzmann M, Eickhoff M 2004 *Phys. Stat. Sol. (c)* **1** 2210
- [19] Heikman S, Keller S, Wu Y, Speck J S, DenBaars S P, Mishra U K 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 10114

Spin polarized current transport and charge polarization effect in ferromagnetic GaMnN resonant tunneling diode^{*}

Tang Nai-Yun[†]

(*Shanghai University of Electric Power, Shanghai 200090, China*)

(Received 20 March 2008 ; revised manuscript received 15 November 2008)

Abstract

The spin-polarized tunneling current transport through a ferromagnetic GaMnN resonant tunneling diode is investigated theoretically. Two distinct spin splitting peaks can be observed in the current-voltage characteristic. Spin splitting peaks and the spin polarization decrease and then disappear with increasing temperature. When charge polarization effect is considered for the GaN heterostructure, the spin-down resonant current peak becomes enhanced significantly and spin polarization is also increased accordingly. A highly spin polarized current can be obtained at a certain polarization charge.

Keywords : GaMnN, resonant tunneling, spin polarized current, polarization charge

PACC : 7225, 7550P, 7335A

^{*} Project supported by the Innovation Program of Shanghai Municipal Education Commission (Grant No. 081Z142), the Specialized Foundation of Shanghai Education Commission for Outstanding Young Teachers in University (Grant No. B01601) and the Shanghai Leading Academic Discipline Project (Grant No. P1303).

[†] Corresponding author. E-mail : naiyuntang@126.com