

ДИАГРАММЫ СТАБИЛЬНОСТИ ТУННЕЛЬНОЙ НАНОГЕТЕРОСТРУКТУРЫ В ПРИБЛИЖЕНИИ СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

Д. А. Лифатова^{a}, А. В. Ведяев^a, Н. В. Рыжанова^a,
О. А. Котельникова^a, М. Г. Чилиев^b, Н. В. Стрелков^a*

*^a Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119991, Москва, Россия*

*^b Université Grenoble Alpes, CEA, CNRS, INAC-SPINTEC
38000, Grenoble, France*

Поступила в редакцию 16 марта 2019 г.,
после переработки 21 марта 2019 г.
Принята к публикации 21 марта 2019 г.

Одной из важных характеристик наногетероструктуры с магнитным туннельным переходом (МТП), применяемой в основе ячейки памяти MRAM (magnetic random access memory) и переключаемой с помощью эффекта спинового торка STT (spin transfer torque), является ее диаграмма стабильности, определяющая области значений внешнего магнитного поля и приложенного напряжения, при которых ячейка находится в одном из двух стабильных состояний. Для численного построения таких диаграмм обычно используется решение динамического уравнения Ландау–Лифшица в однодоменном приближении с применением феноменологических констант, определяющих значения спинового торка в данном материале. В данной статье рассматривается задача спин-зависимого электронного транспорта в МТП-структуре, решение которой в приближении свободных электронов позволяет вычислить значения спинового торка для заданного материала в любой магнитной конфигурации системы и использовать их при интегрировании уравнения Ландау–Лифшица. Используемый метод позволяет более точно воспроизвести форму диаграммы стабильности и предсказать критические значения магнитного поля и напряжения, необходимых для переключения ячейки MRAM на основе МТП-структуры.

DOI: 10.1134/S0044451019080121

1. ВВЕДЕНИЕ

За последние годы было опубликовано большое количество теоретических и экспериментальных работ, посвященных изучению свойств наногетероструктур с магнитным туннельным переходом (МТП-структур) с перпендикулярной относительно плоскости слоев поверхностной анизотропией [1, 2], так как они являются наиболее перспективными для применения их в качестве ячеек современной магнитной памяти MRAM (magnetic random access memory), логическое состояние которых меняется за счет эффекта переноса спинового крутящего момента, или торка (spin transfer torque, STT)

[3, 4]. Преимущество таких структур состоит в том, что они обладают высоким значением (до 200 %) эффекта туннельного магнитосопротивления (tunnel magnetoresistance, TMR) [5, 6] и большой перпендикулярной магнитной анизотропией, обеспечивающей высокую температурную стабильность состояния ячейки [7, 8]. Поскольку состояние такой системы может изменяться с помощью внешнего магнитного поля или с помощью тока, протекающего через МТП-структуру в прямом или обратном направлении, важным является выяснить области значений внешнего поля H и приложенного напряжения V , при которых система будет находиться в том или ином стабильном состоянии. Для этого строится так называемая фазовая диаграмма стабильности, или V – H -диаграмма [9]. Для ее численного построения необходимо интегрировать динамическое уравнение Ландау–Лифшица [10] с дополни-

* E-mail: lifatova.dasha@yandex.ru

тельными слагаемыми, отвечающими за спиновый торк, которые обычно содержат феноменологические константы, подбираемые для каждой конкретной МТП-структуры [11]. Для того чтобы вычислить величины этих торков, создаваемых в условиях спин-зависящего электронного транспорта, необходимо решить задачу туннелирования электрона через потенциальный барьер МТП-структуры.

Простейшая модель МТП-структуры, которая может быть рассмотрена для решения квантово-механической задачи туннелирования, представляет из себя два полубесконечных ферромагнитных электрода, намагниченных однородно (однодоменное приближение) и разделенных тонким (толщиной около 1 нм) диэлектриком. Намагниченность одного электрода зафиксирована (опорный слой), а намагниченность другого может быть отклонена на некоторый угол относительно первого электрода (свободный слой). Подробное теоретическое описание подобных структур было дано в предшествующих работах как в приближении свободных электронов [12–14], так и в приближении сильной связи [15–17], результаты которых хорошо согласуются между собой. Они приближенно описывают поведение двух компонент спинового торка хорошо известными выражениями:

$$\begin{aligned} T_{\parallel} &= (a_1 V + a_2 V^2) [\mathbf{M}_1 \times [\mathbf{M}_1 \times \mathbf{M}_3]], \\ T_{\perp} &= (b_0 + b_1 V + b_2 V^2) [\mathbf{M}_1 \times \mathbf{M}_3], \end{aligned} \quad (1)$$

где $\mathbf{M}_1$ и $\mathbf{M}_3$ — направления намагниченностей соответственно в свободном и опорном слоях, V — приложенное напряжение. Феноменологические константы a_i и b_i обычно заранее неизвестны и подбираются из экспериментальных данных для каждого конкретного образца, так как их величина зависит и от толщины барьера, и от материалов, используемых при изготовлении таких туннельных структур, и от процесса изготовления образца. Например, для ферромагнитных материалов с большим обменным расщеплением и полуметаллов значение константы a_2 стремится к нулю. Построение и анализ численных V – H -диаграмм с использованием выражений (1) было проведено ранее путем численного интегрирования динамического уравнения Ландау – Лифшица как в коллинеарной [6, 18–20], так и в неколлинеарной геометрии [21]. Численные расчеты довольно точно воспроизводят форму экспериментальных диаграмм, хотя количественной оценки они не дают из-за использования феноменологических констант. Более того, на выражения (1) накладывается ограничение для значений напряжения V из-за использования в теориях [12–14] ВКБ-при-

ближения, которое дает возможность получить относительно простой аналитический ответ, но справедливо только тогда, когда энергия электрона намного меньше, чем высота потенциального барьера. Таким образом, выражения (1) справедливы при относительно невысоких напряжениях, в то время как напряжение переключения МТП-структуры может быть гораздо выше возможно допустимого в данном приближении.

В данной работе мы представляем результаты точного решения задачи туннелирования, рассмотренной ранее [12–14], и сравниваем их с результатами решения той же задачи с использованием ВКБ-приближения. Полученные результаты используем для вычисления значений спиновых торков, которые необходимы для построения V – H -диаграммы.

2. МОДЕЛЬ МТП-СТРУКТУРЫ

В основе модели МТП-структуры используется приближение свободных электронов, или так называемая s – d -модель, в которой s -электроны свободно перемещаются, а d -электроны локализованы и создают локальную намагниченность в ферромагнитном металле. Такое приближение приемлемо в случае квадратичного закона дисперсии свободных электронов, что справедливо с хорошей точностью для большинства металлов. МТП-структура представляет собой два полубесконечных ферромагнитных (ФМ) электрода, разделенных тонким слоем диэлектрика, напряжение в котором линейно меняется в зависимости от координаты (рис. 1). Намагниченность в области левого электрода (первая область) фиксирована в направлении оси z , а в области правого электрода (третья область) может иметь с осью z произвольный угол θ . Ток в такой структуре протекает вдоль оси y , а ее сопротивление зависит от взаимной ориентации (от угла θ) намагниченностей в правом и левом ФМ-электродах.

Если угол θ между намагниченностями ФМ-электродов отличен от 0 и π , то в такой неколлинеарной конфигурации волновая функция электрона в третьей области будет смешанной и будет состоять из суперпозиции волновых функций электронов со спинами «вверх» и «вниз». Гамильтониан для s -электронов в ферромагнетике в этом случае имеет вид [22]

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + U(y) - J_{sd}(\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{S}), \quad (2)$$

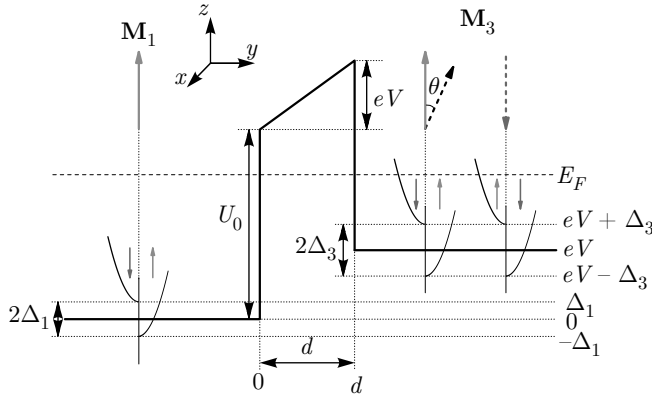


Рис. 1. Потенциальный профиль МТП-структуры $U(y)$. Справа обозначены уровни энергии для электронов с направлением спина «вверх» и «вниз». Через Δ_1 и Δ_3 обозначены обменные интегралы J_{sd} в левой (область 1) и правой (область 3) областях, θ — угол между намагниченностями в левом (M_1) и правом (M_3) ФМ-электродах, U_0 — высота потенциального барьера, eV — приложенное напряжение, d — толщина изолятора, E_F — энергия Ферми электрона

где первое и второе слагаемое отвечают за кинетическую и потенциальную энергии, а третье слагаемое отражает обменную энергию между s - и d -электронами, $\mathbf{S}$ — единичный вектор вдоль локальной намагниченности ферромагнетика за счет d -электронов, J_{sd} — обменный интеграл, равный Δ_1 или Δ_3 соответственно в левом или правом ФМ-электроде, $\hat{\sigma}$ — матрицы Паули.

Если повернуть локальную намагниченность на угол θ вокруг оси y , умножив $\mathbf{S}$ на матрицу вращения $\hat{R}_y$, то скалярное произведение в гамильтониане (2) можно переписать в виде

$$\hat{\sigma} \cdot \mathbf{S}_\theta = (\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2 \hat{\sigma}_3) \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Подставляя гамильтониан (2) и скалярное произведение (3) в стационарное уравнение Шредингера, получаем

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} + U(y) - E \right) \begin{pmatrix} \psi^\uparrow \\ \psi^\downarrow \end{pmatrix} - J_{sd} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi^\uparrow \\ \psi^\downarrow \end{pmatrix} = \hat{0}, \quad (4)$$

где κ — квазиимпульс электрона в плоскости xz . Если ввести квазиимпульсы $k^\uparrow$ и $k^\downarrow$,

$$k^{\uparrow(\downarrow)} = \sqrt{k_0^2 \pm \frac{2m}{\hbar^2} J_{sd}}, \quad (5)$$

$$k_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - U(y)) - \kappa^2},$$

то решение уравнения (4) в ФМ-электродах можно записать в общем виде:

$$\psi^\uparrow = A^\uparrow \exp(ik^\uparrow y) + B^\uparrow \exp(-ik^\uparrow y),$$

$$\psi^\downarrow = A^\downarrow \exp(ik^\downarrow y) + B^\downarrow \exp(-ik^\downarrow y). \quad (6)$$

Эти решения представляют собой плоские волны, распространяющиеся в обе стороны вдоль оси y . Неизвестные коэффициенты A и B находятся из граничных условий и условий непрерывности волновых функций и их производных. Если учитывается изменение эффективной массы электрона внутри барьера [23], то на границах ферромагнетик/изолятор должно выполняться условие сохранения потока

$$\frac{\psi'_F(y)}{m} = \frac{\psi'_B(y)}{m^*},$$

где ψ_F и ψ_B — волновые функции соответственно в ФМ-электроде и барьере, m^* — эффективная масса электрона в барьере.

Если волновая функция в первой области представляет собой спинор, состоящий из функций (6), то в третьей области спинор повернут на угол θ и его компоненты состоят из следующей комбинации состояний электронов со спином «вверх» и «вниз»:

$$\psi = \begin{pmatrix} \cos \theta/2 & \sin \theta/2 \\ -\sin \theta/2 & \cos \theta/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi^\uparrow \\ \psi^\downarrow \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где $\psi^\uparrow$ и $\psi^\downarrow$ — волновые функции (6) электрона в третьей области.

Внутри барьера, где нет ФМ-расщепления ($J_{sd} = 0$) и потенциальная энергия больше, чем энергия s -электронов, точным решением уравнения (4) при линейном изменении потенциала $U(y) = yeV/d$ является комбинация спецфункций Эйри Ai и Bi :

$$\psi_B = A_B \text{Ai} \frac{q^2(y)}{q_v^2} + B_B \text{Bi} \frac{q^2(y)}{q_v^2}, \quad (8)$$

где q и q_v определяются выражениями

$$q(y) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(U_0 - E + \frac{eV}{d} y \right) + \kappa^2},$$

$$q_v = \left(\frac{2m}{\hbar^2} \frac{eV}{d} \right)^{1/3}. \quad (9)$$

В ВКБ-приближении волновые функции (8) аппроксимируются комбинацией экспонент:

$$\psi_B^{\text{WKB}} = A_B e^{Q(y)} + B_B e^{-Q(y)}, \quad (10)$$

где $Q(y)$ — показатель, определяемый из выражения

$$Q(y) = \frac{\hbar^2}{3m} \frac{d}{eV} [q^3(y) - q^3(0)]. \quad (11)$$

Легко убедиться, что в пределе $eV \rightarrow 0$ выражение (11) примет вид выражения для квазиимпульса в прямоугольном барьере: $Q(y) = q(0)y$.

Далее необходимо рассмотреть четыре возможных граничных условия системы.

1. Электрон падает слева со спином «вверх». В этом случае в первой области коэффициент $A_{L1}^{\uparrow\uparrow}$ выбирается равным потоку $1/\sqrt{k_1^{\uparrow}}$, а $A_{L1}^{\uparrow\downarrow} = 0$. В третьей области отсутствие отраженной волны дает $B_{L3}^{\uparrow\uparrow} = B_{L3}^{\uparrow\downarrow} = 0$.

2. Электрон падает слева со спином «вниз»: $A_{L1}^{\uparrow\uparrow} = 0$, $A_{L1}^{\uparrow\downarrow} = 1/\sqrt{k_1^{\downarrow}}$, $B_{L3}^{\uparrow\uparrow} = B_{L3}^{\uparrow\downarrow} = 0$.

3. Электрон падает справа со спином «вверх»: $A_{R1}^{\uparrow\uparrow} = A_{R1}^{\uparrow\downarrow} = 0$, $B_{R3}^{\uparrow\uparrow} = 1/\sqrt{k_3^{\uparrow}}$, $B_{R3}^{\uparrow\downarrow} = 0$.

4. Электрон падает справа со спином «вниз»: $A_{R1}^{\uparrow\uparrow} = A_{R1}^{\uparrow\downarrow} = 0$, $B_{R3}^{\uparrow\uparrow} = 0$, $B_{R3}^{\uparrow\downarrow} = 1/\sqrt{k_3^{\downarrow}}$.

Каждое граничное условие вместе с условиями непрерывности дает восемь уравнений с восемью неизвестными коэффициентами.

Когда волновые функции найдены, можно рассчитать плотность тока, протекающего через МТП-структуру, а также создаваемые этим током спиновые торки. Для расчета тока используем, согласно формализму Ландауэра [24], выражение

$$J_e = \frac{2}{(2\pi)^2} \frac{e^2}{\hbar} \int j_e \kappa d\kappa dE, \quad (12)$$

где e — модуль заряда электрона, интегрирование в ФМ-электродах проводится по всем возможным значениям энергии электрона E и квазиимпульса κ , удовлетворяющим условию

$$E + U(y) + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \leq E_F, \quad (13)$$

а j_e — матричный элемент оператора скорости, пропорциональный туннельному току и рассчитываемый по формуле [25]

$$j_e = i \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial y} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial y} \right). \quad (14)$$

Например, для первого граничного условия, когда электрон падает слева со спином вверх, выражение для матричного элемента тока имеет вид

$$j_{eL}^{\uparrow} = 2 \left(1 - k_1^{\uparrow} \left| B_{L1}^{\uparrow\uparrow} \right|^2 - k_1^{\downarrow} \left| B_{L1}^{\uparrow\downarrow} \right|^2 \right). \quad (15)$$

Спиновый торк, действующий со стороны s -электронов на d -электроны, пропорционален векторному произведению локальной намагниченности $\mathbf{S}$ на локальную спиновую плотность $\mathbf{s}$, которая может быть найдена как матричный элемент матриц Паули:

$$\mathbf{s} = \frac{1}{2} (\psi^* | \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \psi).$$

Поскольку в первом ФМ-электроде локальная намагниченность направлена вдоль оси z ($\mathbf{S} = \{0, 0, 1\}$), векторное произведение векторов $\mathbf{S}$ и $\mathbf{s}$ будет зависеть только от x - и y -компонент спиновой плотности ($[\mathbf{S} \times \mathbf{s}] = \{-s_y, s_x, 0\}$). Удобно ввести комплексную величину спиновой плотности $s_{xy} = s_x + i s_y$, где действительная часть соответствует ее x -компоненте, а мнимая — y -компоненте. В этом случае две компоненты векторного произведения (перпендикулярная и параллельная плоскости xz) также выражаются в виде комплексного числа как $i s_{xy}$. Например, в случае первого граничного условия, когда электрон падает слева со спином вверх, комплексная спиновая плотность в левом ФМ-электроде имеет вид

$$s_{Lxy}^{\uparrow} = s_{Lx}^{\uparrow} + i s_{Ly}^{\uparrow} = B_{L1}^{\uparrow\downarrow} \left(B_{L1}^{\uparrow\uparrow*} \exp \left[i(k_1^{\uparrow} - k_1^{\downarrow})y \right] + \exp \left[-i(k_1^{\uparrow} + k_1^{\downarrow})y \right] / \sqrt{k_1^{\uparrow}} \right). \quad (16)$$

Если найти и сложить значения спиновой плотности для всех четырех граничных условий, то распределение полного спинового торка $\mathbf{T}$ можно получить, проинтегрировав эту сумму в заданных пределах (13):

$$\begin{aligned} \mathbf{T}(y) &= \frac{J_{sd}}{\mu_B} \frac{a_0^3}{(2\pi)^2} \frac{2m}{\hbar^2} \int [\mathbf{S} \times \mathbf{s}] \kappa d\kappa dE, \\ T_{xy}(y) &= \frac{J_{sd}}{\mu_B} \frac{a_0^3}{(2\pi)^2} \frac{2m}{\hbar^2} \int i s_{xy} \kappa d\kappa dE, \end{aligned} \quad (17)$$

где a_0 — постоянная решетки материала ФМ-электрода, μ_B — магнетон Бора и $T_{xy} = T_{\parallel} + i T_{\perp}$ — комплексное представление x - и y -компонент вектора $\mathbf{T}$. Для интегрирования уравнения Ландау – Лифшица необходимо знать среднее значение спинового торка, неоднородно распределенного в свободном слое. Для его нахождения необходимо проинтегрировать полученное распределение (17) по всей длине свободного слоя и поделить на его толщину.

Компоненты спинового тока определяются подобно тому, как это было сделано для электрического тока (14), и его матричные элементы имеют вид [25]

$$\mathbf{j}_s = \frac{i}{2} \left(\psi \hat{\boldsymbol{\sigma}} \frac{\partial \psi^*}{\partial y} - \psi^* \hat{\boldsymbol{\sigma}} \frac{\partial \psi}{\partial y} \right). \quad (18)$$

Вычислив матричный элемент (18) для всех четырех граничных условий и проинтегрировав его по κ и eV в определенных пределах (13), можно получить полный спиновый ток в точке y :

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_s(y) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int \mathbf{j}_s \kappa d\kappa dE, \\ J_{s\,xy}(y) &= J_{s\parallel} + iJ_{s\perp} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int (j_{s\parallel} + ij_{s\perp}) \kappa d\kappa dE, \end{aligned} \quad (19)$$

где $J_{s\,xy}$ — комплексное представление x - и y -компонент вектора J_s . Например, для первого граничного условия комплексная величина спинового тока имеет вид

$$\begin{aligned} j_{L\,s\,xy}^\uparrow &= j_{L\,s\parallel}^\uparrow + ij_{L\perp}^\uparrow = \\ &= B_{L1}^{\uparrow\downarrow} \left[- (k_1^\uparrow + k_1^\downarrow) B_{L1}^{\uparrow\uparrow*} \exp[i(k_1^\uparrow - k_1^\downarrow)y] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{k_1^\uparrow - k_1^\downarrow}{\sqrt{k_1^\uparrow}} \exp[-i(k_1^\uparrow + k_1^\downarrow)y] \right]. \end{aligned} \quad (20)$$

Можно заметить, что производная по y выражения (20) совпадает с комплексной спиновой плотностью $s_{L\,xy}^\uparrow$ (16) с точностью до коэффициента $-i(k_1^{\uparrow 2} - k_1^{\downarrow 2})$. Нетрудно показать, что это равенство выполняется для всех четырех граничных условий. Тогда, учитывая, что $k_1^{\uparrow 2} - k_1^{\downarrow 2} = 4mJ_{sd}/\hbar^2$ и $[\mathbf{S} \times \mathbf{s}] = is_{xy}$, можно записать равенство

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_y \mathbf{j}_s = 2J_{sd}[\mathbf{S} \times \mathbf{s}]. \quad (21)$$

Выражение (21) было впервые получено в работе Эдвардса [26], а также подтверждено позже в приближении сильной связи [27]. Если ФМ-электрод имеет конечную толщину t , то среднее значение торка в левом ФМ-электроде с учетом выражений (17), (19) и (21) имеет вид

$$\begin{aligned} \langle T \rangle_t &= \frac{1}{t} \int_{-\infty}^0 \mathbf{T}(y) dy = \\ &= -\frac{a_0^3}{\mu_B} \frac{1}{t} \int_{-\infty}^0 \nabla_y \mathbf{J}_s(y) dy = -\frac{a_0^3}{\mu_B} \frac{J_s(0)}{t}, \\ \langle T_{xy} \rangle &= \langle T_{\parallel} \rangle + i \langle T_{\perp} \rangle = -\frac{a_0^3}{\mu_B} \frac{J_{s\,xy}(0)}{t}. \end{aligned} \quad (22)$$

Из этого следует, что значение спинового тока на интерфейсе ферромагнетик/изолятор будет соответствовать среднему значению спинового торка в данном ФМ-электроде.

3. ДИНАМИКА НАМАГНИЧЕННОСТИ СВОБОДНОГО СЛОЯ

Динамику намагниченности свободного слоя МТП-структуры в однодоменном приближении под действием спин-поляризованного тока можно описать уравнением Ландау–Лифшица с дополнительными слагаемыми [11]:

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = -\gamma [\mathbf{m} \times \mu_0 \mathbf{H}_{eff}] + \alpha \left[\mathbf{m} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt} \right] - \gamma \mathbf{T}, \quad (23)$$

где $\mathbf{m}$ — единичный вектор, направленный вдоль намагниченности свободного слоя, γ — гиромагнитное отношение для s -электронов, α — фактор затухания Гильберта, $\mathbf{H}_{eff}$ и $\mathbf{T}$ — эффективное поле и средний спиновый торк (22), действующие на свободный слой. Эффективное поле $\mathbf{H}_{eff}$ выражается через вариацию свободной энергии свободного слоя F по намагниченности: $\mathbf{H}_{eff} = -\delta F/\delta \mathbf{M}$. В нашей модели свободная энергия состоит из трех слагаемых: энергии одноосной магнитной анизотропии, энергии Зеемана и энергии размагничивающего поля:

$$\begin{aligned} F &= -K_u(\mathbf{u}_K \cdot \mathbf{m})^2 - \mu_0 M_s \mathbf{H}_{ext} \cdot \mathbf{m} + \\ &\quad + \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2 (N_x m_x^2 + N_y m_y^2 + N_z m_z^2), \end{aligned} \quad (24)$$

где K_u — константа одноосной магнитной анизотропии, $\mathbf{u}_K$ — единичный вектор, направленный вдоль оси легкого намагничивания, M_s — намагниченность насыщения свободного слоя, $\mathbf{H}_{ext}$ — напряженность внешнего магнитного поля, $N_{x,y,z}$ — диагональные компоненты тензора размагничивающего фактора. Следовательно, эффективное поле в случае МТП-структуры с перпендикулярной магнитной анизотропией можно записать в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{eff} &= \left(0, 0, \frac{2K_u}{\mu_0 M_s} m_z \right) + (H_x, H_y, H_z) - \\ &\quad - M_s (N_x m_x, N_y m_y, N_z m_z). \end{aligned} \quad (25)$$

Средний спиновый торк (22) можно разделить на две компоненты — параллельную плоскости векторов намагниченности свободного и опорного слоев, $\mathbf{T}_{\parallel}$, и перпендикулярную ей, $\mathbf{T}_{\perp}$ (1). Если ввести единичный вектор поляризации $\mathbf{p}$, направленный вдоль намагниченности опорного слоя, и учесть, что спиновый торк зависит только от угла θ между векторами $\mathbf{m}$ и $\mathbf{p}$, то можно легко показать, что выполняются соотношения [26]

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{\parallel} &= a_{\parallel} \mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{p}] = \frac{\langle \mathbf{T}_{\parallel} \rangle}{\sin \theta} \mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{p}], \\ \mathbf{T}_{\perp} &= b_{\perp} \mathbf{m} \times \mathbf{p} = \frac{\langle \mathbf{T}_{\perp} \rangle}{\sin \theta} \mathbf{m} \times \mathbf{p}. \end{aligned} \quad (26)$$

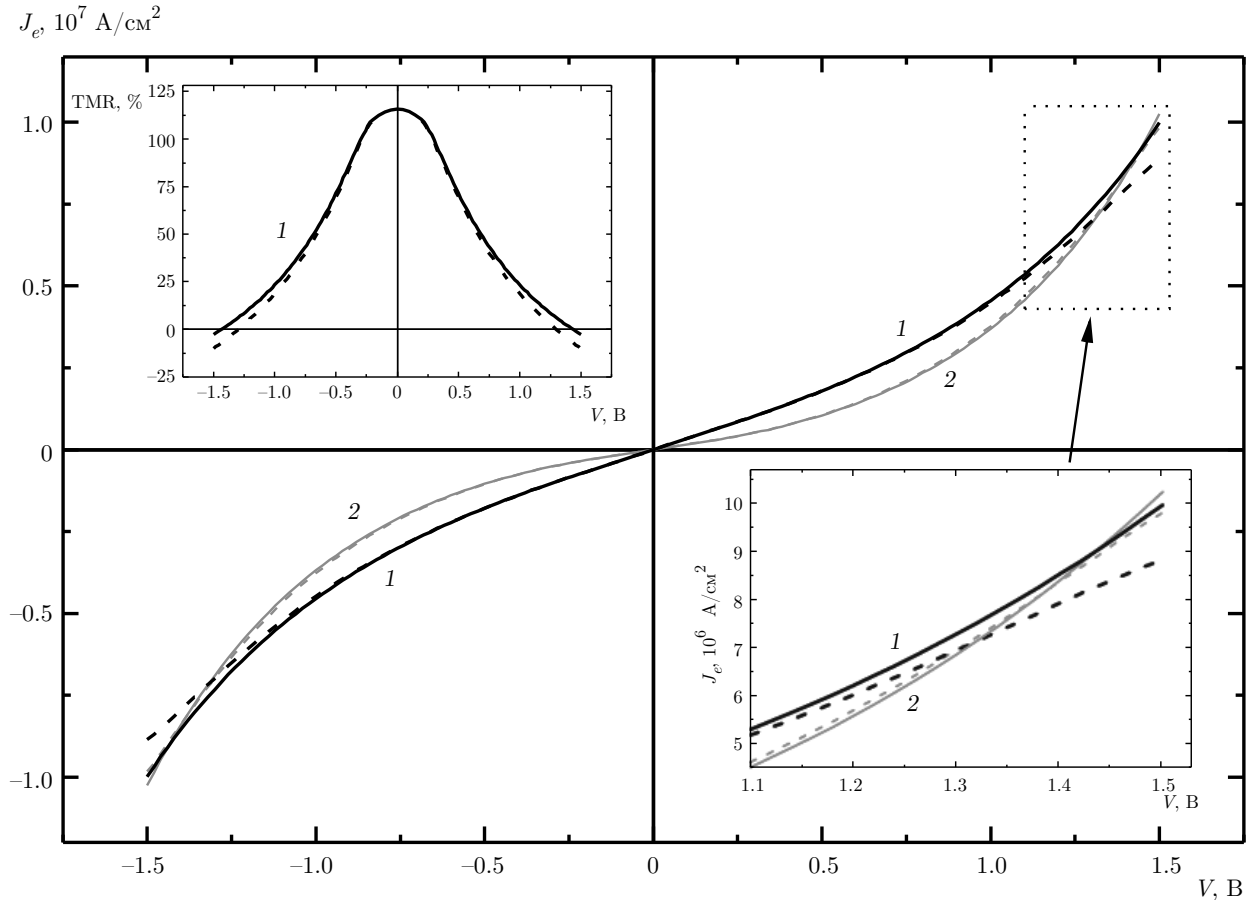


Рис. 2. (В цвете онлайн) Зависимости электрического тока через МТП-структуру от напряжения в параллельной (Р, $\theta = 0$, черные линии 1) и антипараллельной (АР, $\theta = \pi$, красные линии 2) конфигурациях при точном решении (сплошные линии) и в ВКБ-приближении (штриховые линии). На вставке (слева сверху) изображена зависимость эффекта туннельного магнитосопротивления $\text{TMR} = (J_P - J_{AP})/J_P$ от напряжения. Параметры МТП-структуры: $d = 1.1$ нм, $U_0 = 3.23$ эВ, $E_F = 2.18$ эВ, $\Delta_1 = \Delta_3 = 1.96$ эВ

В приближении «толстого» барьера, когда $\exp \int_0^d Q(y) dy \gg 1$, где d — толщина барьера, а $Q(y)$ определяется выражением (11), средние значения компонент спиновых торков, $\mathbf{T}_{\parallel}$ и $\mathbf{T}_{\perp}$, пропорциональны $\sin \theta$ [14], поэтому параметры $a_{\parallel}$ и $b_{\perp}$ не зависят от угла θ в этом случае.

Если записать уравнение Ландау–Лифшица (23) с эффективным полем (25) и дополнительными слагаемыми для спиновых торков (26) в сферических координатах с учетом симметрии системы в плоскости xy ($N_x = N_y$), направлений поляризации тока и внешнего магнитного поля вдоль оси z ($p_x = p_y = 0$, $H_x = H_y = 0$) и постоянства модуля $|\mathbf{m}| = \sqrt{m_x^2 + m_y^2 + m_z^2} = 1$, то получим

$$\begin{aligned} \dot{\theta} &= -\frac{\gamma \sin \theta}{1 + \alpha^2} \left[a_{\parallel} p_z + \alpha \left(H_z + b_{\perp} p_z + \left(\frac{2K_u}{\mu_0 M_s} - M_s(N_z - N_x) \right) \cos \theta \right) \right], \\ \dot{\varphi} &= \frac{\gamma}{1 + \alpha^2} \left[b_{\perp} p_z + H_z - \alpha a_{\parallel} p_z + \left(\frac{2K_u}{\mu_0 M_s} - M_s(N_z - N_x) \right) \cos \theta \right]. \end{aligned} \quad (27)$$

4. РЕЗУЛЬТАТЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ СПИН-ЗАВИСИМОГО ТРАНСПОРТА

Для того чтобы численно проинтегрировать уравнения (27) с использованием компонент спиновых торков $a_{\parallel}$ и $b_{\perp}$, полученных путем решения описанной выше задачи спин-зависимого транспорта, необходимо сначала вычислить зависимость

комплексного спинного тока J_{sxy} (19) на интерфейсе ФМ-электрод/изолятор от напряжения V и угла θ , подставить его в выражение (22) и найти среднее значение комплексного спинного торка $\langle T_{xy} \rangle$. Затем необходимо определить функции $a_{\parallel}(V, \theta)$ и $b_{\perp}(V, \theta)$ из выражений (26), которые будут подставлены в уравнения (27) для интегрирования.

На рис. 2 показаны зависимости туннельных токов при параллельной (черные линии 1) и антипараллельной (красные линии 2) ориентациях намагниченностей ФМ-электродов от приложенного напряжения. Параметры МТП-структуры были выбраны близкими к параметрам структуры CoFe/MgO/CoFe исходя из данных зонных расчетов [28,29] и экспериментальных данных [30,31]. Расчет был проведен с использованием как точной волновой функции в барьере (8) (сплошные линии), так и приближенной (10) (штриховые линии). Как видно на графиках, ВКБ-приближение начинает расходиться с точным решением при высоких напряжениях, когда значение $E_F + |eV|$ близко к U_0 . Это хорошо видно на зависимости эффекта ТМС от напряжения: при $V = 1.4$ В значения различаются на 20 %.

На рис. 3 изображено распределение двух компонент спинного торка по левому ФМ-электроду, рассчитанных по формуле (17) при угле $\theta = \pi/2$ (максимальное значение торка) и приложенном напряжении $V = 1.5$ В. Торк осциллирует с частотой $k_1^{\uparrow} - k_1^{\downarrow}$, зависящей от напряжения, и затухает, удаляясь от интерфейса [12, 14]. На расстоянии $t = 1.6$ нм от интерфейса, соответствующем обычной толщине свободного слоя МТП-структуры, торк затухает незначительно. Используя одномоменное приближение, можно считать, что средний торк $\langle T_{xy} \rangle$ равномерно распределен по всей длине свободного слоя, и можно не учитывать его зависимость от координаты y .

Компоненты полного спинного торка, рассчитанные по формуле (22) в зависимости от приложенного напряжения, представлены на рис. 4. Сплошные черные линии соответствуют точному решению, а штриховые — решению в ВКБ-приближении. Полученные зависимости аппроксимируются полиномом второй степени, согласно выражению (1). Точное решение для перпендикулярной компоненты $\langle T_{\perp} \rangle$ при $\theta = \pi/2$ в заданном интервале напряжений практически совпадает с полиномом $b_0 + b_1V + b_2V^2$, где $b_0 = -7.9$ Э (-0.79 мТл), $b_2 = -16.4$ Э/В² (-1.64 мТл/В²), а b_1 стремится к нулю, что характерно для симметричной ($\Delta_1 = \Delta_3$) МТП-структуры [14]. Решение в ВКБ-приближении

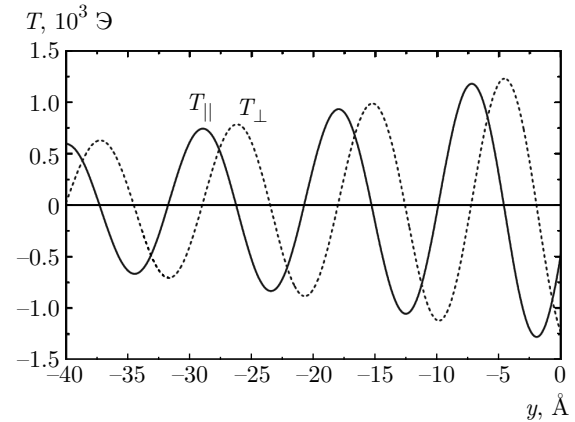


Рис. 3. Распределения параллельной $T_{\parallel}$ и перпендикулярной $T_{\perp}$ компонент спинного торка в левом ФМ-электроду при точном решении. Параметры МТП-структуры такие же, как и на рис. 2. Угол поворота намагниченности в правом ФМ-электроду равен $\theta = \pi/2$ (максимальный торк), приложенное напряжение $V = 1.5$ В

значительно расходится с точным решением при $V > 0.5$ В. Для параллельной компоненты $\langle T_{\parallel} \rangle$, наоборот, приближенное решение хорошо аппроксимируется полиномом $a_1V + a_2V^2$, где $a_1 = -19.8$ Э/В (-1.98 мТл/В), $a_2 = -16.6$ Э/В² (-1.66 мТл/В²) и довольно сильно отличается от точного решения как для положительных, так и для отрицательных напряжений $|V| > 0.5$ В.

Поскольку выбранная толщина барьера $d = 1.1$ нм попадает под приближение «толстого» барьера, функции $a_{\parallel}$ и $b_{\perp}$ зависят только от напряжения и равны соответственно действительной и мнимой частям $\langle T_{xy} \rangle$, рассчитанным при $\theta = \pi/2$. Следовательно, можно использовать полученные на рис. 4 зависимости, чтобы на их основе построить численные интерполяционные функции, которые будут использоваться для расчета слагаемых спинного торка (26) при интегрировании уравнения Ландау–Лифшица (23).

5. ПОСТРОЕНИЕ ДИАГРАММ СТАБИЛЬНОСТИ

Диаметр свободного слоя обычно лежит в интервале 80–200 нм. Для цилиндрического объекта диаметром $D \approx 100$ нм и толщиной $t = 1.6$ нм диагональные элементы тензора размагничивающего фактора равны $N_x = N_y = 0.025$, $N_z = 0.95$ [32]. Намагниченность насыщения CoFeВ при комнатной температуре $M_s = 1.3$ Тл $\approx 10^6$ А/м [33]. Константа перпендикулярной одноосной анизотропии для сво-

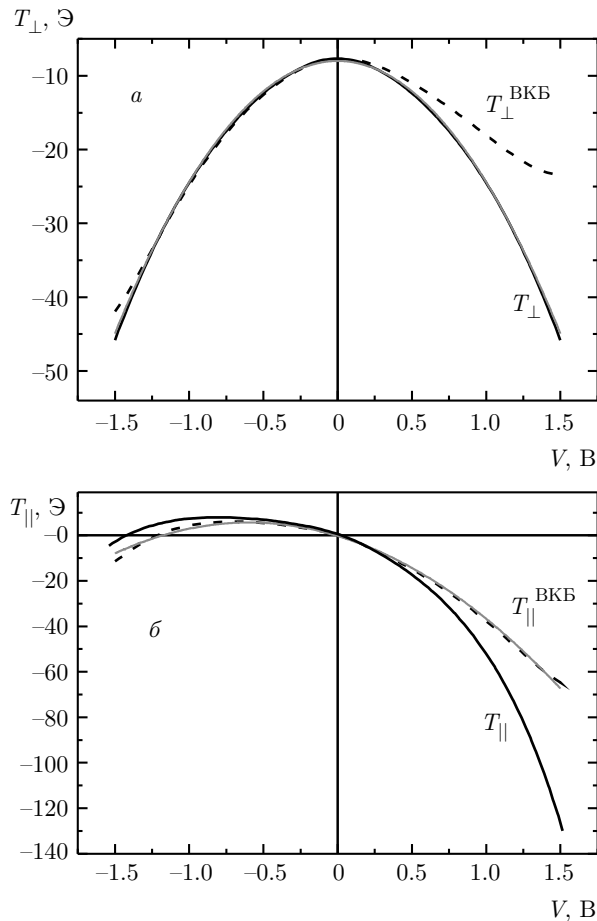


Рис. 4. (В цвете онлайн) Зависимости перпендикулярной (а) и параллельной (б) компонент полного спинового торка в свободном слое (левом ФМ-электроде) при точном решении (сплошные линии) в ВКБ-приближении (штриховые линии). Параметры МТП-структуры такие же, как и на рис. 2. Угол поворота намагниченности в правом ФМ-электроде $\theta = \pi/2$ (максимальный торк), толщина свободного слоя $t = 1.6$ нм. Тонкими красными линиями обозначены аппроксимации зависимостей полиномами второй степени, согласно выражению (1)

бодного слоя данной толщины при комнатной температуре составляет $K_u = 6 \cdot 10^5$ Дж/м³ [33]. Фактор затухания Гильберта для свободного слоя подобных МТП-структур равен $\alpha = 0.008$ [34]. Вектор поляризации опорного слоя выбран в направлении, противоположном оси z ($p_z = -1$).

Подставляя указанные параметры в систему дифференциальных уравнений (27) и задавая начальные условия для углов θ и φ , можно найти ориентацию намагниченности $\mathbf{m}$ свободного слоя в любой момент времени. Для построения диаграммы стабильности МТП-структуры мы численно повто-

ряем экспериментальную процедуру, которая напоминает измерение петли гистерезиса и часто применяется для ее получения [20, 21]. Начальное направление намагниченности $\mathbf{m}$ выбирается с отклонением в 1° от направления начального магнитного поля, чтобы создать ненулевой торк в начальный момент времени. Для заданного напряжения внешнее магнитное поле H_z изменяется от минимального значения -1100 Э до максимального 1100 Э с шагом примерно 20 Э. Напряжение плавно возрастает в течение 0.5 нс до заданного значения. Записывающий импульс напряжения длится 100 нс, после чего также плавно убывает до нуля в течение 0.5 нс. В каждой точке системы уравнений (27) интегрируется в течение 1 мкс, затем значения получившихся углов θ и φ сохраняются, чтобы использовать их в дальнейшем в качестве начальных условий для следующего шага. После достижения максимального значения поля описанная процедура повторяется в обратном направлении — магнитное поле меняется от максимального до минимального значения. После этого направление намагниченности $\mathbf{m}$ усредняется в каждой точке магнитного поля по двум значениям для прямого и обратного ходов процесса.

На рис. 5 представлены рассчитанные диаграммы стабильности МТП-структуры, изображенной на рис. 1, где цветом обозначено среднее значение z -компоненты единичного вектора намагниченности $\mathbf{m}$ свободного слоя. На диаграммах выделяются три области: с параллельной ориентацией намагниченности свободного и опорного слоев (Р) с минимальным сопротивлением, с антипараллельной ориентацией (АР) с максимальным сопротивлением и смешанная область (Р/АР), где могут существовать оба предыдущих состояния.

На рис. 5а для сравнения представлена диаграмма с одной параллельной компонентой спинового торка $a_{||}$, линейной по напряжению. Ее форма хорошо известна и изучена [20]. Две горизонтальные параллельные границы соответствуют переключению МТП-структуры из Р-конфигурации в АР-конфигурацию и наоборот за счет эффекта спинового торка, а две вертикальные соответствуют переключению за счет внешнего магнитного поля.

Диаграммы, использующие результат решения задачи спин-зависимого транспорта в МТП-структуре, изображенной на рис. 1, при точном и приближенном решениях представлены соответственно на рис. 5б и 5в. При отрицательных напряжениях граница перехода из состояния Р в состояние АР перестает быть параллельной границе перехода АР–Р при положительном напряжении из-за квадратич-

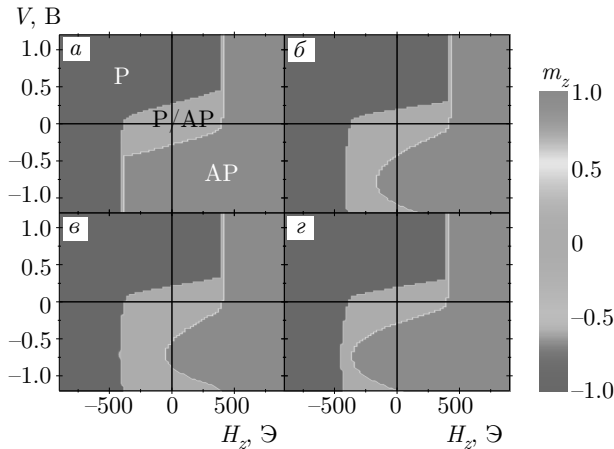


Рис. 5. (В цвете онлайн): $T_{\perp} = -7.9 - 16.4V^2$ (а), $T_{\parallel} = -19.8V - 16.6V^2$ (б). Диаграммы стабильности свободного слоя МТП-структуры, показывающие области с параллельной ориентацией Р (минимальное сопротивление), антипараллельной ориентацией АР (максимальное сопротивление) и смешанные области Р/АР, где оба состояния допустимы. Диаграммы рассчитаны а) при нулевой перпендикулярной компоненте $b_{\perp} = 0$ и линейной по напряжению параллельной компоненте $a_{\parallel} [\text{Э}] = -19.8V$; б) при точном решении для обеих компонент торков, изображенных на рис. 4 (сплошная черная линия); в) при приближенном решении для обеих компонент торков, изображенных на рис. 4 (штриховая черная линия); г) при $b_{\perp} = 0$ и увеличенной линейной компоненте параллельного торка $a_{\parallel} [\text{Э}] = -24.0V - 16.6V^2$. Параметры свободного слоя: $N_x = N_y = 0.025$, $N_z = 0.95$, $M_s = 10^6$ А/м, $K_u = 6 \cdot 10^5$ Дж/м³, $\alpha = 0.008$

ной зависимости параллельной компоненты спинового торка, изображенного на рис. 4б. Граница перехода Р–АР не достигает границы АР–Р при отрицательном напряжении, так как спиновый торк уменьшается, пройдя максимум при $V \approx 0.6$ В. Диаграмма, использующая приближенное решение для спинового торка на рис. 5в, практически совпадает с диаграммой на рис. 5б при положительных напряжениях, однако смешанная область значительно увеличена при $V < 0$ из-за меньшего значения параллельного торка в ВКБ-приближении. Абсолютное значение напряжения переключения при $H_z = 0$ становится различным для АР–Р- и Р–АР-переходов. Подобная асимметрия наблюдается и в эксперименте [35]. При увеличении линейной компоненты в $a_{\parallel}$ при фиксированной квадратичной компоненте данная асимметрия диаграммы уменьшается, так как в этом случае при небольших напряжениях функция $a_{\parallel}(V)$ достаточно хорошо аппроксимируется линейной функцией.

6. ВЫВОДЫ

В представленной работе проведено точное решение задачи спин-зависимого электронного транспорта в МТП-структуре в приближении свободных электронов и проведено сравнение результатов с решением в ВКБ-приближении. Показано, что при высоких напряжениях ($E_F + |eV| \sim U_0$) эти решения значительно расходятся. Поэтому важно использовать точное решение, если предполагаемое рабочее напряжение, для которого делается оценка параметров МТП-структуры, попадает под данное условие. Также были построены диаграммы стабильности МТП-структуры, использующие вместо феноменологических параметров спинового транспорта результаты решения описанной выше задачи. Такие диаграммы асимметричны по отношению к полярности приложенного напряжения, что было показано ранее в экспериментальных работах. Асимметрия пропадает, если линейная составляющая $a_{\parallel}$ параллельного торка преобладает над квадратичной компонентой, что характерно для металлов с большим обменным расщеплением.

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Ikeda, K. Miura, H. Yamamoto et al., *Nature Mater.* **9**, 721 (2010).
2. H. Yoda, T. Kishi, T. Nagase et al., *Current Appl. Phys.* **10**, e87 (2010).
3. J. C. Slonczewski, J. Magn. Mater. **159**, L1 (1996).
4. L. Berger, *Phys. Rev. B* **54**, 9353 (1996).
5. N. Tezuka, S. Oikawa, I. Abe et al., *IEEE Magn. Lett.* **7**, 1 (2016).
6. M. Wang, W. Cai, K. Cao et al., *Nature Comm.* **9**, 671 (2018).
7. H. Sato, E. C. I. Enobio, M. Yamanouchi et al., *Appl. Phys. Lett.* **105**, 062403 (2014).
8. S.-E. Lee, Y. Takemura, and J.-G. Park, *Appl. Phys. Lett.* **109**, 182405 (2016).
9. D. C. Worledge, G. Hu, D. W. Abraham et al., *Appl. Phys. Lett.* **98**, 022501 (2011).
10. L. Landau and E. Lifshits, *Phys. Z. der Sowjetunion* **169**, 14 (1935).
11. А. К. Звездин, К. А. Звездин, А. В. Хвальковский, *УФН* **178**, 436 (2008).

12. A. Manchon, N. Ryzhanova, A. Vedyayev et al., J. Phys.: Condens. Matter. **20**, 145208 (2008).
13. А. В. Ведяев, О. А. Котельникова, Л. Ю. Лысцева и др., ТМФ **168**, 428 (2011).
14. M. Chshiev, A. Manchon, A. Kalitsov et al., Phys. Rev. B **92**, 104422 (2015).
15. I. Theodonis, N. Kioussis, A. Kalitsov et al., Phys. Rev. Lett. **97**, 237205 (2006).
16. M. Chshiev, I. Theodonis, A. Kalitsov et al., IEEE Trans. Magn. **44**, 2543 (2008).
17. A. Kalitsov, M. Chshiev, I. Theodonis et al., Phys. Rev. B **79**, 174416 (2009).
18. K. Bernert, V. Sluka, C. Fowley et al., Phys. Rev. B **89**, 134415 (2014).
19. W. Skowroński, M. Czapkiewicz, S. Ziętek et al., Sci. Rep. **7**, 10172 (2017).
20. A. A. Timopheev, R. Sousa, M. Chshiev et al., Phys. Rev. B **92**, 104430 (2015).
21. N. Strelkov, A. Timopheev, R. C. Sousa et al., Phys. Rev. B **95**, 184409 (2017).
22. A. Manchon, N. Ryzhanova, N. Strelkov et al., J. Phys.: Condens. Matter. **19**, 165212 (2007).
23. A. M. Bratkovsky, Phys. Rev. B **56**, 2344 (1997).
24. R. Landauer, IBM J. Res. Dev. **1**, 223 (1957).
25. M. D. Stiles and A. Zangwill, Phys. Rev. B **66**, 014407 (2002).
26. D. M. Edwards, F. Federici, J. Mathon, and A. Umerski, Phys. Rev. B **71**, 054407 (2005).
27. A. Kalitsov, I. Theodonis, N. Kioussis et al., J. Appl. Phys. **99**, 08G501 (2006).
28. M. B. Stearns, J. Magn. Magn. Mater. **5**, 167 (1977).
29. W. H. Butler, X.-G. Zhang, T. C. Schulthess, and J. M. MacLaren, Phys. Rev. B **63**, 54416 (2001).
30. S. S. P. Parkin, C. Kaiser, A. Panchula et al., Nature Mater. **3**, 862 (2004).
31. J. M. Teixeira, J. Ventura, J. P. Araujo et al., Phys. Rev. B **81**, 134423 (2010).
32. A. Aharoni, J. Appl. Phys. **83**, 3432 (1998).
33. H. Sato, P. Chureemart, F. Matsukura et al., Phys. Rev. B **98**, 214428 (2018).
34. T. Devolder, J. Kim, J. Swerts et al., IEEE Trans. Magn. **54**, 1 (2018).
35. N. Strelkov, A. Chavent, A. Timopheev et al., Phys. Rev. B **98**, 214410 (2018).