ЖЭТФ, 2019, том 156, вып. 2 (8), стр. 338–347

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. Чшиев* [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-зависящего 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:

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

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-приближения, 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]

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

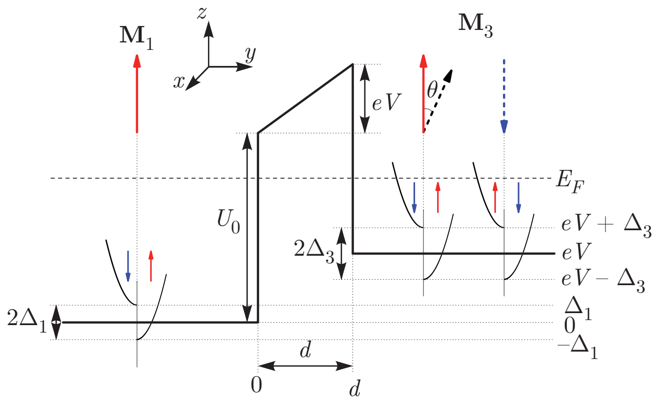

Рис. 1. Потенциальный профиль МТП-структуры $U(y)$. Справа обозначены уровни энергии для электронов с направлением спина «вверх» и «вниз». Через Δ_1 и Δ_3 обозначены обменные интегралы J_{sd} в левой (область 1) и правой (область 3) областях, θ — угол между намагниченностями в левом ($\mathbf{M}_1$) и правом ($\mathbf{M}_3$) 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, $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ — 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

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

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 $k^\downarrow$,

$$k^{\uparrow(\downarrow)} = \sqrt{k_0^2 \pm \frac{2m}{\hbar^2}J_{sd}}, \qquad k_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U(y)) - \kappa^2}, \quad (5)$$

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

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

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»:

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

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:

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

где q и q_v определяются выражениями

$$q(y) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(U_0 - E + \frac{eV}{d}y\right) + \kappa^2}, \qquad q_v = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\frac{eV}{d}\right)^{1/3}. \quad (9)$$

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

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

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

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

Легко убедиться, что в пределе $eV \to 0$ 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»: $A_{L1}^{\downarrow\uparrow} = 0$, $A_{L1}^{\downarrow\downarrow} = 1/\sqrt{k_1^{\downarrow}}$, $B_{L3}^{\downarrow\uparrow} = B_{L3}^{\downarrow\downarrow} = 0$.

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»: $A_{R1}^{\downarrow\uparrow} = A_{R1}^{\downarrow\downarrow} = 0$, $B_{R3}^{\downarrow\uparrow} = 0$, $B_{R3}^{\downarrow\downarrow} = 1/\sqrt{k_3^{\downarrow}}$.

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

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

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

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

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

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

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

$$j_{e\,L}^{\uparrow} = 2\left(1 - k_1^{\uparrow}\left|B_{L1}^{\uparrow\uparrow}\right|^2 - k_1^{\downarrow}\left|B_{L1}^{\uparrow\downarrow}\right|^2\right). \tag{15}$$

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 $s_{xy} = s_x + is_y$, 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 is_{xy}. Например, в случае первого граничного условия, когда электрон падает слева со спином вверх, комплексная спиновая плотность в левом ФМ-электроде имеет вид

$$s_{L\,xy}^{\uparrow} = s_{L\,x}^{\uparrow} + is_{L\,y}^{\uparrow} = B_{L1}^{\uparrow\downarrow}\left(B_{L1}^{\uparrow\uparrow *}\exp\left[i(k_1^{\uparrow} - k_1^{\downarrow})y\right] + \right.$$
$$\left. + \exp\left[-i(k_1^{\uparrow} + k_1^{\downarrow})y\right]/\sqrt{k_1^{\uparrow}}\right). \tag{16}$$

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):

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

где a_0 — постоянная решетки материала ФМ-электрода, μ_B — магнетон Бора и $T_{xy} = T_{\parallel} + iT_{\perp}$ — 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]

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

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:

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

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

$$j^{\uparrow}_{L\,s\,xy} = j^{\uparrow}_{L\,s\,\parallel} + ij^{\uparrow}_{L\,s\,\perp} = \\ = B^{\uparrow\downarrow}_{L1}\left[-(k^{\uparrow}_1 + k^{\downarrow}_1)B^{\uparrow\uparrow *}_{L1}\exp\left[i(k^{\uparrow}_1 - k^{\downarrow}_1)y\right] + \right.\\ \left. + \frac{k^{\uparrow}_1 - k^{\downarrow}_1}{\sqrt{k^{\uparrow}_1}}\exp\left[-i(k^{\uparrow}_1 + k^{\downarrow}_1)y\right]\right]. \tag{20}$$

Можно заметить, что производная по y выражения (20) совпадает с комплексной спиновой плотностью $s^{\uparrow}_{L\,xy}$ (16) с точностью до коэффициента $-i(k^{\uparrow 2}_1 - k^{\downarrow 2}_1)$. Нетрудно показать, что это равенство выполняется для всех четырех граничных условий. Тогда, учитывая, что $k^{\uparrow 2}_1 - k^{\downarrow 2}_1 = 4mJ_{sd}/\hbar^2$ и $[\mathbf{S}\times\mathbf{s}] = = is_{xy}$, можно записать равенство

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

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

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

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]:

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

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:

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

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

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

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]

$$\begin{gathered}\mathbf{T}_{\parallel} = a_{\parallel}\mathbf{m}\times[\mathbf{m}\times\mathbf{p}] = \frac{\langle\mathbf{T}_{\parallel}\rangle}{\sin\theta}\mathbf{m}\times[\mathbf{m}\times\mathbf{p}],\\ \mathbf{T}_{\perp} = b_{\perp}\mathbf{m}\times\mathbf{p} = \frac{\langle\mathbf{T}_{\perp}\rangle}{\sin\theta}\mathbf{m}\times\mathbf{p}.\end{gathered} \tag{26}$$

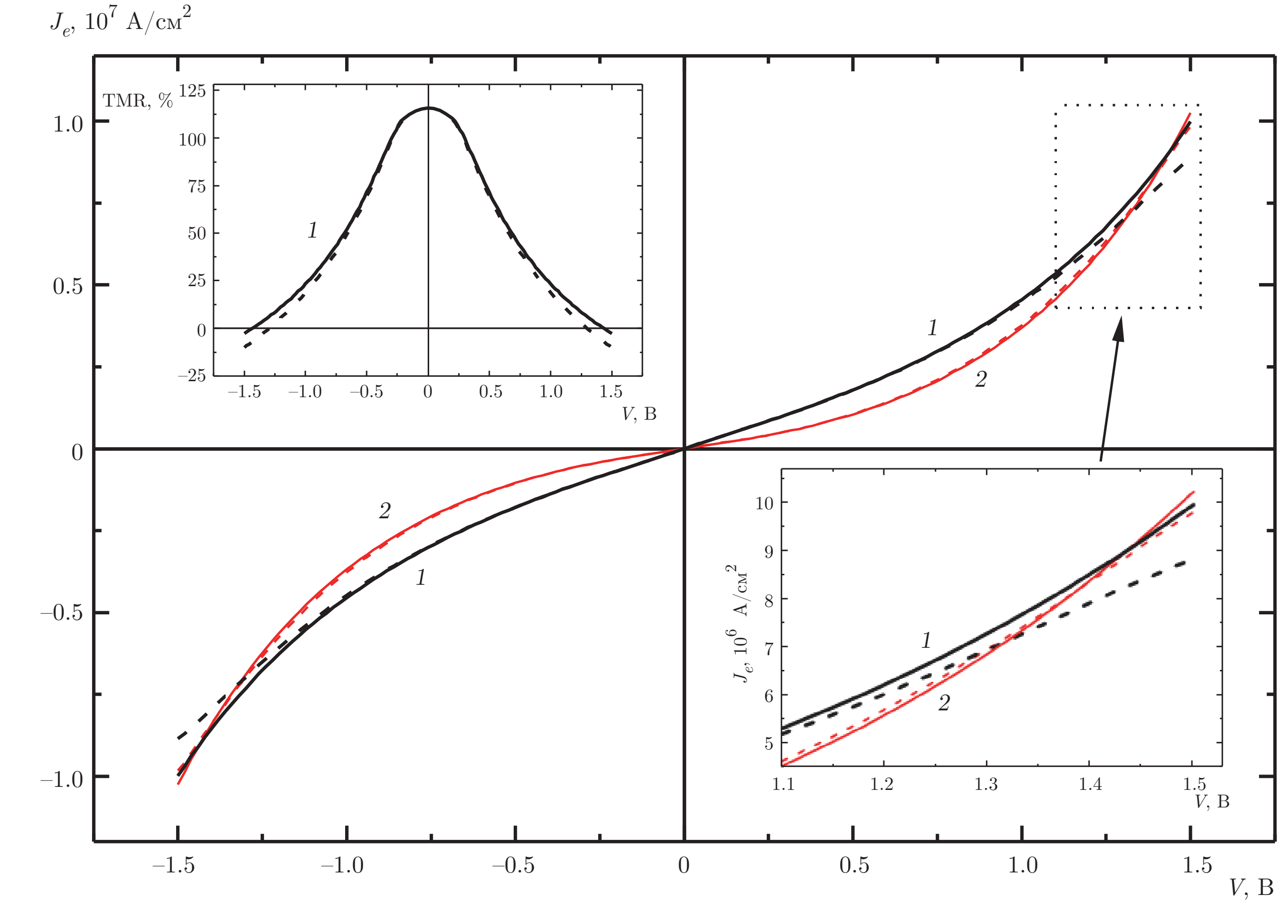

Рис. 2. (В цвете онлайн) Зависимости электрического тока через МТП-структуру от напряжения в параллельной (P, $\theta = 0$, черные линии *1*) и антипараллельной (AP, $\theta = \pi$, красные линии *2*) конфигурациях при точном решении (сплошные линии) и в ВКБ-приближении (штриховые линии). На вставке (слева вверху) изображена зависимость эффекта туннельного магнитосопротивления 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

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

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 спинового тока $J_{s\,xy}$ (19) на интерфейсе ФМ-электрод/изолятор от напряжения V и угла θ, подставить его в выражение (22) и найти среднее значение комплексного спинового торка $\langle T_{xy}\rangle$. Затем необходимо определить функции $a_\|(V,\theta)$ 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 спинового 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 однодоменное 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 спинового 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/В^2 (-1.64 мТл/В^2), а b_1 стремится к нулю, что характерно для симметричной ($\Delta_1 = \Delta_3$) МТП-структуры [14]. Решение в ВКБ-приближении

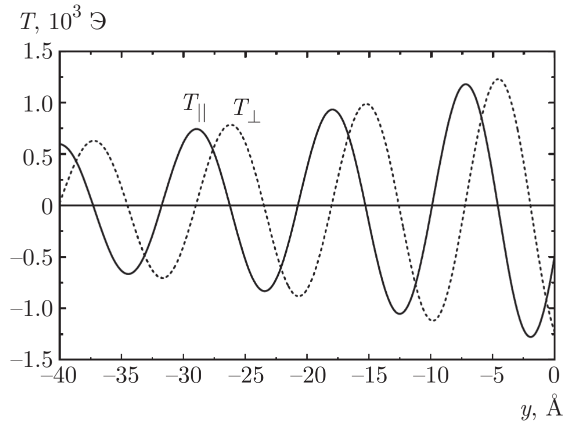

Рис. 3. Распределения параллельной $T_\|$ и перпендикулярной $T_\perp$ компонент спинового торка в левом ФМ-электроде при точном решении. Параметры МТП-структуры такие же, как и на рис. 2. Угол поворота намагниченности в правом ФМ-электроде равен $\theta = \pi/2$ (максимальный торк), приложенное напряжение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

значительно расходится с точным решением при $V > 0.5$ В. Для параллельной компоненты $\langle T_\|\rangle$, 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/В^2 (-1.66 мТл/В^2) 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 $a_\|$ 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 спинового 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 CoFeB при комнатной температуре $M_s = 1.3$ Тл $\approx 10^6$ А/м [33]. Константа перпендикулярной одноосной анизотропии для сво-

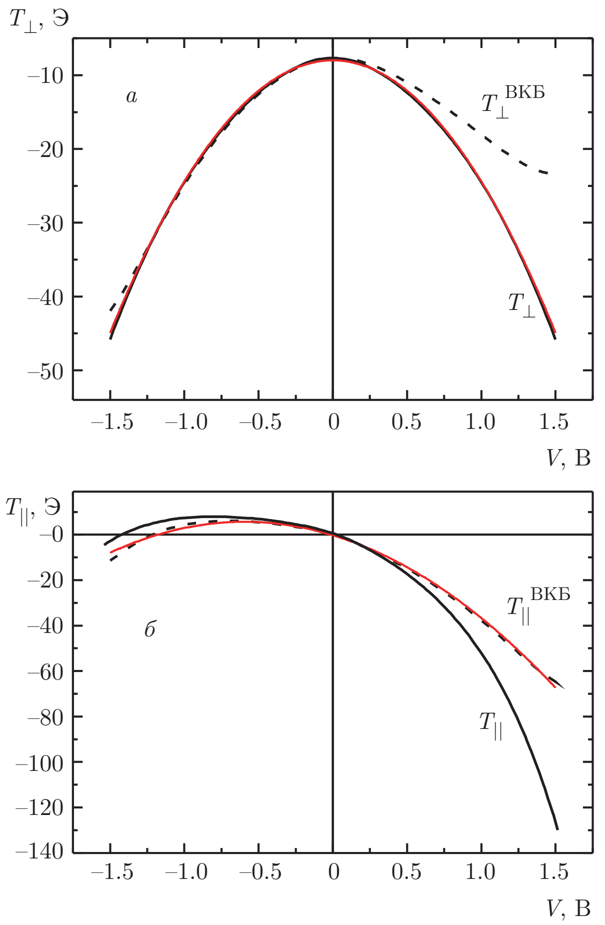

Рис. 4. (В цвете онлайн) Зависимости перпендикулярной (a) и параллельной ($б$) компонент полного спинового торка в свободном слое (левом ФМ-электроде) при точном решении (сплошные линии) в ВКБ-приближении (штриховые линии). Параметры МТП-структуры такие же, как и на рис. 2. Угол поворота намагниченности 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/м^3 [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 повторяем 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 система 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 (P) с минимальным сопротивлением, с антипараллельной ориентацией (AP) с максимальным сопротивлением и смешанная область (P/AP), где могут существовать оба предыдущих состояния.

На рис. 5a 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 P-конфигурации в AP-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. 5$б$ и 5$в$. При отрицательных напряжениях граница перехода из состояния P в состояние AP перестает быть параллельной границе перехода AP–P при положительном напряжении из-за квадратич-

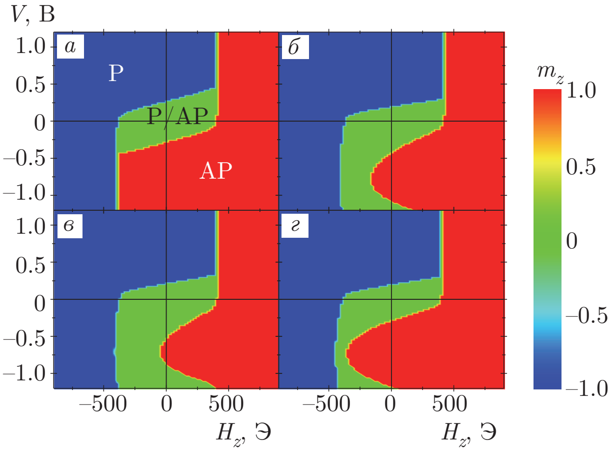

Рис. 5. (В цвете онлайн): $T_\perp = -7.9 - 16.4V^2$ (*а*), $T_\parallel = -19.8V - 16.6V^2$ (*б*). Диаграммы стабильности свободного слоя МТП-структуры, показывающие области с параллельной ориентацией P (минимальное сопротивление), антипараллельной ориентацией AP (максимальное сопротивление) и смешанные области P/AP, где оба состояния допустимы. Диаграммы рассчитаны *а*) при нулевой перпендикулярной компоненте $b_\perp = 0$ и линейной по напряжению параллельной компоненте $a_\parallel$ [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 $a_\parallel$ [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/м^3, $\alpha = 0.008$

ной зависимости параллельной компоненты спинового торка, изображенного на рис. 4*б*. Граница перехода P–AP не достигает границы AP–P 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. 5*в*, практически совпадает с диаграммой на рис. 5*б* 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 AP–P- и P–AP-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. 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).