

## ترابرد الکتریکی وابسته به اسپین در ساختارهای نامتجانس Fe-MgO-Fe

علی اصغر شکری و سمانه خباز

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه پیام نور، تهران

پست الکترونیکی: aashokri@pnu.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۳/۱۰/۱۳؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۴/۱۱/۵)

### چکیده

در این مقاله خواص ترابرد الکتریکی وابسته به اسپین را در ساختارهای نامتجانس مغناطیسی شامل دو الکتروند فرومغناطیس آهن جدا شده با یک لایه عایق مغناطیسی اکسید منیزیم بررسی می‌شود. این خواص شامل جریان الکتریکی، قطبش اسپینی و مقاومت مغناطیس تونل‌زنی می‌باشد. برای این منظور در راستای عمود بر فصل مشترک لایه‌ها، هامیلتونی وابسته به اسپین برای نوارهای تقارنی  $\Delta_1$  و  $\Delta_5$  تعیین می‌شود. با استفاده از رهیافت تابع گرین در چارچوب بستگی قوی، وابستگی خواص ترابرد الکتریکی به انرژی الکترون فرودی، ولتاژ اعمالی و ضخامت لایه سد به دست می‌آیند. نتایج مستخرج از محاسبات ممکن است در طراحی ادوات اسپینترونیکی مفید باشد.

واژه‌های کلیدی: اسپینترونیکی، مقاومت مغناطیسی تونل‌زنی، ترابرد الکتریکی، قطبش اسپینی

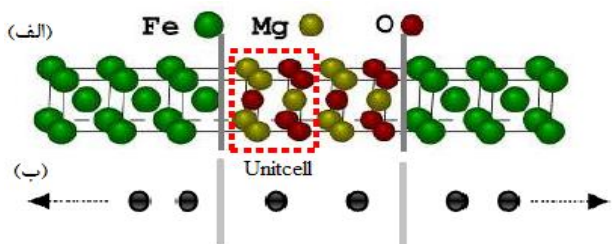
### ۱. مقدمه

بستگی دارد. این اثر با توجه به اثر مات (رفتار مستقل مولفه‌های اسپینی بالا و پایین فرومغناطیس) قابل توصیف است. TMR برای اولین بار در سال ۱۹۷۵ توسط جولیبیر کشف شد [۳]. TMR که وی در دمای اتاق برای اتصال تونلی Fe/GeO/Co اندازه گرفت کمتر از ۱٪ بود و در آن موقع توجه چندانی را به خود جلب نکرد. بعدها اول میازاکی در سال ۱۹۹۵ [۴] و سپس مودرا [۵] مقدار TMR به ترتیب برابر ۱۸٪ و ۱۱/۸٪، در دمای اتاق برای عایق آلومینای آمورف با الکتروندهای Co و CoFe اندازه گرفتند. با اعمال ولتاژ بین دو الکتروند فلزی در دو طرف سد پتانسیل عایق، الکترون‌ها می‌توانند از طریق آن تونل بزنند

ترابرد الکتریکی وابسته به اسپین (یا اسپینترونیکی) علم جدیدی است که به واسطه کاربرد آن در نانوحسگرها و حافظه‌های مغناطیسی<sup>۱</sup> (MRAM) کاربردهای فراوانی یافته است [۱ و ۲]. مقاومت مغناطیسی تونل‌زنی<sup>۲</sup> (TMR) یکی از خاصیت‌های اسپینی مهمی است که در ساختارهای لایه‌ای فرومغناطیس/عایق/فرومغناطیس رخ می‌دهد و در آن بزرگی مقاومت قطعه به آرایش موازی یا پادموازی مغناطش الکتروندها

۱. Magnetic Random Access Memory

۲. Tunneling Magnetoresistance



شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) ساختار شبه یک بعدی، هر یاخته واحد در ساختار منطبق بر یک نقطه شبکه در روش تنگ بست.

مرز محو می شوند و یا تقارن مشابه خود را درون سد پیدا نمی کنند، از این رو آنها را نوارهای ناپایدار<sup>۲</sup> می نامند. همچنین MgO به عنوان یک صافی متقارن عمل می کند، حالت هایی با تقارن ۱ احتمال عبور بیشتری نسبت به بقیه تقارن ها دارند، از این رو یکی از راه های تعبیه این صافی های تقارنی در یک صافی اسپین، این است که مواد سازگار با MgO که حالت های بلاخ متقارن ۱ دارند را شناسایی کنیم [۱۰-۱۳].

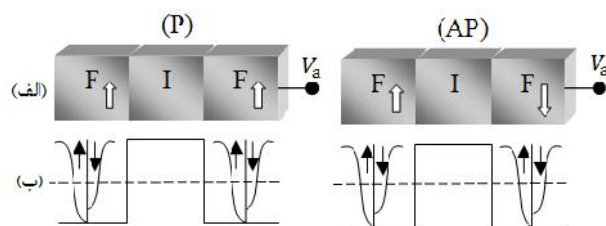
در این مقاله بعد از توضیح مختصر در مقدمه در مورد مقاومت مغناطیسی تونل زنی و اهمیت فصل مشترک لایه های آهن و اکسید منیزیم، در بخش دوم به معرفی مسئله و مدل مورد نظر می پردازیم. در بخش سوم نتایج محاسبات عددی توضیح داده می شود و در آخر به جمع بندی نتایج می پردازیم.

## ۲. تعریف مسئله و مدل بندی نظری آن

مطابق شکل ۲ (الف) فرض کنید که الکترون های قطبیده اسپینی، از الکتروود سمت چپ، به ساختار Fe-MgO-Fe، در حضور یک پتانسیل الکتریکی اعمالی  $V_a$  تزریق می شود. هامیلتونی ساختار اتصال تونل زنی مغناطیسی مورد نظر به صورت

$$H = \begin{bmatrix} H_L & H_{LC} & 0 \\ H_{CL} & H_C & H_{CR} \\ 0 & H_{RC} & H_R \end{bmatrix} \quad (1)$$

نوشته می شود که در آن C معرف عایق وسط، R و L به ترتیب الکتروود راست و چپ هستند. هریک از H ها خود یک ماتریس اند که ابعاد آنها متناسب با تعداد اتم هایی است که در



شکل ۱. (الف) طرحواره ساختار سه لایه ای یک MTJ شامل یک سد عایق که دو الکتروود مغناطیسی نیم بی نهایت را در دو پیکربندی مغناطیسی موازی (P) و پادموازی (AP) از هم جدا کرده است. (ب) نمودار نوار انرژی با روش هامیلتونی تک نوازی.

به طوری که جریان تونل زنی وابسته به راستای نسبی مغناطش دو لایه فرومغناطیس باشد. با فرض آن که از فرآیند چرخش-اسپینی صرف نظر شود حالت های موازی P و پادموازی AP به صورت شکل ۱ می توان نشان داد.

در بین لایه های سدهای عایق مختلفی که در ساختارهای تونل زنی مغناطیسی به کار می روند، لایه های اکسید منیزیم (MgO) به واسطه خواص متمایزشان از اهمیت خاصی برخوردارند [۷و۶]. لایه های MgO یک عایق بلوری است و چون قابلیت رشد بر روی الکتروودها با دمای کوری بالا را دارد به وسیله آن می توان به مقاومت مغناطیسی دست یافت که از نظر بزرگی برای کاربردهای صنعتی مناسب است. از طرفی دیگر، ویژگی های خاص لایه های آهن و اکسید منیزیم و همچنین قابلیت انطباق نوارهای انرژی آنها با یکدیگر در فصل مشترک، باعث شده است که ساختارهای نامتجانس آنها بیشتر مورد توجه قرار بگیرد. نوارهای انرژی در آهن و اکسید منیزیم به صورت ۱، ۲، ۳، ۴ و ۵ می باشند. نوارهای انرژی به این معنی است که آنها انرژی مجاز برای انتشار حالت های بلوخ را فراهم می کنند [۸ و ۹]. نوارهایی حائز اهمیت اند که در دو نوع اتم فوق مشابه باشند، تا در مرز پیوسته بوده و حین عمل تونل زنی، موج بتواند منتشر شود. از این بین تقارن های تابع موج برجسته خورده ۱ و ۵ با تقارن مربعی شبکه دو بعدی bcc در اتم های آهن و ساختار MgO، وقتی در راستای (۰۰۱) به آن نگاه می کنیم، سازگار است. این حالت ها منتشر شده نام دارند. بقیه نوارها در

تعریف می‌شود که با استفاده از آن مطابق رابطه

$$\mathcal{J}^{P(AP)} = \frac{e}{h} dE T^{P(AP)}(E)[f_R - f_L] \quad (6)$$

می‌توان چگالی جریان الکتریکی را در پیکربندی‌های مختلف موازی (P) و پادموازی (AP) محاسبه کرد. در دماهایی که در مقایسه با دمای فرمی پایین‌اند، چگالی جریان الکتریکی به صورت رابطه (۷) داده می‌شود.

$$\mathcal{G}^{P(AP)} = \frac{e^2}{h} T^{P(AP)}(E_F) \quad (7)$$

طبق تعریف مقاومت مغناطیسی تونل‌زنی به صورت

$$\text{TMR}(\%) = \frac{\mathcal{J}^P - \mathcal{J}^{AP}}{\mathcal{J}^P + \mathcal{J}^{AP}} \quad (8)$$

تعریف می‌شود که در آن جریان‌های الکتریکی در پیکربندی موازی و پادموازی به واسطه سهم‌های مربوط به هر دو کانال اسپینی  $\mathcal{J}^{P(AP)} = \mathcal{J}_{\uparrow}^{P(AP)} + \mathcal{J}_{\downarrow}^{P(AP)}$  است [۱۵]. با فرض آن که رسانش اسپینی برای الکترون‌های اسپین اکثریت و اقلیت در یکی از حالت‌های موازی و پادموازی را در نظر بگیریم، آنگاه این کمیت برای تمام الکترودها مثبت است، یعنی جریان الکترون‌های اسپین اکثریت مؤثرتر از اقلیت می‌باشد. پلاریزگی یا قطبش اسپینی تونل‌زنی در انرژی فرمی الکترودها فرومغناطیس به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\text{SP}(\%) = \frac{\mathcal{J}_{\uparrow}^P - \mathcal{J}_{\downarrow}^P}{\mathcal{J}_{\uparrow}^P + \mathcal{J}_{\downarrow}^P} \quad (9)$$

همچنین چگالی حالت‌ها نیز از رابطه زیر قابل استخراج است.

$$\text{DOS}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G_C \quad (10)$$

### ۳. بحث و نتایج عددی

در این قسمت نتایج عددی محاسبات را بر روی خواص ترابرد الکتریکی وابسته به اسپین در سه‌لایه‌ای در رهیافت بستگی قوی نشان می‌دهیم. همچنین از برهم‌کنش‌های الکترون-فونون و الکترون-الکترون چشم‌پوشی شده، یعنی حالت ترابرد بالستیکی خالص در ساختار در نظر گرفته می‌شود [۱۵]. با توجه به دلایل ذکر شده در بخش قبل، کمیت‌ها و پارامترهای مورد نظر برای نوارهای تقارنی ۱ و ۵ در جدول ۱ آمده است.

جدول ۱. پارامترهای پرش و انرژی جایگاه برای MgO, Fe [۱۴] و [۱۶].

MgO	t, (eV)		(eV) E <sub>bo</sub>	
	۱	۱,۰۵	۲,۶	
۵	۱,۰۵	۳,۸		
Fe	t, (eV)		(eV) E <sub>bo</sub>	
	Ç	É	Ç	É
۱	۲,۵	۲,۵	+۱	-۱
۵	+۱	+۱	-۲	۳,۵-

یک یاخته واحد انتخابی قرار می‌گیرد.

با توجه به این که لایه وسط با دو یاخته واحد، اشغال شده است هامیلتونی عایق وسط به صورت یک ماتریس ۲×۲ است. از آنجا که الکترون‌های d جایگزیده جرم مؤثر بیشتری دارند، در داخل ناحیه سدی سریعتر افت می‌کنند. از این رو، برای انجام محاسبات از هامیلتونی تک‌نوازی استفاده شده و ساختار مورد نظر مطابق شکل ۲ (ب) به صورت شبه‌یک‌بعدی فرض شد [۱۴].

با این فرض هامیلتونی ساختار عایق (ناحیه میانی) به صورت

$$H_0 = \begin{cases} E_{bo} + 2t_0 + U_L & |i-j|=1 \\ -t_0 & i=j \end{cases} \quad (2)$$

می‌شود که در آن t پارامتر پرش برای نوارهای تقارنی ۱ و ۵ در جدول ۱ است. E<sub>bo</sub> انرژی جایگاهی و U<sub>L</sub> معرف افت پتانسیل خطی در سرتاسر ناحیه عایق است. از طرفی دیگر تابع گرین ناحیه محدود شده عایق میانی طبق تعریف به صورت

$$G_C = [(E + i\eta)I - H_0 + \sum_L - \sum_R]^{-1} \quad (3)$$

می‌باشد که در آن لا عملگر خودانرژی برای الکترودهای

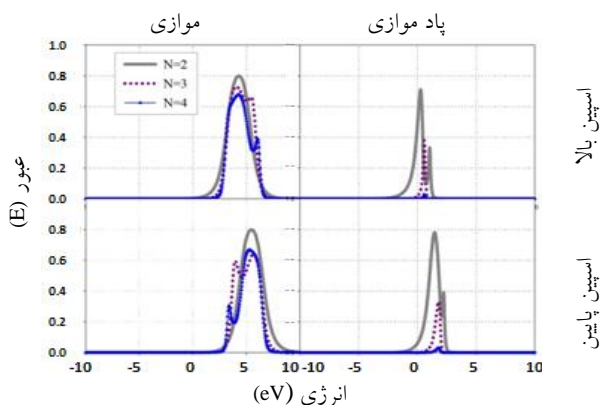
راست و چپ  $\sum_{lead} = -\frac{t_c^2}{t_{lead}} e^{ika}$  است [۱۵]. t<sub>c</sub> پارامتر

انتگرال پرش اتصال الکترودها به لایه میانی است. عملگر ماتریس طیفی Γ از عملگر خودانرژی Σ به صورت

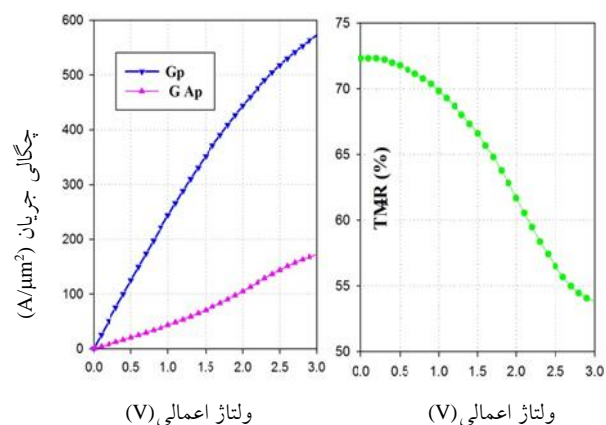
$$L(R) = i \left[ \sum_{L(R)} - \sum_{L(R)} \right] \quad (4)$$

تعیین می‌شود. با استفاده از رهیافت لاندائر احتمال عبور دهی الکترون به صورت

$$T(E) = \text{tr} \left( {}_L G_C {}_R G_C^\dagger \right) \quad (5)$$



شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) ترابرد الکتریکی برحسب انرژی برای پیکربندی‌های مغناطش موازی و پادموازی در دو کانال اسپینی و ضخامت‌های متفاوت سد عایق.



شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) چگالی جریان برای پیکربندی مغناطش موازی و پادموازی.

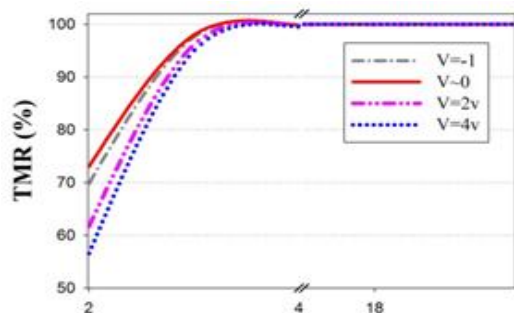
برای مطالعه دقیق‌تر، در شکل ۴ عبوردهی الکترونی را در بایاس صفر برای دو کانال اسپینی بالا و پایین در دو پیکربندی موازی و پادموازی رسم شده است. از شکل می‌توان فهمید که مقادیر غیر صفر و همچنین مقدار قله در آن در نواحی مختلف رخ می‌دهد که به واسطه خاصیت صافی شدگی اسپینی است. همین امر باعث مقدار غیر صفر برای TMR می‌شود.

از آنجایی که خواص ترابرد الکتریکی به عنوان تابعی از ولتاژ اعمالی و ضخامت سد در تونل‌زنی همدوس بررسی می‌شود، نمودارهای قطبش اسپینی و مقاومت مغناطیسی تونل‌زنی برای ضخامت‌های مختلف لایه عایق در شکل ۵ بررسی شده است. برای توضیح آن مجدداً شکل ۴ را در نظر بگیرید. مطابق شکل ۴ تنها در تعداد لایه‌های کم (در حدود ۲ نانومتر) عبور در حالت پادموازی قابل مشاهده است و در ضخامت‌های بالاتر عبوردهی الکترون تماماً در حالت موازی مشاهده می‌شود. به همین دلیل  $TMR > 99\%$  بوده و اشباع می‌شود. این موضوع در شکل ۶ به وضوح دیده می‌شود.

رسانش اسپینی با فرض آن که در فرآیند تونل‌زنی، اسپین الکترون‌ها بقا داشته باشد، به چگالی حالات هر کانال وابسته است. عدم تقارن  $D_{\uparrow}$  و  $D_{\downarrow}$  نتیجه آن است که حالات الکترونی در فلز فرومغناطیس به واسطه برهم‌کنش تبدالی شکافته می‌شود، به طوری که باعث به وجود آمدن چگالی حالات غیر برابر در انرژی فرمی در فلز فرومغناطیس می‌گردد.

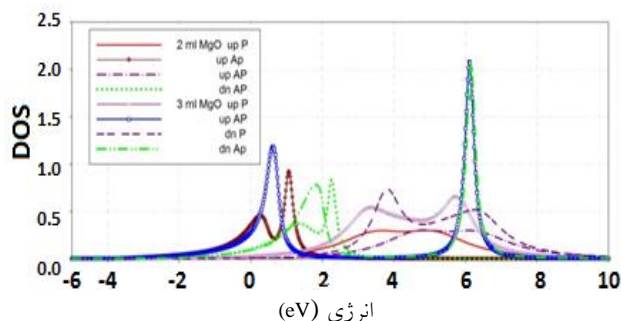
شکل ۳ وابستگی جریان‌های الکتریکی را در پیکربندی موازی و پادموازی (سمت چپ) و همچنین مقاومت مغناطیسی تونل‌زنی را به ولتاژ خارجی نشان می‌دهد. همان طوری که مشاهده می‌شود، جریان‌های الکتریکی در هر دو پیکربندی با افزایش ولتاژ به طور غیرخطی زیاد می‌شوند. رفتار غیرخطی از مشخصات خواص ترابرد الکتریکی در ساختارهای تونل‌زنی مورد نظر است. همچنین الکترون‌های اسپین بالا و پایین در حالت موازی بیشتر از حالت پادموازی است. از این نتایج می‌توان TMR را محاسبه کرد، که با افزایش ولتاژ به طور یکنواخت کاهش می‌یابد. کاهش آن به علت کاهش روی هم افتادگی چگالی حالات‌های مربوط به الکتروهای چپ و راست و همچنین لایه‌های عایق می‌باشد. رفتار جریان الکتریکی به کمیت‌های مختلف ساختار مانند مقدار ولتاژ سد، پهنای لایه عایق و پارامترهای انرژی جایگاهی و انرژی پرش مربوط می‌شود. همچنین TMR در بایاس صفر بیشترین مقدار، ۹۹٪ برابر با ۷۳٪ را در حالت دو تک‌لایه‌ای از سد عایق MgO دار است. لازم به ذکر است در یک اتصال فلز-عایق-فلز عمل ترابرد به وسیله جفت شدن حالات فلزی موجود در تراز فرمی به نوارهای موهومی انجام می‌پذیرد، پس واضح است که نوارهای موهومی (MIGS) نقش مهمی در پدیده تونل‌زنی دارند.

## ۱. Metal Induced Gap State



ضخامت (N)

شکل ۶. (رنگی در نسخه الکترونیکی) وابستگی مقاومت مغناطیسی تونل زنی به ضخامت سد عایق در ولتاژهای متفاوت، ولتاژ مثبت با یک سد پتانسیل و ولتاژ منفی با یک چاه جاذب انرژی قابل قیاس اند. همچنین بیشترین مقدار TMR در ولتاژهای نزدیک به صفر می باشد.

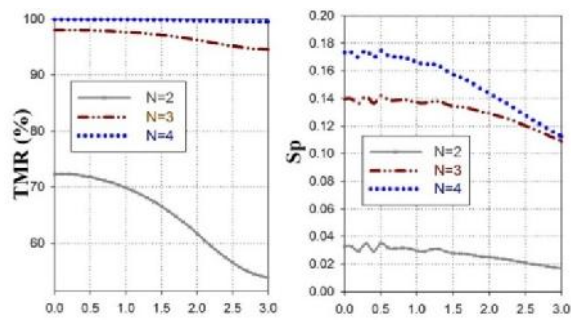


شکل ۸. (رنگی در نسخه الکترونیکی) وابستگی چگالی حالت برای ۲ و ۳ تک لایه (ML) از MgO برای حالت های اسپینی اقلیت و اکثریت تحت قطبش اسپینی موازی و پاد موازی.

و سه تک لایه (ml) یا یاخته عایق در شکل ۸ نشان داده ایم. با مقایسه نمودارها دیده می شود که چگالی حالات با افزایش لایه عایق زیاد می شود. همچنین قله ها برای نمودارهایی که به صورت خط کشیده شده اند (۳ ml MgO) نسبت به حالت نقطه چین (۲ ml MgO) به صورت کامل تفکیک شده اند. همچنین برای حالت اسپینی پاد موازی قله نمودار در دو انرژی کاملاً متفاوت مشاهده می شود. علاوه بر این، اولین قله برای همه حالات، به سمت انرژی های پایین تر جابه جا شده است.

#### ۴. نتیجه گیری

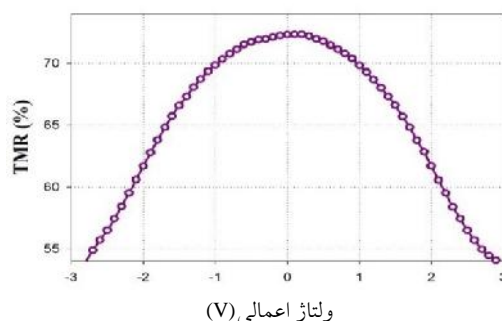
با استفاده از رهیافت تابع گرین در چارچوب بستگی قوی و استفاده از مقادیر تابعی چگالی، خواص ترابرد الکتریکی در ساختار تونل زنی، Fe-MgO-Fe برای دو کانال اسپینی مختلف



ولتاژ اعمالی (V)

ولتاژ اعمالی (V)

شکل ۵. (رنگی در نسخه الکترونیکی) مقایسه TMR برای ضخامت های مختلف سد و اشباع آن در ضخامت های بیش از ۲ نانومتر.



ولتاژ اعمالی (V)

شکل ۷. (رنگی در نسخه الکترونیکی) وابستگی TMR به ولتاژ متقارن. کاهش شیب نمودار با افزایش ولتاژ نشان می دهد جریان با افزایش ولتاژ به آرامی کاهش می یابد.

در نتیجه  $D_{\uparrow} \neq D_{\downarrow}$  خواهد بود. پلاریزگی اسپین که ناشی از اختلاف چگالی حالات اسپین بالا و پایین است یک خاصیت ذاتی نیست [۱۲]. همان طوری که در شکل ۷ دیده می شود، نسبت تغییرات ولتاژ، متقابلاً به صورت متقارن با TMR تغییر می کند و TMR برای محدوده ای از ولتاژ به طور محسوسی قابل مشاهده است. البته در ولتاژ بزرگتر از ۳ و کوچکتر از -۳ شاهد رفتارهایی نامتقارن خواهیم بود. با افزایش تعداد لایه های عایق نحوه رفتار منحنی تغییر نمی کند و تنها به دلیل کاهش مرتبه نمودار، این تغییرات قابل مشاهده نیست. همچنین کاهش تدریجی TMR نشان می دهد، جریان با افزایش ولتاژ به آرامی کاهش می یابد.

در آخر وابستگی چگالی حالت مربوط به کانال های مختلف اسپینی را در دو پیکربندی موازی و پاد موازی برای دو

افزایش ولتاژ کاهش محسوسی خواهد داشت. نتایج برای نوارهای تقارنی دیگر متفاوتند. همچنین با افزایش ضخامت سد شاهد اشباع TMR خواهیم بود.

(منطبق برنوارهای تقارنی ۱ و ۵) در دماهای پایین بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که در ولتاژهای پایین، افزایش چگالی جریان با افزایش ارتفاع سد کاهش می‌یابد و TMR با

## مراجع

1. E Y Tsymbal, O N Mryasov, and P R LeClair, *J. Phys. Condens. Matter* **15** (2003) R109.
2. X G Zhang and W H Butler, *J. Phys. Condens. Matter* **15** (2003) R1603.
3. M Julliere *Phys. Lett. A* **54** (1975) 225.
4. T Miyazaki and N Tezuka, *J. Magn. Magn. Mater.* **139** (1995) L231.
5. J Moodera *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995) 3273.
6. W H Butler, X G Zhang, T C Schulthess, and J M MacLaren, *Phys. Rev. B* **63** (2001) 054416.
7. J Mathon and A Umerski, *Phys. Rev. B* **63** (2001) R220403.
8. K Nagasaka, *J. Magn. Magn. Mater.* **321** (2009) 508.
9. S A Wolf, D D Awschalom, R A Buhrman, J M Daughton, S V Molna, M L Roukes, A Y Chitchekanova, and D M Treger, *Science* **294** (2001) 1488.
10. S Ikeda, J Hayakawa, Y M Lee, F Matsukura, Y Ohno, T Hanyu, and H Ohno, *IEEE Trans. Electron. Dev.* **54** (2007) 991.
11. A Ney, C Pampuch, R Koch, and K H Ploog, *Nature* **425** (2003) 485.
12. B AbediRavan, A A Shokri, and A Yazdani, *Solid State Communications* **150** (2010) 214.
13. W H Butler, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **9** (2008) 014106.
14. T Z Raza and H Raza, "Nanotechnology," *IEEE, Transactions* **10** (2011) 237.
15. A A Shokri and M Mardaani, *Chem. Phys.* **330** (2006) 287.
16. T Z Raza and H Raza, *Phys. Rev. B* **78** (2008) 193401.