

铁磁金属量子阱态的共振隧穿

卢仲毅¹ 张晓光^{2, †}

(1 中国科学院理论物理研究所 北京 100080)

(2 美国橡树岭国家实验室 田纳西州 37831 美国)

摘要 非铁磁金属层中的量子阱态在磁输运过程中的重要性已被广泛认识. 铁磁金属层中自旋极化的量子阱态以前并没有详尽的理论研究, 实验上也没有清晰地观测到自旋极化量子阱态的隧穿. 文章介绍了最近由卢仲毅、张晓光和 Pantelides^[1] 预言的 Fe/MgO/FeO/Fe/Cr 和其他铁磁量子阱隧道结中的共振隧穿, 并解释铁、钴、铬的 Δ_1 能带的对称性在这种共振隧穿中的作用.

关键词 隧道磁阻结, 量子阱态, 共振隧穿, 第一性原理计算

Resonant tunneling through quantum well states in ferromagnetic metallic films

LU Zhong-Yi¹ ZHANG Xiao-Guang^{2, †}

(1 *Institute of Theoretical Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China*)

(2 *Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee 37831, USA*)

Abstract Quantum well states in nonmagnetic metal films between magnetic layers are known to be important in spin-dependent transport. However, there are neither detailed theoretical studies on spin polarized quantum well states in ferromagnetic metal films nor clear experimental observations of electron tunneling through these states. In this paper we discuss the recent theoretical prediction by Zhong-Yi Lu, X.-G. Zhang and Pantelides^[1] on the resonant tunneling through Fe/MgO/FeO/Fe/Cr and other ferromagnetic quantum well states in magnetoresistance junctions. We further explain how the Δ_1 band symmetry of Fe, Co, and Cr plays a crucial role in such resonant tunneling.

Keywords tunneling magnetoresistance junctions, quantum well states, resonant tunneling, first-principles calculation

1 引言

磁隧道结中具有立方对称性铁磁电极的 Δ_1 能带的重要性最先由第一原理计算阐明. 在 Fe/MgO/Fe(100)隧道结中^[2], 铁的费米面多子 Δ_1 能带的对称性与 MgO 能隙(100)方向的复能带相符, 因而有较大的隧穿几率. 而铁的少子 Δ_1 能带高于费米能级, 同时其他在费米能级的能带由于对称性低于 Δ_1 能带, 隧穿几率相对小了几个数量级, 由此导致类似于半(单自旋)金属的大隧穿磁阻. 这项理论预言已

被实验证实^[3]. Δ_1 能带主要由 sp 电子构成, 很接近自由电子能带. 过渡金属中, bcc 晶格的铬, 铁, 钴在费米能级附近都有 Δ_1 能带. 它们的晶格常数也相近. 通过结合这几种金属设计新型的隧道结, 就能利用其中的 Δ_1 能带产生新的输运机制. 例如最近理论预言, 用钴或铁钴合金作为电极能产生隧道结的电子全反射^[4].

本文考虑的是通过结合铬, 铁, 或钴而产生 Δ_1 能带的铁磁量子阱效应^[1]. 其实, 由铁铬构成的铁

2005-07-28 收到

† 通讯联系人. Email: xgz@ornl.gov

磁量子阱,几年前已由 Nagahama 等人间接地观测到^[5]. 由于实验中用的非晶氧化铝绝缘层大大减弱了量子阱共振信号,这样一来,电流对电压关系曲线并没有直接显示出共振,直到二阶导数才看到了可能的量子阱态. 另外, Nagahama 等人也没有意识到量子阱态是由 Δ_1 能带形成的. 他们猜测量子阱态是在二维布里渊区的 \bar{X} 点,而 Δ_1 能带则是在 $\bar{\Gamma}$ 点.

我们认为,观测铁磁量子阱的共振隧穿,绝缘层与铁磁层的晶格匹配至关重要,匹配得好,才能使隧穿电子波函数在界面两边的对称性一致,保证电流主要通过 Δ_1 能带,从而强化铁磁共振隧穿. 因此,外延生长的氧化镁绝缘层要远远优越于非晶氧化铝绝缘层.

2 计算方法

我们用第一原理的 Layer - KKR 程序,具体的计算方法与以前的工作^[2,4]基本相同,不同之处是两边用了两种不同的电极:铁磁电极铁或钴,和非磁性电极铬. 事实上铬具有弱反铁磁性,不过对我们的计算影响不大. 铁,钴,铬都取 bcc(100)方向排列. 我们考虑了如下情况,即在氧化镁绝缘层与铬电极之间,分别计算 2 至 11 原子层的铁薄膜. 为计算简便,所有层都取铁的晶格常数. 加偏压的自洽场计算,用的是文献[6]的方法,自洽场收敛后,电流的积分用了二维布里渊区的 8256 个 k 点. 类似于文献[6],界面共振态对电流的贡献被全部排除. 以前的理论计算中所显示的界面共振态电流从未在实验中观测到.

3 结果及讨论

图 1 显示了三维铁和铬沿 ΓH 方向的能带. 可以看到,铁的多子 Δ_1 能带与费米能级相交,而铬的 Δ_1 能带最低点比费米能级高. 因此夹在氧化镁与铬之间的铁薄膜中的 Δ_1 电子在费米能级附近会在垂直于薄膜的方向形成量子禁闭. 图 2 的态密度清晰地显示了这一现象. 因为 Δ_1 能带主要是 s 电子,而在 Γ 点其他能带都没有 s 分量,所以图 2 中只画了 s 分量的态密度. 我们看到在 multi-band 中费米能级附近有多峰,这些尖峰的宽度正好是计算中所用能量虚部的两倍. 如果我们减小能量虚部,则峰宽也随之线性减小,所以这些峰的真正宽度基本为零. 这

是区分子量子阱态与其他共振态的重要标志之一. 在少子带中接近铬的 Δ_1 能带底部也出现了一个量子阱态,它与费米能级距离略大于 1eV,在偏压大于 1V 时有可能观测到这个态.

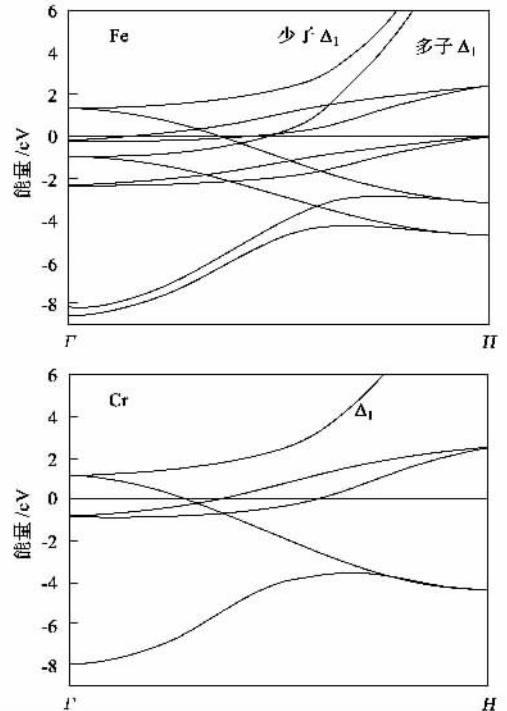


图 1 Fe 和 Cr 的沿着对称轴 ΓH 的能带结构,费米能级设在零点处

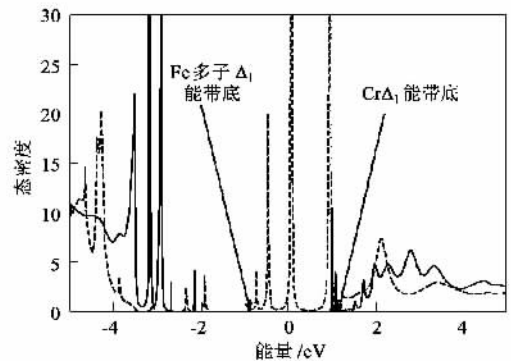


图 2 量子阱薄膜 Fe/MgO/FeO/8Fe/Cr 中 8 层 Fe 上的在 $\bar{\Gamma}(k_{\parallel}=0)$ 点的 s 分解的分部态密度. 虚线对应于多子,实线则对应于少子,费米能级设在零点处

图 3 显示量子阱态的能量随铁薄膜厚度的变化,图 3 的能量窗口是从 0.3eV 到 1.1eV,与 Nagahama 等人^[5]的图 2 中的窗口基本一致. 比较两图,它们惊人地相似,不过它们之间的不同之处更加耐人寻味. 最明显的不同是 Nagahama 等人在每一个

薄膜厚度都观测到量子阱态,他们由此推论,每一个共振系列对应一个量子态.由于在 $\bar{\Gamma}$ 点找不到任何量子阱态对应于这种能量厚度关系,他们的结论是共振系列是由 \bar{X} 点的量子阱态引起的.而我们的计算结果表明:并非每一个薄膜厚度都有量子阱共振,其实每个共振系列是由多个量子阱态产生的,所有量子阱态都在 $\bar{\Gamma}$ 点.在图3中,数据点上的数字标志对应的量子阱态波函数的节点个数.每当薄膜厚度增加一个原子层,前一个量子阱态就移出这个能量窗口,或者下一个量子阱态就移入这个窗口.在Nagahama等人的实验中,薄膜厚度可能不均匀,因此测量实际上是对几个厚度的平均.

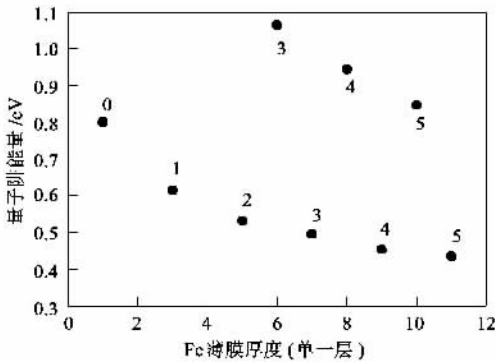


图3 在 Fe/MgO/FeO/Fe/Cr 中,对不同的 $n = 1, \dots, 11$, 多子量子阱能级随 Fe 薄膜厚度的变化关系(图中数据点旁的数字标明所对应的量子阱波函数的节点数)

量子阱态的共振隧穿,可以从计算出的电流随电压变化的 $I-V$ 曲线看出.图4为两个量子阱薄膜的 $I-V$ 曲线,当量子阱薄膜的磁矩与铁磁电极的磁矩平行时,呈阶梯形状,每一个阶梯的起始偏压对应于一个量子阱态相对于费米能级的能量.这说明绝大部分电流是通过量子阱态流过的.偏压最低的共振点,隧穿电流陡增了1到2个数量级.正偏压和负偏压表现出极大的不对称,前者是电子注入量子阱态,后者是空穴注入.另外值得注意的是:当磁矩反平行时,偏压1V左右的电流有一个高平台,这个平台对应于前面提到的铁薄膜中少数 Δ_1 能带的量子阱态.由于铁电极中没有少数 Δ_1 电子,磁矩平行时这个少数量子阱态没有电流贡献.没有界面氧化铁层时(Co/MgO/9Fe/Cr)这个量子阱态似乎不存在.

隧穿磁阻在图5中以平行磁矩时的电导 G_p 与反平行磁矩时的电导 G_{AP} 之商 G_p/G_{AP} 的形式画出.当 $G_p/G_{AP} > 1$ 时,磁阻为正,当 $G_p/G_{AP} < 1$ 时,磁阻

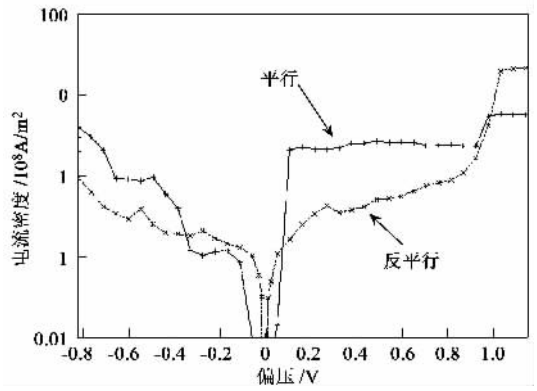


图4 在 Fe/MgO/FeO/8Fe/Cr 中隧道电流随偏压的变化关系(实线对应于 Fe 薄膜层中的磁矩与铁磁电极的磁矩相互平行的情形,虚线则对应于反平行的情形)

为负.图5显示出几个现象:(1)低偏压时磁阻为负.这个低偏压下的大负磁阻与以前计算中预言的界面共振态所造成的负磁阻^[6]不同.由于隧穿电流应该主要由 Δ_1 电子贡献,而低偏压下导电窗口处于铁薄膜量子阱态能隙中,造成了多子电流的锐减.因此这里的负磁阻也是由于量子禁闭造成的.(2)量子阱共振隧穿所造成的正磁阻,即使在有氧化铁界面层时也高达1200%(比较 Fe/MgO/FeO/Fe 的磁阻为78%^[7]),而在无氧化铁层时则达到了10000%.(3)Fe/MgO/FeO/Fe/Cr 隧道结在正偏压1V左右产生了较大的负磁阻,接近400%,对应于铁膜的少数 Δ_1 量子阱态.

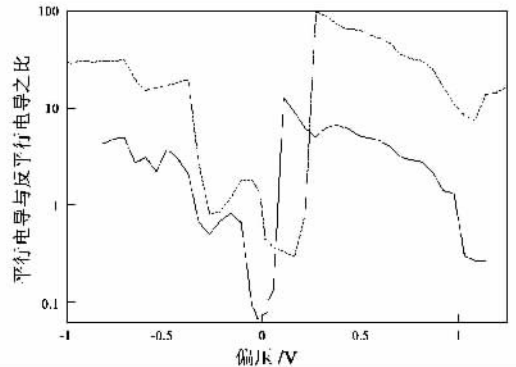


图5 平行磁矩的电导与反平行磁矩的电导之比随偏压的变化关系(实线对应于磁阻结 Fe/MgO/FeO/8Fe/Cr,虚线则对应于磁阻结 Co/MgO/9Fe/Cr)

4 结论

利用 bcc 过渡金属中 Δ_1 能带的独特对称性,我们预言了 Fe/MgO/FeO/nFe/Cr 和 Fe/MgO/nFe/Cr 这类量子阱共振隧道结的共振隧穿特性.我们发现

多子和少子量子阱态都产生共振隧穿,前者产生正磁阻,后者产生负磁阻.这种量子阱隧道结的 $I-V$ 曲线呈现高度不对称,最大磁阻远大于理论预言的简单磁隧道结的磁阻,因而这类量子阱隧道结可以用来设计新型自旋电子器件.

参 考 文 献

- [1] Lu Z Y, Zhang X G, Pantelides S T. Phys. Rev. Lett., 2005, 94 :207210
 [2] Butler W H, Zhang X G, Schulthess T C *et al.* Phys. Rev. B,

2001 63 :054416

- [3] Yuasa S, Nagahama T, Fukushima A *et al.* Nature Materials, 2004, 3 :868 ;Parkin S S P, Kaiser C, Panchula A *et al.* Nature Materials, 2004, 3 :862
 [4] Zhang X G, Butler W H. Phys. Rev. B, 2004, 70 :172407
 [5] Nagahama T, Yuasa S, Suzuki Y *et al.* J. Appl. Phys., 2002, 91 :7035
 [6] Zhang C, Zhang X G, Krstic P S *et al.* Phys. Rev. B, 2004, 69 :134406
 [7] Zhang X G, Butler W H, Bandyopadhyay A. Phys. Rev. B, 2003, 68 :092402

· 物理新闻和动态 ·

玻色 - 爱因斯坦凝聚实现 10 周年

自 1995 年首次实现玻色 - 爱因斯坦凝聚(BEC)以来,相关研究发展迅速.截止到 2005 年 6 月,已实现凝聚的碱金属原子气有六种: ${}^7\text{Li}$, ${}^{23}\text{Na}$, ${}^{41}\text{K}$, ${}^{85}\text{Rb}$ 和 ${}^{133}\text{Cs}$. 自旋极化 ${}^1\text{H}$ 最早被遴选为 BEC 的对象,但因技术上的难度问题,它的凝聚迟至 1998 年 6 月,是由“BEC 教父”Daniel Kleppner 领导的小组实现的.2000 年,对激发态 $\text{He}(20\text{eV})$ 原子气,甚至对 Rb_2 分子,先后实现了 BEC. 第一批 BEC 采用磁光阱技术,几年之后又发展了全光阱技术.全光阱技术的优势在于,磁场可以另外用于控制原子间的相互作用.例如,通过 Feshbach 共振,使吸引相互作用变成排斥.最近,使用全光捕获技术,已经实现了铯和铷原子气的凝聚.迄今,在实现了 BEC 的各种原子中,只有铯具有两个价电子,而铷原子则以其所具有的相当大的磁偶极矩而引起关注.这两种元素在信息产业中都有重要应用.10 年来,BEC 中一系列的新现象(如约瑟夫森效应、原子激光、涡旋、“超流 - 绝缘”量子相变、超冷费米原子气等)向人们展示出这一课题的强大生命力,其中许多是爱因斯坦当年未曾想过的.

2005 年 2 月,一批 BEC 科学家会聚到加拿大的 Banff,庆祝 BEC 首次实现 10 周年.与会者中有许多新转行的科学家,他们原先是从事高温超导机理研究的.来自不列颠哥伦比亚大学的 Fei Zhou 表示,对于自己 18 个月以前从凝聚态领域转至超冷原子领域,决不后悔.今天,有 100 多个实验室致力于超冷原子研究.在这一新领域,实验物理学家不断地向理论学家提出新的课题,使后者有更多的机会做出创新的工作.凝聚态系统中的相互作用过于复杂,超冷原子气却可能模拟凝聚态系统,通过调控相互作用,将所要研究的物理问题突显出来.初期的实验,主要关心凝聚体的尺寸或者对 BEC 的表征.现在,则主要指向应用和开辟理论物理新领域.

(戴闻 编译自 Nature 2005 434 430 和 Physics World 2005 年第 6 期)



北京欧普特科技有限公司

光学元件库 - 欧普特科技

欢迎访问:

www.goldway.com.cn

北京欧普特科技有限公司严格参照国际通常规格及技术指标,备有完整系列的精密光学零部件(备有产品样本供参考)供国内各大专院校、科研机构、实验室随时选用,我公司同时可为您的应用提供技术咨询.我公司可以提供美国及欧洲产的优质红外光学材料,如硒化锌、硫化锌、多光谱硫化锌等.



- 光学透镜:平凸、双凸、平凹、双凹、消色差胶合透镜等.
- 光学棱镜:各种规格直角棱镜及其他常用棱镜.
- 光学反射镜:各种尺寸规格的镀铝、镀银、镀金及介质反射镜,直径 5mm—200mm.
- 光学窗口:各种尺寸规格、材料的光学平面窗口,平晶,直径 5mm—200mm.
- 各种有色玻璃滤光片:规格为直径 5mm—200mm(紫外、可见、红外)及窄带干涉滤片.
- 紫外石英光纤:进口紫外石英光纤, SMA 接口光纤探头,紫外石英聚焦探头.

地址:北京市海淀区知春路 49 号希格玛大厦 B 座 306 室

电话 010-88096218/88096217 传真 010-88096216 网址 www.goldway.com.cn

联系人:徐勇小姐 陈翎先生 施楠小姐

Email xuyong@goldway.com.cn kevinchen@goldway.com.cn shinan@goldway.com.cn