強磁性トンネル接合・二重強磁性トンネル接合における透過率

Transmission Coefficients for Ferromagnetic Tunnel Junctions
with Single and Double Barriers

岸 達也・猪俣浩一郎

(株)東芝基礎研究所, 川崎市幸区小向東芝町1 (〒210)

T. Kishi and K. Inomata

Advanced Research Laboratory, Toshiba Corporation,
1 Komukai Toshiba-cho, Saiwai-ku, Kawasaki 210

One-dimensional ferromagnetic tunnel junctions with single and double barriers are studied, using the transfer matrix method, which is extended to spin-polarized systems. We obtain an analytical expression for the transmission coefficients. For single-barrier junctions, the transmission coefficient shows a deviation from a cosine dependence on the angle between the magnetizations. For double-barrier junctions, resonant tunneling phenomena are induced.

Key words: spin-dependent tunneling, ferromagnetic tunnel junction, transfer matrix method, transmission coefficient, double barrier junction

1. はじめに

スピンの依存したトンネル伝導現象に関する研究の起源は20年以上前にさかのぼる¹⁾。しかし、トンネル接合の作製上の困難さや再現性の問題などによりこれまで十分に調べられてはいなかった。一方、1988年²⁾に磁性人工格子において巨大な磁気抵抗が発見され、今日に至るまで基礎・応用の両面から膨大な数の研究が行われてきた。この観点から強磁性トンネル接合が見直され、最近ではいくつかのグループにより実験研究が行われている^{3)~6)}。

理論の観点からみると、Julliere⁷⁾とMaekawaら⁸⁾により磁性体の分極率を用いてトンネルコンダクタンスの変化が記述され、一方、Slonczewski⁹⁾により自由電子近似のもとで、接合のコンダクタンスが $1 + P^2 \cos \theta$ の形の依存性を持つことが示された。ただし、ここでは絶縁障壁の厚さが無限大の極限を仮定している。

我々は強磁性トンネル接合の電気伝導を調べることを目的として、1次元強磁性トンネル接合の透過率(トンネル確率)を理論的に求める。このために transfer matrix 法をスピン偏極系に適用できるように拡張する。特に、本研究では自由電子モデルに基づき透過を正確に求める。これにより $\cos \theta$ 依存性からのずれがあることが示されている。また、「二重」強磁性トンネル接合を提案し、この系における電気伝導を調べるために、これについても透過率を正確に求める。

2. 計算方法

角型ポテンシャル V に対する Schrödinger 方程式

$$(-\nabla^2 + V - \mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\sigma})\Psi(\mathbf{x}) = E\Psi(\mathbf{x}) \quad (1)$$

を考える。ここで $\mathbf{h}$ は磁場、 $\boldsymbol{\sigma}$ はスピンを表す。強磁性体と絶縁体の積層膜を考えるので、ポテンシャル V は1次元的な障壁となっていると仮定する。各磁性体では、座標を y 軸を共通にし、磁化の方向に z 軸をとる。各磁性体の磁化は、互いに角度 θ をなして傾いているとする (Fig. 1)。

さて Schrödinger 方程式 (1) の解は右向きに進む平面波と左向きに進む平面波との線形結合となる。波動関数は全空間で連続でなければならないので、各界面で連続である条件が必要となる。また、両側の強磁性体で磁化方向が異なるために、スピンの変換が必要になる。これらの条件を transfer matrix で表すと、二つの界面における連続性を表す行列 M_1, M_2 とスピンの変換行列 $U(\theta)$ を用いて波動関数が接続される。具体的には以下の式で表される。

$$\begin{pmatrix} I_{\uparrow} \\ R_{\uparrow} \\ I_{\downarrow} \\ R_{\downarrow} \end{pmatrix} = M_1 U(\theta) M_2 \begin{pmatrix} T_{\uparrow} \\ 0 \\ T_{\downarrow} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

ここで、transfer matrices¹⁰⁾ は次で定義される。

$$U(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) Id & \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) Id \\ -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) Id & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) Id \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$M_1(k_{\uparrow}, k_{\downarrow}, q, d_1) = \begin{pmatrix} M(k_{\uparrow}, q, d_1) & 0 \\ 0 & M(k_{\downarrow}, q, d_1) \end{pmatrix} \quad (4)$$

$$M_2(k_{\uparrow}, k_{\downarrow}, q, d_2) = \begin{pmatrix} M(q, k_{\uparrow}, d_2) & 0 \\ 0 & M(q, k_{\downarrow}, d_2) \end{pmatrix} \quad (5)$$

$$M(k_{\uparrow}, k_{\downarrow}, d) = \frac{1}{2k_{\uparrow}} \times \begin{pmatrix} (k_{\uparrow} + k_{\downarrow})e^{-i(k_{\uparrow} - k_{\downarrow})d} & (k_{\uparrow} - k_{\downarrow})e^{-i(k_{\uparrow} + k_{\downarrow})d} \\ (k_{\uparrow} - k_{\downarrow})e^{i(k_{\uparrow} + k_{\downarrow})d} & (k_{\uparrow} + k_{\downarrow})e^{i(k_{\uparrow} - k_{\downarrow})d} \end{pmatrix} \quad (6)$$

ただし、入射波、反射波、透過波の係数をそれぞれ $I_{\sigma}, R_{\sigma}, T_{\sigma}$ とした。また、 Id は単位行列、 k_{σ} はスピン σ の運動量、 q は絶縁体中の運動量、 $k_{\uparrow}, k_{\downarrow}$ は任意の運動量である。界面の座標を d_1, d_2 で表している。この方程式を解くことにより波動関数の係数が決定される。

二重強磁性トンネル接合では2個の障壁がある。この障壁で隔てられた三つの磁性層において、座標軸は y 軸を共通にし、 z 軸を磁化の方向にとる。ここで、各磁性層の磁化の方向を次のように仮定する。すなわち、左側と右側の磁性層の磁化は常

Fig. 1 Potential for the ferromagnetic tunnel junction. The coordinates in regions I and III are shown. The coordinates have y axes with the same direction. The magnetizations are parallel to the z- and z'-axis in regions I and III, respectively, and form an angle θ with each other.

Fig. 2 Potential for the ferromagnetic tunnel junction with a double barrier. The interfaces divide the whole system into five regions. Regions I, III, and V are ferromagnets, and regions II and IV are insulators. The coordinates in regions I, III, and V are shown in the figure. The magnetizations of regions I and V are parallel and that of region III forms an angle θ with them.

に平行であるとし、この方向と中央の磁性層の磁化のなす角度を θ とする (Fig. 2).

二重接合の場合には界面が四つあり、1 個の transfer matrix が各界面における波動関数の連続条件に対応することから、transfer matrix は 4 個現れる。さらに、中央の磁性層の磁化が θ だけ傾いているので、スピンの変換を 2 回行う必要がある。したがって transfer matrix を用いると 6 個の行列により波動関数の連続条件が表現されることになる。

$$\begin{pmatrix} I_{\uparrow} \\ R_{\uparrow} \\ I_{\downarrow} \\ R_{\downarrow} \end{pmatrix} = M_1 U(\theta) M_2 M_3 U(-\theta) M_4 \begin{pmatrix} T_{\uparrow} \\ 0 \\ T_{\downarrow} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (7)$$

これを解いて透過波の波動関数が決定される。以下では簡単のために、2 個の障壁高さと同様に、中央の磁性層の厚さは絶縁層の厚さの 2 倍とした場合を考える。

3. 計算結果と考察

3.1 強磁性トンネル接合

透過率 $\mathcal{T}$ は、前節で与えられた transfer matrix の方程式を解いて得られる透過波の係数 T_o を用いて

$$\mathcal{T} = k_{\uparrow} |T_{\uparrow}|^2 + k_{\downarrow} |T_{\downarrow}|^2 \quad (8)$$

と与えられる。特に $\uparrow$ スピンをもつ単位の入射、すなわち、 $(I_{\uparrow}, I_{\downarrow}) = (1/\sqrt{k_{\uparrow}}, 0)$ の場合には、透過率は次式で与えられる。

$$\mathcal{T} = \frac{\cos(\theta/2)^2}{|D|^2} \left\{ \frac{(k_{\uparrow}^2 + \kappa^2)^2}{4\kappa^2 \kappa^2} \sinh[\kappa d] + 1 \right\} + \frac{\sin(\theta/2)^2}{|D|^2} \left\{ \frac{(k_{\uparrow}^2 - \kappa^2)(k_{\downarrow}^2 - \kappa^2)}{4k_{\uparrow}^2 \kappa^2} \sinh[\kappa d] + \frac{k_{\uparrow}}{2k_{\downarrow}} \right\} \quad (9)$$

ここで $q = i\kappa$, $d = d_2 - d_1$ である。

これを数値的に調べるために、 $k_{\uparrow}$ でスケールした次のパラメータを定義する。

Fig. 3 Density of states of the free electrons in a ferromagnet. In the free-electron approximation the density of states is parabolic. The lines E_F^r and E_F^i correspond to the energy with a real and a purely imaginary p , respectively.

$$p \equiv \frac{k_{\downarrow}}{k_{\uparrow}}, \quad x \equiv \frac{k}{k_{\uparrow}}, \quad \delta \equiv k_{\uparrow} d \quad (10)$$

ここで、 p, x, δ はそれぞれ磁性層の交換分裂、絶縁層の障壁高さ、障壁厚さに対応する。交換分裂 p は Fermi エネルギーの位置により実数の場合 (Fig. 3 の E_F^r) と純虚数の場合 (Fig. 3 の E_F^i) がある。後者は Fermi エネルギーが $\downarrow$ スピンバンドの底より小さい場合に対応し、このとき $\downarrow$ スピンをもつ進行波は存在しない。パラメータ x は、障壁ポテンシャル V が大きくなるとともに増大する量である。パラメータ δ は障壁の厚さに比例している。

まず、交換分裂 p が純虚数の場合を考える。この場合は全空間において $\uparrow$ スピンをもつ進行波のみが存在する。Fig. 4, 5 に障壁高さが異なる場合の透過係数の θ 依存性を示す。これらの図を比較すると、障壁高さに依存して透過率の角度依存性が異なることがわかる。特に、障壁高さが低い場合には $\cos \theta$ 依存

Fig. 4 θ -Dependence of the transmission coefficient for a higher barrier ($x=1.0$). The parameters are $p=0.01i$ and $\delta=1.0$. A cosine function is also shown for reference.

Fig. 5 θ -Dependence of the transmission coefficient for a lower barrier ($x=0.5$). The parameters are $p=0.01$ and $\delta=1.0$. A cosine function is also shown for reference.

Fig. 6 θ -Dependence of the transmission coefficient for a lower barrier ($x=0.1$) with a real p . The parameters are $p=0.01$ and $\delta=1.0$.

Fig. 7 x -Dependence of the transmission coefficient for a double-barrier junction with a purely imaginary p for $\theta=0, \pi/2$, and π . The parameters are $p=0.5i$, $\delta_0=2.0$, and $\delta_1=2.0$.

性からのずれが大きくなっていることがわかる。

一方、 p が実数の場合の透過率を Fig. 6 に示す。この場合にも、図中には明示していないが、障壁高さが低いときに $\cos \theta$ からのずれが顕著に見られることがわかる。また、全透過率を $\uparrow$ スピンと $\downarrow$ スピンに分けて描いた。ここでは $\uparrow$ スピンをもつ電子が入射している場合を考えているので、磁性層の磁化が平行（すなわち $\theta=0$ ）のとき、透過率は $\uparrow$ スピンをもつものだけからなり、磁性体が反平行（すなわち、 $\theta=\pi$ ）のときは、透過率は $\downarrow$ スピンをもつものだけになることがわかる。

Fig. 4 と Fig. 5 から、 $\cos \theta$ 依存性からのずれは障壁高さが低い時（例えば 1 eV 程度以下）に顕著に現れ、障壁高さが高いときには非常に小さくなることがわかる。また、この傾向は障壁厚さにほとんど依存しないことが示される。実験^{5), 6)} では 2 ~ 3 eV 以上の障壁が形成されており、障壁高さが高い場合に相当するため、 $\cos \theta$ の依存性が測定されたと考えられる。

3.2 二重強磁性トンネル接合

二重強磁性トンネル接合の場合には、透過率 $\mathcal{T}$ は行列 $A = M_1 U(\theta) M_2 M_3 U(-\theta) M_4$ を用いて

$$\begin{pmatrix} T_{\uparrow} \\ T_{\downarrow} \end{pmatrix} = \frac{1}{D_A} \begin{pmatrix} A_{33} & -A_{13} \\ -A_{31} & A_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{\uparrow} \\ I_{\downarrow} \end{pmatrix} \quad (11)$$

と表される。ただし、

$$D_A = A_{11} A_{33} - A_{13} A_{31} \quad (12)$$

である。

二重強磁性トンネル接合の場合も式 (10) で定義されたパラメータを用いて透過率を数値的に調べる。

まず交換分裂パラメータ p が純虚数の場合をみる。この場合は Fig. 7 に示されるように、 $\theta=0$ の時、ある x に対し透過率がちょうど 1 になることがわかる。スピンを含まない通常の二重トンネル接合との類推から、これは「共鳴」を示していると考えられる。共鳴が生じるエネルギー x は θ に依存して変化して

Fig. 8 x -Dependence of the transmission coefficient for a double-barrier junction with a real p for $\theta=0$, $\pi/2$, and π . The parameters are $p=0.5$, $\delta_0=2.0$, and $\delta_1=2.0$.

いる。

p が実数の場合を Fig. 8 に示す。この場合にも透過率が 1 になる x があり、やはり共鳴が生じることを示している。また、 p が純虚数の場合と同様に、 θ の変化とともに共鳴の起こる x の値が変化する。これらの結果は、中央の強磁性層にスピンの依存した離散準位ができていたことを示唆するものと考えられる。すなわち、 p が純虚数のときは $\downarrow$ スピンをもつ状態は存在しないので、中央の強磁性層の磁化が反平行になると共鳴が起こらず、 p が実数のときはどちらのスピンをもつ状態も存在するので、磁化が平行・反平行の両方の場合に中央の強磁性層中

のスピンの依存した離散準位を通して共鳴が生じると考えられる。

4. ま と め

強磁性トンネル接合について、自由電子モデルに基づき transfer matrix 法を用いて透過率を解析的に求めた。この結果は障壁の厚さが無限大の極限で Slonczewski の結果に一致する。また、正確な透過率は磁化の相対角度 θ について $\cos \theta$ 依存性からずれることが示された。

また、二重強磁性トンネル接合においても透過率を求め、解析的な表式を与えた。透過率の解析により、この場合には共鳴トンネル現象が引き起こされることが示された。さらに、この共鳴現象は磁化の相対角度に依存することがわかった。

文 献

- 1) P. M. Tedrow and R. Meservey: *Phys. Rev. Lett.*, **26**, 192 (1971).
- 2) M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, and F. Petroff: *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 2472 (1988).
- 3) J. Nowak and J. Rauluszkievicz: *J. Magn. Magn. Mat.*, **109**, 79 (1992).
- 4) Y. Suezawa and Y. Gondo: *J. Magn. Magn. Mat.*, **126**, 524 (1993).
- 5) T. Miyazaki and N. Tezuka: *J. Magn. Magn. Mat.*, **139**, L231 (1995).
- 6) J. S. Moodera and L. R. Kinder: *J. Appl. Phys.*, **79**, 4724 (1996).
- 7) M. Julliere: *Phys. Lett.*, **54A**, 225 (1975).
- 8) S. Meakawa and U. Gafvert: *IEEE Trans. Magn.*, **MAG-18**, 707 (1982).
- 9) J. C. Slonczewski: *Phys. Rev. B*, **39**, 6995 (1988).
- 10) E. O. Kane: *Tunneling Phenomena in Solids*, ed. by E. Burstein and S. Lundqvist, p. 1 (Plenum Press, New York, 1969).

1996 年 10 月 14 日受理, 1997 年 1 月 16 日採録