二重強磁性トンネル接合における電気伝導と TMR

Transport Properties and TMR for Ferromagnetic Tunnel Junctions with 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(〒210-8582)

T. Kishi and K. Inomata

Advanced Research Laboratory, Toshiba Corporation, 1 Komukai Toshiba-cho, Saiwai-ku, Kawasaki 210-8582

(1998 年 10 月 14 日受理, 1999 年 1 月 21 日採録)

The transport properties and tunnel magnetoresistance (TMR) of ferromagnetic tunnel junctions with double barriers are investigated in the free-electron approximation. Tunnel currents are calculated on the basis of a Tsu-Esaki-type equation using exact transmission coefficients for the double junctions. Enhancement and oscillation of the tunnel magnetoresistance occur as a function of the bias voltage. It is shown that these can be attributed to spin-dependent resonant tunneling through resonant states formed in the quantum well.

Key words: spin-dependent resonant tunneling, ferromagnetic tunnel junction, double barrier, tunnel magnetoresistance

1. はじめに

1995 年に室温で大きなトンネル磁気抵抗比¹⁾が発見されて以来, スピンに依存したトンネル伝導の問題が大きな注目を集めている。これに関して, 筆者らはこれまで自由電子モデル²⁾に基づいて強磁性トンネル接合について詳細に調べてきた³⁾。

本論文では, 「二重の障壁」をもつ強磁性トンネル接合について, 自由電子モデルに基づいて考察する。スピン変数を含まない二重トンネル接合では, 共鳴トンネルという特徴的な現象が現れる⁴⁾。これは, 量子サイズ効果により二つの障壁の間に構成された量子井戸中に離散的なエネルギー準位をもつ共鳴状態が形成され, この準位を介して電子がトンネルするものである。このエネルギー準位近傍では電子のトンネル確率が急激に変化しているため, バイアス電圧の増加により, 電流-電圧特性に特徴的なピークが現れる。

さて, 強磁性トンネル接合の場合にも, 接合を二重化することにより離散共鳴準位が形成され, しかも中央層にも強磁性体を用いているために, これらの共鳴準位はスピンに依存したものとなることが期待できる。これについては, ゼロバイアス時の透過係数の解析によりスピンに依存した状態が現れることを既に報告した³⁾。本論

文では, このような系に対して自由電子モデルに基づいて正確に計算された透過係数を用いてトンネル電流を計算する。これによりスピンに依存した共鳴トンネル現象を解析するとともに, トンネル磁気抵抗比への影響を調べる。なお, 同様の系について自由電子モデルに基づいた計算が既に発表されている⁵⁾ことを指摘しておく。ここでは, 磁気抵抗比のバイアス電圧依存性は 1 重接合とは異なることが示されており, それが共鳴トンネル効果の影響であるとしている。しかし, 共鳴による磁気抵抗比の変化の様子やエネルギー準位との関係など, 十分明らかにされていない。

2. 計算方法

ここで考える系は, 一般に「強磁性体層 (I)/ 絶縁体層 (II)/ 強磁性体層 (III)/ 絶縁体層 (IV)/ 強磁性体層 (V)」のように構成されている。この系に対応するポテンシャル U として, 簡単のために障壁中の電圧降下を絶縁層中で一定の値だけ一様に下がるものとする。即ち, ポテンシャル障壁はバイアス電圧印加時においても矩形になるようにとる。このような近似に基づくポテンシャルは

$$U(x, y, z) = \begin{cases} 0 & x < x_1 \\ U_2 - \frac{eV}{w_2 + w_4} \frac{w_2}{2} & x_1 < x < x_2 \\ \frac{-eV}{w_2 + w_4} w_2 & x_2 < x < x_3 \\ U_4 - \frac{eV}{w_2 + w_4} \left(w_2 + \frac{w_4}{2} \right) & x_3 < x < x_4 \\ -eV & x < x_4 \end{cases} \quad (1)$$

で与えられる。ただし w_2 , w_3 , w_4 はそれぞれ絶縁体層 (II), 強磁性体層 (III), 絶縁体層 (IV) の厚さを表し, U_2 , U_4 はそれぞれ絶縁体層 (II), 絶縁体層 (IV) の障壁高さを表す。このポテンシャルの特徴は x にのみ依存すること, 即ち, 障壁が 1 次元的に定義されているとい

うことである。これにより波動関数は x 方向と (y, z) 方向に分離でき、問題を 1 次元に還元することが可能となる。また、座標系は x 軸を共通に持ち、各強磁性層で磁化方向を y 軸にとっている。強磁性体層 (I) と (III) の磁化方向のなす角度を θ_1 、強磁性体層 (III) と (V) の磁化方向のなす角度を θ_2 とする。

上記の系について、各層で平面波の波動関数を仮定し、各層の界面においてこれらの波動関数が滑らかに接続されるという条件から透過係数を正確に求めることができる。特に報告者は transfer matrix 法を用いて透過係数を計算している。この方法は接続条件を行列形式に表現するものであり、中間層の波動関数をあらわに考えなくてもよいという特徴がある。従って、二重接合のように界面が多数ある場合においても計算量を減らすことができる。なお、詳細は別の機会に譲る⁶⁾。

トンネル電流は、Tsu-Esaki の式⁷⁾をスピン偏極系に拡張し、ここで得られた透過係数 $T^\uparrow$ を用いて計算される。 $\uparrow$ スピン電子による電流は、バイアス電圧が Fermi エネルギーより小さいとき、即ち $eV < E_F^+ \equiv E_F + h_0$ (h_0 は交換分裂エネルギーの 1/2) のとき

$$J^\uparrow = \frac{2m\pi e}{h^3} \times \left\{ \int_0^{E_F^+ - eV} T^\uparrow(E_x, V, \{w\}, \theta_1, \theta_2) eV dE_x + \int_{E_F^+ - eV}^{E_F^+} T^\uparrow(E_x, V, \{w\}, \theta_1, \theta_2) (E_F^+ - E_x) dE_x \right\} \quad (2)$$

で与えられる。ただし $\{w\} \equiv w_1, w_2, w_3$ である。 $\downarrow$ スピン電子による電流は、(2) 式においてスピンを入れ替えて得られる。

3. 計算結果

本論文における計算対象として、強磁性層 (I), (III), (V) はすべて Fe とし、絶縁体層 (II), (IV) はどちらも Al_2O_3 とする。この場合、トンネル電流は T_{2g} 対称性を持つ電子により運ばれるという主張⁸⁾に従うことにして、バンド計算の結果から⁹⁾ Fermi エネルギー $E_F = 1.25$ eV、交換分裂エネルギー 1.9 eV とおく。接合の構造は、絶縁体層 (II): 1.5 nm、強磁性層 (III): 2.0 nm、絶縁体層 (IV): 2.6 nm とした。絶縁体層 Al_2O_3 のつくる障壁ポテンシャルの高さは理想的状態を考慮して 3 eV とした。

トンネル磁気抵抗比 (TMR) はトンネル電流 (2) 式を用いて次式で定義する：

$$\text{TMR} \equiv \frac{J_P - J_{AP}}{J_{AP}} \quad (3)$$

ここで、磁化のなす角度について、 $\theta_1 = \theta_2 = 0$ を平行配置 (P)、 $\theta_1 = -\theta_2 = \pi$ を反平行配置 (AP) と呼んでいる。

Fig. 1 Dependence of the tunnel magnetoresistance on the bias voltage (solid line). The current-voltage characteristics for parallel (dashed line) and antiparallel (dotted line) configurations are also shown.

Fig. 2 Current-voltage characteristics for parallel configuration. The solid line shows the total current, while the dashed and dotted lines show the contributions from the $\uparrow$ - and $\downarrow$ -spin electrons, respectively.

このように設定した二重強磁性トンネル接合について計算した結果を Fig. 1 に示す。この図から、バイアス電圧が 0.2 ~ 0.5 V の範囲で TMR が振動していることがわかる。Fig 1 にはバイアス電圧 1 V における平行配置電流値で規格化した電流-電圧特性が同時に示されている。これにより、平行配置のとき 0.3 V 付近で電流が小さなピークをもつことがわかる。一方、反平行配置のときはそのようなピークは見られず、単調に増加している。この違いを反映して TMR の振動が見えたと考えられる。

このようなピークが現れた原因を調べるために、トンネル電流をスピン分解する。Fig. 2 は、平行配置の場合のトンネル電流について、 $\uparrow$ スピンと $\downarrow$ スピンの寄与に分解して示したものである。この図から、 $\uparrow$ スピン電流は単調に増加しているのに対し、 $\downarrow$ スピン電流は 0.3 V 付近にピークをもち、減少した後さらに 0.45 V 以上で再び増加していくことがわかる。この特性は共鳴トンネ

ルに特有の依存性であると考えられる。従って、この系ではバイアス電圧 0.3 V が印加されたときに↓スピンの共鳴準位を介したトンネルが起こることにより TMR の増大が生じたといえる。その結果、Fig. 1 に示したような磁気抵抗比の振動が現れたと考えられる。

4. 考察

透過係数から共鳴条件を求めると次のようになる：

$$n\pi - k_{3\sigma_3}w_3 = \phi_{3\sigma_3} + \psi_{3\sigma_3}\kappa_2w_2 = \kappa_4w_4 \quad (4)$$

$$\phi_{3\sigma} \equiv \arctan\left(\frac{\kappa_2}{k_{3\sigma}}\right), \quad \psi_{3\sigma} \equiv \arctan\left(\frac{\kappa_4}{k_{3\sigma}}\right) \quad (5)$$

ここで $k_{3\sigma_3}$ は強磁性体層 (III) における電子の運動量、 $i\kappa_j$ ($j = 2, 4$) は絶縁体層 (II), (IV) における電子の運動量、 n は正整数である。この式によりポテンシャル井戸中の共鳴準位のエネルギーが決められる。さらに、完全な共鳴状態 (透過係数が 1) が形成されるためには、条件 $\kappa_2w_2 = \kappa_4w_4$ が必要である。ここで扱っている系においては絶縁体層 (II) と (IV) について障壁高さは等しいが厚さが異なるため、この条件は満たされていない。これは共鳴状態がないことを意味するものではなく、単に共鳴準位における透過係数が 1 にならないことを意味しているに過ぎないことを注意しておく。

平行配置における↓スピン電子について、ポテンシャル井戸と共鳴状態の様子を Fig. 3 に示す。図の (a), (b), (c) はそれぞれバイアス電圧が 0.0 V, 0.3 V, 0.5 V である。図中の x 軸はゼロバイアス時の Fermi エネルギーに対応している。この場合、ゼロバイアス (a) のときには共鳴準位は Fermi エネルギーの下に 1 個、上に 5 個、合計 6 個形成される。バイアス電圧が 0.3 V のときには下から二つの準位を介したトンネルが起こると考えられる。これらは (b) に点線で示されている。バイアス電圧が 0.5 V になると、(c) に示されるように、一番下の共鳴準位が左側電極のバンドの底より低くなってしまったため、この準位を介したトンネルは起こらない。下から 2 番目の準位については (b) と同様にこの準位を介してトンネルが起こる。これをトンネル電流の振る舞いとして見直すと、バイアス電圧が 0.3 V 付近まではバイアス電圧の上昇とともにトンネル電流は非線形に増加するが、その後共鳴準位の数が増えるためにトンネル電流は減少する。この振る舞いは Fig. 2 に示された↓スピン電流の振る舞いを説明していることがわかる。

Fig. 4 には平行配置における↑スピン電子に対して形成される共鳴準位を示した。Fig. 4 の (a), (b), (c) にはそれぞれバイアス電圧が 0.0 V, 0.3 V, 0.5 V の場合が示されている。ゼロバイアスのときは Fermi エネルギーの下に 5 個、上に 3 個、合計 8 個の共鳴準位が形成されている (Fig. 4(a))。バイアス電圧 0.3 V のときは (b) に示されるように準位が変化する。さらにバイア

Fig. 3 Bound states formed in the quantum well for ↓-spin electrons are shown for bias voltages of (a) 0.0 V, (b) 0.3 V, and (c) 0.5 V in the parallel configuration. The bound states, represented by dotted lines, correspond to the resonance.

ス電圧が 0.5 V になると (c) に点線で示された一つの共鳴準位を通して共鳴トンネルが起こる。↓スピンの場合と異なるのは、バイアス電圧が 0.5 V においても共鳴準位はバンドの底より大きな値を持っていることである。以上のことをトンネル電流の振る舞いとして見直してみると、トンネル電流はバイアス電圧の上昇とともに非線形に増加し、バイアス電圧が 0.5 V になっても減少することはないと考えられる。この振る舞いは Fig. 2 に示された↑スピン電流の振る舞いを説明していると考えられる。

Fig. 4 The bound states formed in the quantum well for $\uparrow$ -spin electron are shown for bias voltages of (a) 0.0 V, (b) 0.3 V, and (c) 0.5 V in the parallel configuration. The bound states, represented by dotted lines, correspond to the resonance.

従って、平行配置の場合にはバイアス電圧の増加に伴い $\downarrow$ スピン電子において最低エネルギー準位と下から2番目の準位を介して共鳴トンネルが起こり、さらに最低エネルギー準位がバンドの底より下に位置するようになることで電流が減少する。これがバイアス電圧 0.3 V を

越えたところに見られた負性微分抵抗に対応していると考えられる。

同様の解析を反平行配置の場合にも行うことができる。共鳴状態のエネルギー準位と数は、 $\uparrow$ スピン電子については、平行配置の $\downarrow$ スピン電子の場合と同じであり、 $\downarrow$ スピン電子については、平行配置の $\uparrow$ スピン電子の場合と同じである。なぜなら共鳴状態のエネルギー準位と数は(4)式により決まるためである。しかし、共鳴状態の現れ方は異なり、その結果、トンネル電流の振る舞いも異なる。この解析の結果、反平行配置の場合には $\uparrow$ スピンの寄与と $\downarrow$ スピンの寄与はバイアス電圧の増加に対しともに単調に増加するのみであり、全体として単調増加するトンネル電流が得られる。

以上のことから、平行配置の $\downarrow$ スピン電子に対してバイアス電圧約 0.3 V で生じる共鳴トンネルにより負性微分抵抗が現れることが確かめられた。これにより、バイアス電圧 0.3 V 付近でみられた磁気抵抗比の増大と振動は共鳴に起因すると考えられる。

5. まとめ

二重強磁性トンネル接合における電気伝導特性を自由電子モデルに基づいて調べた。特に共鳴トンネル効果と磁気抵抗比の関係に注目し、バイアス電圧約 0.3 V で磁気抵抗比の増大が見られることを示した。さらに、共鳴条件を導出することにより電流-電圧特性についてスピン依存性を詳細に解析し、磁気抵抗比の増大の起源を考察した。その結果、平行配置の $\downarrow$ スピン電流に負性微分抵抗が生じることが原因であることが分かった。

文 献

- 1) T. Miyazaki and N. Tezuka: *J. Magn. Magn. Mater.* **139**, L231 (1995); J. S. Moodera, L. R. Kinder, T. M. Wong and R. Meservey: *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3273 (1995).
- 2) J. C. Slonczewski: *Phys. Rev. B* **39**, 6995 (1988).
- 3) 岸, 猪俣: 日本応用磁気学会誌 **21**, 501 (1996); 岸, 猪俣: 同 **22**, 1150 (1998).
- 4) E. L. Wolf: *Principles of Electron Tunneling Spectroscopy*, (Oxford University Press, 1985).
- 5) X. Zhang, B.-Z. Li, G. Sun and F.-C. Pu: *Phys. Rev. B* **56**, 5484 (1997).
- 6) T. Kishi and K. Inomata: in preparation.
- 7) R. Tsu and L. Esaki: *Appl. Phys. Lett.* **22**, 562 (1973).
- 8) M. B. Stearns: *J. Magn. Magn. Mater.* **5**, 167 (1977).
- 9) T. Kishi: unpublished; P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, and S. B. Trickey: *Comput. Phys. Comm.* **59**, 399 (1990).