非磁性スペーサ層による TMR の量子振動の理論

Theoretical Study of Quantum Oscillation of TMR in Junctions with a Nonmagnetic Layer

伊藤博介*, 井上順一郎**, A. Umerski***, J. Mathon****

*名古屋大学大学院工学研究科量子工学専攻, 名古屋市千種区不老町 (〒464-8603)

**名古屋大学大学院工学研究科応用物理学専攻, 名古屋市千種区不老町 (〒464-8603)

***Department of Applied Mathematics, Open University, Milton Keynes, MK7 6AA, U.K.

****Department of Mathematics, City University, London EC1V 0HB, U.K.

H. Itoh*, J. Inoue**, A. Umerski***, and J. Mathon****

*Department of Quantum Engineering, Nagoya University, Nagoya 464-8603

**Department of Applied Physics, Nagoya University, Nagoya 464-8603

***Department of Applied Mathematics, Open University, Milton Keynes MK7 6AA, U.K.

****Department of Mathematics, City University, London EC1V 0HB, U.K.

We theoretically study quantum oscillation of tunnel magnetoresistance recently observed in junctions with a nonmagnetic spacer inserted at the interface. It is shown that momentum selection due to the insulating barrier and new conduction channels via quantum well states due to the disorder are crucial to explain the observed period of the oscillation in the TMR ratio and its asymptotic behavior.

Key words: tunneling junction, TMR, quantum well, quantum oscillation, stationary phase approximation, linear response

1. はじめに

磁性体をデバイスに組み込むことにより, 電子の持つスピンの自由度を積極的に利用して, 新たな機能を持つデバイスを開発しようとする試みが活発に行われている. 絶縁体薄膜(I)を強磁性体(FM)ではさんだ強磁トンネル接合は, 室温において数10%にも及ぶ大きな磁気抵抗効果を示す^{1), 2)}. この磁気抵抗効果はトンネル磁気抵抗(TMR)と呼ばれ, 磁気センサやMRAMへの応用が期待されている. しかしながら, 実用化に向けては, 高TMR比(外部磁場による電気抵抗の変化率)化や低抵抗化などの問題が残されている. これらの問題を克服するためには, TMRが物質の電子構造とどのように結びついているのかを明らかにする必要がある.

これまでの多くの研究により, トンネル接合の界面での電子状態がTMRに大きな影響を与えることが示されてきた^{3)~8)}. 例えば, 接合の界面にAuやCuあるいはCrといった非磁性スペーサ(NM)を挿入したFM/I/NM/FM接合において, NMの膜厚の増加とともにTMR比が単調に減少することが示されている^{9)~11)}. ZhangとLevyは, 不純物散乱等による電子の位相緩和を用いてTMR比の減少を説明した¹²⁾.

ところが最近, 下部単結晶電極を用いたNiFe/Al₂O₃/Cu/Co接合において, TMR比がCu層厚の関数として振動することが見出された¹³⁾. 観測されたTMR比の振動には次のような特徴がある. i)振動の周期は, Cuのフェルミ波数 k_F (フェルミ面上のbellyでの波数)によって与えられる単一周期である. そして, この周期は, 光電子分光¹⁴⁾および磁性金属人工格子における層間交換結合¹⁵⁾で見られる振動周期と一致している. ii)振動

の中心は, ほぼ0である. iii)振動の振幅は, Cu層厚の増加とともに減衰する. 以上のような特徴を持つTMR比の振動は, Cu層に形成された量子井戸による干渉効果であると考えられる. 実験結果は電子のコヒーレント伝導(電子の持つ位相の記憶が失われない伝導)を明確に示している. しかも, この実験は物質の電子構造(バンド構造)をはっきりと捉えており, TMRと物質の電子構造との関係を解明する糸口を与えうると考えられる. したがって, このTMRの量子振動現象を理論的に解明することは, 物性基礎論的な観点のみならず, 応用上も非常に重要な課題であるといえる.

不純物等による散乱を考えないで, 電子の持つ位相を正確に取り扱うことにより, TMRの量子振動を調べた理論もある^{16), 17)}. この理論ではTMR比はCu層厚の関数として振動するが, 得られた振動の周期は単一周期ではなく, Cuの k_F だけからは理解できない. さらに振動の中心は0ではなく, 最近の実験結果を説明できない¹⁶⁾.

これまでの理論^{12), 16)}のいずれも, 電子の持つ位相か, あるいは散乱の効果のどちらか一方のみしか考慮に入れておらず, TMRの量子振動を説明するにはいたってない. そこで本研究では, 電子の位相と散乱の効果の両方を, 同時に正確に取り扱うことにより, 実験で観測されたTMRの量子振動の理論的説明を試みる. 得られた結果は, 実験で観測されているTMR比の振動の特徴(周期, 中心および振幅)を良く再現している. またトンネル障壁による伝導電子の運動量選択則, および乱れによって生じる量子井戸状態を介した伝導チャンネルがTMRの量子振動現象を理解する上で不可欠であることが明らかとなったので, 以下に報告する.

2. モデルおよび方法

強磁性体(FM)/絶縁体(I)/非磁性スペーサ(NM)/強磁性体(FM)トンネル接合を考える. この系に対して, 単一軌道のタイト・バインディング模型を用いる. 結晶構造は簡単のため格子定数 a の単純立方格子とし, 接合の積層方向は(001)軸すなわち z -軸方向とする. ハミルトニアンは次式で与えられる.

$$H = -t \sum_{(i,j), \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{i, \sigma} V_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}. \quad (1)$$

ここで, $c_{i\sigma}^\dagger$ は格子点 i における, スピン σ ($=\uparrow, \downarrow$)の電子に対する消滅(生成)演算子であり, t および $V_{i\sigma}$ は電子の飛び移り積分, 格子点 i においてスピン σ を持つ電子の感じるポテンシャルを

Fig. 1 Schematic figures of the DOS (a) and potential profile (b) in an FM/I/NM/FM junction. In AP alignment, the magnetization of the right FM is opposite to that of the left FM.

表す。図 1(a)に、状態密度の模式図を示す。スピンの量子化軸を、左側の FM の磁化の向きに取る。磁性層の磁化が平行(P)配列しているときには、右側の FM の磁化は左側の FM の磁化と同じ向きであり、また反平行(AP)配列しているときには反対の向きであるとする。現実のトンネル接合の重要な 2 つの特徴(Co と Cu の電子構造、および Al_2O_3 がアモルファスであることを次のようにして取り入れる。Co の多数スピン電子のバンドと Cu のバンドはほぼ等しいと考えてよいので、左側の FM の $V_{\text{FM}\uparrow}$ と V_{NM} を等しいとする。図 1(b)のポテンシャルの模式図に示されるに、P 配列の場合には $\downarrow$ -スピン電子に対して、また AP 配列の場合には $\uparrow$ -スピン電子に対して NM 層に量子井戸が形成されることになる。また、絶縁障壁がアモルファスであることを、障壁の高さが空間的にランダムに分布しているとモデル化して、I の中では、 V_{i0} は $V_1 + \Delta V$ か $V_1 - \Delta V$ の値を等確率でランダムにとるとする。

線形応答理論(久保公式)とリカーシブ・グリーン関数法を用いて接合のコンダクタンスを計算する。磁化配列が P と AP 配列の場合に、それぞれ $\uparrow$ および $\downarrow$ -スピン電子に対するコンダクタンス($G_{\text{P}}^{\uparrow}, G_{\text{P}}^{\downarrow}, G_{\text{AP}}^{\uparrow}, G_{\text{AP}}^{\downarrow}$)を求める。左側の FM から入射した膜面に平行方向の波数ベクトル $\mathbf{k}_{\parallel}$ を持つ電子が、右側の FM の $\mathbf{k}'_{\parallel}$ の状態に透過していく際の透過係数 $t_{\text{P(AP)}}^{\sigma}(\mathbf{k}_{\parallel} \rightarrow \mathbf{k}'_{\parallel})$ を用いて、コンダクタンスは次のように表される。

$$G_{\text{P(AP)}}^{\sigma} = \frac{e^2}{h} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel}} t_{\text{P(AP)}}^{\sigma}(\mathbf{k}_{\parallel} \rightarrow \mathbf{k}'_{\parallel}) . \quad (2)$$

TMR 比は $\text{TMR} \equiv 1 - (G_{\text{AP}}^{\uparrow} + G_{\text{AP}}^{\downarrow}) / (G_{\text{P}}^{\uparrow} + G_{\text{P}}^{\downarrow})$ と定義する。また、I 中の乱れは、コヒーレントポテンシャル近似(CPA)を用いて取り扱い、乱れによる散乱の効果を電子の自己エネルギーに取り込む。また、この近似によって生じるコンダクタンスに対するパーテックス補正も、電流保存が成り立つように計算する^{18), 19)}。この方法とは別に、われわれは有限サイズクラスターに対する数値シミュレーション^{20), 21)}を実行し、2 つの方法で得られた結果が定性的に良く一致することを確認した。また、本論文では、絶縁体中に乱れを導入した場合の結果のみを示すが、NM/FM 界面に乱れを導入した場合の計算も行い、得られた結果が定性的に変わらないことを確認した。

3. 計算結果

数値計算を行う際に、 V_{NM} と左側の FM の $V_{\text{FM}\uparrow}$ の値を同じ

Fig. 2 Conductance (a) and TMR ratio (b) of clean junctions. Conductances for $\uparrow$ and $\downarrow$ spin electrons are denoted by $\blacktriangle$ (Δ) and $\bullet$ ($\circ$), respectively, for P (AP) alignment of magnetizations. Dashed lines are guides for the eye.

$2.382t$ にとり、また $V_{\text{FM}\downarrow} = 5.382t$, $E_{\text{F}} = 0$, $V_1 = 9.0t$ とした。絶縁体中に乱れがない場合には $\Delta V = 0$ 、乱れがある場合には $\Delta V = 0.5t$ とし、絶縁体の膜厚を $5a$ とした。ここでは、NM が無いトンネル接合に対して計算される TMR 比が実験で得られている値程度になるよう、また TMR 比の振動の周期が Cu の k_{F} によって与えられる振動の周期程度になるようにパラメータの値を選んだ。

3.1. 乱れのない接合の TMR

接合に乱れを含まない場合に計算されたコンダクタンスおよび TMR 比を図 2(a)と(b)に示す。NM 層に形成される量子井戸による干渉効果のため、 $G_{\text{P}}^{\downarrow}$ と $G_{\text{AP}}^{\uparrow}$ は、NM の膜厚 L_{NM} の増加とともに振動していることがわかる。この振動は、二つの異なる周期を持つ振動の重ねあわせとなっている。一つの周期は、NM のフェルミ波数 k_{F} によって与えられるものであり、もう一つの周期はフェルミ面の cut-off によって生じる波数 k_{cp} によって与えられる周期である。この k_{cp} によって与えられる振動は、磁性金属人工格子における CPP-GMR の理論^{22), 23)}で予言されたものと同じものであり、 k_{cp} は量子井戸の深さによって定義される²²⁾。 k_{F} の振動以外に、 k_{cp} の振動が現れる理由は、乱れがない場合には、膜面に平行方向の運動量 ($\mathbf{k}_{\parallel}$) が保存されなければならない、電気伝導に寄与することのできる状態が制限されるためである。フェルミ面上の状態のうち $\mathbf{k}_{\parallel}$ -保存則を満たす状態のみが、伝導に寄与する。この結果、井戸に閉じ込められた状態(量子井戸状態)は伝導に寄与できないため、 k_{cp} の振動が現れる。今の場合 k_{F} と k_{cp} は、 $k_{\text{F}} = 4\pi/5a$, $k_{\text{cp}} = 2\pi/3a$ となっている。したがって、 k_{F} と k_{cp} によって与えられるコンダクタンスの振動の周期は、それぞれ $5a$ と $3a$ である。また、図 2 (b)に示される TMR 比の振動の周期は、コンダクタンスの振動周期と一致している。また、TMR 比の振動は 0 の周りではなく、正の有限値の周りとなっている。これらの結果は、以前の不純物等による散乱を考慮していない理論から得られる結果と定性的に良く一致している¹⁶⁾。

今考えているトンネル接合と磁性金属人工格子との大きな違

Fig. 3 Conductance (a) and TMR ratio (b) of disordered junctions. The notation is the same as in Fig. 2. Solid lines are obtained by the stationary phase approximation. In (b), open squares denote TMR ratios estimated from the DOS model and dashed-and-dotted lines denote $1/L_{\text{NM}}$ dependence.

いは、トンネル障壁の存在である。トンネル障壁に斜めに入射する ($\mathbf{k}_{\parallel} \neq 0$) 電子より、垂直に入射する電子 ($\mathbf{k}_{\parallel} = 0$) の方が障壁内での波動関数の減衰率が小さいので、透過しやすい。障壁が十分厚ければ、トンネル障壁が運動量のフィルタとして働き、 $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ の状態が電気伝導を支配する ($\mathbf{k}_{\parallel}$ -選択則)。このため、われわれの計算で I の膜厚を増加させていくと、斜め入射に相当する k_{cp} によって与えられる振動は、垂直入射に相当する k_{F} によって与えられる振動に比べて振幅が弱くなる。 I の膜厚が十分大きくて、 k_{F} による振動周期のみが TMR 比の振動に残ったとしても、すでに述べたように、接合に乱れがないような理想的な場合には、界面に挿入した NM がいくら厚くなっても TMR 比は 0 とならず実験結果^[13] とは一致しない。

3.2. 乱れを含む接合の TMR

図 3(a) と (b) に、 I 中に乱れを含む接合に対して計算されたトンネルコンダクタンスおよび TMR 比を示す。 $G_{\text{P}}^{\uparrow}$ 、 $G_{\text{P}}^{\downarrow}$ と $G_{\text{AP}}^{\downarrow}$ は乱れによってほとんど影響を受けていないのに比べ、 $G_{\text{AP}}^{\uparrow}$ は明らかに増加しており $G_{\text{P}}^{\uparrow}$ の周りで振動していることがわかる。また、 $G_{\text{AP}}^{\uparrow}$ の振動周期も k_{F} によって与えられる $5a$ の単一の周期となっている。このため、TMR 比は乱れによって減少し、0 の周りに k_{F} の振動周期で振動している。

乱れによる $G_{\text{AP}}^{\uparrow}$ の増加およびその振動周期の変化を理解するために、 $\mathbf{k}_{\parallel}$ の波数ベクトルを持つ電子が左の FM から入射した際の透過確率 $T_{\text{AP}}^{\uparrow}(\mathbf{k}_{\parallel}) \equiv \sum_{\mathbf{k}'_{\parallel}} t_{\text{AP}}^{\uparrow}(\mathbf{k}_{\parallel} \rightarrow \mathbf{k}'_{\parallel})$ を図 4 に示す。乱れがない場合には、 $\mathbf{k}_{\parallel}$ -空間の Γ 点 ($\mathbf{k}_{\parallel} = 0$) まわりのほんの狭い領域の状態のみが $T_{\text{AP}}^{\uparrow}$ に寄与している。一方、乱れがある場合には、 $T_{\text{AP}}^{\uparrow}$ に寄与する状態が広い領域に広がっていることがわ

Fig. 4 $\mathbf{k}_{\parallel}$ -dependence of transmission probabilities $T_{\text{AP}}^{\uparrow}$ calculated for clean (a) and disordered (b) junctions.

かる。これは、乱れによって生じる diffusive 散乱 ($\mathbf{k}_{\parallel}$ を保存しない散乱) のためである。系に乱れがない場合には、フェルミ面上の状態の中で、 $\mathbf{k}_{\parallel}$ -保存則を満たす状態だけが電気伝導に寄与することができる。一方、系に乱れがある場合には、diffusive 散乱のためにフェルミ面上のすべての状態が伝導に寄与できるようになる。特に注目すべきは、図 4(b) において、乱れがないときには $T_{\text{AP}}^{\uparrow}$ に寄与していなかった $\mathbf{k}_{\parallel}$ -空間の領域で、円周上に鋭いピークが存在することである。この鋭いピークは、NM 層に形成される量子井戸状態に対応する $\mathbf{k}_{\parallel}$ の位置に存在している。このことから、乱れによって、NM 中に閉じ込められた量子井戸状態を介した新たな伝導チャンネルが生まれ、これがコンダクタンスに対して大きな寄与をしていることがわかる。

図 4(b) からわかるように、乱れがある場合には左側の FM のフェルミ面上のすべての状態が $T_{\text{AP}}^{\uparrow}$ に寄与しており、これは P 配列の場合の $T_{\text{P}}^{\uparrow}$ と同じ状況になっている。このため、 $G_{\text{AP}}^{\uparrow}$ の平均値 (振動の中心の値) は、乱れによって $G_{\text{P}}^{\uparrow}$ と同程度まで増加する (図 3(a) を参照)。この diffusive 散乱によるコンダクタンスの増加は、左側と右側の FM のフェルミ面の大きさが異なる AP 配列の場合に顕著に現れる。したがって、 $G_{\text{P}}^{\uparrow}$ と $G_{\text{P}}^{\downarrow}$ は乱れによってほとんど変化しない。また、 $G_{\text{AP}}^{\downarrow}$ については、この場合、NM 層に量子井戸が形成されないため (図 1(b) 参照)、乱れによる影響は小さい。以上のことから、 I 中の乱れによって TMR 比が減少し、0 の周りに振動することが理解できる。また、図 4(a) で見られた Fermi 面のシャープな cut-off が、乱れによって取り除かれたために、乱れのない場合に $G_{\text{AP}}^{\uparrow}$ の振動に見られた k_{cp} による振動は弱められ、その結果として、TMR 比には k_{F} による振動のみが残ることになる。

3.3. 状態密度モデルとの比較

強磁性トンネル接合の TMR を直感的に理解するモデルとして、状態密度モデルがある^{24), 25)}。状態密度モデルでは、TMR 比は、絶縁体をはさむ金属のスピンの分極率を用いて表される。このモデルを、今考えている系に適用して TMR 比を見積もってみる。ただし、状態密度としてバルクの状態密度を用いると、非磁性スペーサのスピンの分極率はゼロとなるので、代わりに表面の状態密度(左側の FM 表面における局所状態密度と、右側の FM 上に積層された膜厚 L_{NM} の NM 表面における局所状態密度)を用いることにする。図 3(b)に状態密度モデルから見積もられた TMR 比を□印で示す。状態密度モデルから見積もられた TMR 比は、 L_{NM} の増加とともに振動していることがわかる。この振動の周期は、NM の k_F によって与えられる周期となっている。これが振動する原因は、FM 上に積層された NM の表面状態密度がスピンの分極し、その分極率が L_{NM} の増加とともに振動するためである。しかしながら、このスピンの分極は非常に小さいため、状態密度モデルは、3.2 節で計算した TMR 比の結果を再現しない。このことから、TMR の大きな量子振動は状態密度のスピンの分極だけでは理解できなく、むしろそれ以外の効果(量子井戸が電気伝導におよぼす効果)のほうが重要であるということが明らかとなった。

3.4. Stationary phase 近似

乱れを含む場合の TMR 比の計算結果を stationary phase 近似を用いて再現できるか調べてみる。ここで、stationary phase 近似とは、振動に対するフェルミ面の鞍点近傍の寄与を漸近的な振る舞いの範囲($L_{\text{NM}} \rightarrow \infty$)で見積もる近似であり、磁性金属人工格子の層間交換結合に対して適用され、その振動を説明してきた¹⁵⁾。コンダクタンス G をフーリエ展開すると、

$$G = \text{Re} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \sum_r c_r(\mathbf{k}_{\parallel}) e^{2ir k_{\parallel}(\mathbf{k}_{\parallel}) L a}, \quad (3)$$

のようになる。ここで、 C_r は r 次のフーリエ係数であり、 $k_{\parallel}$ は波数ベクトルの電流方向(z -軸方向)成分である。これを、フェルミ面上の鞍点 $\mathbf{k}_{\parallel}^0$ のまわりで展開し、さらにガウス積分を実行することにより、次式を得る。

$$G \approx G^0 + \frac{N_{\parallel}}{4\pi} \text{Re} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\tau m^*}{rL} c_r(\mathbf{k}_{\parallel}^0) e^{2ir k_{\parallel}(\mathbf{k}_{\parallel}^0) L a}. \quad (4)$$

ただし m^* , τ は次式で与えられる。

$$m^* = |m_x \cdot m_y|^{1/2}, \quad (5)$$

$$m_{\alpha} = \left[\partial^2 (k_{\perp} a) / \partial (k_{\alpha} a)^2 \right]_{\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel}^0}^{-1}, \quad (6)$$

$$\tau = \begin{cases} -i: m_x, m_y > 0 \\ 1: m_x \cdot m_y < 0 \end{cases}. \quad (7)$$

本研究で用いているモデルでは、 $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ がフェルミ面の鞍点を与え、 $k_F = k_{\perp}(\mathbf{k}_{\parallel} = 0)$ である。

乱れを含まない接合に対する計算結果から、コンダクタンスの定数項 G^0 、および振動項のフーリエ係数 $c_r(\mathbf{k}_{\parallel} = 0)$ を求める。これを用いて乱れがある場合のコンダクタンスおよび TMR 比を見積もった結果を、図 3(a), (b)に実線で示す。図からわかるように、stationary phase 近似は、NM の膜厚が薄い部分($L_{\text{NM}} < 5$)を除いて、3.2 節で計算されたコンダクタンスと TMR 比の振動の周期、振幅および位相を非常によく再現する。このことから、振動の周期は NM の k_F によって与えられる単一周期的であるということが再確認され、また振動の振幅が $1/L_{\text{NM}}$ で減衰することも明らかとなった。

Fig.5 TMR ratio of disordered junctions. The values of the mean free path in NM λ_{NM} are ∞ (○), $\sim 50a$ (■), and $\sim 5a$ (▲).

3.5. NM 中の散乱の効果

これまででは、NM 中に乱れがない、つまり NM 中の平均自由行程が無大であるとして計算を行ってきた。次に、NM 中の散乱が TMR の量子振動に与える影響について調べる。NM 中に不純物を導入し、これを I 中の乱れと同様に CPA で取り扱う。不純物ポテンシャルを変化させることにより、いくつかの NM 中の平均自由行程 λ_{NM} の値に対して、TMR 比を計算した結果を図 5 に示す。振動の周期は、不純物散乱による平均自由行程によらない。しかし、振動の振幅は、平均自由行程が短くなるにつれて、 $1/L_{\text{NM}}$ よりも速く減衰することがわかる。特に、 λ_{NM} が振動の周期程度になると、 $1/L_{\text{NM}}$ からのずれは顕著になる。平均自由行程が短くなるにつれ振動が速く減衰するようになるのは、不純物散乱のために電子の持つ位相の干渉効果が弱められるためであると考えられる。解析の結果、振幅の減衰は、ほぼ $1/L_{\text{NM}} \times \exp(-L_{\text{NM}}/\lambda_{\text{NM}})$ に比例することがわかった。

4. 議論

本研究では、TMR 比の振動の振幅が NM の膜厚 L_{NM} の増加とともに、 $1/L_{\text{NM}} \times \exp(-L_{\text{NM}}/\lambda_{\text{NM}})$ に比例して減衰することがわかった。実験で用いられる Cu スペーサの平均自由行程が数 100Å と TMR 比の振動の周期に比べずっと長ければ、振幅は $1/L_{\text{NM}}$ で減衰すると考えてよい。この $1/L_{\text{NM}}$ 依存性は、磁性金属人工格子における層間交換結合の振幅が $1/(L_{\text{NM}})^2$ で減衰することと同様に、異なるさまざまな周期を持つ振動が重なり合い、互いに打ち消しあうことに起因している。また、非磁性スペーサの平均自由行程が振動の周期に比べてずっと短いような場合には、TMR 比はほぼ単調に減少するように見えるであろう。このような状況が、以前の実験結果^{9)~11)}や位相緩和を用いた理論¹²⁾に相当するのではないかと考える。また、最近の鈴木らの理論では、振動の振幅が $\exp(-L_{\text{NM}}/\lambda_{\text{NM}})$ で減衰するとの報告がある²⁶⁾。TMR 比の振動がどのように減衰するかを明らかにすることは、Fermi 面上のどの電子がどれくらい伝導に寄与するのか、電子が伝導過程でどのように位相を緩和していくのかを知る上で非常に重要であり、実験結果との詳細な比較、検討が今後必要である。

本研究では、比較的単純なモデルを用いて TMR 比の振動を調べてきた。TMR 比の振動がバイアス印加によってどのように変化するかを明らかにするためには、より現実的な電子構造を

取り入れる必要がある²⁶⁾。現在のところ、現実的な電子構造と、乱れの効果を同時に正確に取り扱うことは容易ではない。しかしながら、本研究では、stationary phase 近似を用いて、乱れのある接合に対して計算された TMR 比の振動をよく記述できることを示した。今後は、このような手法を用いて、より詳細な電子構造を計算に取り入れ、実験結果と理論の定量的な比較を行うことが重要になるであろうと考える。

5. まとめ

本研究では、電子の位相と散乱の効果を正確に取り扱うことにより、最近の実験で観測された TMR の量子振動に対する理論の説明を試みた。得られた結果は、実験で観測されている TMR 比の振動の特徴(周期, 中心および振幅)を定性的に良く再現している。トンネル障壁による $k_{\parallel}$ -選択則, および diffusive 散乱による量子井戸準位を介した新たな伝導チャンネルが、観測された TMR 比の振動の特徴を理解するのに本質的であることが明らかとなった。

また、磁性金属人工格子における層間交換結合に対して用いられてきた stationary phase 近似による手法が、TMR の量子振動現象に対しても有用であることも示された。この手法を用いてより現実的な電子構造を理論に取り入れることにより、理論と実験の定量的な比較が可能となり、TMR と物質の電子構造との関係の解明に近づくことができると期待する。

謝 辞 非常に有益な議論をしていただいた CREST 鈴木チームの方々に感謝します。また、本研究の一部は、伊藤が日本学術振興会特定国派遣研究者として英国に滞在中に行ったものである。

文 献

- 1) T. Miyazaki and N. Tezuka: *J. Magn. Magn. Mater.*, **139**, L231 (1995).
- 2) J. S. Moodera, L. R. Kinder, T. M. Wong, and R. Meservey: *Phys. Rev. Lett.*, **74**, 3273 (1995).
- 3) J. M. MacLaren, X. -G. Zhang, and W. H. Butler: *Phys. Rev.*, **B56**, 11827 (1997).
- 4) J. Mathon and A. Umerski: *Phys. Rev.*, **B63**, 220403 (2001).
- 5) J. M. De Teresa, A. Barthélémy, A. Fert, J. P. Contour, R. Lyonnet, F. Montaigne, P. Seneor, and A. Vaurès: *Phys. Rev. Lett.*, **82**, 4288 (1999).
- 6) H. Itoh and J. Inoue: *J. Magn. Soc. Jpn.*, **24**, 583 (2000) (in Japanese).
- 7) I. I. Oleinik, E. Yu. Tsymbal, and D. G. Pettifor: *Phys. Rev.*, **B62**, 3952 (2001).
- 8) J. Inoue, and H. Itoh: *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **35**, 2432 (2002).
- 9) J. S. Moodera, J. Nowak, L. R. Kinder, P. M. Tedrow, R. J. M. van de Veerdonk, B. A. Smith, M. van Kampen, H. J. M. Swagten, and W. J. M. de Jonge: *Phys. Rev. Lett.*, **83**, 3029 (1999).
- 10) J. J. Sun and P. P. Freitas: *J. Appl. Phys.*, **85**, 5264 (1999).
- 11) P. LeClair, H. J. M. Swagten, J. T. Kohlhepp, R. J. M. van de Veerdonk, and W. J. M. de Jonge: *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 2933 (2000).
- 12) S. Zhang and P. M. Levy: *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 5660 (1998).
- 13) S. Yuasa, T. Nagahama and Y. Suzuki: *Science*, **297**, 234 (2002).
- 14) J. E. Ortega and F. J. Himpsel: *Phys. Rev. Lett.*, **69**, 844 (1992).
- 15) J. Mathon, Murielle Villeret, A. Umerski, R. B. Muniz, J. d'Albuquerque e Castro and D. M. Edwards: *Phys. Rev.*, **B56**, 11797 (1997).
- 16) J. Mathon and A. Umerski: *Phys. Rev.*, **B60**, 1117 (1999).
- 17) A. Vedyayev, N. Ryzhanova, C. Lacroix, L. Giacomoni, and B. Dieny: *Europhys. Lett.*, **39**, 219 (1997).
- 18) J. Mathon, M. Villeret, and H. Itoh: *Phys. Rev.*, **B52**, R6983 (1995).
- 19) J. Mathon, A. Umerski, and M. Villeret: *Phys. Rev.*, **B55**, 14378 (1997).
- 20) H. Itoh, A. Shibata, T. Kumazaki, J. Inoue, and S. Maekawa: *J. Phys. Soc. Jpn.*, **69**, 1632 (1999).
- 21) H. Itoh, J. Inoue, S. Maekawa, and P. Bruno: *J. Magn. Soc. Jpn.*, **23**, 52 (1999).
- 22) H. Itoh, T. Kumazaki, J. Inoue and S. Maekawa: *Jpn. J. Appl. Phys.*, **37**, 5554 (1998).
- 23) H. Itoh, Y. Naito, and J. Inoue: *J. Magn. Soc. Jpn.*, **24**, 587 (2000) (in Japanese).
- 24) M. Julliere: *Phys. Lett.*, **54A**, 225 (1975).
- 25) S. Maekawa and U. Gafvert: *IEEE Trans. Magn.*, **IMAG-18**, 707 (1982).
- 26) Y. Suzuki, E. Tamura, T. Nagahama, and S. Yuasa: *Digests of the 26th annual conference on magnetism in Japan*, 22 (2002) (in Japanese).

2002 年 10 月 7 日受理, 2002 年 11 月 20 日採録