

УДК 538.9

ВЛИЯНИЕ БЕСПОРЯДКА В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ МАГНИТНОГО СПЛАВА $Fe_{1-x}Co_x$ НА ПРОЦЕССЫ СПИНОЗАВИСИМОГО ТУННЕЛИРОВАНИЯ

И.Н. Марушенко^{1,2}, В.Н. Карпан², Н.А. Азаренков¹, П.Д. Келли²

¹ Харьковський національний університет імені В.Н. Каразіна
 пр. Курчатова, 31, 61108 Харків, Україна

² Університет Твенте

Дринерлолаан 5, 7500 АЕ Енсхеде, Нідерланди

E-mail: i.marushchenko@gmail.com

Received 15 November 2011, revised 18 May 2012

В статье приводятся результаты численного исследования влияния беспорядка в кристаллической решетке ферромагнитного сплава $Fe_{1-x}Co_x$ на туннелирование в магнитных туннельных переходах $Fe_{1-x}Co_x$ / вакуум / $Fe_{1-x}Co_x$. С помощью расчетов из первых принципов, с учетом электронной структуры туннельного перехода, показано, что беспорядок в кристаллической решетке оказывает сильное влияние на спин-поляризованный перенос в случае небольшой концентрации примесных атомов, и практически не влияет в случае, когда содержание кобальта в сплаве становится выше 40%. Полученный результат важен для понимания механизмов, ответственных за эффект большого туннельного магнитосопротивления.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: спин-поляризованный перенос, магнитный туннельный переход, поверхностные состояния, беспорядок

INFLUENCE OF SUBSTITUTIONAL DISORDER IN MAGNETIC ALLOY $Fe_{1-x}Co_x$ ON SPIN-DEPENDENT TUNNELING

I.N. Marushchenko^{1,2}, V.M. Karpan², N.A. Azarenkov¹, P.J. Kelly²

¹ V. N. Karazin Kharkiv National University

31 Kurchatov St., Kharkov, 61108, Ukraine

² University of Twente

Drienerloolaan 5, 7500 AE Enschede, The Netherlands

A quantitative study of the influence of substitutional disorder on the transport properties of $Fe_{1-x}Co_x$ / вакуум / $Fe_{1-x}Co_x$ magnetic tunnel junctions is presented. From the first principle calculations with taking into account the parameter-free electronic structure it has been found that the substitutional disorder produces a strong effect on the spin-polarized transport in the limit of low concentration of Co in $Fe_{1-x}Co_x$ alloy, and is negligible when the concentration of cobalt in alloy is larger than 40%. The obtained results are important for understanding the mechanisms responsible for the giant tunneling magnetoresistance.

KEY WORDS: spin-polarized transport, magnetic tunnel junction, surface states, disorder

ВПЛИВ БЕЗЛАДУ У КРИСТАЛІВІЙ ГРАТЦІ МАГНІТНОГО СПЛАВУ $Fe_{1-x}Co_x$ НА ПРОЦЕСИ СПІНОЗАЛЕЖНОГО ТУННЕЛЮВАННЯ

І.М. Марушенко^{1,2}, В.М. Карпан², М.О. Азаренков¹, П.Д. Келлі²

¹ Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

пр. Курчатова 31, 61108 Харків, Україна

² Університет Твенте

Дринерлолаан 5, 7500 АЕ Енсхеде, Нідерланди

У статті приведено результати числового дослідження впливу безладу у кристалівій ґратці ферромагнітного сплаву $Fe_{1-x}Co_x$ на тунелювання у магнітних тунельних переходах $Fe_{1-x}Co_x$ / вакуум / $Fe_{1-x}Co_x$. За допомогою розрахунків з перших принципів, виходячи з розрахованої електронної структури тунельного переходу, доведено, що безлад у кристалівій ґратці завдає дуже сильну дію на спин-поляризований перенос у випадку, коли концентрація кобальта у сплаві відносно мала, та майже невідчутно у випадку, коли концентрація кобальта у сплаві перевищує 40%. Отриманий результат важливий для розуміння механізмів, що відповідні за ефект гігантського тунельного магнетопору.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: спин-поляризований перенос, магнітний тунельний перехід, поверхневі стани, безлад

Туннельное магнитосопротивление (ТМС) описывает зависимость сопротивления магнитного туннельного перехода (МТП) ферромагнетик / вакуум / ферромагнетик от относительной ориентации направления магнетизации ферромагнитных электродов при переключении их из параллельной в антипараллельную конфигурацию: $TMS = (R_{AP} - R_P) / R_P = (G_P - G_{AP}) / G_{AP}$. Со времени открытия больших значений ТМС в МТП со сверхтонким слоем аморфного Al_2O_3 в качестве изолятора [1], значительные усилия были приложены к изучению возможности применения этого эффекта в сенсорах и как основы для элементов энергонезависимой памяти. Понимание природы ТМС было существенно затруднено сложностью экспериментальной характеристики границы раздела ферромагнетик / изолятор. Было показано [2], что химическая структура границы раздела имеет сильное влияние на величину и поляризацию ТМС, и правильное ее описание является критически важным для теоретического анализа МТП. Ситуация существенно изменилась с наблюдением

больших значений ТМС при комнатных температурах в FeCo/MgO/FeCo МТП, в которых туннельный барьер был моно- [3,4] или поликристаллическим [5]. Эта работа была частично мотивирована теоретическим предсказанием [6,7] огромных значений ТМС для идеальных Fe/MgO/Fe МТП. Это привело к новому направлению исследований в этой области, и одним из существенных вопросов стало объяснение разницы между огромными значениями ТМС, предсказанными теоретически (порядка 10 000 %) [6], и гораздо более скромными значениями 353%, полученными экспериментально [4]. Были попытки объяснить эту разницу как в терминах релаксации атомов на поверхности ферромагнетика [8], так и образованием оксидного слоя FeO на границе раздела [9,10]. В работе [11] исследовано влияние атомного беспорядка в кристаллической решетке на границе раздела металл/вакуум, связанного с неидеальностью поверхностей, полученных методом электронно-лучевой эпитаксии, когда в граничном слое лишь часть узлов решетки занята атомами железа, а оставшиеся узлы остаются пустыми (при этом предполагалось, что сама кристаллическая решетка на границе раздела сохраняет симметрию). Было показано, что огромные значения ТМС в идеальных МТП связаны с резонансным туннелированием, которое очень чувствительно к симметрии границы раздела между электродом и изолятором, так что даже очень малое нарушение симметрии этой границы снижает предсказанные значения ТМС на один-два порядка.

В данной работе рассматривается другой эффект, действующий в том же направлении, что и вышеуказанные. Во многих экспериментах в качестве электродов используется ферромагнитный сплав $Fe_{1-x}Co_x$, который удобен тем, что обладает наибольшим магнитным моментом среди металлов переходной группы. Однако, в случае, когда кристаллическая решетка заполняется атомами разного типа (в данном случае, Fe и Co), имеет место нарушение симметрии кристаллической решетки в том смысле, что, вообще говоря, нарушается трансляционная симметрия элементарной ячейки, и транспорт через такие МТП может существенно зависеть от кластеризации атомов каждого типа в решетке, то есть от конкретной конфигурации беспорядка в каждом конкретном образце. В реальной системе с электродами на основе ферромагнитного сплава имеют место оба эффекта одновременно, но мы исследуем их отдельно один от другого, чтобы иметь возможность сравнить эффективность их влияния на туннелирование (см. рис.1). С этой же целью в качестве изолятора был выбран слой вакуума, позволяющий изучать туннелирование через барьер, но не привносящий никаких новых эффектов, связанных с собственной электронной структурой туннельного барьера. Это также делает результаты данного исследования относительно универсальными, не привязанными к конкретному выбору туннельного барьера. Отметим также, что результаты могут иметь и самостоятельную ценность, так как существуют работы, в которых напрямую измерялась туннельная проводимость через вакуумный слой [12-16].

Таким образом, целью работы является исследование того, насколько сильно влияет беспорядок в кристаллической решетке на туннелирование в МТП с идеально ровной границей раздела.

ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ И ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В работе исследуется туннельный спиновый транспорт в МТП в режиме линейного отклика в приближении локальной плотности спинов в рамках теории функционалов плотности.

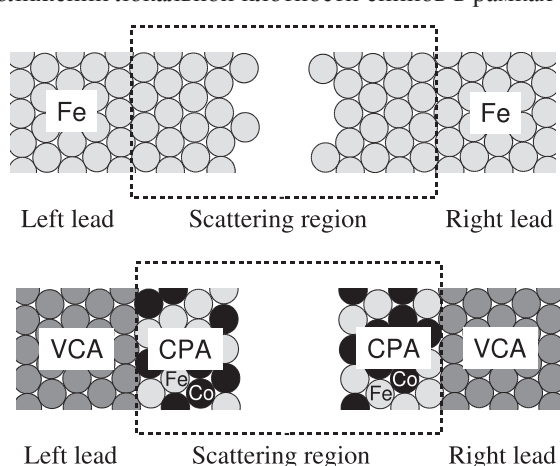


Рис.1. Показан МТП Fe / вакуум / Fe для случая с идеальной кристаллической решеткой и неровностью на границе раздела (вверху), и МТП $Fe_{1-x}Co_x$ / вакуум / $Fe_{1-x}Co_x$ для случая с беспорядком в атомной решетке, вызванном наличием примесных атомов, но с идеальной границей раздела (внизу). Атомы Fe обозначены серым цветом, а атомы Co черным. Область рассеяния представлена вакуумным барьером и 4 ферромагнитными монослоями с каждой из сторон.

В исследуемой модели МТП типа ФМ / вакуум / ФМ состоит из трех областей: левый и правый подводящие провода, состоящие из ферромагнетика, и область рассеяния (см. рис.1). Провода обладают трехмерной блоховской симметрией, тогда как область рассеяния рассматривается как область, состоящая из атомных слоев с двумерной периодичностью (перпендикулярно к направлению переноса).

Беспорядок в кристаллической решетке изучается в соответствии с моделью, представленной схематически на рис.1 (внизу). Предположим, что беспорядок имеет место только в области рассеяния, тогда как подводящие провода имеют идеальную кристаллическую решетку (это необходимо для того, чтобы размеры рассматриваемой системы были конечными). Размер области рассеяния в представленных вычислениях составляет 16 атомных монослоев: 4 атомных монослоя $Fe_{1-x}Co_x$ с каждой стороны барьера и 8 монослоев вакуумного барьера. Ниже будет предложено обоснование такого выбора.

Исследование состоит из двух этапов. На первом этапе рассчитывается электронная структура

и магнитные свойства МТП, которые были получены с помощью техники поверхностных функций Грина [17], разработанной в рамках метода «линейных маффин-тин орбиталей» (ЛМТО) с сильной связью в приближении атомных сфер (ПАС) [18]. Потенциалы атомных сфер барьера и нескольких атомных монослоев ферромагнетика на каждой из сторон барьера были рассчитаны самосогласовано, а в качестве потенциалов полубесконечных резервуаров (проводов) были взяты значения для соответствующих блоховских потенциалов. На втором этапе полученные выше самосогласованные потенциалы используются для расчета матриц трансмиссии, используя метод стыковки волновых функций для «маффин-тин орбиталей» в приближении сильной связи, в соответствии с модифицированной схемой Андо [19]. Используя эти матрицы, проводимость рассчитывается в соответствии с транспортным формализмом Ландауэра [20]. Более подробное описание метода можно найти в работах [21, 22].

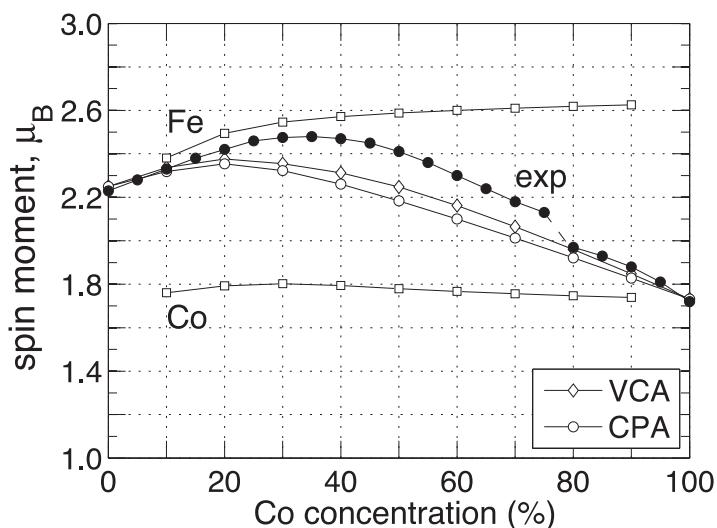


Рис.2. Кривая Слэтэра-Паулинга (зависимость спинового магнитного момента от атомного числа металла). Вычисления проведены для двух случаев: идеальный МТП, описываемый в приближении ПВК (VCA), и МТП, в котором беспорядок в атомной решетке учтен в приближении ПКП (CPA). Квадратными символами показаны значения спинового магнитного момента для атомов Fe и Co, которые определяют магнитный момент $Fe_{1-x}Co_x$ сплава в приближении ПКП. Также приведены экспериментальные результаты, взятые из классической книги Бозорта [26].

проверили этот вариант и получили немного меньшие значения для магнитного момента сплавов $Fe_{1-x}Co_x$ для различных концентраций.

Согласно предлагаемой модели, беспорядок присутствует только в области рассеяния, тогда как в подводящих проводах кристаллическая решетка идеальна. Это необходимо для того, чтобы размеры рассматриваемой системы были конечными. Беспорядок в атомной решетке моделируется с помощью приближения когерентных потенциалов - ПКП (coherent potential approximation - CPA) [25]. Этот же подход использовался для расчетов беспорядка на границе раздела в МТП [11], только теперь вместо пустых сфер атомы Fe смешиваются с атомами Co для моделирования сплава $Fe_{1-x}Co_x$ при заданной концентрации x . При этом, так как каждая конкретная конфигурация беспорядка (распределение атомов Fe и Co по узлам решетки в суперячейке) дает для проводимости значение, которое может отличаться на десятки процентов от значений проводимости, даваемых другими конфигурациями, все результаты для проводимости, приведенные в статье, являются усредненными по множеству случайных конфигураций беспорядка. В качестве референсной системы, как и в предыдущем случае [11], рассмотрим идентичную систему, максимально близко повторяющую распределение потенциалов, но имеющую идеальную кристаллическую решетку (т.е. с полной трансляционной инвариантностью в плоскости, перпендикулярной транспорту). Таким образом, в качестве альтернативной модели для моделирования сплава $Fe_{1-x}Co_x$ было выбрано приближение виртуального кристалла – ПВК (virtual crystal approximation - VCA), согласно которому вместо реальных атомов кристаллическая решетка заполняется виртуальными $Fe_{1-x}Co_x$ атомами, физические характеристики которых, такие как атомный номер, заряд и т.д., определяются по формулам, аналогичным закону Вегарда. Для того, чтобы убедиться, что приближение ПВК дает корректные результаты, проведено сравнение результатов расчета кривой Слэтэра-Паулинга (зависимости магнитного момента от атомного числа металла) для сплава $Fe_{1-x}Co_x$, полученных в приближении ПКП с результатами, полученными для виртуального кристалла, смоделированному согласно методу ПВК. Полученные

Постоянная решетки для bcc Fe взята равной $a_{Fe}=2,866$ А, но Co обычно не встречается в виде bcc , поэтому постоянная решетки для bcc Co выбрана таким образом, чтобы атомная решетка bcc Co имела такой же объем, как и hcp Co, и соответствующее значение равно $a_{Co}=2,817$ А. Это приближение нам понадобилось для того, чтобы мы смогли моделировать сплав $Fe_{1-x}Co_x$ как функцию x для исследования эффекта влияния беспорядка в атомной решетке сплава на туннельный магнитный резонанс (ТМР). Из экспериментов известно, что Fe и Co образуют bcc сплав для концентраций в интервале от $x = 0,0$ до $x \leq 0,7$, где происходит фазовый переход в hcp [23]. Для простоты предположим, что сплав $Fe_{1-x}Co_x$ имеет кристаллическую bcc структуру для всех концентраций Co, причем сплав подчиняется закону Вегарда, в соответствии с которым его постоянная решетки определяется по формуле $(1-x)a_{Fe} + xa_{Co}$, где x – концентрация Co в сплаве. Отметим, что закон Вегарда не является единственно возможным способом определения постоянной решетки для различных сплавов. Можно использовать такую постоянную решетки, для которой полная энергия имеет минимум [24]. Мы

результаты (см. рис.2) хорошо согласуются с экспериментальными [26], особенно если учесть, что в нашей работе не учитывается наличие фазового перехода от *bcc* к *hcp* при концентрации Co выше 70%. Также важно отметить, что в вычислениях магнитного момента пренебрегается вкладом от орбитального момента, и рассматривается только спиновую часть. Полученные результаты хорошо согласуются с аналогичными результатами, полученными теоретически [24]. Но самым важным является то, что ПВК дает почти полное совпадение с ПКП, и ошибка первого относительно второго при расчете магнитного момента не превышает 4-5%. Таким образом, этот метод действительно можно использовать для моделирования ферромагнитного сплава. Используя ПВК, можно также построить *bcc* решетку с идеальной трехмерной трансляционной симметрией, которая будет моделировать подводящие провода (резервуары) МТП как в случае беспорядка, так и в случае идеального МТП (см. рис.1). С одной стороны, наличие идентичных резервуаров означает одинаковый уровень Ферми в системе в обоих случаях (с беспорядком и без), так что можно сравнивать результаты напрямую. С другой стороны, это позволяет хорошо стыковать кристаллические решетки на границе раздела между резервуаром и областью рассеяния, избежав рассеяния, которое могло возникнуть в ином случае. Важно отметить, что везде в этой статье граница раздела металл - вакуум предполагается идеальной, и беспорядок имеет место только в кристаллической структуре ферромагнетика. Постоянные решетки для Fe и Co соответствуют радиусу атомных сфер Вигнера-Зейтца, составляющих 2,677 и 2,621 боровских радиусов соответственно. Туннельный барьер моделируется с помощью так называемых «пустых сфер». Область барьера заполняется «пустыми» атомными сферами с нулевыми зарядом и атомным числом, но того же размера, что и в ферромагнитных контактах, которые размещаются в узлах *bcc* решетки, идентичной кристаллической решетке ферромагнитного сплава.

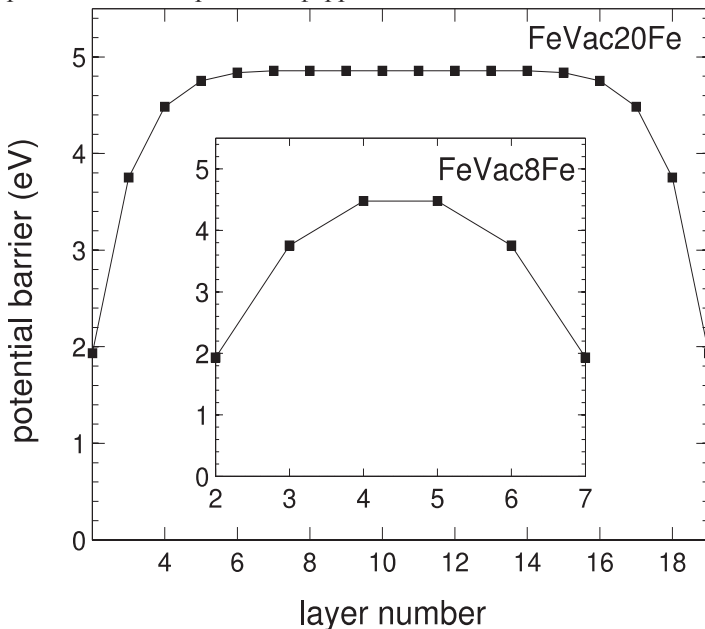


Рис.3. Профиль потенциального барьера с железными электродами, рассчитанный для двух случаев: 1) толстый барьер в 20 атомных монслоёв, и 2) относительно тонкий барьер толщиной в 8 монслоёв, используемый нами для расчетов, приведенных ниже в статье.

по форме скорее близок к параболическому, причем его высота приблизительно равна 4,7 eV, что находится в хорошем согласии с экспериментальным значением для работы выхода Fe, равной 4,5 eV [27].

Следующий вопрос состоит в том, какого размера должна быть область рассеяния, чтобы в достаточной степени учесть беспорядок в кристаллической решетке. Для того, чтобы ответить на этот вопрос, проверим, как изменяется сопротивление МТП при увеличении толщины ферромагнитного сплава от 4 до 12 монслоев. Полученные результаты показывают, что усредненное сопротивление МТП при этом практически не меняется, и разброс значений, связанный с использованием различных конфигураций беспорядка, намного более значительный, чем тот, что связан с уменьшением области рассеяния. Выбранная для расчетов толщина ферромагнитного слоя в 4 монслоя связана также с тем, что именно в четвертом монслое (в направлении, перпендикулярном транспорту) магнитный момент, сильно меняющийся в слоях, непосредственно прилегающих к границе раздела ферромагнетик / вакуум, практически перестает чувствовать влияние границы, и его вариация от слоя к слою становится незначительной, асимптотически приближаясь к магнитному моменту кристалла с полной трансляционной инвариантностью во всех трех кристаллографических направлениях.

Прежде чем перейти к непосредственным вычислениям для ферромагнитного сплава, следует убедиться, что туннельный барьер смоделирован правильно, рассчитав его потенциальный профиль. Для этого нужно проанализировать самосогласованные потенциалы для соответствующих «пустых сфер» каждого монслоя в области вакуумного барьера и определить потенциал в центре каждой из неидентичных атомных сфер. Отметим, что этот потенциальный профиль рассчитывался только для области, в которой потенциалы почти плоские. Результирующий профиль показан на рис.3. Отсюда видно, что для очень толстого вакуумного слоя (порядка 20 монслоёв) форма потенциального барьера близка к прямоугольной. Однако основная часть наших расчетов выполнена для барьеров толщиной в восемь атомных монслоёв (см. рис.3), так как проводимость экспоненциально падает с увеличением толщины барьера, и для более толстых барьеров величина трансмиссии становится сравнима с точностью транспортного кода (10^{-9}). Как видно из рис.3, потенциальный профиль для такого барьера существенно отличается от прямоугольного и

В данной работе мы рассматриваем транспорт в направлении (001), оставляя атомы на границах раздела в нерелаксированных позициях, то есть в строго заданных узлах *bcc* решетки. Все самосогласованные расчеты выполнены в *spd*-базисе и обменно-корреляционные потенциалы посчитаны и параметризованы в соответствии со схемой Бардина и Хедина [28]. Интегрирование по двухмерной зоне Бриллюэна выполнено с сеткой k_{\parallel} , достаточно плотной для хорошей сходимости результатов. Для расчетов с учетом беспорядка в кристаллической решетке использовались двумерные суперячейки размером 10×10 (то есть 100 атомов).

ВЛИЯНИЕ БЕСПОРЯДКА В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ НА ТУННЕЛИРОВАНИЕ

Рассмотрим теперь туннелирование в МТП в случае, когда электроды сделаны из ферромагнитного сплава $Fe_{1-x}Co_x$ с идеально ровной границей раздела металл / вакуум.

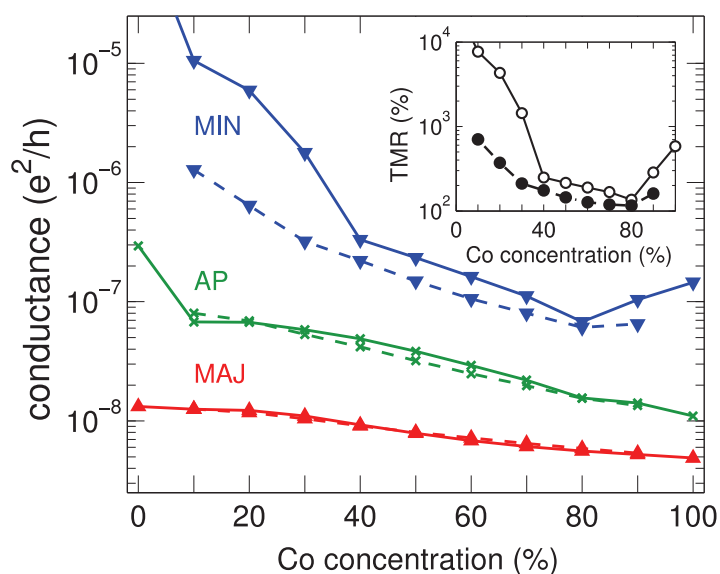


Рис.4. Усредненные по конфигурациям проводимости магнитного туннельного перехода $Fe_{1-x}Co_x$ / вакуум / $Fe_{1-x}Co_x$ с толщиной барьера 8 монослоев, показаны как функции концентрации примесного элемента Co для каждого из каналов проводимости: спин-вверх (MAJ) и спин-вниз (MIN) в случае параллельной конфигурации спинов, а также для антипараллельной конфигурации спинов (AP). Во вставке показана зависимость ТМС от концентрации Co. Пустые кружки соответствуют вычислениям для идеального случая (ПВК), а черные кружки соответствуют вычислениям для случая с беспорядком (ПКП).

На рис.4 представлены результаты вычислений проводимости для отдельных спиновых каналов в параллельной и антипараллельной конфигурации. Видно, что каналы с антипараллельной конфигурацией спинов и канал “спин-вверх” для параллельной конфигурации практически не отличаются друг от друга, однако значительные изменения наблюдаются в канале “спин-вниз”, и прежде всего для малых концентраций примеси. Для того, чтобы объяснить это поведение, следует исследовать поверхностные состояния в рассматриваемой системе. Для идеальных систем существуют состояния, “живущие” на поверхности $Fe_{1-x}Co_x$ сплава в канале “спин-вниз”. Благодаря различному числу валентных электронов для разных концентраций x , положение поверхностного состояния относительно уровня Ферми будет постепенно меняться.

На рис.5 представлены результаты вычисления плотности состояний, полученные для вышеописанного случая. Плотность состояний Δ_1 (состояний со сферической симметрией) в точке k_{\parallel} , которая находится близко к центру зоны Бриллюэна, посчитана для фиксированной толщины барьера, но разных концентраций примеси Co. Для того, чтобы можно было увидеть эти пики, было использовано уширение, заданное комплексной энергией $\eta = 0,0025$ Ry. Видно, что значительный вклад от резонансного туннелирования стоит ожидать для малых концентраций примеси. По мере дальнейшего увеличения концентрации Co уровень Ферми уходит в сторону от поверхностного резонанса. Это отражено в поведении проводимости в канале “спин-вниз” как функции концентрации примеси, показанной на рис.4. Таким образом, высокие значения проводимости “спин-вниз” могут быть отнесены на счет резонансного туннелирования. С увеличением концентрации Co проводимость в этом канале уменьшается, так как уменьшается вклад от резонансных состояний. Беспорядок кристаллической решетки приводит к разрушению точечной группы симметрии, эффективно увеличивая полуширину резонанса Γ , что в свою очередь приводит к снижению туннелирования. При $x = 40\%$

Целесообразно рассмотреть два случая: один соответствует идеальному случаю (сохраняется трансляционная инвариантность элементарной ячейки в плоскости, перпендикулярной направлению переноса спина), другой соответствует системе с беспорядком, когда есть два типа атомов, которые распределены по узлам решетки случайным образом в соответствии с заданной концентрацией основного металла Fe и примеси Co. На рис.4 показаны результаты расчетов для проводимости различных концентраций сплава $Fe_{1-x}Co_x$ с шагом в 10%.

С увеличением концентрации x примесных атомов не только усиливается беспорядок в кристаллической решетке, но также меняется и соответствующая электронная структура сплава, поскольку уровень Ферми сдвигается вверх. Чтобы различать эти два эффекта, сначала проведем вычисления, в которых магнитный сплав моделируется в приближении ПВК. В этом случае можно наблюдать эффект, вызванный изменением уровня Ферми, не включающий беспорядок. Затем посчитаем проводимость, учитывая беспорядок с помощью приближения ПКП, и сравним эти результаты с результатами, полученными в предыдущем случае, можем делать вывод о влиянии беспорядка в атомной решетке на туннелирование в МТП.

поверхностные резонансы более не дают существенного вклада, и эффект от беспорядка в кристаллической решетке в этом случае довольно мал. Для больших концентраций Co проводимость довольно хорошо описывается в приближении ПВК. Таким образом, наибольший вклад в суммарную проводимость резонансное туннелирование дает для очень малых значений x , когда уровень Ферми и резонансный пик совпадают.

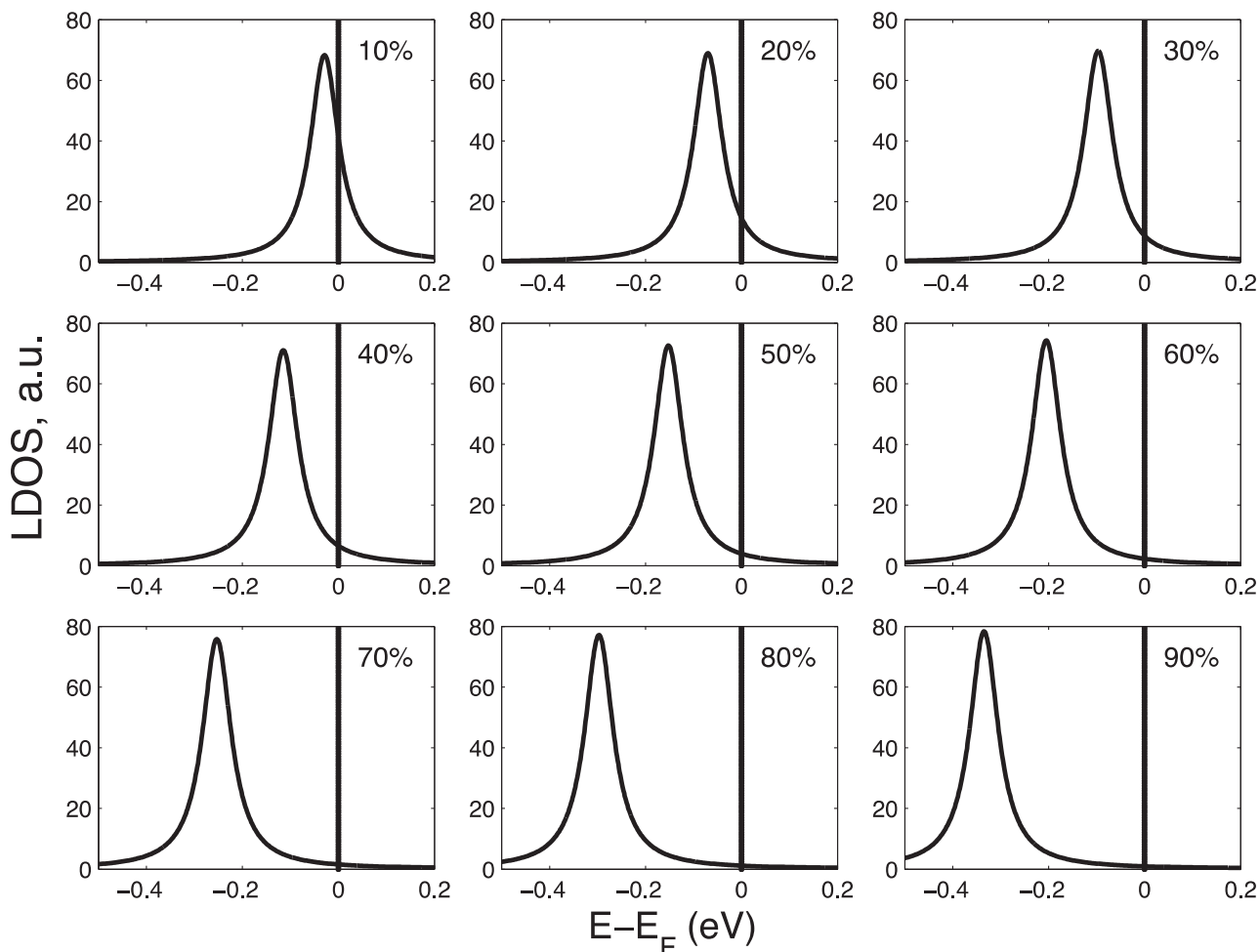


Рис.5. Результаты для локальной плотности состояний (LDOS), посчитанной для разных значений x в приближении ПВК. Смещение уровня Ферми системы относительно поверхностного состояния (которое остается неизменным) приводит к уменьшению локальной плотности состояний на уровне Ферми при увеличении концентрации Co .

Таким образом, беспорядок в кристаллической решетке действует так же, как и беспорядок на границе раздела металл / вакуум, а именно, снижая огромные значения туннельного магнитного сопротивления (ТМС), найденные для эквивалентной системы без беспорядка, хотя и значительно менее эффективно.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Если сравнить исследуемую здесь систему $Fe_{1-x}Co_x$ / вакуум / $Fe_{1-x}Co_x$ и МТП, основанный на MgO , обнаружится, что разница между ними скорее количественная, чем качественная (опуская подробности вычислений). В обоих случаях резонансное туннелирование очень важно и наблюдается только в канале «спин-вниз», а его причиной является поверхностное состояние на поверхности Fe в кристаллографическом направлении (001). Никакого резонансного туннелирования не было обнаружено в канале «спин-вверх», потому что в этом случае поверхностное состояние лежит намного ниже уровня Ферми. Однако, в случае MgO было обнаружено, что вклад в проводимость от канала «спин-вниз» для некоторых определенных значений толщины барьера значительно меньше, чем те, что наблюдаются здесь. Недооценка резонансного туннелирования приводит к ситуации, когда проводимость «спин-вверх» начинает доминировать в параллельной конфигурации, как было обнаружено для MgO барьеров.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Moodera J.S., Kinder L.R., Wong T.M., Meservey R. Large Magnetoresistance at Room Temperature in Ferromagnetic Thin Film Tunnel Junctions // *Phys. Rev. Lett.* – 1995. – Vol.74. – P.3273-3276.
2. De Teresa J.M., Barthelemy A., Fert A., Contour J.P., Montaigne F., Seneor P. Role of Metal-Oxide Interface in Determining the Spin Polarization of Magnetic Tunnel Junctions // *Science.* – 1999. – Vol.286. – P.507-509.
3. Yuasa S., Nagahama T., Fukushima A., Suzuki Y., Ando K. Giant room-temperature magnetoresistance in single-crystal Fe/MgO/Fe magnetic tunnel junctions // *Nature Materials.* – 2004. – Vol.3. – P.868-871.
4. Yuasa S., Katayama T., Nagahama T., Fukushima A., Kubota H., Suzuki Y., Ando K. Giant tunneling magnetoresistance in fully epitaxial body-centered-cubic Co/MgO/Fe magnetic tunnel junctions // *Appl. Phys. Lett.* – 2005. – Vol.87. – P.222508-222510.
5. Parkin S.S.P., Kaiser C., Panchula A., Rice P.M., Hughes B., Samant M., Yang S.H. Giant tunnelling magnetoresistance at room temperature with MgO (100) tunnel barriers // *Nature Materials.* – 2004. – Vol.3. – P.862-867.
6. Butler W.H., Zhang X.G., Schulthess T.C., MacLaren J.M. Spin-dependent tunneling conductance of Fe|MgO|Fe sandwiches // *Phys. Rev. B.* – 2001. – Vol.63. – P.054416-054427.
7. Mathon J., Umerski A. Theory of tunneling magnetoresistance of an epitaxial Fe/MgO/Fe(001) junction // *Phys. Rev. B.* – 2001. – Vol.63. – P.220403-220406(R).
8. Wortmann D., Bihlmayer G., Bluegel S. Ab initio calculations of interface effects in tunnelling through MgO barriers on Fe(100) // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2004. – Vol.16. – P.S5819-S5822.
9. Zhang X.G., Butler W.H., Bandyopadhyay A. Effects of the iron-oxide layer in Fe-FeO-MgO-Fe tunneling junctions // *Phys. Rev. B.* – 2003. – Vol.68. – P.092402-092405.
10. Tusche C., Meyerheim H.L., Jedrecy N., Renaud G., Ernst A., Henk J., Bruno P., Kirschner J. Oxygen-Induced Symmetrization and Structural Coherency in Fe/MgO/Fe(001) Magnetic Tunnel Junctions // *Phys. Rev. Lett.* – 2005. – Vol.95. – P.176101-176104.
11. Marushchenko I.N., Karpan V.N., Azarenkov N.A., Kelli P.D. Vliyanie besporyadka na granitse razdela na protsessy spinovavisimogo tunnelirovaniya // *The Journal of Kharkiv National University, physical series: Nuclei, Particles, Fields.* – 2010. – Vol.916. – P.110-116.
12. Stroscio J.A., Pierce D.T., Davies A., Celotta R.J., Weinert M. Tunneling Spectroscopy of bcc (001) Surface States // *Phys. Rev. Lett.* – 1995. – Vol.75. – P.2960.
13. Alvarado S.F. Tunneling Potential Barrier Dependence of Electron Spin Polarization // *Phys. Rev. Lett.* – 1995. – Vol.75. – P.513-516.
14. Okuno S.N., Kishi T., Tanaka K. Spin-polarized tunneling spectroscopy of Co(0001) Surface States // *Phys. Rev. Lett.* – 2002. – Vol.88. – P.066803.
15. Ding H.F., Wulfhekel W., Henk J., Bruno P., Kirschner J. Absence of Zero-Bias Anomaly in Spin-Polarized Vacuum Tunneling in Co(0001) // *Phys. Rev. Lett.* – 2003. – Vol.90. – P.116603.
16. Bischoff M.M.J., Yamada T.K., Fang C.M., de Groot R.A., van Kempen H. Local electronic structure of Fe(001) surfaces studied by scanning tunneling spectroscopy // *Phys. Rev. B.* – 2003. – Vol.68. – P.045422.
17. Turek I., Drchal V., Kudrnovsky J., Sob M., Weinberger P. *Electronic Structure of Disordered Alloys, Surfaces and Interfaces.* – Boston-London-Dordrecht, Kluwer, 1997.
18. Andersen O.K., Pawlowska Z., Jepsen O. Illustration of the linear-muffin-tin-orbital tight-binding representation: Compact orbitals and charge density in Si // *Phys. Rev. B.* – Vol.34. – P.5253-5269.
19. Ando T. Quantum point contacts in magnetic fields // *Phys. Rev. B.* – 1991. – Vol.44. – P.8017-8027.
20. Datta S. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems.* – Cambridge, Cambridge University Press, 1997.
21. Xia K., Kelly P.J., Bauer G.E.W., Turek I., Kudrnovsky J., Drchal V. Interface resistance of disordered magnetic multilayers // *Phys. Rev. B* – Vol.63. – P.064407.
22. Xia K., Zwierzycki M., Talanana M., Kelly P.J., Bauer G.E.W. First-principles scattering matrices for spin transport // *Phys. Rev. B* – 2006. – Vol.73. – P.064420.
23. Schwarz K., Mohn P., Blaha P., Kubler J. Electronic and magnetic structure of BCC Fe-Co alloys from band theory // *J. Phys. F: Met. Phys.* – 1984. – Vol.14. – P.2659.
24. MacLaren J.M., Schulthess T.C., Butler W.H., Sutton R., McHenry M. Electronic structure, exchange interactions, and Curie temperature of FeCo // *J. Appl. Phys.* – 1999. – Vol.85. – P.4833.
25. Soven P. Coherent-Potential Model of Substitutional Disordered Alloys // *Phys. Rev.* – 1967. – Vol.156. – P.809-813.
26. Bozort R. *Ferromagnetizm* – Moskva, Izdatel'stvo inostrannoy literatury, 1956.
27. Skriver L., Rosengaard N.M. Surface energy and work function of elemental metals // *Phys. Rev. B* – 1992. – Vol.46. – P.7157-7168.
28. von Barth U., Hedin L. A local exchange-correlation potential for the spin polarized case. I // *J. Phys. C: Sol. State Phys.* – 1972. – Vol.5. – P.1629.