

СПИНОВАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В ТУННЕЛЬНЫХ КОНТАКТАХ $\text{Co}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}/\text{MgO}/\text{InSb}$

Н. А. Виглин ^{a*}, В. М. Цвелиховская ^a, А. О. Шориков ^{a,b}, Т. Н. Павлов ^a, В. В. Проглядо ^a

^a Институт физики металлов им. М. Н. Михеева
Уральского отделения Российской академии наук
620108, Екатеринбург, Россия

^b Уральский федеральный университет им. Б. Н. Ельцина
620002, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 26 февраля 2024 г.,
после переработки 27 апреля 2024 г.
Принята к публикации 6 мая 2024 г.

Методом магнетронного напыления и безмасочной фотолитографии изготовлены латеральные спиновые устройства с туннельными контактами $\text{Co}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}/\text{MgO}/\text{InSb}$. Измерены вольт-амперные характеристики и сопротивление контактов, а также эффект Ханле при диффузии поляризованных электронов между контактами. В рамках первопринципной молекулярной динамики выполнены расчеты зонной структуры в сверхъячейках, моделирующих интерфейсы Co/MgO и MgO/InSb . Показано что на границе интерфейса Co/MgO для блоховских состояний электронов возникает существенная спиновая поляризация. Вследствие этого вероятности прохождения через слой диэлектрика и через интерфейсы ферромагнетик/диэлектрик, диэлектрик/полупроводник для этих электронов различные. Вычислены высота и ширина туннельных барьеров на основании анализа вольт-амперных характеристик туннельных контактов. Показано, что более высокая степень поляризации достигается в туннельных контактах с большей высотой барьера и более высоким сопротивлением. Показано, что в интерфейсе MgO/InSb из-за большой разницы величин параметров решеток высока вероятность образования дефектов, не позволяющих достичь высоких поляризационных характеристик туннельных контактов.

DOI: 10.31857/S0044451024090074

1. ВВЕДЕНИЕ

Инжекция поляризованных по спину электронов из ферромагнитного (ФМ) металла в немагнитный металл или полупроводник является давней целью теоретических и экспериментальных исследований спиновой электроники [1]. Особую привлекательность представляет спиновая инжекция в полупроводники, поскольку использование углового момента электрона (спина) как дополнительного параметра для контроля и управления состоянием электронов может существенно расширить функциональные возможности существующих полупроводниковых приборов [2, 3]. Для приборов на основе кремния даже разработаны новые направления проектирования и создания устройств, использующих спин электронов [4, 5]. Не меньший интерес представляет инжекция спин-поляризованных электро-

нов в полупроводники группы $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$. Например, в светоизлучающих устройствах на основе полупроводника GaAs возникает поляризованная люминесценция [6, 7]. В полупроводнике InSb инжекция поляризованных электронов может вызвать отклонение от равновесной заселенности спиновых уровней и даже их инверсию и, как следствие, генерацию электромагнитного излучения [8].

Однако простая схема спиновой поляризации электронов в немагнитном материале при инжекции электронов из ФМ-металла через омический контакт оказалась неработоспособной. Опыты [9] по инжекции поляризованных электронов из пермаллоя в Al показали чрезвычайно малую эффективность этой схемы. Попытки обнаружить в полупроводнике InAs поляризованные электроны, инжектированные через омические контакты с ФМ-металлом (пермаллой, Co, Ni), также не увенчались успехом [10]. Крайне низкая эффективность инжекции спин-поляризованных электронов из ФМ-метал-

* E-mail: viglin@imp.uran.ru

ла в полупроводники подтверждалась расчетами в работе [11]. Было показано, что если проводимости полупроводника и ферромагнетика равны, то в полупроводнике может быть достигнута только небольшая спиновая поляризация. Если проводимость полупроводника много меньше, чем ФМ-металла, а поляризация электронов ФМ-металла меньше 100 %, то поляризация электронов в полупроводнике пренебрежимо мала. Коротко вывод формулируется как «несоответствие проводимостей» (the conductivity mismatch) ФМ-металла и полупроводника. В терминах сопротивлений (величин обратных проводимостям), сопротивление r_F ферромагнетика много меньше сопротивления r_N полупроводника, $r_F \ll r_N$. Такое «несоответствие» наблюдается в подавляющем большинстве реальных ФМ-металлов и полупроводников.

В 2000 г. появились работа Рашба [12], в которой для решения проблемы несоответствия сопротивлений ферромагнетика и полупроводника ($r_F \ll r_N$) предлагалось расположить между ФМ-металлом и полупроводником тонкий слой диэлектрика, образующего туннельный контакт (ТК), спин-зависимое сопротивление которого, r_C , должно быть больше сопротивления полупроводника r_N , $r_C \geq r_N$. Сопротивление ТК экспоненциально растет с увеличением толщины слоя диэлектрика [13], и регулирование величины сопротивления слоя сводится к подбору его толщины. Труднее создавать ТК с тонким слоем диэлектрика и небольшим сопротивлением r_C , соизмеримым с r_N , поскольку когда толщина диэлектрического слоя равна или меньше величины средней шероховатости подложки, высока вероятность возникновения в слое сквозных отверстий (pinhole) [14].

Акцентируем внимание на зависимости сопротивления ТК от направления спина. В работе [12] предположение о существовании такой зависимости основывались на экспериментальных данных, полученных при исследованиях полупроводников силовым туннельным микроскопом с ФМ-иглой из Ni [15]. Исследования показали, что возникает спиновая поляризация туннельного тока, причем величина ее возрастает с уменьшением ширины туннельного барьера. Туннельный барьер представлял собой слой вакуума между полупроводником и ФМ-иглой. Необходимо отметить, что проводимость слоя вакуума не обладает какой-либо спиновой зависимостью. Так же не очевидна спиновая зависимость туннельной проводимости в диэлектрике, однако такая зависимость была предсказана с помощью теоретических расчетов. Для Fe/MgO/Fe [16], Co/MgO/Co и FeCo/MgO/FeCo [17] были проделаны

расчеты из первых принципов, показывающие наличие спин-зависимого сопротивления в ТК. Зависимость туннельного сопротивления от направления спина вытекала из-за разной вероятности переходов для электронов со спином вверх и спином вниз между состояниями с s -, p -, и d -симметрией в ФМ-металле и диэлектрике [18]. Расчеты проводились для сплошного однородного диэлектрика MgO, параметр решетки которого искусственно увеличивался для эпитаксиального согласования с параметрами ФМ-металлов. Материалы электродов и диэлектрика обладали одинаковой кристаллической ОЦК-структурой. Можно предполагать, что для ТК с неоднородной пленкой диэлектрика, со структурными искажениями и дефектами, спиновая зависимость сопротивления станет слабее или совсем исчезнет. Однородность пленки диэлектрика является одним из главных критериев качества ТК. Требования к свойствам пленки диэлектрика следующие. Диэлектрический слой должен быть однородным, плоским, не содержать сквозных отверстий и обладать совместимостью как с ФМ-металлом, так и с полупроводником [19]. Наиболее распространенный способ оценки качества ТК: «разумное» соответствие толщины d_C слоя диэлектрика и высоты ϕ_C потенциального барьера, предполагаемое при его изготовлении и вычисленное на основании анализа вольт-амперных характеристик (ВАХ) в какой-нибудь теоретической модели, например, работы [20].

Таким образом, представляется актуальным провести систематические исследования в одних и тех же латеральных спиновых устройствах сопротивления, поляризационных характеристик, а также ширины и высоты ТК, вычисленных при анализе ВАХ, для сопоставления этих параметров.

Для изучения поляризационных характеристик ТК Co_{0.9}Fe_{0.1}/MgO/InSb мы исследовали величину эффекта Ханле при диффузии поляризованных электронов между контактами, а для получения информации о сопротивлении, ширине и высоте туннельного барьера исследовались ВАХ контактов. Также были выполнены расчеты зонной структуры в сверхъячейках, моделирующих интерфейсы Co/MgO и MgO/InSb в рамках первопринципной молекулярной динамики. Нашей задачей было выяснение влияния параметров туннельного барьера на эффективность инжекции спин-поляризованных электронов из ФМ-металла в полупроводник InSb.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Исследования проводились в латеральных спиновых устройствах, подобных описанному в работе [21], изготовленных на грани (110) монокристаллических пластин InSb с концентрацией электронов $n = 1.64 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$. ТК между электродами из $\text{Co}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}$ и InSb были изготовлены из тонких слоев MgO, полученных магнетронным распылением мишени из оксида магния.

Латеральные устройства имели по шесть ФМ-электродов со структурой $\text{Co}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}(60 \text{ нм})/\text{MgO}(1.8 \text{ нм})$, пересекающих узкое окно, созданное методами фотолитографии в пленке фоторезиста, расположенной на пластине InSb (горизонтальная полоса на рис. 1). Толщина фоторезиста 1 мкм, пластины InSb — порядка 0.5 мм. Вертикальные полосы — ФМ-электроды (показано только пять электродов) с условной нумерацией слева направо от №1 до №6. К концам электродов присоединены токоподводящие дорожки, заканчивающиеся контактными площадками (на рисунке не показаны). Площадь туннельного контакта определяется произведением ширины полупроводникового канала на ширину ФМ-электрода.

Величина спиновой поляризации электронов P_n^N в полупроводнике рассчитывалась на основании измеренных напряжений, которые были получены при электрическом детектировании спин-поляризованных электронов. Метод детектирования основан на зависимости величины и знака контактной разности потенциалов полупроводника и ФМ-контакта от взаимной намагниченности этого контакта и электронного газа в полупроводнике под ним. Возникновение потенциала интерпретируется спин-зарядовой связью Джонсона–Силеби [9]. Также это явление в терминах, связанных с энергией электронов, объясняется отклонением величины химического потенциала поляризованных электронов, находящихся на расстояниях порядка длины спиновой диффузии вблизи инжектора, от химического потенциала неполяризованных электронов, расположенных вдали от инжектора. Для определения энергии электронов, расположенных в локальных областях кристалла, вводится понятие квазихимического потенциала [1]. Особенность электрического детектирования спинового состояния электронов заключается в необходимости выделения слабого электрического сигнала, обусловленного локальной намагниченностью электронного газа, из более сильных сигналов, вызванных движением электронов полупроводника в электрическом поле вблизи намагниченных ФМ-

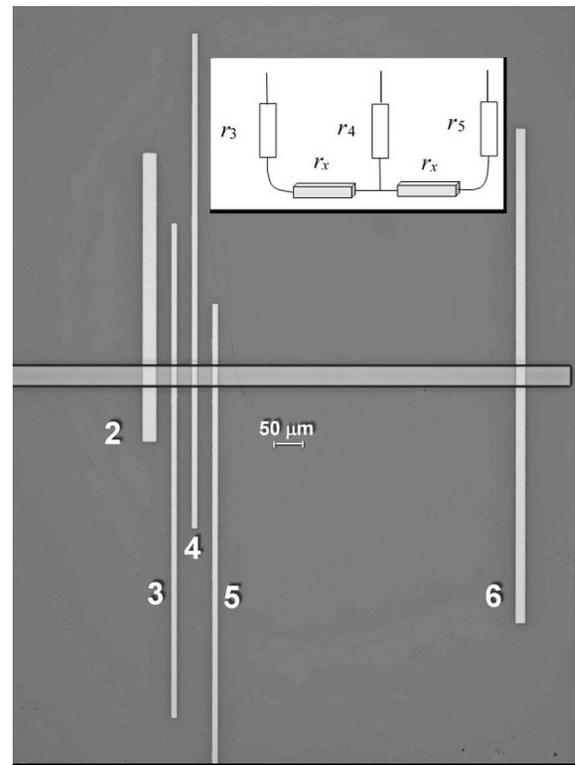


Рис. 1. Фотография латерального спинового устройства со структурой ТК $\text{Co}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}(60 \text{ нм})/\text{MgO}(1.8 \text{ нм})/\text{InSb}$. Горизонтальная полоса в центре — InSb, вертикальные полосы — электроды $\text{Co}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}$. Вставка: упрощенная схема электрических цепей между электродами № 3, № 4 и № 5

контактов. Для снижения уровня этих сигналов используется метод так называемых нелокальных измерений, при которых измерительная цепь детектора пространственно отделена от электрической цепи инжектора, создающей ток электронов в полупроводнике (рис. 2). Электроны, инжектируемые из контакта №3 в полупроводник, могут дрейфовать под действием электрического поля в направлении контакта №1, образующего вместе с инжектором цепь электрического тока, со скоростью $v_d = -\mu E$, где μ — подвижность электронов в полупроводнике, E — электрическое поле. Также эти электроны за счет диффузии могут смещаться во все стороны со скоростью диффузии $v_s = L_s^N/\tau_s$, где L_s^N — длина спиновой диффузии в немагнитном полупроводнике, τ_s — время спиновой релаксации. Измерения проводятся в режиме малых токов, когда $v_s \gg v_d$. Контакт №4 (детектор) расположен вне цепи электрического тока на дистанции d от инжектора №3, соизмеримой с длиной L_s^N . Потенциал контакта №4 (детектора) измеряется относительно контакта №6,

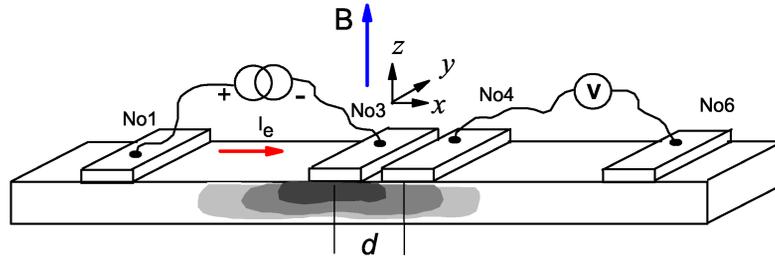


Рис. 2. Схема устройства для измерений электрических сигналов, обусловленных диффузией спинполяризованных электронов. ФМ-электроды № 1, № 3, № 4, № 6, намагничены вдоль оси y , расположены на поверхности полупроводникового канала, в котором происходит спиновый транспорт. Ток I_e течет от №1 к №3. Под №3 затемнением с разной контрастностью условно показано облако поляризованных по спину электронов, степень поляризации которых по мере диффузии от инжектирующего электрода убывает. Нелокальное напряжение измеряется между контактами №4 и №6. Магнитное поле при измерении эффекта Ханле изменяется в диапазоне ± 30 Гс вдоль оси z перпендикулярно плоскости устройства

удаленного от №3 на расстояние, много большее L_s^N , так что спины электронов под ним находятся в равновесном состоянии. При такой конфигурации расположения контактов детектор чувствителен только к потенциалам, создаваемым намагниченными электродами, остальные сигналы в значительной мере подавлены.

При регистрации сигналов, создаваемых поляризованными электронами, сравнивают потенциалы на детекторе при параллельном и антипараллельном намагничивании инжектора и детектора, либо изменяют направление результирующей намагниченности поляризованных электронов, а направления намагниченности инжектора и детектора оставляют неизменными. Управление направлением намагниченности электронов можно реализовать с помощью магнитного поля с индукцией B , направленной по оси z перпендикулярно намагниченности инжектора и, следовательно, намагниченности газа поляризованных электронов. Данная геометрия эксперимента позволяет наблюдать так называемый эффект Ханле. Спины электронов, диффундирующих от инжектора к детектору, в поперечном магнитном поле с индукцией B за время t поворачиваются на угол $\varphi = \omega_L t$. Здесь $\omega_L = gB\mu_B/\hbar$ — частота Лармора, g — g -фактор электронов проводимости, μ_B — магнетон Бора. В предположении того, что детектор чувствителен к проекции магнитного момента электрона на направление намагниченности в детекторе, вклад в выходной сигнал от каждого электрона будет пропорционален $\cos \varphi$. Поскольку электроны имеют различное время транзита, углы спиновой прецессии также будут разными. Если разница углов будет сравнима с периодом Лармора, то средний магнитный момент возле детектора окажется нулевым. Для подсчета в точке детектирования вклада от всех электронов необходимо провести интегрирование по всем временам диффузии. Кроме того,

необходимо учесть, что во время диффузии происходит релаксация со временем τ_s . После интегрирования и усреднений, учитывающих конечные размеры контактов, результирующее напряжение $V_H(B, d)$ в зависимости от поперечного магнитного поля B в точке, удаленной от инжектора на расстояние d , с учетом сопротивлений ферромагнетика r_F , туннельного контакта r_C и полупроводника r_N , может быть рассчитано с помощью выражения [22]

$$V_H(B, d) = \pm P_j^2 r_N j \exp\left(-\frac{d}{L_s^N} \alpha\right) \times \left[\frac{\alpha \cos\left(\frac{d}{L_s^N} \beta\right) - \beta \sin\left(\frac{d}{L_s^N} \beta\right)}{\alpha^2 + \beta^2} \right], \quad (1)$$

где

$$\alpha = \frac{\sqrt{\sqrt{1 + (\omega_L \tau_s)^2} + 1}}{\sqrt{2}},$$

$$\beta = \frac{\sqrt{\sqrt{1 + (\omega_L \tau_s)^2} - 1}}{\sqrt{2}},$$

j — плотность тока в инжекторе. Спиновая поляризация P_j тока в полупроводнике равна

$$P_j = \frac{r_F P_\sigma^F + r_C P_\sigma^C}{r_F + r_C + r_N}. \quad (2)$$

Здесь P_σ^F и P_σ^C — коэффициенты спиновой поляризации проводимости в ФМ-металле и контакте. При расчете осуществляется подгонка теоретической зависимости напряжения $V_H(B, d)$ к полученной экспериментально. Подгоночными параметрами являются L_s^N , τ_s и P_σ^C . Эффект Ханле наблюдался при температуре $T = 77$ К в магнитном поле B , перпендикулярном плоскости устройства, плавно изменяющимся от -30 до 30 Гс. Для наблюдения эффекта использовались рядом расположенные узкие электроды. Если поляризованные электроны инжектировались из электрода №3 (токовая цепь

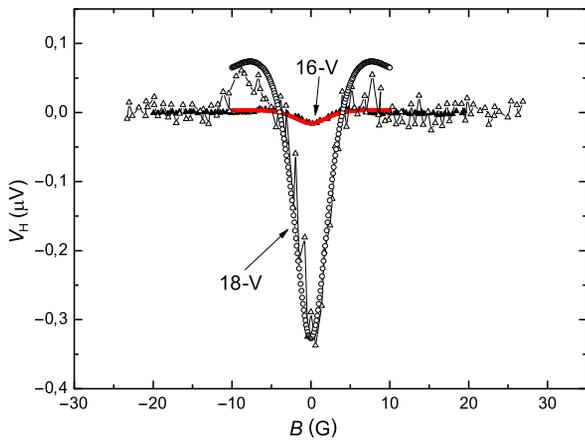


Рис. 3. Напряжение на детекторе (контакт №4) при эффекте Ханле. Для устройства 16-V: темные треугольники — экспериментальные точки, красные кружки — расчет с помощью выражения (1). Для устройства 18-V: светлые треугольники — данные эксперимента, светлые кружки — расчет с помощью выражения (1)

между электродами №1 и №3), то детектирование осуществлялось электродом №4 относительно электрода №6. Дистанции между электродами №3, №4 и №5 при изготовлении устройств закладывались одинаковыми, поэтому аналогичная конфигурация эксперимента могла быть организована с электродами №4 и №5 в качестве инжектора и детектора. Мы исследовали четыре латеральных спиновых устройства с электродами, созданными с помощью лазерной технологии фотолитографии, имеющими одинаковые размеры и расстояния между ними. Во всех устройствах технология подготовки подложек и создания туннельного барьера были одинаковыми. В одном устройстве отсутствовал эффект Ханле, в другом обнаружили дефекты в токоподводящих цепях. Для анализа были отобраны два устройства с рабочими номерами 16-V и 18-V. На рис. 3 показана полученная экспериментально зависимость напряжения V_H на детекторе (электрод №4) при эффекте Ханле и теоретическая зависимость для двух спиновых устройств. В тех устройствах, в которых был обнаружен эффект Ханле, оценивался коэффициент спиновой поляризации проводимости ТК, P_σ^C , и коэффициент спиновой поляризации электронов, P_n^N , инжектированных из ФМ-металла в полупроводник.

Спиновая поляризация электронов в полупроводнике вычислялась с помощью выражения

$$P_n^N = jeP_j r_N P_\sigma^C \left[\left(\frac{dn}{d\xi} \right) \frac{1}{n} \right], \quad (3)$$

где e — заряд электрона, ξ — энергия Ферми, n — концентрация электронов в зоне проводимо-

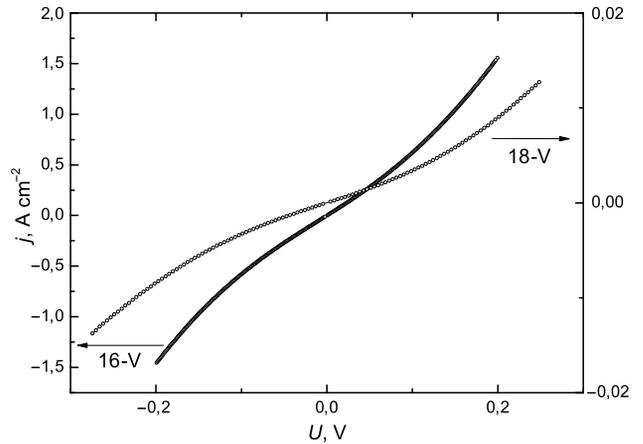


Рис. 4. ВАХ, измеренные между электродами №4 и №5 в устройствах 16-V и 18-V

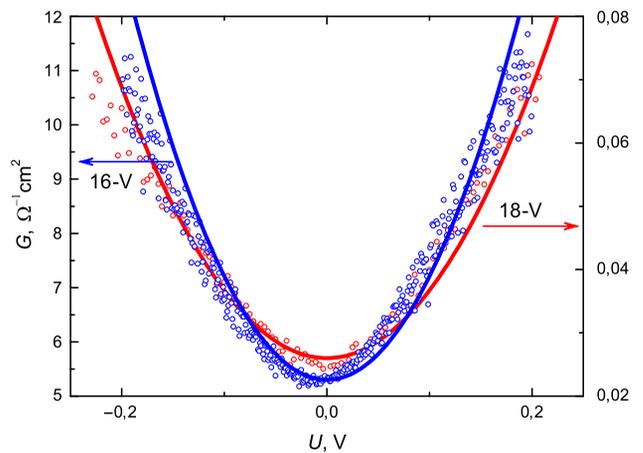


Рис. 5. Зависимость дифференциальной проводимости G от смещающего напряжения U между электродами №4 и №5 для устройства 18-V (красные кружки) и 16-V (синие кружки). Сплошные красная и синяя линии — аппроксимация полиномами второго порядка

сти полупроводника, параметр $(dn/d\xi)/n$ рассчитывался с использованием интеграла Ферми с индексом 1/2 по методике, приведенной в работе [22]. Спиновая поляризация тока (или эффективность спиновой инжекции) P_j , как видно из ее определения, зависит от соотношения сопротивлений r_C , r_F и r_N , а также от поляризации проводимости P_σ^F ферромагнетика и P_σ^C контакта. Сопротивление $r_F = \rho_F L_s^F = 8.4 \cdot 10^{-16}$ Ом · см² (для ферромагнетика $\text{Co}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}$ удельное сопротивление $\rho_F = 7 \cdot 10^{-10}$ Ом · см и длина спиновой диффузии $L_s^F = 1.2 \cdot 10^{-6}$ см [23]).

Мы предположили, что в ферромагнетике $\text{Co}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}$, который применялся в качестве инжектора, поляризация проводимости приблизительно равна поляризации электронов, $P_\sigma^F \simeq P_n^F = 0.224$ [21]. Сопротивление полупроводника $r_N = \rho_N L_s^N =$

Таблица 1. Сопротивление R , толщина барьера d_C , высота барьера ϕ_C , поляризация электронов P_n^N , поляризация контакта P_σ^C для устройства 16-V

Цепь	R , Ом · см ²	d_C , Å	ϕ_C , эВ	P_n^N	P_σ^C
r_{34}	0.1	31.045	0.757	—	—
r_{45}	0.16	24.946	0.861	0.0048	—
r_{35}	0.136	19.486	0.982	—	—
r_3	0.03	—	—	—	—
r_4	0.06	—	—	—	0.035
r_5	0.09	—	—	—	—

Таблица 2. То же, что в табл. 1 для устройства 18-V

Цепь	R , Ом · см ²	d_C , Å	ϕ_C , эВ	P_n^N	P_σ^C
r_{34}	18.04	20.776	1.005	—	—
r_{45}	25.554	26.229	0.955	0.07	—
r_{35}	16.488	30.012	0.888	—	—
r_3	4.487	—	—	—	—
r_4	13.553	—	—	—	0.5
r_5	12.001	—	—	—	—

$= 1.52 \cdot 10^{-4}$ Ом · см² ($\rho_N = 0.0608$ Ом · см на основании данных измерений Холла, $L_s^N = 25 \cdot 10^{-4}$ см [24]).

Сопротивления ТК r_C вычислялись следующим образом. Мы измеряли зависимость тока от напряжения, приложенного между парами электродов: №3 и №4, №4 и №5, №3 и №5. На рис. 4 показаны ВАХ, измеренные на электродах №4 и №5, для устройств 16-V и 18-V. Геометрия электродов в этих устройствах одинакова. Видно, что ВАХ нелинейная, а дифференциальная проводимость $G = dj/dU$ достаточно хорошо описывается полиномами второго порядка (рис. 5). Сопротивление каждой из цепей r_{34} , r_{45} и r_{35} , состоящей из суммы сопротивлений токоподводящих дорожек, ФМ-электродов, ТК и сопротивления полупроводника, расположенного между электродами, измерялось при одних и тех же величинах напряжения, приложенного к концам цепи (табл. 1 и 2). Для расчета сопротивлений ТК r_3 , r_4 и r_5 мы воспользовались упрощенной схемой протекания тока между электродами устройства, в которой сопротивления токоподводящих дорожек и ферромагнитных электродов не учитывались (см. вставку на рис. 1). Сопротивление полупроводника между электродами, r_x , рассчитывалось как сопротивление параллелипипеда, длина которого равна расстоянию между центрами соответствующих контактов, а сечение равно площади контакта. Таким образом, сопротивление полупроводника между со-

седними контактами (№3 и №4, №4 и №5), при расстоянии между центральными осями $35 \cdot 10^{-4}$ см, равно $r_x = 2.13 \cdot 10^{-4}$ Ом · см, а сопротивление между контактами №3 и №5 равно $2r_x$:

$$\begin{aligned} r_{34} &= r_3 + r_x + r_4, \\ r_{45} &= r_4 + r_x + r_5, \\ r_{35} &= r_3 + 2r_x + r_5. \end{aligned} \quad (4)$$

Сопротивления r_3 , r_4 и r_5 были найдены при решении системы линейных уравнений методом Гаусса. При расчете величины $V_H(B, d)$ с помощью выражений (1) и (2) в каждом из устройств для сопротивления r_C использовались значения r_4 .

В модели протекания тока через одиночный туннельный барьер в случае малых напряжений смещения дифференциальная проводимость имеет параболическую зависимость от напряжения [25]. Подбор экспериментальных данных к теоретическому выражению дает высоту барьера ϕ_C и его толщину d_C . Если получены «разумные» значения, можно сделать вывод, что в проводимости доминирует туннелирование [26]. В нашем случае измерение ВАХ проводится в более сложной цепи, содержащей два туннельных барьера, разделенных каналом полупроводника. Тем не менее дифференциальная проводимость $G = dj/dU$, измеренная для различных комбинаций пар контактов №3, №4 и №5, также может быть описана параболой. На рис. 5 показана зависимость G от напряжения смещения между контактами №4 и №5 для двух устройств и построены параболы $y = 0.026(1 + 21z^2)$ для устройства 18-V и $y = 5.3(1 + 36z^2)$ для устройства 16-V. Безразмерный параметр z численно совпадает с величиной напряжения U . Удовлетворительное совпадение теоретических и экспериментальных кривых позволило нам провести оценки цепей, содержащих два туннельных барьера с помощью теории, развитой для одиночного барьера [25]:

$$G = \frac{dj}{dU} = \eta(1 + 3\gamma U^2), \quad (5)$$

где

$$\eta = \frac{3}{2} \frac{e^2 (2m\phi_C)^{1/2}}{h^2 d_C} \exp(-A\phi_C^{1/2}),$$

$$A = \frac{4\pi(2m)^{1/2} d_C}{h},$$

$$\gamma = \frac{(Ae)^2}{96\phi_C} - \frac{Ae^2}{32\phi_C^{3/2}},$$

m — масса электрона, $h = 2\pi\hbar$. Результаты расчетов приведены в табл. 1 и 2.

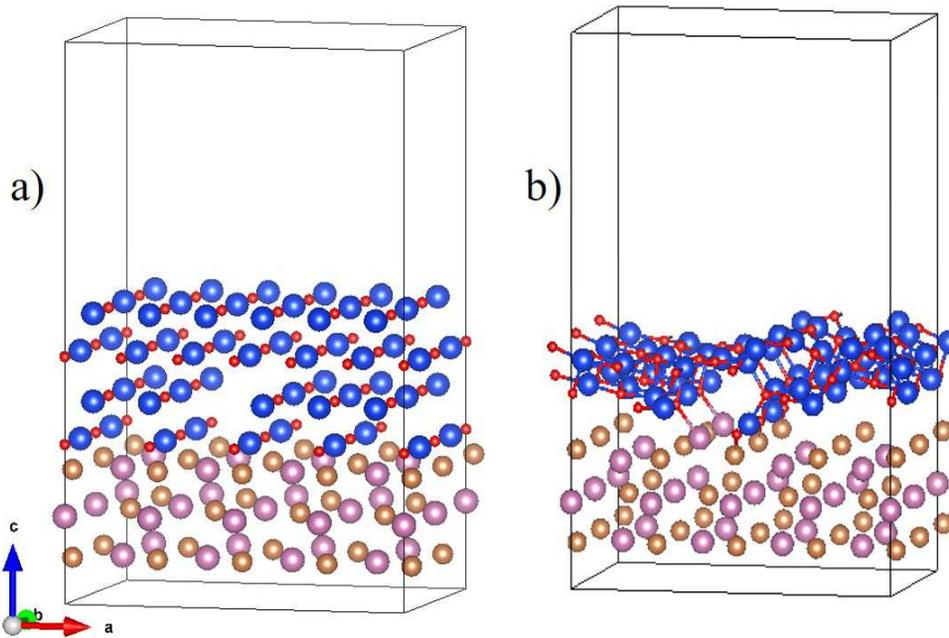


Рис. 6. Сверхъячейки вакуум/MgO/InSb: *a* — стартовое состояние и *b* — конечное состояние. Сиреневые шары означают In, золотые — Sb, синие — Mg, красные — O

3. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ

Для исследования интерфейсов Co/MgO и MgO/InSb были проведены расчеты в рамках первопринципной молекулярной динамики. Релаксация кристаллической структуры и расчеты зонной структуры проводились с помощью пакета Quantum Espresso [27] в приближении электронной плотности (DFT) с использованием функционала PBE (Perdew – Burke – Ernzerhof) [28]. Учет кулоновских корреляций на *d*-оболочке Co был выполнен в рамках метода GGA+U [29, 30]. Параметр кулоновского взаимодействия для кобальта был выбран равным 8 эВ и хундовского взаимодействия 1 эВ. Псевдопотенциалы были взяты из библиотеки стандартных псевдопотенциалов для твердых тел [31]. Были сконструированы сверхъячейки, моделирующие интерфейс Co/MgO и несколько сверхъячеек для MgO/InSb. Конструкции сверхъячеек, а также детали расчетов в данной статье не приводятся. Здесь мы рассмотрим только описание результатов. Для интерфейса Co/MgO расчет показал, что в двух приграничных слоях произошло изменение зонной структуры вследствие гибридизации *s*-, *p*- и *d*-состояний Co с *p*-состояниями O в MgO. В приграничных слоях происходит металлизация, и в запрещенной щели возникают преимущественно *p*-состояния кислорода. В глубине пленки зонная структура сохраняется такой же, как и для стехиометрического образца с запрещенной щелью 4.5 эВ. Для интерфейса MgO/InSb в результате

релаксации произошла существенная модификация положения атомов, вызванная большим расхождением величин параметров решеток (постоянная решетки $a = 6.63 \text{ \AA}$ InSb и $a = 4.19 \text{ \AA}$ MgO, что на 37 % меньше).

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

При изготовлении спиновых устройств диэлектрический слой толщиной 18 Å формировался магнетронным распылением мишени из MgO. Эта толщина соответствует ширине $d_C = 18 \text{ \AA}$ туннельного барьера. Расчеты зонной структуры (в рамках метода DFT) показали, что высота туннельного барьера $\phi_C \simeq 2 \text{ эВ}$ в двух первых атомных слоях пленки MgO вблизи интерфейса Co/MgO и $\phi_C \simeq 2.5 \text{ эВ}$ для слоев в глубине пленки. Наличие дефектов и нестехиометрии уменьшает величину запрещенной щели в MgO и приводит к уменьшению ϕ_C . Ширина туннельного барьера, вычисленная на основании анализа ВАХ в контакте №4 для устройства 16-V, составила $d_C = 24.9 \text{ \AA}$, а для 18-V — $d_C = 26.3 \text{ \AA}$. Значения близки друг к другу, но при этом больше, чем 18 Å. Такую разницу можно объяснить тем, что расчет протекания тока через двойной туннельный барьер проводился с помощью выражений для одиночного барьера. На основании анализа ВАХ [25] мы получили высоту барьера $\phi_C = 0.86 \text{ эВ}$ в контакте №4 для устройства 16-V и $\phi_C = 0.96 \text{ эВ}$ для 18-V, что более чем в два раза меньше высоты барьера ϕ_C для стехиометрического MgO. Можно предположить,

что ТК в обоих устройствах дефектные, но плотность дефектов в устройстве 18-V ниже, чем в 16-V. Об этом свидетельствует большее значение высоты барьера ϕ_C в устройстве 18-V, более высокие сопротивление r_C и поляризация проводимости P_σ^C в контакте (см. табл. 1 и 2).

Возникновение дефектов на границе между MgO и InSb закономерно из-за существенного рассогласования параметров решеток этих материалов. Этот результат иллюстрируется зонными расчетами в сверхъячейке, моделирующей интерфейс MgO/InSb. На рис. 6 приведены положения атомов для сверхъячейки до и после релаксации. Видно, что разница в постоянных решетки привела к тому, что для снятия напряжения, вызванного большой эпитаксиальной деформацией, пленка MgO оторвалась от поверхности InSb, при этом сохранила контакт в области дислокации, что можно рассматривать как формирование сквозных отверстий (рис. 6b). За счет искажений начальные расстояния Mg–O в пленке (2.817 Å) уменьшились до 2.088 Å, что близко к значениям в стехиометрическом MgO (2.095 Å). Но при этом сама структура сохранила только остатки кубического мотива, что можно интерпретировать как формирование аморфного слоя на границе интерфейса.

Таким образом, поляризационные характеристики ТК практически полностью определяются качеством диэлектрического слоя, расположенного между ферромагнитным и полупроводниковым электродами.

Качество диэлектрического слоя может быть оценено на основании сравнения величин высоты и ширины туннельного барьера, полученных при анализе ВАХ, и сравнении величин сопротивлений контактов. В контактах с меньшей плотностью дефектов больше величина ϕ_C , выше сопротивление контакта r_C и выше значения коэффициентов поляризации P_n^N и P_σ^C .

Результаты расчетов показывают, что в случае большой разницы параметров решеток полупроводника и пленок диэлектрика, нанесенных на полупроводник, даже в случае идеальной поверхности без шероховатостей высока вероятность возникновения в пленке диэлектрика дефектов, затрудняющих инжекцию поляризованных электронов через диэлектрик.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Эффективность инжекции спин-поляризованных электронов из ФМ-металла через туннельный барьер в полупроводник определяется наличием

спин-зависимого сопротивления туннельного барьера, которое должно быть больше сопротивления r_N полупроводника. Спиновая зависимость сопротивления ТК реализуется в сплошных, однородных и плоских диэлектрических слоях, свойства которых подпадают под определение «качественного» барьера [19]. При использовании для туннельного барьера диэлектриков, параметр решетки которых значительно отличается от параметра решетки полупроводника, высока вероятность возникновения случайных дефектов, резко снижающих P_σ^C и эффективность инжекции. Таким образом, туннельный барьер, один из интерфейсов которого MgO/InSb, невозможно сделать качественным без использования специальных мер для создания однородной бездефектной пленки диэлектрика. Такой мерой могло бы быть применение буферной прослойки, нивелирующей несоответствие параметров решеток MgO и InSb, или использование другого диэлектрика, кристаллическая решетка которого лучше бы соответствовала решетке InSb. Следует заметить, что спин-зависимое сопротивление ТК возникает из-за различия вкладов от s -, p - и d -орбиталей электронов в состоянии ФМ-металла на уровне Ферми для зон со спинами вверх и вниз в приграничном слое интерфейса, а также их различной гибридизацией с s - и p -состояниями в слое диэлектрика, имеющими различную скорость затухания [18]. В этом смысле туннельный контакт действует как «спиновый» фильтр, однако сам диэлектрик не обладает фильтрующими функциями, аналогичными, например, оптическому поляризатору.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема «Спин», Государственная регистрация № 122021000036-3), расчеты электронной структуры выполнены при частичной поддержке Российского научного фонда (проект № 24-12-00024).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Fabian, A. Matos-Abiague, C. Ertler et al., Acta Phys. Slov. **57**, 565 (2007).
2. I. Zutic, J. Fabian, and S. Das Sarma, Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004).
3. D. D. Awschalom and M. E. Flatte, Nature Phys. **3**, 153 (2007).
4. H. Dery, P. Dalal, L. Cywinski and L. J. Sham, Nature **447**, 5736 (2007).

5. H. Dery, Y. Song, P. Li, and I. Zutic, *Appl. Phys. Lett.* **99**, 082502 (2011).
6. A. T. Hanbicki, O. M. J. van't Erve, R. Magno et al., *Appl. Phys. Lett.* **82**, 4092 (2003).
7. X. Jiang, R. Wang, R. M. Shelby et al., *Phys. Rev. Lett.* **94**, 056601 (2005).
8. Н. А. Виглин, В. В. Устинов, В. В. Осипов, *Письма в ЖЭТФ* **86**, 221 (2007).
9. M. Johnson and R. Silsbee, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1790 (1985).
10. A. Filip, B. H. Hoving, F. Jedema et al., *Phys. Rev. B* **62**, 9996 (2000).
11. G. Schmidt, D. Ferrand, L. W. Molenkamp et al., *Phys. Rev. B* **62**, 4790 (2000).
12. E. I. Rashba, *Phys. Rev. B* **62**, R16267 (2000).
13. E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, Wiley, New York (1997).
14. Н. А. Виглин, И. В. Грибов, В. М. Цвелиховская, Е. И. Патраков, *ФТП* **53**, 277 (2019).
15. S. F. Alvorado, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 513 (1995).
16. W. H. Butler, X.-G. Zhang, T. C. Schulthess et al., *Phys. Rev. B* **63**, 054416 (2001).
17. X.-G. Zhang and W. H. Butler, *Phys. Rev. B* **70**, 172407 (2004).
18. J. M. MacLaren, X.-G. Zhang, W. H. Butler et al., *Phys. Rev. B* **59**, 5470 (1999).
19. O. M. J. van't Erve, A. L. Friedman, E. Cobas et al., *Nat. Nanotechnol.* **7**, 737 (2012).
20. J. G. Simmons, *J. Appl. Phys.* **34**, 1793 (1963).
21. N. A. Viglin, V. V. Ustinov, S. O. Demokritov et al., *Phys. Rev. B* **96**, 235303 (2017).
22. Н. А. Виглин, Ю. В. Никулин, В. М. Цвелиховская и др., *ЖЭТФ* **161**, 866 (2022).
23. J. Bass and W. P. Pratt Jr., *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 183201 (2007).
24. Н. А. Виглин, В. М. Цвелиховская, Н. А. Кулеш и др., *Письма в ЖЭТФ* **110**, 248 (2019).
25. J. G. Simmons, *J. Appl. Phys.* **34**, 238 (1963).
26. B. J. Jönsson-Åkerman, R. Escudero, C. Leighton et al., *Appl. Phys. Lett.* **77**, 18 (2000).
27. P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini et al., *J. Phys.: Cond. Matter* **21**, 395502 (2009).
28. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett* **77**, 3865 (1996).
29. V. I. Anisimov, J. Zaanen, and Ole K. Andersen. *Phys. Rev. B* **44**, 943 (1991).
30. V. I. Anisimov, F. Aryasetiawan, and A. I. Lichtenstein, *J. Phys.: Cond. Matter* **9**, 767 (1997).
31. G. Prandini, A. Marrazzo, I. E. Castelli et al., *npj Comp. Mater.* **4**, 72 (2018).