

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧЕРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «МОСКОВСКИЙ  
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ им. М. В. ЛОМОНОСОВА»

---

Физический факультет  
Кафедра магнетизма

Магистерская диссертация

ДИАГРАММЫ СТАБИЛЬНОСТИ МАГНИТНОЙ ТУННЕЛЬНОЙ  
НАНОГЕТЕРОСТРУКТУРЫ В ПРИБЛИЖЕНИИ СВОБОДНЫХ  
ЭЛЕКТРОНОВ

Выполнила студентка  
219м группы  
Лифатова Д. А.

---

*(подпись студента)*

Научный руководитель:  
кандидат физ.-мат. наук  
Стрелков Н. В.

---

*(подпись науч. руководителя)*

Допущена к защите «\_\_» \_\_\_\_\_ 2020г.  
Зав. кафедрой магнетизма  
профессор Перов Николай Сергеевич

---

*(подпись зав. кафедрой)*

## ***Оглавление***

<b>Введение .....</b>	<b>3</b>
<b>Литературный обзор .....</b>	<b>5</b>
<b>Туннельное магнетосопротивление .....</b>	<b>5</b>
<b>Спиновый крутящий момент (спиновый торк) .....</b>	<b>8</b>
<b>Недостатки ВКБ приближения .....</b>	<b>11</b>
<b>Фазовые диаграммы стабильности.....</b>	<b>12</b>
<b>Теоретическая модель .....</b>	<b>13</b>
<b>Квантовая модель МТП структуры в приближении свободных электронов.....</b>	<b>13</b>
<b>Волновые функции и токи .....</b>	<b>14</b>
<b>Спиновый вращающий момент (спиновый торк) .....</b>	<b>21</b>
<b>Динамика намагниченности свободного слоя .....</b>	<b>24</b>
<b>Результаты.....</b>	<b>26</b>
<b>Построение диаграмм стабильности.....</b>	<b>33</b>
<b>Выводы .....</b>	<b>37</b>
<b>Список литературы.....</b>	<b>38</b>

## ***Введение***

История открытия эффекта *туннельного магнетосопротивления* (ТМС) берет свое начало с 1975 года. Французский ученый М. Жюльер [1] исследовал гетероструктуру, состоящую из двух ферромагнитных слоев и тонкого изолятора между ними, и, впоследствии, экспериментально обнаружил данный эффект. В то время, этот эффект не привлекал особого внимания учёных, так как его значение было около 14%. Позднее, в 1995 году Д. Мудера [2] экспериментально получил ТМС порядка 24% из высококачественного тонкого барьера из оксида алюминия  $Al_2O_3$  при комнатной температуре. Такое высокое значение эффекта ТМС повлекло за собой детальное изучение структуры с магнитным туннельным переходом (МТП-структуры) ферромагнетик/изолятор/ферромагнетик (F/I/F) по причине широких перспектив в создании высокоскоростных устройств хранения информации. В настоящее время изучение МТП-структур тесно связано с таким устройством современной спинтроники как MRAM (Magnetic Random Access Memory).

Твердотельная память MRAM – это класс устройств, хранящих данные с помощью магниторезистивных ячеек, переключаемых с помощью эффекта спинового торка STT (Spin Transfer Torque). Своеобразным хранилищем информации в данной системе является МТП-структура. Предпочтительно использовать туннельные структуры с изолятором из оксида магния ( $MgO$ ), так как они обладают низким энергопотреблением и большим значением эффекта (до 600%) [3]. Состояние такой системы определяется взаимной ориентацией намагниченностей ферромагнитных слоёв, от которой зависит её сопротивление в результате эффекта ТМС.

Одной из важных характеристик такой МТП-структуры является её диаграмма стабильности, или «*V-H диаграмма*» [4], которая определяет области значений внешнего магнитного поля и приложенного напряжения, при которых ячейка находится в одном из двух стабильных состояний. Для того, чтобы численно построить такие диаграммы необходимо использовать результаты решения динамического уравнения Ландау-Лифшица в

однодомном приближении с применением феноменологических транспортных констант, определяющих значения спинового торка в данном материале. Чтобы определить значения данных феноменологических констант, необходимо решить квантово-механическую задачу спин-зависящего транспорта в МТП-структуре.

За последние годы была опубликована масса теоретических работ, среди которых большинство используют различные методы приближения для волновой функции внутри потенциального барьера, который зависит от координаты. Наиболее распространенным методом является приближение ВКБ (Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна), которое дает несложный, физически прозрачный результат для задачи туннелирования [5,6]. Но, такой приближённый метод имеет ограничения, из-за которых возникают значительные расхождения с точным решением. Например, при высоком значении напряжения, которое обычно используется для записи ячейки MRAM.

Целью данной магистерской диссертации является точное решение задачи спин-зависящего электронного транспорта в МТП-структуре в приближении свободных электронов, вычисление спиновых торков и их последующее использование для определения транспортных констант в уравнении Ландау-Лифшица. Эта процедура позволяет более точно воспроизвести форму диаграммы стабильности и предсказать критические значения магнитного поля и напряжения, необходимых для переключения ячейки. Сравнительный анализ результатов полученного решения задачи туннелирования с результатами той же задачи, полученными с использованием ВКБ приближения позволит установить критерии применимости приближенного решения.

## Литературный обзор

### Туннельное магнетосопротивление

Прежде чем описать нашу модель, необходимо изучить физическое явление, которое дало возможность развиваться такому направлению в науке как *спинтроника*. Спинтроника – наука, изучающая транспортные свойства наногетероструктур с учётом спина электрона с целью их применения в качестве компонентов в современных электронных устройствах. Одним из важнейших эффектов в таких структурах является эффект туннельного магнетосопротивления (ТМС) – изменение сопротивления наногетероструктуры в зависимости от взаимной ориентации намагниченности двух ферромагнитных слоёв, разделённых тонким слоем диэлектрика. Такую структуру, обычно, называют структурой с магнитным туннельным переходом (МТП). Для количественной оценки эффекта ТМС обычно используют относительную величину  $\Delta G/G_{\uparrow\uparrow}$ , где  $\Delta G$  – изменение проводимости МТП-структуры при изменении её конфигурации с параллельной на антипараллельную, а  $G_{\uparrow\uparrow}$  – значение проводимости МТП-структуры в параллельной конфигурации, которое максимально. До 1975 года туннельные структуры исследовались только с целью дальнейшего применения их в полупроводниковой технике, и поэтому измерялись исключительно их вольт-амперные характеристики [7,8]. Но Жульер, работая с подобными структурами, решил изучить зависимость эффекта ТМС от приложенного напряжения в гетероструктуре *Fe-Ge-Co* (см. Рис. 2 в [1]). Он также предположил, что значение эффекта связано со спиновой поляризацией электронов проводимости в двух ферромагнитных слоях и предложил следующее выражение для расчёта этого значения:

$$\frac{\Delta G}{G_{\uparrow\uparrow}} = \frac{2PP'}{1 + PP'} \quad (1)$$

где  $P$  и  $P'$  – спиновые поляризации электронов в ферромагнитных электродах. Из формулы

следует независимость ТМС от геометрии и электронной структуры барьера, что является сомнительным и нереалистичным.

Максимум, полученной Жульером экспериментальной зависимости  $\Delta G/G_{\uparrow\uparrow}$  при  $V \rightarrow 0$  и сверхнизкой температуре жидкого гелия давал значение 14%. По оценкам из (1) и данным о значениях спиновой поляризации из работ П. Тедроу и Р. Месерви [7,8] значение ТМС получалось около 26% для структур  $Al-Al_2O_3-Fe$ . Такое завышенное значение, по предположению Жульера, могло быть объяснено наличием магнитных взаимодействий между ферромагнитными слоями и неучтёнными эффектами спин-флипа.

Позднее, в 1989 году Джон Слончевский, используя методы квантовой механики для решения задачи о туннелировании электрона через потенциальный барьер предложил похожее выражение для максимального значения эффекта ТМС [9]:

$$\frac{\Delta G}{G_{\uparrow\uparrow}} = \frac{2P_{fb}P_{f' b}}{1 + P_{fb}P_{f' b}}, \quad (2)$$

где  $P_{fb}$ ,  $P_{f' b}$  – эффективные спиновые поляризации электронов в ферромагнитных электродах, которые отличаются от обычных одним множителем  $\alpha$ :

$$P_{fb} = \alpha P, \quad \alpha = \frac{q^2 - k_{\uparrow}k_{\downarrow}}{q^2 + k_{\uparrow}k_{\downarrow}}, \quad P = \frac{k_{\uparrow} - k_{\downarrow}}{k_{\uparrow} + k_{\downarrow}}, \quad (3)$$

где  $k_{\uparrow}$  и  $k_{\downarrow}$  – импульсы Ферми для электронов с разным направлением спина в ферромагнитном слое,  $q$  – импульс электрона внутри потенциального барьера.

Дополнительный множитель  $\alpha$  перед спиновой поляризацией  $P$  в (3) учитывает влияние барьера на плотность состояний в ферромагнитном электроде. В результате, данная модель дает гораздо более точное описание электронного транспорта в МТП структурах. Однако, значения ТМС из теории Слончевского оказываются чаще всего заниженными, по сравнению с экспериментальными данными.

Сравнение моделей Жульера и Слончевского с результатами эксперимента было проведено в работе МакЛарена в 1997 году [10]. Авторы рассмотрели большое количество различных структур и показали, что обе теории не дают удовлетворительного согласия с данными экспериментов. Более того, ни одна теория не объясняла зависимости ТМС от приложенного напряжения.

Кроме этого, в вышеописанных моделях не учитывалось рассеивание на примесях и тот факт, что внутри барьера у электронов уменьшается эффективная масса. В своей работе А. Братковский учёл изменение эффективной массы электрона и получил модифицированное выражение для спиновой поляризации [11], похожее на выражение (3) модели Слончевского:

$$P_{fb} = \frac{q^2 - m_2^2 k_{\uparrow} k_{\downarrow}}{q^2 + m_2^2 k_{\uparrow} k_{\downarrow}} P, \quad (4)$$

где  $m_2$  – эффективная относительная масса электрона внутри барьера. Используя значения импульсов для материала изолятора  $\text{Al}_2\text{O}_3$  и положив относительную эффективную массу электронов равной 0.4, Братковский получил хорошее согласование с экспериментом.

Рассмотренные выше модели давали незначительный эффект магнитосопротивления, даже при низких температурах, что негативно сказывалось на перспективе их практического применения. Поэтому начались поиски условий, при которых бы эффект мог достигать гораздо больших значений. Одними из первых в этом направлении стали Чжан и Ли, которые предложили в качестве основы использовать не одно барьерную, а двух барьерную систему. В такой задаче, с потенциальной ямой в середине структуры, появляются условия для возникновения резонансного туннелирования, которое приводит к резкому возрастанию проводимости, а следовательно и эффекта ТМС до 90% [12]. Однако, такие «чистые» резонансы, которые не учитывают рассеяние электронов в магнитных слоях очень узкие. Их ширина пропорциональна  $e^{-2qd}$ , где  $q$  – квазиимпульс электрона внутри барьера,  $d$  – ширина барьера. Это значит, что данная задача экспериментально трудно осуществима. К тому же, в

реальных системах рассеяние электронов может играть значительную роль и уменьшать ширину резонансов.

В 1998 г., в работе Ведяева была рассмотрена задача с системой ферромагнитных слоев, чередующихся с тремя изолирующими барьерами с учётом рассеяния электронов в магнитных слоях [13]. Расчеты были проведены в рамках квантовой теории линейного отклика (формализм Кубо). Было показано, что эффект ТМС может возникать не только за счет спиновой поляризации, но и за счет спин-зависящей длины свободного пробега, характеризующей процессы рассеяния. Хотя рассеяние и приводит к увеличению ширины резонанса, всё равно он остаётся довольно узким, и остаётся проблема с изготовлением образцов с хорошо контролируемой толщиной различных слоёв, чтобы удовлетворить резонансным условиям.

### ***Спиновый крутящий момент (спиновый торк)***

Ещё один эффект, который возникает в МТП-структуре в случае неколлинеарной взаимной ориентации намагниченностей в магнитных электродах и носит название *переноса спинового крутящего момента (торка)*. Его суть заключается в переносе магнитного момента поляризованного электрона из одного слоя в другой через потенциальный барьер и его взаимодействие с локальной намагниченностью. Первое определение спинового торка было предложено Слончевским в 1989 году в его квантовой модели свободных магнитных туннельных переходов [9]. В этой статье автор проанализировал реакцию намагниченности на спин-поляризованный электрический ток.

В 1996 году, одновременно, Слончевский и Бергер теоретически показали, что электрический ток, протекающий через МТП-структуру может вызвать спиновый крутящий момент (торк), генерирующий магнитные возбуждения, и даже способен изменить направление намагниченности [14,15]. Все эти теоретические предсказания были

подтверждены последующими экспериментальными работами и внесли огромный вклад в развитие спинтроники.

Выражение для спинового крутящего момента в ферромагнитном слое МТП-структуры, предложенное Слончевским можно записать в виде [14]:

$$\vec{T}_{\parallel 1,2} = g \frac{J_e}{e} [\vec{m}_{1,2} \times [\vec{m}_2 \times \vec{m}_1]], \quad (5)$$

где  $J_e$  – электрический ток,  $e$  – заряд электрона,  $\vec{m}_1$  и  $\vec{m}_2$  – единичные векторы, направленные вдоль намагниченностей ферромагнитных слоёв,  $g$  – положительный фактор, зависящий от поляризации спинов в данном материале. Вектор  $\vec{T}_{\parallel}$  в выражении (5) называют *торком Слончевского* или *параллельным торком*, так как его направление параллельно плоскости, которую образуют векторы  $\vec{m}_1$  и  $\vec{m}_2$ . Как можно видеть из (5), зависимость спинового торка от угла между намагниченностями ферромагнитных слоёв в МТП-структуре пропорционально синусу этого угла.

Дальнейшее развитие квантовой теории спинового транспорта привело к выделению в спиновом торке двух компонент, параллельной и перпендикулярной:

$$\begin{aligned} T_{\parallel} &= (a_1 V + a_2 V^2) \mathbf{M}_1 \times [\mathbf{M}_1 \times \mathbf{M}_3], \\ T_{\perp} &= (b_0 + b_1 V + b_2 V^2) \mathbf{M}_1 \times \mathbf{M}_3, \end{aligned} \quad (6)$$

где  $\mathbf{M}_1$  и  $\mathbf{M}_3$  – направление намагниченностей в свободном и опорном слое соответственно,  $V$  – приложенное напряжение. Феноменологические константы  $a_i$  и  $b_i$  обычно заранее неизвестны и подбираются из экспериментальных данных для каждого конкретного образца, так как их величина зависит и от толщины барьера, и от материалов, используемых при изготовлении таких туннельных структур, и от процесса изготовления образца. Например, для ферромагнитных материалов с большим обменным расщеплением и полуметаллов значение константы  $a_2$  стремится к нулю. Если  $T_{\perp}$  действует как обычное поле и заставляет

намагниченность  $M_1$  прецессировать вокруг  $M_3$ , то  $T_{\parallel}$  заставляет  $M_1$  затухать в направлении  $M_3$ . В статье А. Маншона были изложены основные квантово-механические модели для расчёта токов и спиновых торков в многослойных структурах как с туннельным переходом (МТП-структуры), так и без (спин-вентильные структуры) [16]. Для описания этих двух типов структур предлагаются два основных механизма электронного транспорта: баллистический и диффузный соответственно. Для описания МТП-структур, мы будем рассматривать баллистический предел, в котором отсутствует спиновая диффузия и пренебрегаются эффекты спин-флипа.

В недавней работе М. Чшиева были представлены аналитические выражения для тока и обоих компонент спиновых торков, полученные в приближении свободных электронов. В пределе «толстого» барьера, когда выполняется условие  $e^{2qd} \gg 1$  эти выражения имеют простой вид [6]:

$$T_{\parallel} = -4T_1T_2P_{fb1}(f_1 - f_2)e^{-2qd} \sin \theta, \quad (7)$$

$$T_{\perp} = -4T_1T_2(P_{fb1}P_{\eta2}f_1 - P_{fb2}P_{\eta1}f_2)e^{-2qd} \sin \theta, \quad (8)$$

$$J_e = -8T_1T_2(1 + P_{fb1}P_{fb2} \cos \theta)(f_1 - f_2)e^{-2qd}, \quad (9)$$

где  $\theta$  – угол между намагниченностями ферромагнитных слоёв,  $d$  – толщина барьера,  $q$  – квазиимпульс электрона внутри барьера,  $f_{1,2}$  – электронные функции распределения Ферми в обоих электродах,  $P_{fb1,2}$  – коэффициент поляризации Слончевского (3),  $T_{1,2}$  и  $P_{\eta1,2}$  – эффективные коэффициенты туннелирования и эффективные перпендикулярные поляризации соответственно, определяемые из формул:

$$P_{\eta} = \eta P, \quad T = \frac{\eta}{\eta^2 + \alpha^2}, \quad \eta = q \frac{k_{\uparrow} + k_{\downarrow}}{q^2 + k_{\uparrow}k_{\downarrow}}, \quad (10)$$

где  $P$  и  $\alpha$  – поляризация Стернса [17] и фактор Слончевского соответственно, определяемые

из выражений (3). Как можно легко видеть из (7) и (8), спиновый торк пропорционален синусу угла  $\theta$ . То есть, при коллинеарной конфигурации намагниченностей МТП-структуры торк равен нулю. Из зависимости электрического тока от угла (9) можно получить выражение для ТМС, которое совпадёт с выражением (2).

Недостатком описанной выше квантовой теории является использование квазиклассического приближённого выражения для волновой функции внутри барьера (ВКБ приближение).

### ***Недостатки ВКБ приближения***

Теоретические работы по квантовой теории баллистического транспорта в МТП-структуре опубликованные ранее используют чаще всего квазиклассическое приближение (ВКБ приближение) для волновой функции внутри потенциального барьера, высота которого зависит от координаты.

Квазиклассическое приближение – приближенный метод нахождения волновой функции и уровней энергии квантовой системы при условии, что длина волны де Бройля частиц системы много меньше характерных размеров изменения потенциала. Если движение квантовой частицы определяется уравнением Шредингера:

$$\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}^2} + p^2(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = 0, \quad (11)$$

где  $\psi(\mathbf{r})$  – волновая функция частицы, то в одномерном случае приближённое решение уравнения в классически доступной области  $p(x) > 0$  имеет вид:

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[ \pm \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx \right], \quad (12)$$

где  $C$  – постоянная. Решение представляет собой простейшее обобщение плоской волны. Преимуществом такого метода является возможность получить несложный аналитический

результат для задачи туннелирования, дающий физически прозрачную интерпретацию. Но, этот приближённый метод имеет ограничения, из-за которых возникают значительные расхождения с точным решением уравнения Шредингера при определенных условиях, вблизи так называемых точек поворота, когда  $p(x) = 0$ . Для расчета транспортных свойств МТП-структур, являющихся элементами ячеек магнитной памяти напряжения для переключения логического состояния настолько высоки, что этот критерий применимости не выполняется.

### ***Фазовые диаграммы стабильности***

Поскольку логическое состояние системы может изменяться с помощью внешнего магнитного поля или с помощью тока, протекающего через МТП-структуру в прямом или обратном направлении, то важным является выяснить области значений внешнего поля  $H$  и приложенного напряжения  $V$  при которых система будет находиться в том или ином стабильном состоянии. Для этого строится так называемая фазовая диаграмма стабильности, или «V-H диаграмма» [4]. Для её численного построения необходимо интегрировать динамическое уравнение Ландау-Лифшица [18] с дополнительными слагаемыми, отвечающими за спиновый торк, которые обычно содержат феноменологические константы, подбираемые для каждой конкретной МТП-структуры [19].

Построение и анализ численных V-H диаграмм с использованием выражений (6) было проведено ранее путём численного интегрирования динамического уравнения Ландау-Лифшица как в коллинеарной [20–22], так и в неколлинеарной геометрии [23]. Численные расчеты довольно точно воспроизводят форму экспериментальных диаграмм, хотя количественной оценки они не дают из-за использования феноменологических констант.

## Теоретическая модель

### Квантовая модель МТП структуры в приближении свободных электронов

Для решения задачи используется приближение свободных электронов или так называемая s-d модель, в которой s-электроны свободно перемещаются, а d-электроны локализованы и создают локальную намагниченность в ферромагнитном металле. МТП-структура представляет собой два полубесконечных ферромагнитных электрода (ФМ-электрода),

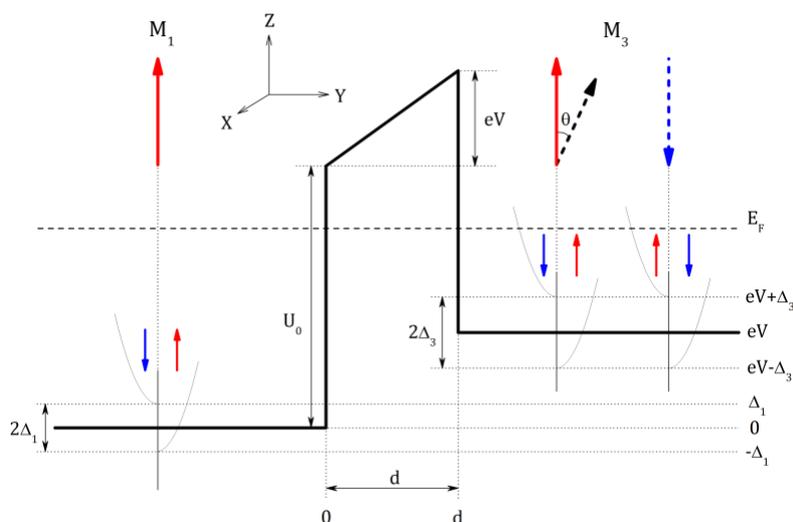


Рис. 1: Потенциальный профиль МТП структуры  $U(y)$ . Справа обозначены уровни энергии для электронов с направлением спина «вверх» и «вниз». За  $\Delta_1$  и  $\Delta_3$  обозначен обменный интеграл  $J_{sd}$  в левой (1) и правой (3) областях соответственно,  $\theta$  – угол между намагниченностями в левом ( $M_1$ ) и правом ( $M_3$ ) ферромагнитных электродах,  $U_0$  – высота потенциального барьера,  $eV$  – приложенное напряжение,  $d$  – толщина изолятора и  $E_F$  – энергия ферми электрона.

разделенных тонким слоем диэлектрика, напряжение в котором линейно меняется от координаты (Рис. 1). Намагниченность в первой области фиксирована в направлении оси OZ, а в третьей может иметь с осью OZ произвольный угол  $\theta$ . Ток в такой структуре протекает вдоль оси OY, а её сопротивление зависит от взаимной ориентации (от угла  $\theta$ ) намагниченностей в правом и левом ФМ-электродах.

Такая модель применима, например, к структурам типа CoFeB / MgO / CoFeB, которые наиболее часто используются на практике. Значения для параметров материалов, такие как обменный интеграл, энергия ферми и высота барьера можно взять как из экспериментальных работ, так и из зонных расчетов на основе методов квантовой химии (Хартри-Фока, теория функционала плотности).

Если угол  $\theta$  между намагниченностями ФМ-электродов отличен от 0 и  $\pi$ , то в такой неколлинеарной конфигурации волновая функция электрона в третьей области будет представлять из себя спинор, состоящий из двух компонент  $\psi^\uparrow$  и  $\psi^\downarrow$  для направления спина «вверх» и «вниз» соответственно. Гамильтониан для s-электронов в ферромагнетике в этом случае будет иметь вид [16]:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + U(y) - J_{sd}(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{S}), \quad (13)$$

где первый и второй член отвечают за кинетическую и потенциальную энергии соответственно, а третий член отражает обменную энергию между s и d электронами,  $\mathbf{S}$  – единичный вектор вдоль локальной намагниченности ферромагнетика за счет d-электронов,  $J_{sd}$  – константа обмена,  $\hat{\sigma}$  – вектор из матриц Паули.

### **Волновые функции и токи**

Если повернуть локальную намагниченность на угол  $\theta$  вокруг оси OY, умножив  $\mathbf{S}$  на матрицу вращения  $\hat{R}_y$ , то скалярное произведение в гамильтониане (13) можно переписать в виде:

$$(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{S}_\theta) = (\hat{\sigma}_1 \quad \hat{\sigma}_2 \quad \hat{\sigma}_3) \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Тогда, подставляя гамильтониан (13) и скалярное произведение (14) в стационарное уравнение Шредингера получаем:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} + U(y) - E\right)\begin{pmatrix}\psi^\uparrow \\ \psi^\downarrow\end{pmatrix} - J_{sd}\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi^\uparrow \\ \psi^\downarrow\end{pmatrix} = \hat{0}, \quad (15)$$

где  $\kappa$  – квазиимпульс электрона в плоскости XZ. Если ввести квазиимпульсы  $k_0^\uparrow$  и  $k_0^\downarrow$ :

$$k_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U(y)) - \kappa^2}, \quad k_0^\uparrow = \sqrt{k_0^2 + \frac{2m}{\hbar^2}J_{sd}}, \quad k_0^\downarrow = \sqrt{k_0^2 - \frac{2m}{\hbar^2}J_{sd}}, \quad (16)$$

то решение уравнения (15) можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \psi^\uparrow &= A^\uparrow e^{ik_0^\uparrow y} + B^\uparrow e^{-ik_0^\uparrow y} \\ \psi^\downarrow &= A^\downarrow e^{ik_0^\downarrow y} + B^\downarrow e^{-ik_0^\downarrow y} \end{aligned} \quad (17)$$

Эти решения представляют из себя плоские волны, распространяющиеся в обе стороны вдоль оси OY. Неизвестные коэффициенты  $A$  и  $B$  находятся из условий непрерывности волновых функций и их производных и граничных условий. В случае, если учитывается изменение эффективной массы электрона внутри барьера [11], то на границах ферромагнетик/изолятор должно выполняться условие сохранения потока  $\psi'_F(y)/m = \psi'_B(y)/m^*$ , где  $\psi_F$  и  $\psi_B$  – волновые функции в ФМ-электроре и барьере соответственно,  $m^*$  – эффективная масса электрона в барьере.

Внутри барьера, где нет ферромагнитного расщепления ( $J_{sd} = 0$ ) и потенциальная энергия больше чем энергия электронов, точным решением уравнения (14) при  $U(y) = y \cdot eV/d$  является комбинация спец-функций Эйри  $Ai$  и  $Bi$ :

$$\psi_B = A_B Ai\frac{q^2(y)}{q_v^2} + B_B Bi\frac{q^2(y)}{q_v^2}, \quad (18)$$

где  $q$  и  $q_v$  определяются выражениями:

$$q(y) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left( U_0 - E + \frac{eV}{d} y \right) + \kappa^2}, \quad q_v = \left( \frac{2m eV}{\hbar^2 d} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (19)$$

В ВКБ приближении волновые функции (18) аппроксимируются комбинацией экспонент:

$$\psi_B^{VKB} = A_B e^{Q_{l,r}(y)} + B_B e^{-Q_{l,r}(y)}, \quad (20)$$

где  $Q_{l,r}$  – показатели, которые находятся из определения квазиклассического приближения (12). Для удобства получения аналитического результата удобно определить эти показатели по-разному, в зависимости от рассматриваемого направления падения электрона  $l$  – слева и  $r$  – справа:

$$Q_l(y) = \frac{\hbar^2 d}{3m eV} (q^3(y) - q^3(0)), \quad Q_r(y) = \frac{\hbar^2 d}{3m eV} (q^3(d) - q^3(y)). \quad (21)$$

Волновая функция электрона в правом ферромагнитном электроде с повёрнутой намагниченностью получается путём поворота спинора на угол  $\theta$ , поэтому состояние каждой волновой функции будет смешанное и состоять из суперпозиции состояний «вверх» и «вниз», например для спинора электрона со спином «вверх»:

$$\vec{\psi}_3^\uparrow = \begin{pmatrix} \psi^{\uparrow\uparrow} \\ \psi^{\uparrow\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & \sin \frac{\theta}{2} \\ -\sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_3^\uparrow \\ \psi_3^\downarrow \end{pmatrix}, \quad (22)$$

где  $\psi_3^\uparrow$  и  $\psi_3^\downarrow$  – волновые функции для электрона со спином «вверх» и «вниз» в правом ферромагнитном электроде, определяемые из решений (17) уравнения Шредингера (15).

Далее, необходимо рассмотреть четыре возможных конфигурации системы: электрон падает слева или справа, со спином «вверх» или «вниз». Для каждого из случаев нужно записать систему уравнений непрерывности волновых функций и их производных на границах из 8-и уравнений с 8-ю неизвестными.

Уравнения для электрона падающего слева со спином «вверх»:

$$\begin{aligned}
1 + \mathbf{B}_{L1}^{\uparrow\uparrow} &= \mathbf{A}_{L2}^{\uparrow\uparrow} \text{Ai} \frac{q^2(0)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{L2}^{\uparrow\uparrow} \text{Bi} \frac{q^2(0)}{q_v^2}, \\
ik_1^{\uparrow}(1 - \mathbf{B}_{L1}^{\uparrow\uparrow}) &= q_v \left( \mathbf{A}_{L2}^{\uparrow\uparrow} \text{Ai}' \frac{q^2(0)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{L2}^{\uparrow\uparrow} \text{Bi}' \frac{q^2(0)}{q_v^2} \right), \\
\mathbf{A}_{L2}^{\uparrow\uparrow} \text{Ai} \frac{q^2(d)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{L2}^{\uparrow\uparrow} \text{Bi} \frac{q^2(d)}{q_v^2} &= \mathbf{A}_{L3}^{\uparrow\uparrow} \cos \frac{\theta}{2} + \mathbf{B}_{L3}^{\uparrow\downarrow} \sin \frac{\theta}{2}, \\
q_v \left( \mathbf{A}_{L2}^{\uparrow\uparrow} \text{Ai}' \frac{q^2(d)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{L2}^{\uparrow\uparrow} \text{Bi}' \frac{q^2(d)}{q_v^2} \right) &= i \left( \mathbf{A}_{L3}^{\uparrow\uparrow} k_3^{\uparrow} \cos \frac{\theta}{2} + \mathbf{B}_{L3}^{\uparrow\downarrow} k_3^{\downarrow} \sin \frac{\theta}{2} \right), \\
\mathbf{B}_{L1}^{\uparrow\downarrow} &= \mathbf{A}_{L2}^{\uparrow\downarrow} \text{Ai} \frac{q^2(0)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{L2}^{\uparrow\downarrow} \text{Bi} \frac{q^2(0)}{q_v^2}, \\
-i\mathbf{B}_{L1}^{\uparrow\downarrow} k_1^{\downarrow} &= q_v \left( \mathbf{A}_{L2}^{\uparrow\downarrow} \text{Ai}' \frac{q^2(0)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{L2}^{\uparrow\downarrow} \text{Bi}' \frac{q^2(0)}{q_v^2} \right), \\
\mathbf{A}_{L2}^{\uparrow\downarrow} \text{Ai} \frac{q^2(d)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{L2}^{\uparrow\downarrow} \text{Bi} \frac{q^2(d)}{q_v^2} &= -\mathbf{A}_{L3}^{\uparrow\uparrow} \sin \frac{\theta}{2} + \mathbf{B}_{L3}^{\uparrow\downarrow} \cos \frac{\theta}{2}, \\
q_v \left( \mathbf{A}_{L2}^{\uparrow\downarrow} \text{Ai}' \frac{q^2(d)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{L2}^{\uparrow\downarrow} \text{Bi}' \frac{q^2(d)}{q_v^2} \right) &= -i \left( \mathbf{A}_{L3}^{\uparrow\uparrow} k_3^{\uparrow} \sin \frac{\theta}{2} - \mathbf{B}_{L3}^{\uparrow\downarrow} k_3^{\downarrow} \cos \frac{\theta}{2} \right),
\end{aligned} \tag{23}$$

где квазиимпульсы электронов в ФМ-электродах со спинами «вверх» или «вниз»  $k_{1,3}^{\uparrow,\downarrow}$  находятся из выражений (16):

$$\begin{aligned}
k_1^{\uparrow} &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + J_{sd}) - \kappa^2}, & k_1^{\downarrow} &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - J_{sd}) - \kappa^2}, \\
k_3^{\uparrow} &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - eV + J_{sd}) - \kappa^2}, & k_3^{\downarrow} &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - eV - J_{sd}) - \kappa^2},
\end{aligned} \tag{24}$$

Уравнения для электрона падающего слева со спином «вниз»:

$$\begin{aligned}
\mathbf{B}_{L1}^{\downarrow\uparrow} &= \mathbf{A}_{L2}^{\downarrow\uparrow} \text{Ai} \frac{q^2(0)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{L2}^{\downarrow\uparrow} \text{Bi} \frac{q^2(0)}{q_v^2}, \\
-i\mathbf{B}_{L1}^{\downarrow\uparrow} k_1^{\uparrow} &= q_v \left( \mathbf{A}_{L2}^{\downarrow\uparrow} \text{Ai}' \frac{q^2(0)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{L2}^{\downarrow\uparrow} \text{Bi}' \frac{q^2(0)}{q_v^2} \right), \\
\mathbf{A}_{L2}^{\downarrow\uparrow} \text{Ai} \frac{q^2(d)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{L2}^{\downarrow\uparrow} \text{Bi} \frac{q^2(d)}{q_v^2} &= \mathbf{A}_{L3}^{\downarrow\downarrow} \sin \frac{\theta}{2} + \mathbf{B}_{L3}^{\downarrow\uparrow} \cos \frac{\theta}{2}, \\
q_v \left( \mathbf{A}_{L2}^{\downarrow\uparrow} \text{Ai}' \frac{q^2(d)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{L2}^{\downarrow\uparrow} \text{Bi}' \frac{q^2(d)}{q_v^2} \right) &= i \left( \mathbf{A}_{L3}^{\downarrow\downarrow} k_3^{\downarrow} \sin \frac{\theta}{2} + \mathbf{B}_{L3}^{\downarrow\uparrow} k_3^{\uparrow} \cos \frac{\theta}{2} \right), \\
1 + \mathbf{B}_{L1}^{\downarrow\downarrow} &= \mathbf{A}_{L2}^{\downarrow\downarrow} \text{Ai} \frac{q^2(0)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{L2}^{\downarrow\downarrow} \text{Bi} \frac{q^2(0)}{q_v^2}, \\
ik_1^{\downarrow} (1 - \mathbf{B}_{L1}^{\downarrow\downarrow}) &= q_v \left( \mathbf{A}_{L2}^{\downarrow\downarrow} \text{Ai}' \frac{q^2(0)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{L2}^{\downarrow\downarrow} \text{Bi}' \frac{q^2(0)}{q_v^2} \right), \\
\mathbf{A}_{L2}^{\downarrow\downarrow} \text{Ai} \frac{q^2(d)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{L2}^{\downarrow\downarrow} \text{Bi} \frac{q^2(d)}{q_v^2} &= \mathbf{A}_{L3}^{\downarrow\downarrow} \cos \frac{\theta}{2} - \mathbf{B}_{L3}^{\downarrow\uparrow} \sin \frac{\theta}{2}, \\
q_v \left( \mathbf{A}_{L2}^{\downarrow\downarrow} \text{Ai}' \frac{q^2(d)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{L2}^{\downarrow\downarrow} \text{Bi}' \frac{q^2(d)}{q_v^2} \right) &= i \left( \mathbf{A}_{L3}^{\downarrow\downarrow} k_3^{\downarrow} \cos \frac{\theta}{2} - \mathbf{B}_{L3}^{\downarrow\uparrow} k_3^{\uparrow} \sin \frac{\theta}{2} \right).
\end{aligned} \tag{25}$$

Уравнения для электрона падающего справа со спином «вверх»:

$$\begin{aligned}
\mathbf{B}_{R1}^{\uparrow\uparrow} &= \mathbf{A}_{R2}^{\uparrow\uparrow} \text{Ai} \frac{q^2(0)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{R2}^{\uparrow\uparrow} \text{Bi} \frac{q^2(0)}{q_v^2}, \\
-ik_1^{\uparrow} \mathbf{B}_{R1}^{\uparrow\uparrow} &= q_v \left( \mathbf{A}_{R2}^{\uparrow\uparrow} \text{Ai}' \frac{q^2(0)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{R2}^{\uparrow\uparrow} \text{Bi}' \frac{q^2(0)}{q_v^2} \right), \\
\mathbf{A}_{R2}^{\uparrow\uparrow} \text{Ai} \frac{q^2(d)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{R2}^{\uparrow\uparrow} \text{Bi} \frac{q^2(d)}{q_v^2} &= (1 + \mathbf{A}_{R3}^{\uparrow\uparrow}) \cos \frac{\theta}{2} + \mathbf{B}_{R3}^{\uparrow\downarrow} \sin \frac{\theta}{2}, \\
q_v \left( \mathbf{A}_{R2}^{\uparrow\uparrow} \text{Ai}' \frac{q^2(d)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{R2}^{\uparrow\uparrow} \text{Bi}' \frac{q^2(d)}{q_v^2} \right) &= -ik_3^{\uparrow} (1 - \mathbf{A}_{R3}^{\uparrow\uparrow}) \cos \frac{\theta}{2} + \mathbf{B}_{R3}^{\uparrow\downarrow} ik_3^{\downarrow} \sin \frac{\theta}{2}, \\
\mathbf{B}_{R1}^{\uparrow\downarrow} &= \mathbf{A}_{R2}^{\uparrow\downarrow} \text{Ai} \frac{q^2(0)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{R2}^{\uparrow\downarrow} \text{Bi} \frac{q^2(0)}{q_v^2}, \\
-ik_1^{\downarrow} \mathbf{B}_{R1}^{\uparrow\downarrow} &= q_v \left( \mathbf{A}_{R2}^{\uparrow\downarrow} \text{Ai}' \frac{q^2(0)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{R2}^{\uparrow\downarrow} \text{Bi}' \frac{q^2(0)}{q_v^2} \right), \\
\mathbf{A}_{R2}^{\uparrow\downarrow} \text{Ai} \frac{q^2(d)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{R2}^{\uparrow\downarrow} \text{Bi} \frac{q^2(d)}{q_v^2} &= -(1 + \mathbf{A}_{R3}^{\uparrow\uparrow}) \sin \frac{\theta}{2} + \mathbf{B}_{R3}^{\uparrow\downarrow} \cos \frac{\theta}{2}, \\
q_v \left( \mathbf{A}_{R2}^{\uparrow\downarrow} \text{Ai}' \frac{q^2(d)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{R2}^{\uparrow\downarrow} \text{Bi}' \frac{q^2(d)}{q_v^2} \right) &= ik_3^{\uparrow} (1 - \mathbf{A}_{R3}^{\uparrow\uparrow}) \sin \frac{\theta}{2} + \mathbf{B}_{R3}^{\uparrow\downarrow} ik_3^{\downarrow} \cos \frac{\theta}{2},
\end{aligned} \tag{26}$$

Уравнения для электрона падающего справа со спином «вниз»:

$$\begin{aligned}
\mathbf{B}_{R1}^{\uparrow\uparrow} &= \mathbf{A}_{R2}^{\uparrow\uparrow} \text{Ai} \frac{q^2(0)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{R2}^{\uparrow\uparrow} \text{Bi} \frac{q^2(0)}{q_v^2}, \\
-ik_R^{\uparrow} \mathbf{B}_{R1}^{\uparrow\uparrow} &= q_v \left( \mathbf{A}_{R2}^{\uparrow\uparrow} \text{Ai}' \frac{q^2(0)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{R2}^{\uparrow\uparrow} \text{Bi}' \frac{q^2(0)}{q_v^2} \right), \\
\mathbf{A}_{R2}^{\uparrow\uparrow} \text{Ai} \frac{q^2(d)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{R2}^{\uparrow\uparrow} \text{Bi} \frac{q^2(d)}{q_v^2} &= \mathbf{A}_{R3}^{\uparrow\uparrow} \cos \frac{\theta}{2} + (1 + \mathbf{B}_{R3}^{\uparrow\uparrow}) \sin \frac{\theta}{2}, \\
q_v \left( \mathbf{A}_{R2}^{\uparrow\uparrow} \text{Ai}' \frac{q^2(d)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{R2}^{\uparrow\uparrow} \text{Bi}' \frac{q^2(d)}{q_v^2} \right) &= \mathbf{A}_{R3}^{\uparrow\uparrow} ik_3^{\uparrow} \cos \frac{\theta}{2} - ik_3^{\uparrow} (1 - \mathbf{B}_{R3}^{\uparrow\uparrow}) \sin \frac{\theta}{2}, \\
\mathbf{B}_{R1}^{\downarrow\downarrow} &= \mathbf{A}_{R2}^{\downarrow\downarrow} \text{Ai} \frac{q^2(0)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{R2}^{\downarrow\downarrow} \text{Bi} \frac{q^2(0)}{q_v^2}, \\
-ik_R^{\downarrow} \mathbf{B}_{R1}^{\downarrow\downarrow} &= q_v \left( \mathbf{A}_{R2}^{\downarrow\downarrow} \text{Ai}' \frac{q^2(0)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{R2}^{\downarrow\downarrow} \text{Bi}' \frac{q^2(0)}{q_v^2} \right), \\
\mathbf{A}_{R2}^{\downarrow\downarrow} \text{Ai} \frac{q^2(d)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{R2}^{\downarrow\downarrow} \text{Bi} \frac{q^2(d)}{q_v^2} &= -\mathbf{A}_{R3}^{\downarrow\downarrow} \sin \frac{\theta}{2} + (1 + \mathbf{B}_{R3}^{\downarrow\downarrow}) \cos \frac{\theta}{2}, \\
q_v \left( \mathbf{A}_{R2}^{\downarrow\downarrow} \text{Ai}' \frac{q^2(d)}{q_v^2} + \mathbf{B}_{R2}^{\downarrow\downarrow} \text{Bi}' \frac{q^2(d)}{q_v^2} \right) &= -\mathbf{A}_{R3}^{\downarrow\downarrow} ik_3^{\downarrow} \sin \frac{\theta}{2} - ik_3^{\downarrow} (1 - \mathbf{B}_{R3}^{\downarrow\downarrow}) \cos \frac{\theta}{2}.
\end{aligned} \tag{27}$$

Решение систем уравнений (23), (25), (26) и (27) даёт аналитические выражения для всех неизвестных коэффициентов, которые не приводятся в данной работе из-за их громоздкости. Для ВКБ приближения можно записать аналогичные системы уравнений, заменив волновые функции во второй области на приближённые (20).

Теперь, когда известны все волновые функции системы, можно рассчитать токи протекающие через МТП-структуру, а также, создаваемые этим током спиновые торки. Для этого используем формализм Ландауера, в котором даётся выражение для туннельного тока [24]:

$$J = \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{e^2}{\hbar} \int j_{kE} k dk dE, \tag{28}$$

где интегрирование производится по поверхности Ферми – всем возможным значениям

энергии  $E$  и квазиимпульса  $\kappa$  удовлетворяющих условию (последующие пределы интегрирования)  $2mE/\hbar + U(y) + \kappa^2 < E_F$ ,  $e$  – заряд электрона,  $j_{\kappa E}$  – матричный элемент оператора скорости, который пропорционален туннельному току, рассчитываемый по формуле [25]:

$$j_{\kappa E} = i \left( \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial y} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial y} \right). \quad (29)$$

Например, если взять волновую функцию электрона со спином «вверх» в первой области, падающего слева, которая представляет из себя три слагаемых: набегающую слева единичную волну и две отражённых, со спином «вверх» и «вниз» соответственно:

$$\psi_{L1}^{\uparrow} = e^{ik_1^{\uparrow}y} + B_{L1}^{\uparrow\uparrow} e^{-ik_1^{\uparrow}y} + B_{L1}^{\uparrow\downarrow} e^{-ik_1^{\downarrow}y}, \quad (30)$$

тогда подстановка (30) в (29) даст выражение, пропорциональное току, создаваемому данным электроном:

$$j_{\kappa E L}^{\uparrow} = 2 \left( 1 - k_1^{\uparrow} |B_{L1}^{\uparrow\uparrow}|^2 - k_1^{\downarrow} |B_{L1}^{\uparrow\downarrow}|^2 \right). \quad (31)$$

Аналогично находятся выражения для остальных случаев:

$$\begin{aligned} j_{\kappa E L}^{\downarrow} &= 2 \left( 1 - k_1^{\uparrow} |B_{L1}^{\downarrow\uparrow}|^2 - k_1^{\downarrow} |B_{L1}^{\downarrow\downarrow}|^2 \right), \\ j_{\kappa E R}^{\uparrow} &= -2 \left( 1 - k_3^{\uparrow} |B_{R3}^{\uparrow\uparrow}|^2 - k_3^{\downarrow} |B_{R3}^{\uparrow\downarrow}|^2 \right), \\ j_{\kappa E R}^{\downarrow} &= -2 \left( 1 - k_3^{\uparrow} |B_{R3}^{\downarrow\uparrow}|^2 - k_3^{\downarrow} |B_{R3}^{\downarrow\downarrow}|^2 \right), \end{aligned} \quad (32)$$

где индекс  $L$  и  $R$  означают направление падения электрона (слева или справа). Пределы интегрирования в выражении (28) выбираются, согласно возможной энергии электрона, которая проиллюстрирована на потенциальном профиле системы (Рис. 1):

$$\begin{aligned}
J_L^\uparrow &= \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{e^2}{\hbar} \int_{-J_{sd1}}^{E_F} \int_0^{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+J_{sd1})}} j_{kEL}^\uparrow \kappa d\kappa dE, \\
J_L^\downarrow &= \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{e^2}{\hbar} \int_{J_{sd1}}^{E_F} \int_0^{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-J_{sd1})}} j_{kEL}^\downarrow \kappa d\kappa dE, \\
J_R^\uparrow &= \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{e^2}{\hbar} \int_{eV-J_{sd2}}^{E_F} \int_0^{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-eV+J_{sd2})}} j_{kER}^\uparrow \kappa d\kappa dE, \\
J_R^\downarrow &= \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{e^2}{\hbar} \int_{eV+J_{sd2}}^{E_F} \int_0^{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-eV-J_{sd2})}} j_{kER}^\downarrow \kappa d\kappa dE.
\end{aligned} \tag{33}$$

Полный туннельный ток через МТП-структуру будет равен сумме всех четырёх токов (33):

$$J = J_L^\uparrow + J_L^\downarrow + J_R^\uparrow + J_R^\downarrow. \tag{34}$$

Величина эффекта ТМС будет вычисляться по формуле:

$$TMR = \frac{J(\theta = 0) - J(\theta = \pi)}{J(\theta = 0)}. \tag{35}$$

### ***Спиновый вращающий момент (спиновый торк)***

Спиновый вращающий момент (*спиновый торк*), действующий со стороны s-электронов на d-электроны пропорционален векторному произведению локальной намагниченности  $\mathbf{S}$  на локальную спиновую плотность  $\mathbf{s}$ , которая может быть найдена как матричный элемент матриц Паули  $\mathbf{s} = \frac{1}{2} \langle \psi^* | \boldsymbol{\sigma} | \psi \rangle$ . Так как в первом ФМ-электроде локальная намагниченность направлена вдоль оси OZ ( $\mathbf{S} = \{0, 0, 1\}$ ), то векторное произведение векторов  $\mathbf{S}$  и  $\mathbf{s}$  будет зависеть только от x- и y-компоненты спиновой плотности ( $[\mathbf{S} \times \mathbf{s}] = \{-s_y, s_x, 0\}$ ). Удобно ввести комплексную величину спиновой плотности  $s_{xy} = s_x + i s_y$ , где действительная часть соответствует её x-компоненте, а мнимая – y-компоненте.

В этом случае две компоненты векторного произведения (перпендикулярная и параллельная плоскости XZ) также выражаются в виде комплексного числа как  $i s_{xy}$ . Например, в случае первого граничного условия, когда электрон падает слева со спином «вверх» комплексная спиновая плотность в левом ФМ-электроде имеет вид:

$$s_{Lxy}^{\uparrow} = s_{Lx}^{\uparrow} + i s_{Ly}^{\uparrow} = B_{L1}^{\uparrow\downarrow} \left( B_{L1}^{\uparrow\uparrow*} e^{i(k_1^{\uparrow} - k_1^{\downarrow})y} + \frac{1}{\sqrt{k_1^{\uparrow}}} e^{-i(k_1^{\uparrow} + k_1^{\downarrow})y} \right). \quad (36)$$

Если найти и сложить значения спиновой плотности для всех четырёх граничных условий, то распределение полного спинового торка можно получить, проинтегрировав эту сумму:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}(y) &= \frac{J_{sd}}{\mu_B} \frac{a_0^3}{(2\pi)^2} \frac{2m}{\hbar^2} \int [\mathbf{S} \times \mathbf{s}] \kappa dk dE, \\ T_{xy}(y) &= \frac{J_{sd}}{\mu_B} \frac{a_0^3}{(2\pi)^2} \frac{2m}{\hbar^2} \int i s_{xy} \kappa dk dE, \end{aligned} \quad (37)$$

где  $a_0$  – постоянная решётки материала ФМ-электрода,  $\mu_B$  – магнетон Бора и  $T_{xy} = T_{\parallel} + iT_{\perp}$  – комплексное представление x- и y-компоненты вектора  $\mathbf{T}$ . Для интегрирования уравнения Ландау-Лифшица необходимо знать среднее значение спинового торка неоднородно распределённого в свободном слое. Для его нахождения необходимо проинтегрировать полученное распределение (37) по всей длине свободного слоя и поделить на его толщину.

Компоненты спинового тока определяются подобно тому, как это было сделано для электрического тока (29), и его матричные элементы имеют вид [25]:

$$\mathbf{j}_s = i \frac{1}{2} \left( \psi \boldsymbol{\sigma} \frac{\partial \psi^*}{\partial y} - \psi^* \boldsymbol{\sigma} \frac{\partial \psi}{\partial y} \right). \quad (38)$$

Вычислив матричный элемент (38) в случае всех четырёх граничных условий и проинтегрировав его по  $k$  и  $eV$  можно получить полный спиновый ток в точке  $y$ :

$$\begin{aligned} J_s(y) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int j_s \kappa dk dE, \\ J_{s\,xy}(y) &= J_{s\parallel} + \iota J_{s\perp} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int (j_{s\parallel} + \iota j_{s\perp}) \kappa dk dE, \end{aligned} \quad (39)$$

где  $J_{s\,xy}$  – комплексное представление  $x$ - и  $y$ -компоненты вектора  $J_s$ . Например, для первого граничного условия, комплексная величина спинового тока будет иметь вид:

$$j_{L\,s\,xy}^\uparrow = j_{L\,s\parallel}^\uparrow + \iota j_{L\,s\perp}^\uparrow = B_{L1}^{\uparrow\downarrow} \left( -(k_1^\uparrow + k_1^\downarrow) B_{L1}^{\uparrow\uparrow*} e^{\iota(k_1^\uparrow - k_1^\downarrow)y} + \frac{k_1^\uparrow - k_1^\downarrow}{\sqrt{k_1^\uparrow}} e^{-\iota(k_1^\uparrow + k_1^\downarrow)y} \right). \quad (40)$$

Можно заметить, что производная по  $y$  выражения (40) будет совпадать комплексной спиновой плотностью  $s_{L\,xy}^\uparrow$  (36) с точностью до коэффициента  $-\iota(k_1^{\uparrow 2} - k_1^{\downarrow 2})$ . Нетрудно показать, что это равенство выполняется для всех четырёх граничных условий. Тогда, учитывая, что  $k_1^{\uparrow 2} - k_1^{\downarrow 2} = 4mJ_{sd}/\hbar^2$  и  $[\mathbf{S} \times \mathbf{s}] = \iota s_{xy}$  можно записать равенство:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_y j_s = 2J_{sd} [\mathbf{S} \times \mathbf{s}]. \quad (41)$$

Выражение (41) было впервые получено в работе Эдвардса [26], а также подтверждено позже в приближении сильной связи [27]. Если ФМ-электрод имеет конечную толщину  $t$ , то среднее значение торка в левом ФМ-электроде с учётом (37), (39) и (41) будет иметь вид:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{T} \rangle_t &= \frac{1}{t} \int_{-\infty}^0 \mathbf{T}(y) dy = -\frac{a_0^3}{\mu_B} \frac{1}{t} \int_{-\infty}^0 \nabla_y J_s(y) dy = -\frac{a_0^3 J_s(0)}{\mu_B t}, \\ \langle T_{xy} \rangle &= \langle T_{\parallel} \rangle + \iota \langle T_{\perp} \rangle = -\frac{a_0^3 J_{s\,xy}(0)}{\mu_B t}. \end{aligned} \quad (42)$$

Из этого следует, что значение спинового тока на интерфейсе ферромагнетик/изолятор будет соответствовать среднему значению спинового торка в данном ФМ-электроде.

### ***Динамика намагниченности свободного слоя***

Динамику намагниченности свободного слоя МТП-структуры в однодоменном приближении под действием спин-поляризованного тока можно описать уравнением Ландау-Лифшица с дополнительными слагаемыми [19]:

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = -\gamma[\mathbf{m} \times \mu_0 \mathbf{H}_{\text{eff}}] + \alpha \left[ \mathbf{m} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt} \right] - \gamma \mathbf{T}, \quad (43)$$

где  $\mathbf{m}$  – это единичный вектор, направленный вдоль намагниченности свободного слоя,  $\gamma$  – гиромагнитное отношение s-электронов,  $\alpha$  – фактор затухания Гильберта,  $\mathbf{H}_{\text{eff}}$  и  $\mathbf{T}$  – эффективное поле и средний спиновый торк (42) соответственно, действующие на свободный слой. Эффективное поле  $\mathbf{H}_{\text{eff}}$  выражается через вариацию свободной энергии свободного слоя  $F$  по намагниченности  $\mathbf{H}_{\text{eff}} = -\delta F / \delta \mathbf{M}$ . В нашей модели свободная энергия будет состоять из трёх слагаемых: энергия одноосной магнитной анизотропии, энергия Зеемана и энергия размагничивающего поля:

$$F = -K_u(\mathbf{u}_k \cdot \mathbf{m})^2 - \mu_0 M_s \mathbf{H}_{\text{ext}} \cdot \mathbf{m} + \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2 (N_x m_x^2 + N_y m_y^2 + N_z m_z^2), \quad (44)$$

где  $K_u$  – константа одноосной магнитной анизотропии,  $\mathbf{u}_k$  – единичный вектор, направленный вдоль оси лёгкого намагничивания,  $M_s$  – намагниченность насыщения свободного слоя,  $\mathbf{H}_{\text{ext}}$  – напряжённость внешнего магнитного поля,  $N_{x,y,z}$  – диагональные компоненты тензора размагничивающего фактора. Следовательно, эффективное поле в случае МТП-структуры с перпендикулярной магнитной анизотропией можно записать в виде:

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = \left(0, 0, \frac{2K_u}{\mu_0 M_s} m_z\right) + (H_x, H_y, H_z) - M_s(N_x m_x, N_y m_y, N_z m_z). \quad (45)$$

Средний спиновый торк (42) можно разделить на две компоненты (6) – параллельную плоскости векторов намагниченности свободного и опорного слоя  $\mathbf{T}_{\parallel}$  и перпендикулярную ей  $\mathbf{T}_{\perp}$ . Если ввести единичный вектор поляризации  $\mathbf{p}$ , направленный вдоль намагниченности опорного слоя и учесть, что спиновый торк зависит только от угла  $\theta$  между векторами  $\mathbf{m}$  и  $\mathbf{p}$ , тогда можно легко показать, что выполняются соотношения [26]:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{\parallel} &= a_{\parallel} \mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{p}] = \frac{\langle T_{\parallel} \rangle}{\sin \theta} \mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{p}], \\ \mathbf{T}_{\perp} &= b_{\perp} \mathbf{m} \times \mathbf{p} = \frac{\langle T_{\perp} \rangle}{\sin \theta} \mathbf{m} \times \mathbf{p}. \end{aligned} \quad (46)$$

В приближении «толстого» барьера, когда  $\exp \int_0^d Q(y) dy \gg 1$ , где  $d$  – толщина барьера, а  $Q(y)$  определяется выражением (21), средние значения компонент спиновых торков  $\langle T_{\parallel} \rangle$  и  $\langle T_{\perp} \rangle$  пропорциональны  $\sin \theta$  [6], поэтому параметры  $a_{\parallel}$  и  $b_{\perp}$  не зависят от угла  $\theta$  в этом случае.

Если записать уравнение Ландау-Лифшица (43) с эффективным полем (45) и дополнительными слагаемыми для спиновых торков (46) в сферических координатах, учитывая симметрию системы в плоскости XY ( $N_x=N_y$ ), направление поляризации тока и внешнего магнитного поля вдоль оси OZ ( $p_x=p_y=0, H_x=H_y=0$ ) и постоянство модуля  $|\mathbf{m}| = \sqrt{m_x^2 + m_y^2 + m_z^2} = 1$  получим:

$$\begin{aligned} \dot{\theta} &= -\frac{\gamma \sin \theta}{1 + \alpha^2} \left[ a_{\parallel} p_z + \alpha \left( H_z + b_{\perp} p_z + \left( \frac{2K_u}{\mu_0 M_s} - M_s(N_z - N_x) \right) \cos \theta \right) \right], \\ \dot{\phi} &= \frac{\gamma}{1 + \alpha^2} \left[ b_{\perp} p_z + H_z + \left( \frac{2K_u}{\mu_0 M_s} - M_s(N_z - N_x) \right) \cos \theta - \alpha a_{\parallel} p_z \right]. \end{aligned} \quad (47)$$

## Результаты

Для расчетов были использованы значения параметров из работы [6] для материалов Co и MgO. На Рис. 2 приведены сравнительные графики для тока, рассчитанного по формуле (34).

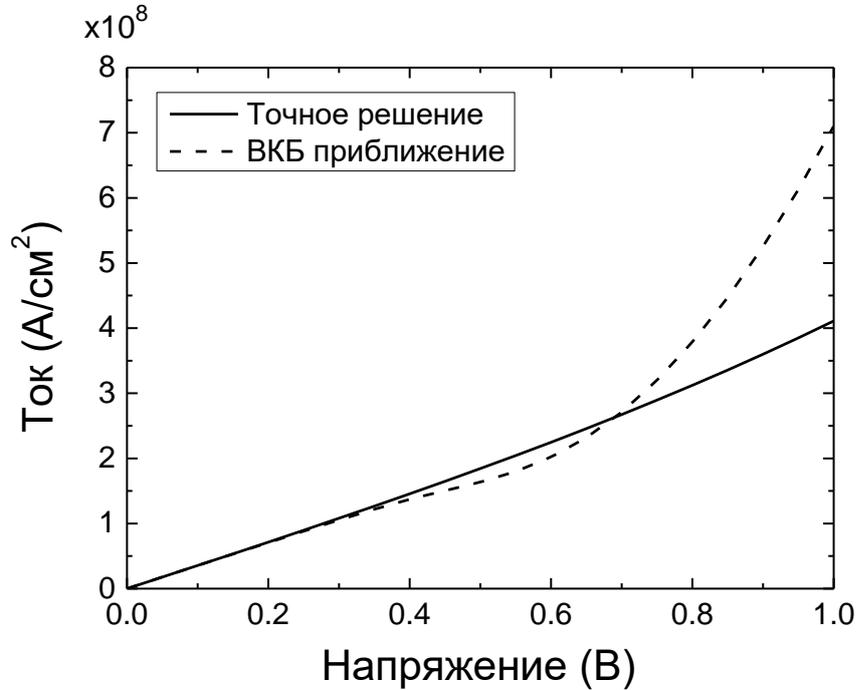


Рис. 2: Зависимости туннельного тока через МТП-структуру от приложенного напряжения. Угол между намагниченностями в ФМ-электродах  $\theta=0^\circ$ , толщина изолятора  $d=5 \text{ \AA}$ , высота барьера  $U_0=3 \text{ эВ}$ , энергия Ферми  $E_F=2.62 \text{ эВ}$ , обменный интеграл в обоих ФМ-электродах  $J_{sd}=0.98 \text{ эВ}$ .

Из графика видно, что при напряжении  $V=0.4 \text{ В}$  кривые начинают расходиться. Ток в ВКБ приближении значительно отклоняется от линейной зависимости при  $V>0.6 \text{ В}$ , в то время как ток при точном решении продолжает следовать линейному закону. Такое поведение приближенного решения объясняется условиями его применимости. В нашем случае, критерий применимости ВКБ приближения будет выглядеть так:

$$E_F + eV \ll U_0, \quad (48)$$

где  $U_0$  – высота потенциального барьера,  $E_F$  – энергия Ферми и  $eV$  – приложенное напряжение.

Аналогичная ситуация с зависимостью ТМС от напряжения (Рис. 3). ВКБ приближение даёт заниженное значение эффекта при высоких напряжениях.

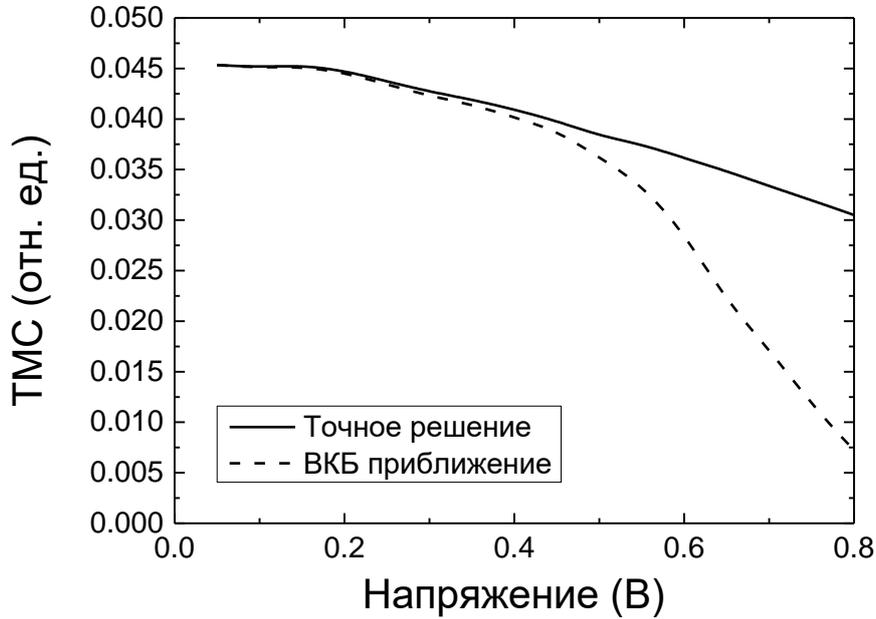


Рис. 3: Зависимости эффекта ТМС в МТП-структуре от приложенного напряжения. Угол между намагниченностями в ФМ-электродах  $\theta = 0^\circ$ , толщина изолятора  $d = 5 \text{ \AA}$ , высота барьера  $U_0 = 3 \text{ эВ}$ , энергия Ферми  $E_F = 2.62 \text{ эВ}$ , обменный интеграл в обоих ФМ-электродах  $J_{sd} = 0.98 \text{ эВ}$ .

На Рис. 4 и Рис. 5 приведены угловые зависимости туннельного тока и эффекта ТМС соответственно при приложенном напряжении  $V = 0.1 \text{ В}$ . Несмотря на видимую небольшую разницу в токе, кривые ТМС для точного и приближенного случая совпадают с хорошей точностью (см. вставку на Рис. 5).

Однако, при более высоких напряжениях разница токов при точном и приближенном решении значительно увеличивается. При напряжении  $V = 0.55 \text{ В}$ , разница для тока (Рис. 6) и для величины эффекта ТМС (Рис. 7) при углах  $\theta = \pm\pi$  достигает 15%.

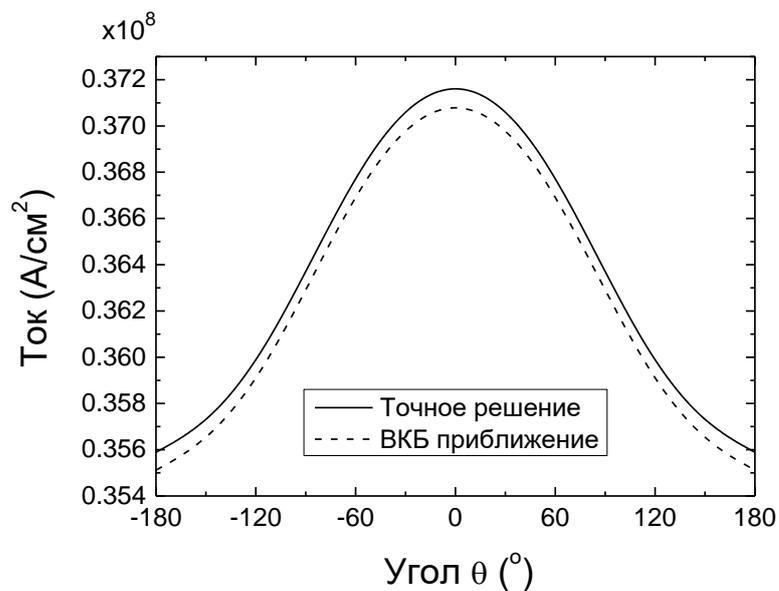


Рис. 5: Зависимости туннельного тока через МТП-структуру от угла  $\theta$  между намагниченностями ФМ-электродов. Приложенное напряжение  $V=0.1$  В. Остальные параметры такие же, как на Рис. 2.

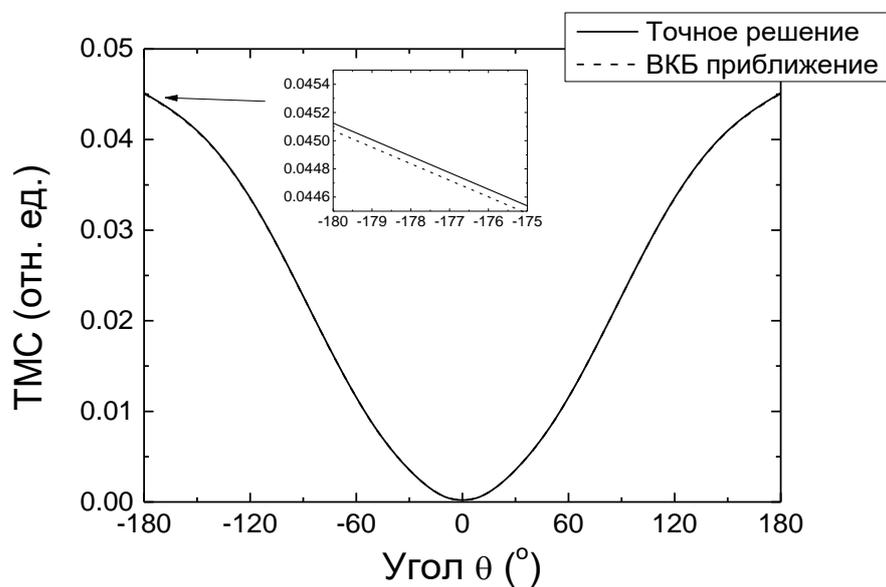


Рис. 4: Зависимости эффекта ТМС в МТП-структуре от угла  $\theta$  между намагниченностями ФМ-электродов. Приложенное напряжение  $V=0.1$  В. Остальные параметры такие же, как на Рис. 2.

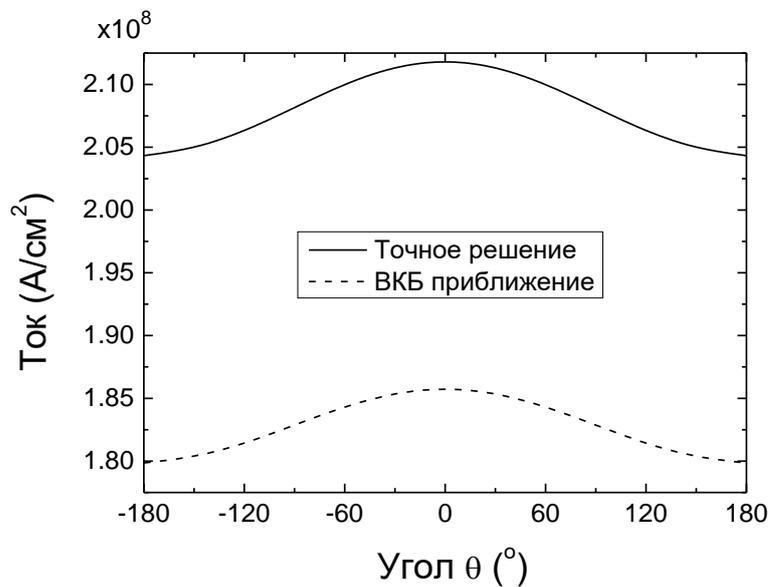


Рис. 6: Зависимости туннельного тока через МТП-структуру от угла  $\theta$  между намагниченностями ФМ-электродов. Приложенное напряжение  $V=0.55$  В. Остальные параметры такие же, как на Рис. 2.

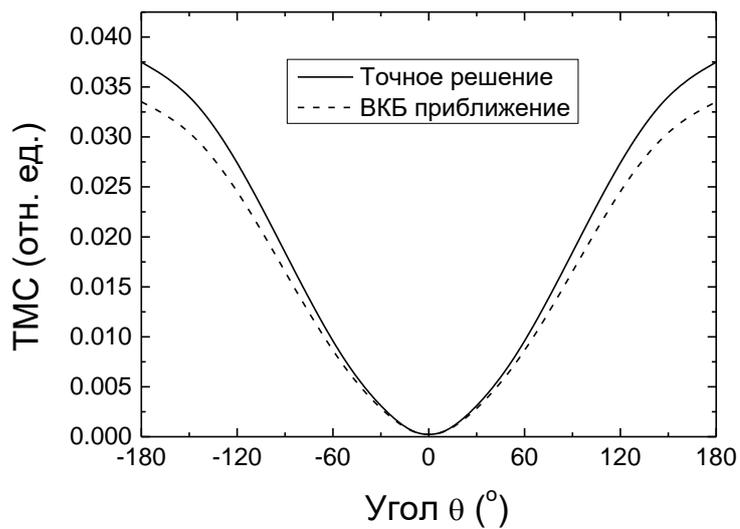


Рис. 7: Зависимости эффекта ТМС в МТП-структуре от угла  $\theta$  между намагниченностями ФМ-электродов. Приложенное напряжение  $V=0.55$  В. Остальные параметры такие же, как на Рис. 2.

Для того чтобы численно проинтегрировать уравнения (47) с использованием компонент спиновых торков  $a_{\parallel}$  и  $b_{\perp}$ , полученных путём решения вышеописанной задачи спин-зависящего транспорта необходимо сначала вычислить зависимость комплексного спинового тока  $J_{sxy}$  (39) на интерфейсе ФМ-электрод/изолятор от напряжения  $eV$  и угла  $\theta$ , подставить его в выражение (42) и найти среднее значение комплексного спинового торка  $\langle T_{xy} \rangle$ . Затем,

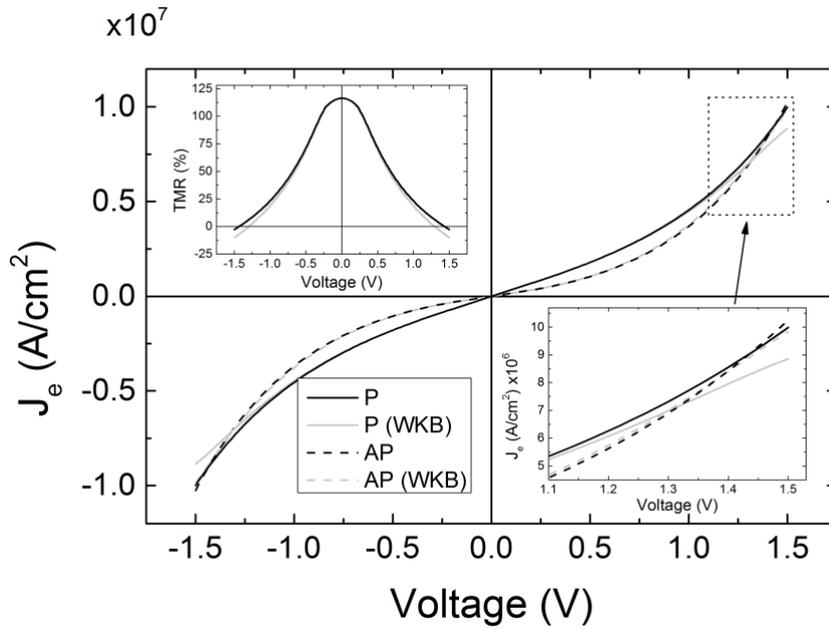


Рис. 8: Зависимость электрического тока через МТП-структуру в зависимости от напряжения в параллельной (P,  $\theta = 0$ ) и антипараллельной конфигурации (AP,  $\theta = \pi$ ) при точном решении (чёрная линия) и в ВКБ приближении (серая линия). На вставке (слева вверху) изображена зависимость эффекта  $TMR = (J_P - J_{AP})/J_P$  от напряжения.

Параметры МТП структуры:  $d=1.1$  нм,  $U_0=3.23$  эВ,  $E_F=2.18$  эВ,  $\Delta_1=\Delta_3=1.96$  эВ.

необходимо определить функции  $a_{\parallel}(eV, \theta)$  и  $b_{\perp}(eV, \theta)$  из выражений (46), которые будут подставлены в уравнения (47) для интегрирования.

На Рис. 8 показана зависимость туннельных токов при параллельной (сплошная линия) и антипараллельной (пунктирная линия) ориентации намагниченностей ФМ-электродов от приложенного напряжения. Параметры МТП-структуры были выбраны близкими для

структуры CoFe/MgO/CoFe, исходя из данных зонных расчетов [17,28] и экспериментальных данных [29,30]. Расчёт был произведён как с использованием точной волновой функции в барьере (18) (чёрные линии), так и приближённой (20) (серые линии).

Как видно из графика, ВКБ приближение начинает расходиться с точным решением при высоких напряжениях, когда значение  $E_F + |eV|$  близко к  $U_0$ . Это хорошо видно на

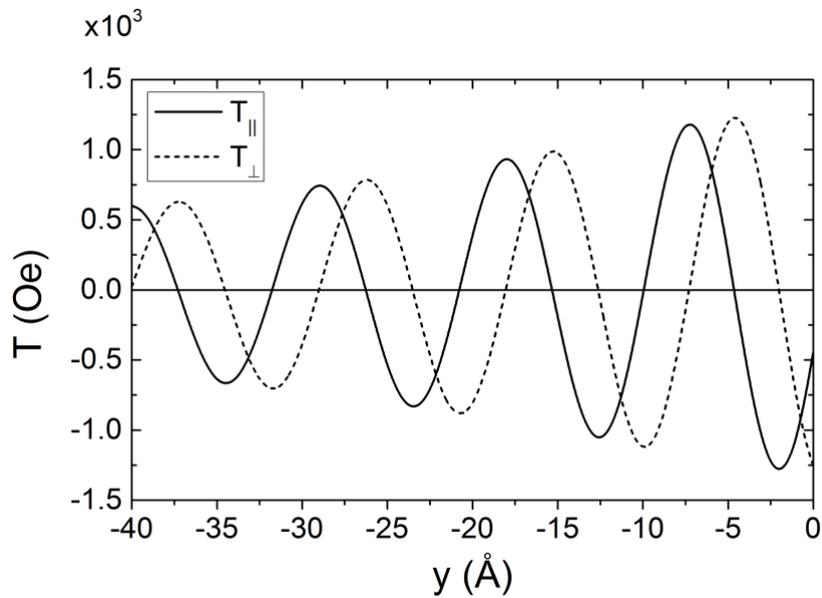


Рис. 9: Распределение параллельной  $T_{||}$  и перпендикулярной  $T_{\perp}$  компонент спинового торка в левом ФМ-электроде при точном решении. Параметры МТП структуры такие же, как и на Рис. 8. Угол поворота намагниченности в правом ФМ-электроде  $\theta = \pi/2$  (максимальный торк), приложенное напряжение  $eV=1.5$  В.

зависимости эффекта ТМС от напряжения: при  $V=1.4$  Вольт значения отличаются на 20%.

На Рис. 9 изображено распределение двух компонент спинового торка по левому ФМ-электроду, рассчитанных по формуле (37) при угле  $\theta=\pi/2$  (максимальное значение торка), и приложенном напряжении  $eV=1.5$  В. Торк осциллирует с частотой  $k_1^{\uparrow} - k_1^{\downarrow}$ , зависящей от напряжения и затухает, удаляясь от интерфейса [6,31]. На расстоянии  $t=1.6$  нм от интерфейса, соответствующей обычной толщине свободного слоя МТП-структуры торк затухает

незначительно. Используя однодоменное приближение можно считать, что средний торк  $\langle T_{xy} \rangle$  равномерно распределён по всей длине свободного слоя и не учитывать его зависимость от координаты  $y$ .

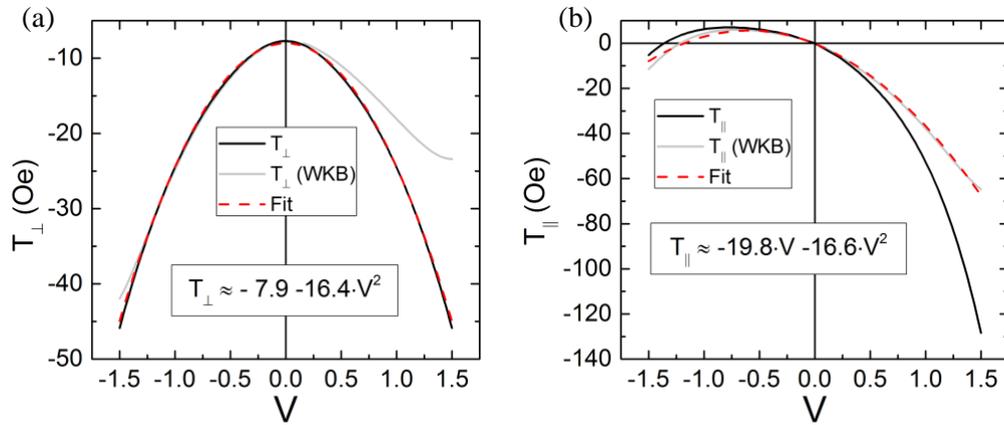


Рис. 10: Зависимость (а) перпендикулярной ( $T_{\perp}$ ) и (б) параллельной ( $T_{\parallel}$ ) компоненты полного спинового торка в свободном слое (левом ФМ-электроде) при точном решении (чёрная линия) в ВКБ приближении (серая линия). Параметры МТП структуры такие же, как и на Рис. 8. Угол поворота намагниченности в правом ФМ-электроде  $\theta = \pi/2$  (максимальный торк), толщина свободного слоя  $t = 1.6$  нм. Пунктирной линией обозначена аппроксимация кривой зависимости полиномом второй степени, согласно выражению (б).

Компоненты полного спинового торка, рассчитанные по формуле (42) в зависимости от приложенного напряжения представлены на Рис. 10. Сплошная чёрная линия соответствует точному решению, а сплошная серая – решению в ВКБ приближении. Полученные зависимости аппроксимируются полиномом второй степени, согласно выражению (б). Точное решение для перпендикулярной компоненты  $\langle T_{\perp} \rangle$  при  $\theta = \pi/2$  в заданном интервале напряжений практически совпадает с полиномом  $b_0 + b_1 V + b_2 V^2$ , где  $b_0 = -7.9$  Э (-0.79 мТл),  $b_2 = -16.4$  Э/В<sup>2</sup> (-1.64 мТл/В<sup>2</sup>), а  $b_1$  стремится к нулю, что характерно для симметричной ( $\Delta_1 = \Delta_3$ ) МТП-структуры [6]. Решение в ВКБ приближении значительно расходится с точным решением при  $V > 0.5$  В. Для параллельной компоненты  $\langle T_{\parallel} \rangle$ , наоборот, приближённое

решение хорошо аппроксимируется полиномом  $a_1V + a_2V^2$ , где  $a_1 = -19.8$  Э/В (-1.98 мТл/В),  $a_2 = -16.6$  Э/В<sup>2</sup> (-1.66 мТл/В<sup>2</sup>) и довольно сильно отличается от точного решения как для положительных, так и для отрицательных напряжений  $|V| > 0.5$  В.

Так как выбранная толщина барьера  $d = 1.1$  нм попадает под приближение «толстого» барьера, то функции  $a_{\parallel}$  и  $b_{\perp}$  будут зависеть только от напряжения и равны соответственно реальной и мнимой частям  $\langle T_{xy} \rangle$  рассчитанных при  $\theta = \pi/2$ . Следовательно, можно использовать полученные зависимости на Рис. 10, чтобы на их основе построить численные интерполяционные функции, которые будут использоваться для расчёта слагаемых спинового торка (46) при интегрировании уравнения Ландау-Лифшица (43).

### ***Построение диаграмм стабильности***

Диаметр свободного слоя обычно лежит в интервале 80-200 нм. Для цилиндрического объекта с диаметром  $D \approx 100$  нм и толщиной  $t = 1.6$  нм диагональные элементы тензора размагничивающего фактора будут равны:  $N_x = N_y = 0.025$ ,  $N_z = 0.95$  [32]. Намагниченность насыщения CoFeB при комнатной температуре  $M_s = 1.3$  Тл ( $\approx 10^6$  А/м) [33]. Константа перпендикулярной одноосной анизотропии для свободного слоя данной толщины при комнатной температуре  $K_u = 6 \cdot 10^5$  Дж/м<sup>3</sup> [33]. Фактор затухания Гильберта для свободного слоя подобных МТП-структур  $\alpha = 0.008$  [34]. Вектор поляризации опорного слоя выбран в направлении противоположном оси OZ ( $p_z = -1$ ).

Подставляя указанные параметры в систему дифференциальных уравнений (47) и задав начальные условия для углов  $\theta$  и  $\varphi$  можно найти ориентацию намагниченности свободного слоя  $\mathbf{m}$  в любой момент времени. Для построения диаграммы стабильности МТП-структуры мы численно повторяем экспериментальную процедуру, которая напоминает измерение петли гистерезиса и часто применяется для её получения [22,23]. Начальное направление намагниченности  $\mathbf{m}$  выбирается с отклонением в  $1^\circ$  от направления начального магнитного поля чтобы создать ненулевой торк в начальный момент времени. Для заданного напряжения

внешнее магнитное поле  $H_z$  изменяется от минимального значения  $-1100$  Э до максимального  $1100$  Э с шагом примерно  $20$  Э. Напряжение плавно возрастает в течение  $0.5$  нс до заданного значения. Записывающий импульс напряжения длится  $100$  нс, после чего также плавно спадает до нуля в течение  $0.5$  нс.

В каждой точке система уравнений (47) интегрируется до  $1$  мкс, затем значения

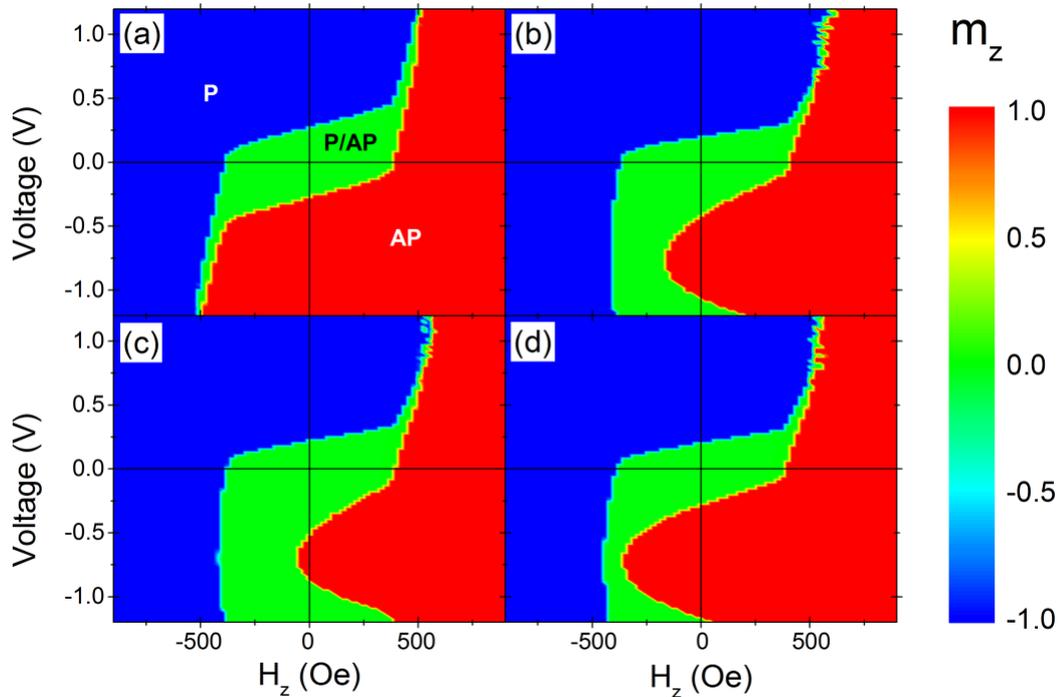


Рис. 11: Диаграммы стабильности свободного слоя МТП-структуры, показывающие области с параллельной ориентацией P (минимальное сопротивление), антипараллельной ориентацией AP (максимальное сопротивление) и смешанные P/AP области, где оба состояния допустимы. Диаграммы рассчитаны (a) при нулевой перпендикулярной компоненте  $b_{\perp}=0$  и линейной по напряжению параллельной компоненте  $a_{\parallel}=-19.8 \cdot V$  Э, (b) при точном решении для обоих компонент торков изображённых на Рис. 10 (сплошная чёрная линия), (c) при приближённом решении для обоих компонент торков изображённых на Рис. 10 (сплошная серая линия) и (d) при  $b_{\perp}=0$  и увеличенной линейной компонентой параллельного торка  $a_{\parallel}=-24.0 \cdot V - 16.6 \cdot V^2$  Э. Параметры свободного слоя:  $N_x=N_y=0.025$ ,  $N_z=0.95$ ,  $M_s=10^6$  А/м,  $K_u=6 \cdot 10^5$  Дж/м<sup>3</sup>,  $\alpha=0.008$ .

получившихся углов  $\theta$  и  $\varphi$ . сохраняются, чтобы использовать их в дальнейшем в качестве начальных условий для следующего шага. После достижения максимального значения поля описанная процедура повторяется в обратном направлении – магнитное поле меняется от максимального до минимального значения. После этого, направление намагниченности  $m$  усредняется в каждой точке магнитного поля по двум значениям для прямого и обратного хода процесса.

На Рис. 11 представлены рассчитанные диаграммы стабильности МТП-структуры изображённой на Рис. 1, где цветом обозначено среднее значение z-компоненты единичного вектора намагниченности свободного слоя  $m$ . По оси абсцисс отложено значение магнитного поля  $H_z$ , а по оси ординат – значение приложенного напряжения. На диаграммах выделяется три области: с параллельной ориентацией намагниченности свободного и опорного слоя (P) с минимальным сопротивлением, антипараллельной ориентацией (AP) с максимальным сопротивлением и смешанная область (P/AP), где могут существовать оба предыдущих состояния.

На Рис. 11(a), для сравнения, представлена диаграмма с одной параллельной компонентой спинового торка  $a_{\parallel}$  линейной по напряжению. Её форма хорошо известна и изучена [22]. Две горизонтальные параллельные границы соответствуют переключению МТП-структуры из P конфигурации в AP и наоборот за счет эффекта спинового торка, а две вертикальные соответствуют переключению за счет внешнего магнитного поля.

Диаграммы, использующие результат решения задачи спин-зависящего транспорта в МТП-структуре, изображённой на Рис. 1 при точном и приближённом решении, представлены соответственно на Рис. 11(b) и Рис. 11(c). При отрицательных напряжениях граница перехода из состояния P в состояние AP перестаёт быть параллельной границе перехода AP-P при положительном напряжении из-за квадратичной зависимости параллельной компоненты спинового торка Рис. 10(b). Граница перехода P-AP не достигает границы AP-P при

отрицательном напряжении, так как спиновый торк уменьшается, пройдя максимум при  $V \approx 0.6$  В. Диаграмма, использующая приближённое решение для спинового торка на Рис. 11(с) практически совпадает с диаграммой на Рис. 11(б) при положительных напряжениях, однако смешанная область значительно увеличена при  $V < 0$  из-за меньшего значения параллельного торка в ВКБ приближении. Абсолютное значение напряжения переключения при  $H_z = 0$  становится различным для AP-P и P-AP переходов. Подобная асимметрия наблюдается и в эксперименте [35]. При увеличении линейной компоненты в  $a_{\parallel}$  при фиксированной квадратичной компоненте данная асимметрия диаграммы уменьшается, так как при небольших абсолютных напряжениях функция  $a_{\parallel}(V)$  достаточно хорошо аппроксимируется линейной функцией.

## **Выводы**

Из полученных результатов можно сделать вывод, что при расчете электронного транспорта МТП-структуры при высоких напряжениях порядка 0.7 В, когда не выполняется условие применимости ВКБ приближения (48) важно использовать не приближенные, а точные волновые функции (18) при решении задачи туннелирования и нахождении туннельных токов. Это даст более точную величину напряжения переключения и поможет получить наиболее реалистичную форму такой важной характеристики МТП-структуры как фазовая V-H диаграмма стабильности.

Сравнительный анализ V-H диаграмм, построенных с использованием приближенного и точного решения показал, что абсолютное значение напряжения переключения в отсутствие внешнего магнитного поля становится различным для AP-P и P-AP переходов. Формы таких диаграмм проявляют асимметрию по отношению к полярности приложенного напряжения, что было показано ранее в экспериментальных работах. Асимметрия пропадает, если линейная составляющая параллельного торка  $a_{||}$  преобладает над квадратичной компонентой, что характерно для ферромагнетиков с большим обменным расщеплением (полуметаллы).

## *Список литературы*

1. Julliere M. Tunneling between ferromagnetic films // *Phys. Lett. A*. North-Holland, 1975. Vol. 54, № 3. P. 225–226.
2. Moodera J.S. et al. Large Magnetoresistance at Room Temperature in Ferromagnetic Thin Film Tunnel Junctions // *Phys. Rev. Lett.* American Physical Society, 1995. Vol. 74, № 16. P. 3273–3276.
3. Ikeda S. et al. Tunnel magnetoresistance of 604% at 300K by suppression of Ta diffusion in CoFeB/MgO/CoFeB pseudo-spin-valves annealed at high temperature // *Appl. Phys. Lett.* American Institute of Physics, 2008. Vol. 93, № 8. P. 082508.
4. Worledge D.C. et al. Spin torque switching of perpendicular Ta|CoFeB|MgO-based magnetic tunnel junctions // *Appl. Phys. Lett.* American Institute of Physics, 2011. Vol. 98, № 2. P. 022501.
5. Manchon A. et al. Theoretical investigation of the relationship between spin torque and magnetoresistance in spin-valves and magnetic tunnel junctions // *J. Magn. Magn. Mater.* 2007. Vol. 316, № 2 SPEC. ISS. P. e977–e979.
6. Chshiev M. et al. Analytical description of ballistic spin currents and torques in magnetic tunnel junctions // *Phys. Rev. B*. American Physical Society, 2015. Vol. 92, № 10. P. 104422.
7. Tedrow P.M., Meservey R. Spin-Dependent Tunneling into Ferromagnetic Nickel // *Phys. Rev. Lett.* American Physical Society, 1971. Vol. 26, № 4. P. 192–195.
8. Tedrow P.M., Meservey R. Spin Polarization of Electrons Tunneling from Films of Fe, Co, Ni, and Gd // *Phys. Rev. B*. American Physical Society, 1973. Vol. 7, № 1. P. 318–326.
9. Slonczewski J.C. Conductance and exchange coupling of two ferromagnets separated by a

- tunneling barrier // Phys. Rev. B. American Physical Society, 1989. Vol. 39, № 10. P. 6995–7002.
10. MacLaren J.M., Zhang X.-G., Butler W.H. Validity of the Julliere model of spin-dependent tunneling // Phys. Rev. B. American Physical Society, 1997. Vol. 56, № 18. P. 11827–11832.
  11. Bratkovsky A.M. Tunneling of electrons in conventional and half-metallic systems: Towards very large magnetoresistance // Phys. Rev. B. American Physical Society, 1997. Vol. 56, № 5. P. 2344–2347.
  12. Zhang X. et al. Spin-polarized tunneling and magnetoresistance in ferromagnet/insulator(semiconductor) single and double tunnel junctions subjected to an electric field // Phys. Rev. B. American Physical Society, 1997. Vol. 56, № 9. P. 5484–5488.
  13. Vedyayev A. et al. Giant tunnel magnetoresistance in multilayered metal/oxide structures comprising multiple quantum wells // J. Phys. Condens. Matter. 1998. Vol. 10, № 26. P. 5799–5805.
  14. Slonczewski J.C. Current-driven excitation of magnetic multilayers // J. Magn. Magn. Mater. 1996. Vol. 159, № 1–2. P. L1–L7.
  15. Berger L. Emission of spin waves by a magnetic multilayer traversed by a current // Phys. Rev. B. American Physical Society, 1996. Vol. 54, № 13. P. 9353–9358.
  16. Manchon A. et al. Modelling spin transfer torque and magnetoresistance in magnetic multilayers // J. Phys. Condens. Matter. 2007. Vol. 19, № 16. P. 165212.
  17. Stearns M.B. Simple explanation of tunneling spin-polarization of Fe, Co, Ni and its alloys // J. Magn. Magn. Mater. 1977. Vol. 5, № 2. P. 167–171.
  18. Landau L., Lifshits E. on the Theory of the Dispersion of Magnetic Permeability in

- Ferromagnetic Bodies // Phys. Zeitsch. der Sow. 1935. Vol. 169, № 14. P. 14–22.
19. Zvezdin A.K., Zvezdin K.A., Khval'kovskii A. V. The generalized Landau-Lifshitz equation and spin transfer processes in magnetic nanostructures // Phys. Usp. 2008. Vol. 51, № 4. P. 412–417.
  20. Bernert K. et al. Phase diagrams of MgO magnetic tunnel junctions including the perpendicular spin-transfer torque in different geometries // Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys. American Physical Society, 2014. Vol. 89, № 13. P. 134415.
  21. Skowroński W. et al. Understanding stability diagram of perpendicular magnetic tunnel junctions // Sci. Rep. 2017. Vol. 7, № 1. P. 10172.
  22. Timopheev A.A. et al. Respective influence of in-plane and out-of-plane spin-transfer torques in magnetization switching of perpendicular magnetic tunnel junctions // Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys. American Physical Society, 2015. Vol. 92, № 10. P. 104430.
  23. Strelkov N. et al. Stability phase diagram of a perpendicular magnetic tunnel junction in noncollinear geometry // Phys. Rev. B. 2017. Vol. 95, № 18. P. 184409.
  24. Landauer R. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction // IBM J. Res. Dev. 1957. Vol. 1. P. 223–231.
  25. Stiles M.D., Zangwill A. Anatomy of spin-transfer torque // Phys. Rev. B. American Physical Society, 2002. Vol. 66, № 1. P. 014407.
  26. Edwards D.M. et al. Self-consistent theory of current-induced switching of magnetization // Phys. Rev. B. American Physical Society, 2005. Vol. 71, № 5. P. 054407.
  27. Kalitsov A. et al. Spin-polarized current-induced torque in magnetic tunnel junctions // J. Appl. Phys. 2006. Vol. 99, № 8. P. 08G501.

28. Butler W.H. et al. Spin-dependent tunneling conductance of Fe|MgO|Fe sandwiches // Phys. Rev. B. American Physical Society, 2001. Vol. 63, № 5. P. 54416.
29. Parkin S.S.P. et al. Giant tunnelling magnetoresistance at room temperature with MgO (100) tunnel barriers // Nat. Mater. Nature Publishing Group, 2004. Vol. 3. P. 862.
30. Teixeira J.M. et al. Evidence of spin-polarized direct elastic tunneling and onset of superparamagnetism in MgO magnetic tunnel junctions // Phys. Rev. B. American Physical Society, 2010. Vol. 81, № 13. P. 134423.
31. Manchon A. et al. Description of current-driven torques in magnetic tunnel junctions // J. Phys. Condens. Matter. 2008. Vol. 20, № 14. P. 145208.
32. Aharoni A. Demagnetizing factors for rectangular ferromagnetic prisms // J. Appl. Phys. American Institute of Physics, 1998. Vol. 83, № 6. P. 3432–3434.
33. Sato H. et al. Temperature-dependent properties of CoFeB/MgO thin films: Experiments versus simulations // Phys. Rev. B. American Physical Society, 2018. Vol. 98, № 21. P. 214428.
34. Devolder T. et al. Material Developments and Domain Wall-Based Nanosecond-Scale Switching Process in Perpendicularly Magnetized STT-MRAM Cells // IEEE Trans. Magn. 2018. Vol. 54, № 2. P. 1–9.
35. Strelkov N. et al. Impact of Joule heating on the stability phase diagrams of perpendicular magnetic tunnel junctions // Phys. Rev. B. American Physical Society, 2018. Vol. 98, № 21. P. 214410.