

# 磁性半导体隧道结中自旋注入效率的温度效应

马 军

(中国药科大学基础部,南京 200093)

**摘要** 利用了隧道哈密顿方法研究了稀磁性半导体(DMS)到非磁性半导体(SM)隧道结中自旋注入效率与温度的关系。计算表明,随着温度的升高,自旋注入效率逐渐降低。这主要是由两方面的原因引起的,其一温度升高稀磁半导体的极化率降低;其二温度升高自旋反转隧穿增加。

**关键词** 稀磁半导体 自旋注入效率 隧道哈密顿 线性响应

**中图法分类号** O472.7; **文献标志码** A

为了能够更好的把自旋这个自由度应用到半导体器件中去,生产出更好的基于自旋的半导体器件<sup>[1]</sup>,首先要解决的一个重要问题是如何在半导体中得到尽可能高的极化电流。早期人们想利用量子隧穿原理来获得自旋极化的电流。在1970年的时候第一次在实验上测量到了从铁磁金属层中发出的自旋极化电流<sup>[2]</sup>。由于现在的半导体技术和工艺已经非常成熟,所以人们更关心的是从铁磁金属到非磁半导体的自旋注入效率问题。这样就可以直接利用现有的半导体技术和工艺制造出自旋半导体器件。可是正如 Schmidt *et al*<sup>[3]</sup> 所说的,在铁磁金属(FM)到半导体(SM)扩散系统中,由于 FM 和 SM 的电导的不匹配,阻碍了自旋极化的电子从 FM 到 SM 的注入。虽然许多学者<sup>[4—9]</sup> 提出可以在 FM 和 SM 之间引入势垒,从而产生和自旋相关的隧道电导来克服电导不匹配这个障碍,但是效果不是很显著。随着新材料不断的被发现,人们在从铁磁半导体到非磁半导体的自旋注入中观察到了 90% 注入效率<sup>[10—12]</sup>。但是现在所发现的在磁性半导体的居里温度普遍都比较小,都要比室温低得多。近来在 III-V 族掺 Mn<sup>2+</sup> 的稀磁性半导体(DMS)<sup>[12]</sup> 中发现了居里温度在 110 K 左右的新材料。本文中我们将主要是利用隧道哈密顿的方法,讨论从 GaMnAs/AlAs/GaAs 单结中的自旋注入效率随着温度的变化情况。

## 1 模型介绍及理论推导

### 1.1 磁性半导体的基本物理图像

磁性半导体的磁性主要是来源价带的空穴和 Mn 杂质自旋的 p-d 交换耦合互作用导致巡游空穴的极化,从而导致 Mn 杂质离子之间的长程序的铁磁互作用<sup>[13—15]</sup>。在输运理论中,费米能( $E_F$ )是一个重要的参数,它和温度、半导体的类型以及载流子的密度都有着密切的关系。我们在磁性半导体中应用两能带模型。如图 1 所示,相反自旋的多数载流子能带和少数载流子能带的带底能量之差即自旋劈裂能为  $\Delta$ ,费米能  $E_F$  是从  $E_0$  开始测量的。对于一个给定的费米能来说,磁性半导体中具有相反自旋的电子的各个量子态的统计分布能够被确定,由此人们就可以计算自旋极化电流。

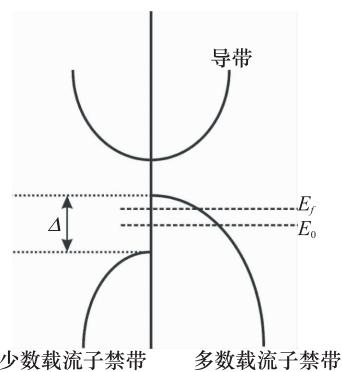


图 1 磁性半导体多数载流子和少数载流子能带

利用 König<sup>[15]</sup>的工作来确定费米能  $E_F$  和自旋劈裂量  $\Delta$ ,分别用  $c$  和  $c^*$  来表示 Mn 杂质的浓度和空穴浓度。一般情况下,在 Mn 掺杂浓度 0.035 <

$x < 0.06$  的范围内,  $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$  可以描述成载流子有相对较高的密度的简并半导体, 杂质当作是局域磁性杂质。通过自旋波自洽近似方法, 磁性半导体的有效哈密顿可以表达成:

$$H_{\text{eff}} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{|q| < q_c} \Omega_q b_q^\dagger b_q \quad (1)$$

式(1)中  $\varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon_k + \sigma \frac{\Delta}{2} = \hbar^2 k^2 / (2m^*) + \sigma \frac{\Delta}{2}$  表示自旋为  $\sigma = \pm 1$  的巡游空穴的能带能量,  $c_{k\sigma}^\dagger$  ( $c_{k\sigma}$ ) 是巡游空穴在动量空间的产生(消灭)算符,  $b_q^\dagger$  ( $b_q$ ) 是动量空间自旋波量子的产生(消灭)算符。 $q_c$  是表示局域自旋波的德拜频率,  $q_c^3 = 6\pi c$ 。自旋波色散关系和自旋劈裂能满足以下两个方程

$$\Omega_q = \frac{J_{pd}}{2} (n_\downarrow - n_\uparrow) - \frac{J_{pd}\Delta}{2V} \sum_k [f(\varepsilon_{k\downarrow}) - f(\varepsilon_{k+q\downarrow})] \frac{1}{\Omega_q + \varepsilon_{k+q\downarrow} - \varepsilon_{k\downarrow}} \quad (2)$$

和

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{V} \sum_{|q| < q_c} \{S - n_B(\Omega_q) + (2S+1)n_B[(2S+1)\Omega_q]\} \quad (3)$$

式(3)中  $n_\downarrow$  ( $n_\uparrow$ ) 是自旋为向下(向上)的巡游空穴的密度,  $f(x)$  和  $n_B(x)$  分别是费米分布函数和玻色分布函数,  $\beta = 1/(k_b T)$ 。方程(2)右边的第一、第二两项给出了自旋密度, 可以通过处理玻色子得到, 最后一项是自旋动力学的纠正项, 它去除非物理态。在有限温度的情况下自旋劈裂能为  $\Delta(T) = J_{pd} \langle S^z \rangle$ , 通过方程(2)和式(3)可以自洽的解得费米能  $E_F$  和自旋劈裂量  $\Delta$ 。

## 1.2 自旋极化运输的哈密顿模型

考虑一个 DMS/SM 单结的情况, 如图 2, 左边是稀磁半导体(DMS)电极, 右边是非磁性半导体(SM)电极, 中间是绝缘层势垒。那么这个单结的哈密顿可以由式

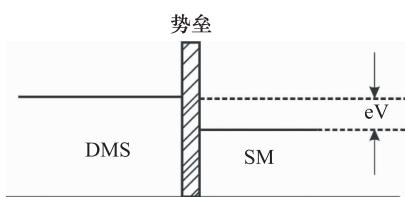


图 2 DMS/SM 单结

$H = H_L + H_R + H_T$  来描述, 其中,

$$H_L = \sum_{p\sigma} \varepsilon_{p\sigma} c_{p\sigma}^\dagger c_{p\sigma} + \sum_{|q| < q_c} \Omega_q b_q^\dagger b_q \quad (4)$$

$$H_R = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} d_{k\sigma}^\dagger d_{k\sigma} \quad (5)$$

$$H_T = \sum_{kp\sigma} (T_{kp}^0 d_{k\sigma}^\dagger c_{p\sigma} + iT'_{kp} d_{k\sigma}^\dagger c_{p,-\sigma} + H.c.) + \frac{1}{\sqrt{V_{kp}}} \sum_{|q| < q_c} [T''_{kpq} S^z(q) (d_{k\uparrow}^\dagger c_{p\uparrow} - d_{k\downarrow}^\dagger c_{p\downarrow}) + H.c.] + \frac{1}{\sqrt{V_{kp}}} \sum_{|q| < q_c} [T''_{kpq} \sqrt{2cSb_q} (d_{k\downarrow}^\dagger c_{p\uparrow} + c_{p\downarrow}^\dagger d_{k\uparrow}) + H.c.] \quad (6)$$

这里  $H_L$  和  $H_R$  分别是左边磁性半导体和右边非磁性半导体的有效哈密顿, 算符  $d_{k\sigma}$  ( $c_{p\sigma}$ ) 表示右边(左边)电极中动量为  $k$  ( $p$ ) 自旋为  $\sigma$  的载流子的消灭算符,  $S^z(q) = cS - b_q^\dagger b_q$ 。在方程 6 中与  $T_{kp}^0$  相关的项是指自旋守恒的隧穿过程; 与  $T'_{kp}$  相关的项是来源于绝缘层势垒中的自旋反转<sup>[16]</sup>; 与  $T''_{kpq}$  相关的后两项是描述的非弹性的自旋反转隧穿过程, 主要来自于绝缘层势垒与稀磁性半导体之间界面的局域自旋产生的自旋波激发。非弹性的自旋反转隧穿不但直接在界面上产生, 而且在界面上共振长度内也会产生<sup>[17]</sup>。通常认为各种不同的隧穿幅  $|T_{kp}^0|^2$ ,  $|T'_{kp}|^2$  和  $|T''_{kpq}|^2$  跟它们的动量是没有关系的, 可以分别为它们的平均值  $|T^0|^2$ ,  $|T'|^2$  和  $|T''|^2$  来代替。在低温和小偏置电压  $V$  的情况下, 利用标准的格林函数方法<sup>[18]</sup>, 半导体中电流的表达式可以写成:

$$\langle I_\sigma \rangle = 2\pi e^2 V |T^0|^2 [N_{L,\sigma}(E_F) N_{sm}(E_F) + \gamma N_{L,-\sigma}(E_F) N_{sm}(E_F)] \quad (7)$$

式(7)中

$$\gamma = \gamma_1 + 2\eta cS(cS - \langle S^z \rangle) \quad (8)$$

$N_{L,\sigma}(E_F)$  是指左边磁性半导体中在费米面处自旋为  $\sigma$  的空穴的态密度,  $N_{sm}(E_F)$  是右边非磁性半导体中和自旋无关的在费米面处的态密度。 $\gamma_1 = |T'|^2 / |\tilde{T}|^2$ ,  $\eta = |T''|^2 / |\tilde{T}|^2$ , 式中的  $|\tilde{T}|^2 = |T^0|^2 + c^2 S^2 |T'|^2$ , 因为通常情况下  $c^2 |T'|^2$  总是要比  $|T^0|^2$  小两个数量级, 所以上式可以写成  $|\tilde{T}|^2 \approx |T^0|^2$ 。根据自旋注入效率的定义, 以及前面的推导, 我们很容易得到 DMS/SM 的注入效率为

$$\alpha = \frac{I_\uparrow - I_\downarrow}{I_\uparrow + I_\downarrow} = P \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma} \quad (9)$$

式(9)中的  $P$  为

$$P = \frac{N_{L,\uparrow}(E_F) - N_{L,\downarrow}(E_F)}{N_{L,\uparrow}(E_F) + N_{L,\downarrow}(E_F)} \quad (10)$$

正好是磁性半导体中巡回空穴的自旋极化率。显然在没有自旋反转的情况下,注入效率  $\alpha = P$ 。

## 2 数值结果和讨论

在数值计算过程中固定杂质浓度  $c = 1 \text{ nm}^{-3}$ , 有关材料的参数为  $m^* = 0.5 \text{ m}_e$ ,  $J_{pd} = 0.15 \text{ eV} \cdot \text{nm}^{-3}$ <sup>[13]</sup> 其中  $m_e$  是指自由电子, 与自旋反转相关的参数  $\gamma_1$  和  $\eta$  参考文献[13]分别取为 0.692 和 0.005。如图 3 所示的是自旋劈裂能随着温度的升高而减小, 当达到  $T_c$  后变为零。

图 4 和图 5 指的是巡回空穴的自旋极化率和自旋注入效率随温度的变化。当空穴浓度  $c^* = 0.1 \text{ nm}^{-3}$  时, 我们可以看到在温度相对较低的时候, 由于自旋劈裂能比较大, 所以多数载流子和少数载流子的带是完全分开的, 所以自旋极化率  $P = 100\%$ , 表现出半金属特性。在这种情况下自旋注入效率

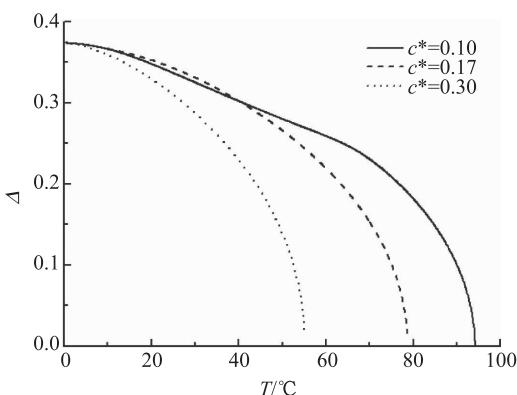


图 3 自旋劈裂能  $\Delta$  作为温度的函数

可以简化为  $\alpha = (1 - \gamma)/(1 + \gamma)$ 。随着温度的升高自旋波集体激发的数量增多,  $\gamma$  将慢慢变大, 自旋注入效率  $\alpha$  将减小。当温度升高到某一个值的时候, 多数载流子开始减少而少数载流子开始增加, 从而导致了自旋极化率的快速下降。这样自旋注入效率也跟着快速的下降到零。而对于较高的空穴浓度  $c^* = 0.3 \text{ nm}^{-3}$  时, 系统的费米能比原来要高, 而且自旋向上和向下的态都有空穴占据, 所以温度较低的时候也没有了半金属的特性。所以自旋注入效率也比较低。

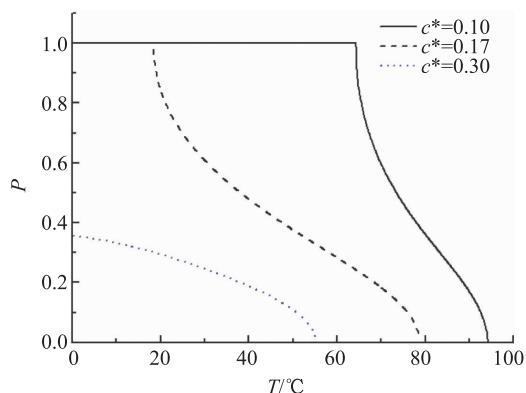


图 4 自旋极化率作为温度的函数

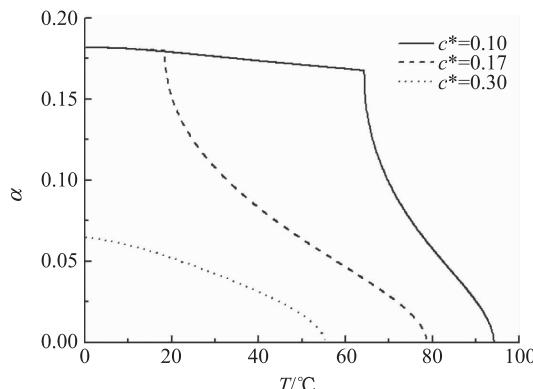


图 5 自旋注入效率作为温度的函数

## 3 小结

在本文中, 我们应用隧道哈密顿的方法来研究 DMS/SM 单结在考虑自旋反转的情况下的自旋注入效率, 它和温度有着密切的关系, 主要体现在两个方面: 一方面, 随着温度的升高稀磁半导体的极化率会逐渐变小, 从而使得自旋注入效率下降, 另一方面, 随着温度的升高自旋波激发也会增加, 自旋反转隧穿增加, 这样也使得注入效率减小。

## 参 考 文 献

- Datta S, Das B. Electronic analog of the electro-optic modulator. *Appl Phys Lett*, 1990; 56: 665—667
- Meservey R, Tedrow P M, Fulde, et al. Magnetic field splitting of the quasiparticle states in superconducting aluminum films. *P Fulde Phys Rev Lett*, 1970; 25: 1270—1272
- Schmidt G, Ferrand D, Molenkamp L W. Fundamental obstacle for electrical spin injection from a ferromagnetic metal into a diffusive semiconductor. *Phys Rev B*, 2000; 62: R4790—R4793

- 4 Rashba E I. Theory of electrical spin injection; tunnel contacts as a solution of the conductivity mismatch problem. *Phys Rev B*, 2000; 62: R16267—R16270
- 5 Fert A, Jaffr, *et al.* Conditions for efficient spin injection from a ferromagnetic metal into a semiconductor. *Phys Rev B*, 2001; 64: 184420 ~ 1—184420 ~ 9
- 6 Smith D L, Silver R N. Electrical spin injection into semiconductors. *Phys Rev B*, 2001; 64: 045323 ~ 1—045323 ~ 8; Albrecht J D,
- 7 Smith D L. Electron spin injection at a Schottky contact. *Phys Rev B*, 2002; 66: 113303—113307
- 8 Fiederling R, Keim M, Reuscher G, *et al.* Injection and detection of a spin-polarized current in a light-emitting diode. *Nature*, 1999; 402: 787—790;
- 9 Ohno Y, Young D K, Beschoten B, *et al.* Electrical spin injection in a ferromagnetic semiconductor heterostructure. *Nature*, 1999; 402: 790—792
- 10 Ghali M, Kossut J, Regiński K, *et al.* Optical injection of spin-polarized carriers across a strongly mismatched heterostructure. *Solid State Commun*, 2001; 119: 371—376
- 11 Johker B T, Park Y D, Bennett B R, *et al.* Robust electrical spin injection into a semiconductor heterostructure. *Phys Rev B*, 2000; 62: 8180—8183
- 12 Ohno H, Shen A, Matsukura F, *et al.* (Ga,Mn)As: a new diluted magnetic semiconductor based on GaAs. *Appl Phys Lett*, 1996; 69: 363—365
- 13 Ohno H. Making nonmagnetic semiconductors ferromagnetic. *Science*, 1998; 281: 951—956
- 14 Dietl T, Ohno H, Matsukura F, *et al.* Zener model description of ferromagnetism in zinc-blende magnetic semiconductors. *Science*, 2000; 287: 1019—1022
- 15 Ouml J N, Lin Hsiuhau, Allan H. Theory of diluted magnetic semiconductor ferromagnetism. *Phys Rev Lett*, 2000; 84: 5628—5631
- 16 Gu R Y, Xing D Y, Dong J M. Spin-polarized tunneling between ferromagnetic films. *Appl Phys*, 1996; 80: 7163—7165
- 17 Lyu P, Moon K. Tunneling magnetoresistance in diluted magnetic semiconductor tunnel junctions. *Phys Rev B*, 2001; 64: 035201—1—035201—6
- 18 Mahan G D. Many-particle physics. New York: Plenum, 1993: 788—794

## Temperature Effects of Spin Injection Efficiency in Magnetic Semiconductor Tunnel Junction

MA Jun

(Department of Basic Science, China Pharmaceutical University, Nanjing 21009, P. R. China)

**[Abstract]** Using the tunnel Hamiltonian method, the spin injection efficiency from diluted magnetic semiconductor (DMS) to no-magnetic semiconductor (SM) with temperature is studied. Numerical calculations indicate that with increasing temperature spin injection efficiency decreases. This is mainly caused by two reasons; the first the polarization rate of diluted magnetic semiconductor is reduced with raising of temperature; the second the spin-flip tunneling is increased with the temperature raised.

**[Key words]** diluted magnetic semiconductor      spin injection efficiency      tunneling hamilton      linear response