

УДК 538.9

ВЛИЯНИЕ БЕСПОРЯДКА НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА НА ПРОЦЕССЫ СПИНОЗАВИСИМОГО ТУННЕЛИРОВАНИЯ

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

¹ Харьковський національний університет імені В.Н. Каразіна

пл. Свободи, 4, 61077 Харків, Україна

² Університет Твенте, Дрінерлолаан

5, 7500 AE Enschede, Нідерланды

E-mail: i.marushchenko@gmail.com

Поступила в редакцию 10 июня 2010 г.

В статье приводятся результаты численного исследования влияния беспорядка на границах раздела на свойства переноса в магнитных туннельных переходах Fe|vacuum|Fe. С помощью расчетов из первых принципов, с учетом электронной структуры туннельного перехода, показано, что беспорядок на границе раздела оказывает сильное влияние на спин-поляризованный перенос. Полученный результат важен для понимания механизма, ответственного за эффект гигантского туннельного магнетосопротивления при комнатных температурах.

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

INFLUENCE OF INTERFACE ROUGHNESS ON SPIN-DEPENDENT TUNNELING

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

¹ Kharkov National Karazin University

Sq.4 Svobody, Kharkov, 61077, Ukraine

² University of Twente, Drienerlolaan

5, 7500 AE Enschede, The Netherlands

A quantitative study of the interface roughness effect on the transport properties of Fe|vacuum|Fe magnetic tunnel junctions is presented. From the first principle calculations with taking into account the parameter-free electronic structure it has been found that the surface roughness produces a very strong effect on the spin-polarized transport. The obtained results are important for understanding the mechanism responsible for the giant tunneling magnetoresistance.

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

ВПЛИВ БЕЗЛАДДЯ НА МЕЖІ РОЗДІЛУ НА ПРОЦЕСИ СПИНОЗАЛЕЖНОГО ТУНЕЛЮВАННЯ

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

¹ Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

м. Свободи 4, 61077, Харків, Україна

² Університет Твенте, Дрінерлолаан

5, 7500 AE Enschede, Нідерланды

В статті приведено результати числового дослідження впливання безладдя на межі розділу на властивості переносу у магнітних тунельних переходах Fe|vacuum|Fe. За допомогою розрахунків з перших принципів, виходячи з розрахованої електронної структури тунельного переходу, доведено, що безладдя на межі розділу завдає дуже сильну дію на спин-поляризований переніс. Отриманий результат важливий для розуміння механізму, що відповідний за ефект гігантського тунельного магнетопору при кімнатній температурі.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: спин-поляризований переніс, магнітний тунельний перехід, поверхневі стани, безладдя.

Спинтроника представляет собой быстро развивающуюся ветвь физики конденсированного состояния. Она имеет целью использование квантового спинового состояния как дополнительную степень свободы, что приводит к наблюдению новых эффектов. Одним из наиболее важных приложений спинтроники является магнетосопротивление - зависимость сопротивления системы от внешнего магнитного поля. В настоящей работе мы приводим результаты численных расчетов туннельного магнетосопротивления (ТМС), которое представляет собой зависимость сопротивления магнитного туннельного перехода типа ферромагнетик / изолятор / ферромагнетик от относительной ориентации направлений намагниченности ферромагнитных электродов, когда она меняется из антипараллельной в параллельную конфигурацию: $TMR = (R_{AP} - R_P) / R_P = (G_P - G_{AP}) / G_{AP}$, где R_P , R_{AP} , G_P и G_{AP} – сопротивления и проводимости туннельного перехода в параллельной и антипараллельной конфигурации соответственно.

После открытия больших значений ТМС в магнитных туннельных переходах, основанных на ультратонких слоях аморфного Al_2O_3 в качестве изолятора [1], значительные усилия были потрачены на использование этого эффекта в сенсорах и в качестве базиса для накопительных элементов флеш-памяти. Понимание ТМС было усложнено трудностью экспериментального изучения границ раздела металл / изолятор. Было показано [2], что химический состав границы раздела оказывает сильное влияние на величину и поляризацию ТМС, и знание структуры этой границы необходимо для теоретического анализа туннельных

переходов. В отсутствие подробных структурных моделей переходов и материалo-зависимых электронных структур, которые могли бы быть рассчитаны с помощью этих моделей, эффект интерпретировался в терминах спиновой поляризации P_1 электронов проводимости в электроде, используя модель, предложенную Джульером [3], согласно которой $TMC = 2P_1P_2/(1-P_1P_2)$. Факторы, дающие вклад в величину P_1 , были предметом многих обсуждений, но использование аморфного оксида в качестве материала для потенциального барьера делало невозможным подробное теоретическое исследование, которое можно было бы сравнить с экспериментом [4,5]. Ситуация принципиально изменилась после наблюдения больших значений ТМС при комнатной температуре в магнитном туннельном переходе $Fe_xCo_{1-x}|MgO|Fe_xCo_{1-x}$, в котором туннельный барьер MgO был моно- [6,7] и поликристаллическим [8].

Предсказание огромных значений ТМС для идеальных $Fe|MgO|Fe$ структур с помощью материалo-зависимых транспортных вычислений привело к необходимости понимания факторов, определяющих знак и величину ТМС, так как наибольшее экспериментально наблюдавшееся значение в 353% при низких температурах [7] все еще намного меньше значений, предсказанных в вычислениях из первых принципов, достигающих 20000% для соответствующей толщины MgO [9]. Попытки объяснить это расхождение были сделаны в работах, где для этой цели использовалась релаксация атомов на границе раздела [10] или образование слоя оксида FeO на границе электрода и оксидного барьера [11,12], однако роль беспорядка на границе раздела обсуждалась лишь качественно, не опираясь на результаты непосредственных расчетов.

В настоящей работе исследуется влияние неровности границы раздела между ферромагнитными электродами и вакуумным барьером в магнитных туннельных переходах на ТМС при помощи расчетов электронной структуры из первых принципов. Выбор вакуумного слоя в качестве диэлектрического барьера был сделан не только исходя из его простоты для теоретического описания, но также и для того, чтобы исключить эффекты, связанные с электронной структурой барьера, и отделить эффект беспорядка на границе раздела от посторонних к нему эффектов. При этом ценность и применимость этой модели к различным экспериментальным условиям неоднократно подтверждалась другими исследованиями спиновозависимого туннелирования в вакууме [13,14].

Целью данной работы является теоретическое изучение влияния беспорядка на поверхностях электродов в магнитном туннельном переходе на процессы туннелирования, основанное на расчетах параметров туннелирования для различных конфигураций беспорядка в туннельном переходе и сравнении этих результатов с референсной системой, обладающей идеальной кристаллической структурой.

ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ И ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В работе исследуются свойства переноса в магнитном туннельном переходе в режиме линейного отклика в рамках приближения локальной плотности спинов (LSDA) теории функционалов плотности (DFT) [15]. Исследование состоит из двух этапов.

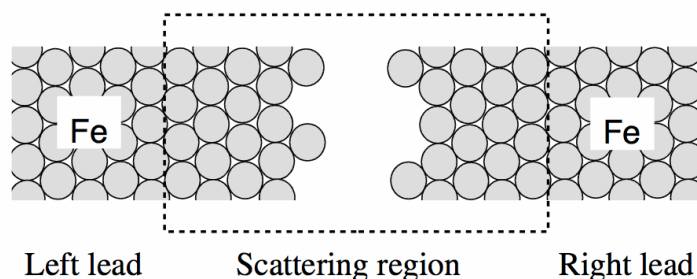


Рис.1. Показан туннельный переход $Fe|vacuum|Fe$ с неровной границей раздела (т.е. с поверхностным покрытием). Атомы Fe обозначены серым цветом. Область рассеяния представлена вакуумным барьером и 4 монослоями Fe с обеих сторон. Беспорядок на границе раздела смоделирован неполными атомными слоями Fe.

туннелирования в вакууме [13,14].

Во всех вычислениях в этой статье мы используем базисный набор $\{spd\}$ орбиталей, а обменно-корреляционные потенциалы параметризованы по методу фон Барта и Хедина [18]. В ходе вычислений используется релаксация потенциалов в области рассеяния. Приближение атомных сфер использовано для узлов фиксированной bcc решетки, занятых либо атомными, либо пустыми сферами, которые использовались для моделирования вакуумного барьера. Для Fe решетки использовалось значение постоянной решетки $a_{Fe} = 2,866 \text{ \AA}$.

На втором этапе самосогласованные потенциалы использовались для вычисления элементов матрицы рассеяния (коэффициенты прохождения и отражения), используя имплементацию метода muffin-tin орбиталей в приближении сильной связи для схемы стыковки волновых функций согласно Андо [19]. Тогда проводимость

На первом этапе самосогласованные потенциалы, плотности заряда и спина определяются для системы, состоящей из двух полубесконечных идеальных проводов и области рассеяния. Область рассеяния ограничена частью системы, которая включает вакуумный туннельный барьер и несколько непосредственно прилегающих к нему монослоев электрода (см. рис. 1). Предполагается, что внутри каждого слоя сохраняется трансляционная инвариантность, сохраняющая $k_{||}$ как хорошее квантовое число. Самосогласованные вычисления выполняются с использованием метода поверхностных функций Грина [16], развитого в рамках линейного метода muffin-

может быть посчитана согласно формуле Ландауэра-Буттикера [20] интегрированием по двумерной зоне Бриллюэна.

Беспорядок моделируется с помощью решеточных супер-ячеек размером в 100 атомов (10×10). Неровность границы раздела Fe|vacuum рассматривается как случай, когда поверхностный слой каждого электрода покрыт дополнительными атомами Fe, образующими неполный слой и занимающими узлы бсс решетки (см. рис.1). Потенциалы внутри атомных и пустых сфер вычисляются в приближении двумерных когерентных потенциалов с поверхностным слоем, рассматриваемым формально как сплав атомов Fe и пустых сфер. В этом случае сферы случайно распределены в супер-ячейке с концентрацией атомов Fe, соответствующей предполагаемому поверхностному покрытию $\{x\}$.

ТУННЕЛИРОВАНИЕ В ИДЕАЛЬНОМ МАГНИТНОМ ТУННЕЛЬНОМ ПЕРЕХОДЕ

Перед тем как приступить к исследованию влияния неровности границы раздела на туннелирование, важно понять, какие факторы определяют свойства переноса в идеальном магнитном туннельном переходе. Мы начнем с расчетов проводимости идеального перехода Fe|vacuum|Fe как функции толщины барьера. Результаты для каналов “спин-вверх” и “спин-вниз” в параллельной конфигурации магнитных моментов, G_p^{maj} and G_p^{min} , показаны на рис. 2 вместе с проводимостью одного спинового канала для антипараллельной конфигурации, G_{AP}^o . Интересно сравнить эти результаты с предсказанием простейшей модели свободных электронов через прямоугольный барьер. В этой модели затухание проводимости асимптотически описывается простым экспоненциальным фактором $\exp(-2dk)$, где d это толщина барьера и $k = \sqrt{(2m/\hbar^2)V_b}$, где V_b представляет собой высоту барьера. Все три кривые на рис. 2 достигают экспоненциального предела при толщине вакуумного барьера больше 8 монослоев с одинаковой скоростью затухания (т.е. наклоном кривой). Полученная из наклона кривых высота барьера $V_b = 4,7$ eV находится в хорошем согласии с высотой барьера, определяемой потенциальным профилем.

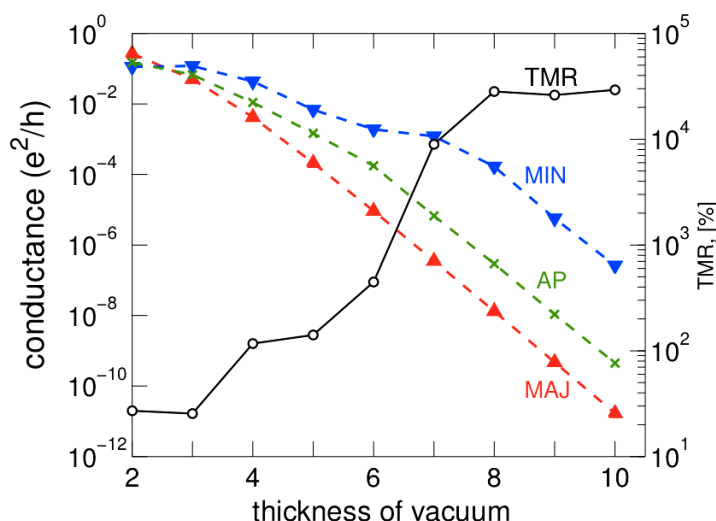


Рис.2. Проводимости G_p^{min} (▼), G_p^{maj} (▲), и G_{AP}^o (×) идеального магнитного туннельного перехода Fe|vacuum|Fe как функция толщины барьера (измеренной в единицах атомных монослоев бсс решетки). Соответствующие значения TMC показаны черной кривой с пустыми кружками.

простое поведение, за исключением области, где барьер достаточно тонкий (наклон уменьшается, т.е. наблюдается отклонение от простого экспоненциального затухания). Это отклонение может быть объяснено отклонением формы туннельного барьера от прямоугольной, которое тем сильнее, чем тоньше барьер, и напротив, для достаточно толстого барьера форма его потенциального профиля слабо отличается от прямоугольной. Согласно модели свободных электронов, вероятность прохождения для состояний с большим $k_{||}$ должна убывать быстрее, и картина вероятностей туннелирования в двумерной зоне Бриллюэна должна представлять собой широкий “колоколообразный” пик с центром в Γ -точке (центр зоны Бриллюэна). Это качественно соответствует тому, что мы получили для туннелирования в канале “спин-вверх”.

Однако, зависимость проводимости в канале “спин-вниз” от толщины вакуумного барьера существенно отличается от вышеупомянутой. Как видно на рис. 2, в очень тонком барьере $G_p^{maj} > G_p^{min}$, но дальнейшее увеличение толщины барьера приводит к тому, что поляризация проводимости меняет свой знак, и для более толстых барьеров G_p^{min} начинает доминировать. При этом TMC возрастает как функция толщины барьера, достигая значений порядка 20000%. Нетривиальная зависимость проводимости в канале “спин-вниз” от

Как показано на рис. 2, TMC возрастает с увеличением толщины барьера и выходит на насыщение, достигнув значения около 20000%. Это число сравнимо со значениями TMC, полученными путем расчетов из первых принципов для идеального магнитного туннельного перехода Fe|MgO|Fe. [9]

Несмотря на то, что наклон всех кривых на большой толщине становится примерно одинаковым и соответствует асимптотическому пределу затухания, их поведение очень различно в случае более тонких барьеров. Это следствие того, что в их основе лежат разные механизмы туннелирования. Мы обсудим это на примере каналов “спин-вверх” и “спин-вниз” в параллельной конфигурации. Антипараллельная проводимость может рассматриваться как комбинация первых двух и поэтому не будет обсуждаться отдельно.

Из трех каналов, представленных на рис. 3, канал “спин-вверх” параллельной конфигурации демонстрирует наиболее

толщины барьера может быть объяснена наличием поверхностного состояния с Δ_1 симметрией в Γ -точке (где $k_{\parallel}=0$), которое в случае Fe электродов находится очень близко к уровню Ферми для “спинов-вниз”, но намного ниже этого уровня для “спинов-вверх”. В параллельной конфигурации одно такое состояние существует на каждой из границ раздела, и для значений k_{\parallel} , отличных от нуля, эти состояния становятся поверхностными резонансами, которые образуют связанные-антисвязанные пары с вероятностью прохождения через барьер близкой к единице. С увеличением ширины барьера, связь между поверхностными резонансами ослабляется до уровня, где расщепление связанной-антисвязанной пары становится меньше, чем ширина резонанса, после чего максимальная вероятность туннелирования для этих состояний становится меньше единицы и устанавливается нормальная экспоненциальная зависимость проводимости от толщины барьера.

ВЛИЯНИЕ НЕРОВНОСТИ ПОВЕРХНОСТЕЙ НА ТУННЕЛИРОВАНИЕ

Идеальный магнитный туннельный переход, рассмотренный в предыдущей главе, невозможно реализовать на практике. Всегда будет оставаться некоторый беспорядок в виде шероховатостей поверхности, островов, дислокаций и т.д. В этой главе мы рассмотрим магнитный туннельный переход Fe|vacuum|Fe с беспорядком, введенным в форме неполных поверхностных слоев на границах Fe|vacuum. Этот беспорядок моделируется путем заполнения случайным образом части узлов решетки атомами Fe в соответствующих слоях на границах раздела, как представлено схематически на рис. 1. В этом случае три различных механизма могут влиять на туннелирование через магнитный туннельный переход.

Во-первых, введение беспорядка нарушает точечную группу симметрии системы и связано с разрушением поверхностного состояния вместе с соответствующим ему резонансным состоянием. Это, в свою очередь, должно привести к значительному падению проводимости в канале “спин-вниз”, так как резонансное туннелирование в наибольшей степени ответственно за высокие значения проводимости, полученные для идеального случая.

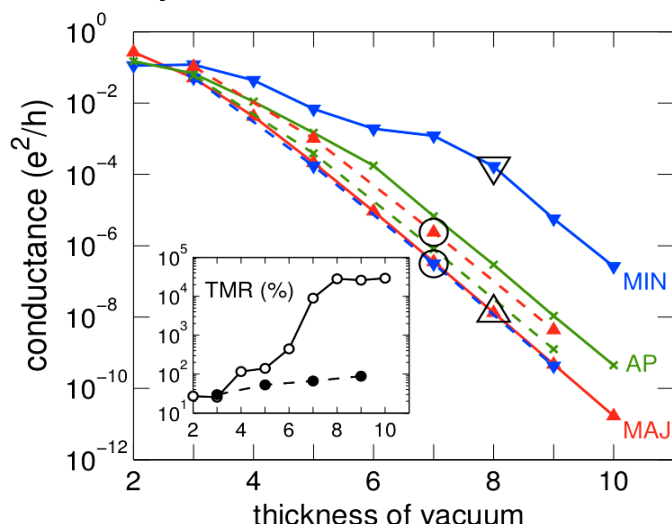


Рис.3. Сплошной линией показаны проводимости G_p^{\min} (\blacktriangledown), G_p^{maj} (\blacktriangle), и G_{AP}^{σ} (\times) идеального магнитного туннельного перехода Fe|vacuum|Fe как функция толщины барьера, а пунктирной линией – результаты для соответствующих проводимостей для случая сильного беспорядка, когда поверхностное покрытие границы раздела атомами Fe составляет 50%. Во вставке показаны соответствующие значения ТМС как для идеального случая (пустые кружки), так и для случая с беспорядком (черные кружки).

конфигурациям беспорядка. Беспорядок был сгенерирован, извлекая случайным образом атомы Fe из одной поверхности и размещая их случайным образом на другой поверхности, сохраняя таким образом среднюю толщину потенциального барьера неизменной. Как и ожидалось, канал “спин-вниз” демонстрирует наиболее сильные изменения по сравнению с проводимостями идеальной системы, также показанными на рис.3. Значения проводимостей в канале “спин-вниз” уменьшились на четыре порядка, тогда как проводимости в канале “спин-вверх” немного возросли, и в антипараллельном случае проводимости остаются в области промежуточных значений. Значения ТМС при этом (см. вставку на рис.3) сильно уменьшились и находятся теперь в промежутке от 10 до 100%, что по порядку величины находится в согласии с экспериментом [7].

Все три проводимости для системы с беспорядком, показанные на рис.3, убывают экспоненциально уже для очень тонких барьеров. Вместе с сильным падением проводимости в канале “спин-вниз” это указывает на

Во-вторых, в случае слабого беспорядка поверхностное состояние может “выжить”, но оно может оказаться смещенным по отношению к уровню Ферми, и связанные с ним резонансы станут шире. Последнее может в некоторых случаях привести к возрастанию проводимости в зависимости от того, какой была изначальная энергия резонансного состояния и амплитуда связанного-антисвязанного расщепления.

В третьих, введение случайного покрытия поверхности атомами Fe приведет к тому, что в некоторых местах эффективная толщина вакуумного барьера будет меньше, чем в изначальном переходе. В связи с экспоненциальной зависимостью туннелирования от толщины барьера, это может привести к заметному увеличению проводимости. Этот эффект, вероятно, может оказать влияние на канал “спин-вверх” с его простым туннелированием, похожим на то, что получается для модели свободных электронов.

Эти предсказания согласуются с результатами вычислений для покрытия поверхности, равного 50% (случай сильного беспорядка), представленными на рис.3. Здесь были использованы супер-ячейки размером 10×10 атомов и результаты были усреднены по 20

то, что 50% покрытия поверхности более чем достаточно для подавления резонансных эффектов в туннелировании.

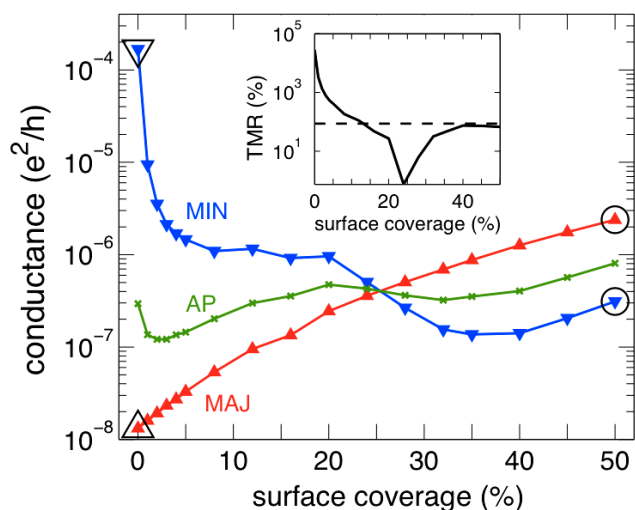


Рис.4. Усредненные по конфигурациям проводимости $G_{\text{P}}^{\text{min}}$ (\blacktriangledown), $G_{\text{P}}^{\text{maj}}$ (\blacktriangle), и G_{AP}^{σ} (\times) магнитного туннельного перехода Fe|vacuum|Fe с толщиной барьера 8 монослоев, показаны как функции поверхностного покрытия. Во вставке показана соответствующая зависимость для ТМС. Большими символами отмечены точки, соответствующие аналогичным точкам на рис.3.

Для покрытия до 5% наблюдается быстрое уменьшение, за которым следует плато приблизительно постоянных значений, распространяющееся вплоть до 20% поверхностного покрытия. Для еще больших покрытий значение проводимости падает опять, достигая минимума около 35% и затем начинает возрастать, причем начиная с этого места кривые обоих спиновых каналов идут практически параллельно. Это говорит о том, что этот рост обеспечивается одним и тем же механизмом – уменьшением средней толщины барьера, а также указывает на то, что резонансные эффекты, доминировавшие в проводимости через идеальную систему, были полностью разрушены.

Сильное падение проводимости наблюдается уже для поверхностного покрытия всего в 1%. Маловероятно, что поверхностное состояние и ассоциированные с ним резонансы разрушены таким слабым беспорядком. Здесь доминирует другой механизм, обсуждавшийся в начале этой главы. Изменение локальной электронной структуры, в частности уширение резонансов, может, как увеличить, так и уменьшить проводимость в зависимости от таких факторов, как расположение пика резонанса по отношению к энергии Ферми и степень связанного-антисвязанного расщепления. Тот факт, что проводимость канала “спин-вниз”, значительно снизившись, остается все же намного большей, чем проводимость канала “спин-вверх” вплоть до покрытия в 20%, говорит о том, что проводимость в этой области все еще ассоциируется с резонансными состояниями на поверхности Fe. Возможное объяснение состоит в том, что случайный беспорядок на поверхности уничтожает зеркальную симметрию перехода, смещая резонансные состояния друг относительно друга. В этой ситуации идеальное резонансное туннелирование без затухания становится невозможным, однако даже не связанные друг с другом резонансные состояния все еще могут давать существенный вклад в полную проводимость (как это имеет место, например, в антипараллельном канале, где есть только одно резонансное состояние).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Численным моделированием с помощью метода стыковки волновых функций, в работе были исследованы свойства переноса в туннельных переходах типа Fe|vacuum|Fe. В идеальной системе (в отсутствие беспорядка в переходах) было обнаружено, что в канале “спин-вниз” параллельной конфигурации электродов доминирует резонансное туннелирование, также найденное с помощью вычислений из первых принципов. Этот эффект ответствен за предсказанное значение ТМС. Резонансы в этом случае вырождаются в сильнолокализованные пики – области двумерной зоны Бриллюэна, в которой состояния туннелируют практически без затухания. Эти резонансы тесно связаны с поверхностным состоянием с Δ_1 симметрией, которое образуется на поверхности Fe. Также было показано, что беспорядок (в виде неровности границы раздела) снижает огромные значения ТМС, предсказанные для идеальной системы, до порядка экспериментально наблюдаемых значений. Беспорядок на границе раздела вызывает два конкурирующих эффекта: с одной стороны, он увеличивает вероятность туннелирования, уменьшая эффективную толщину барьера, и, с другой стороны, разрушая точечную группу

Для того, чтобы лучше понять эффект беспорядка, требуется подробно проследить, как меняется проводимость при изменении покрытия поверхности. Для этого толщина барьера была зафиксирована на уровне 8 монослоев и неровность поверхности смоделирована размещением дополнительных атомов Fe на поверхностях обоих электродов. Это значит, что точка 50% на рис.4 соответствует точке, соответствующей 7 монослоям на рис.3. Соответствующие точки на обоих рисунках были отмечены большими символами. Как можно увидеть, есть качественная разница в зависимости проводимостей спиновых каналов от покрытия поверхности. Остановимся на этом подробнее.

Канал “спин-вверх” в параллельной конфигурации демонстрирует самую простую зависимость. Проводимость возрастает как функция поверхностного покрытия благодаря уменьшению эффективной толщины барьера. Проводимость в канале “спин-вниз” демонстрирует намного более сложную зависимость от поверхностного покрытия.

симметрии системы, он разрушает резонансные и поверхностные состояния, уменьшая, таким образом, проводимость в канале “спин-вниз” и, следовательно, уменьшая ТМС.

Последний эффект является наиболее сильным в системе, изучавшейся в этой статье, где резонансные эффекты доминируют в туннелировании в идеальной системе. Мы обнаружили, что даже очень слабого беспорядка достаточно, чтобы существенно снизить проводимость в канале “спин-вниз”, даже с учетом того, что резонансные состояния, по всей видимости, все еще сохраняются. В пределе очень сильного беспорядка проводимость в канале “спин-вниз” демонстрирует ту же зависимость от толщины барьера, что и в канале “спин-вверх”, что указывает на то, что резонансные эффекты полностью устранены в этом пределе.

Необычайно большие значения ТМС, предсказанные другими группами для идеального Fe|MgO|Fe намного превосходят значения, полученные в эксперименте. Наши результаты позволяют предположить, что эти эксперименты все еще находятся в режиме, ограниченном беспорядком. Однако, следует отметить, что прямое приложение наших результатов к переходам, основанным на MgO, не является бесспорным. В отличие от нашей системы, в туннелировании через идеальный MgO доминирует канал “спин-вверх” благодаря хорошей стыковке состояний с Δ_1 симметрией в Fe с затухающими решениями в энергетической щели MgO. Таким образом, несмотря на то, что резонансы были предсказаны для проводимости “спин-вниз”, их разрушение может не иметь такого сильного эффекта, как в случае вакуумного барьера.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. J.S. Moodera, L.R. Kinder, T.M. Wong, R. Meservey Large Magnetoresistance at Room Temperature in Ferromagnetic Thin Film Tunnel Junctions // *Phys. Rev. Lett.* – 1995. – Vol.74. – P.3273-3276.
2. J.M. De Teresa, A. Barthelemy, A. Fert, J.P. Contour, F. Montaigne, P. Seneor Role of Metal-Oxide Interface in Determining the Spin Polarization of Magnetic Tunnel Junctions // *Science*. – 1999. – Vol.286. – P.507-509.
3. M. Julliere Tunneling between ferromagnetic films // *Phys. Lett.* – 1975. – Vol.54A. – P. 225-226.
4. E. Y. Tsymbal, O.N. Mryasov, P.R. LeClair Spin-dependent tunnelling in magnetic tunnel junctions // *J. Phys.: Condens. Matter*. – 2003. – Vol.15. – P.R109-R142.
5. X.G. Zhang, W.H. Butler Band structure, evanescent states, and transport in spin tunnel junctions // *J. Phys.: Condens. Matter*. – 2003. – Vol.15. – P.R1603-1639.
6. S. Yuasa, T. Nagahama, A. Fukushima, Y. Suzuki, K. Ando Giant room-temperature magnetoresistance in single-crystal Fe/MgO/Fe magnetic tunnel junctions // *Nature Materials*. – 2004. – Vol.3. – P.868-871.
7. S. Yuasa, T. Katayama, T. Nagahama, A. Fukushima, H. Kubota, Y. Suzuki, K. Ando Giant tunneling magnetoresistance in fully epitaxial body-centered-cubic Co/MgO/Fe magnetic tunnel junctions // *Appl. Phys. Lett.* – 2005. – Vol.87. – P.222508 - 222511.
8. S.S. P. Parkin, C. Kaiser, A. Panchula, P.M. Rice, B. Hughes, M. Samant, S.H. Yang Giant tunnelling magnetoresistance at room temperature with MgO (100) tunnel barriers // *Nature Materials*. – 2004. – Vol.3. – P.862-867.
9. W.H. Butler, X.G. Zhang, T.C. Schulthess, J.M. MacLaren Spin-dependent tunneling conductance of Fe|MgO|Fe sandwiches // *Phys. Rev. B*. – 2001. – Vol.63. – P.054416 - 054428.
10. D. Wortmann, G. Bihlmayer, S. Blugel Ab initio calculations of interface effects in tunnelling through MgO barriers on Fe(100) // *J. Phys.: Condens. Matter*. – 2004. – Vol.16. – P.S5819-S5822.
11. X.G. Zhang, W.H. Butler, A. Bandyopadhyay Effects of the iron-oxide layer in Fe-FeO-MgO-Fe tunneling junctions // *Phys. Rev. B*. – 2003. – Vol.68. – P.092402 - 092406.
12. C. Tusche, H.L. Meyerheim, N. Jedrecy, G. Renaud, A. Ernst, J. Henk, P. Bruno, J. Kirschner Oxygen-Induced Symmetrization and Structural Coherency in Fe/MgO/Fe(001) Magnetic Tunnel Junctions // *Phys. Rev. Lett.* – 2005. – Vol.95. – P.176101 - 176105.
13. J.A. Stroscio, D.T. Pierce, A. Davies, R.J. Celotta, M. Weinert Tunneling Spectroscopy of bcc (001) Surface States // *Phys. Rev. Lett.* – 1995. – Vol.75. – P.2960-2963.
14. H.F. Ding, W. Wulfhekkel, J. Henk, P. Bruno, J. Kirschner Absence of Zero-Bias Anomaly in Spin-Polarized Vacuum Tunneling in Co(0001) // *Phys. Rev. Lett.* – 2003. – Vol.90. – P.116603 - 116607.
15. R.G. Parr, W. Yang Density-Functional Theory of Atoms and Molecules. - New York: Oxford University Press, 1989.
16. I. Turek, V. Drchal, J. Kudrnovsky, M. Sob, P. Weinberger Electronic Structure of Disordered Alloys, Surfaces and Interfaces. - Boston-London-Dordrecht, Kluwer, 1997.
17. O.K. Andersen, Z. Pawlowska, O. Jepsen Illustration of the linear-muffin-tin-orbital tight-binding representation: Compact orbitals and charge density in Si // *Phys. Rev. B*. – Vol.34. – P.5253-5269.
18. U. von Barth, L. Hedin A local exchange-correlation potential for the spin polarized case // *J. Phys. C: Sol. State Phys.* – 1972. – Vol.5. – P.1629-1642.
19. T. Ando Quantum point contacts in magnetic fields // *Phys. Rev. B*. – 1991. – Vol.44. – P.8017-8027.
20. S. Datta Electronic Transport in Mesoscopic Systems. – Cambridge: Cambridge University Press, 1997.