

プログラム名： 無充電で長期間使用できる究極のエコ IT 機器の実現

PM名： 佐橋 政司

プロジェクト名： 新規 MRAM 開発のための計算科学支援チーム

委 託 研 究 開 発

実 施 状 況 報 告 書 (成 果)

平 成 2 8 年 度

研究開発課題名：

スピントロニクス材料設計

研究開発機関名：

東北大学 電気通信研究所

研究開発責任者

白井 正文

I 当該年度における計画と成果

1. 当該年度の担当研究開発課題の目標と計画

電圧駆動磁化反転（電圧トルク）MRAM の実現に向けて、大きな磁気異方性電圧効果を示す磁気トンネル接合材料を理論設計することを目標とする。平成 28 年度は、 $3d$ 遷移金属と $5d$ 遷移金属または $6p$ 卑金属からなる強磁性合金・多層膜を対象とし、真空中に接した表面において磁気異方性電圧変調が 300 fJ/Vm を超える強磁性合金・多層膜を理論設計することを目指した。また、X 線磁気円二色性（XMCD）測定で得られた実験結果を解析し、磁気異方性電圧効果に重元素の果たす役割を解明する。

2. 当該年度の担当研究開発課題の進捗状況と成果

2-1 進捗状況

1) 電圧トルク MRAM 材料の理論設計

1-1) 重元素を含む強磁性合金の探索

Fe(001) または Co(0001) 面上を $5d$ 遷移金属単原子層で被覆した薄膜を対象とし、磁気異方性の電界変調を系統的に第一原理計算して、大きな電界効果を示す材料を探索した。また、当初計画では平成 29 年度に実施する予定であった絶縁層との接合界面における磁気異方性電界変調の計算にも着手した。

2) 磁気異方性電圧効果の起源解明

FePt 薄膜における磁気異方性電圧効果について実験グループと共同研究を実施した。XMCD 測定結果を第一原理計算に基づいて解析し、磁気異方性の電圧効果に Pt $5d$ 電子が果たす役割を明らかにした。

2-2 成果

1) 電圧トルク MRAM 材料の理論設計

1-1) 重元素を含む強磁性合金の探索

Fe(001) または Co(0001) 面上を $5d$ 遷移金属単原子層で被覆した薄膜の磁気異方性エネルギー (MAE) とその電界変調を系統的に第一原理計算した。Fe 表面上の Ta, Os, Ir 単原子層、および Co 表面上の Hf, W, Ir 単原子層が 100 fJ/Vm を超える MAE の電界変調を示した (図 1)。特に Fe 表面上の Ir 単原子層では約 260 fJ/Vm と最大の電界効果が得られており、これは表面原子当たり 0.01 個の電子数変化に対して 0.30 meV の MAE 変化に相当する。計算で得られた MAE の電界効果の符号と大きさは、リジッドバンドモデルを仮定した MAE の価電子数依存性により概ね理解することができるが、例外も存在し、そこでは表面・界面に特有な電子状態の関与を示唆している。

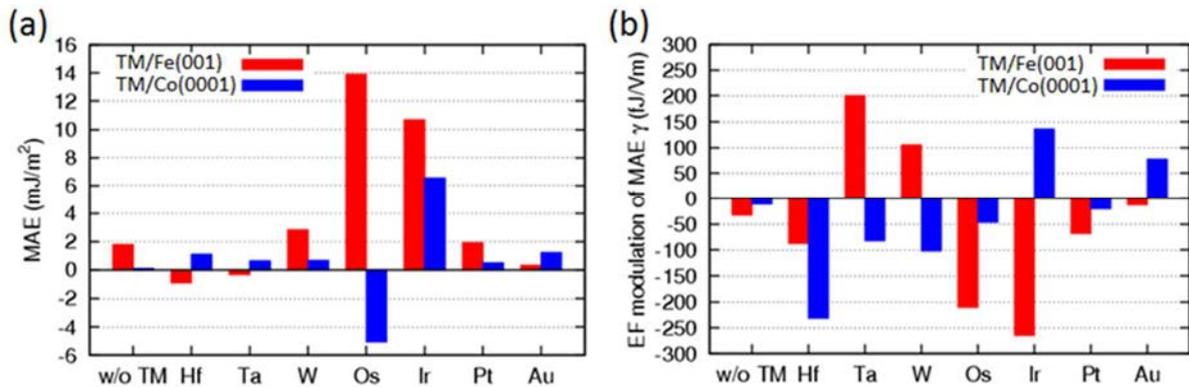


図1 Fe(001) および Co(0001) 表面上を 5d 遷移金属 (TM = Hf, Ta, W, Os, Ir, Pt, Au) 単原子層で被覆した膜における磁気異方性エネルギー(MAE) (a) とその電界変調率 (b)。

次に、Fe(001) 面上の 5d 遷移金属単原子層と MgO を接合した膜において、MgO 層が電界効果に及ぼす影響を第一原理計算に基づいて評価した。その結果、Fe/Os/MgO または Fe/Ir/MgO 膜において 100 fJ/Vm を超える電界効果が得られた。ただし、Fe/Ir/MgO 膜では Fe/Ir 膜と比べて MAE が著しく変化し、電界効果の符号も反転した。これは、Ir 原子に隣接した $0\ 2p(z)$ 軌道との混成により Ir $5d(3z^2-r^2)$ 軌道準位が変化するためである。

2) 磁気異方性電圧効果の起源解明

FePt/MgO 接合で観測された XMCD スペクトルから磁気総和則を用いて導出された Pt の軌道磁気モーメントおよび磁気双極子モーメントの電圧変調を、第一原理計算の結果と比較した。その結果、XMCD 測定と第一原理計算で得られた Pt 磁気双極子モーメントの大きな電圧変調が、この系の MAE の電圧変調に寄与していることを初めて明らかにした。スピン軌道相互作用の二次摂動に基づいた理論解析の結果、スピン保存電子遷移過程から生じる磁気異方性の電界変調は、軌道磁気モーメントの異方性の電界変調から予想される値と定量的によく一致することが確認できた。また、スピン保存項とスピン反転項の電界に対する変化の符号は逆であり、電界による変化の大部分が相殺している。5d 遷移金属を用いて巨大な磁気異方性の電界効果を得るためには、この相殺を克服する必要がある。

2-3 新たな課題など

上記の研究成果により、Fe/MgO 界面に 5d 遷移金属層を挿入することで、磁気異方性の電界変調の増強が期待できるが、現実の系では 5d 遷移金属原子の拡散が予想される。その影響についても第一原理計算に基づいて検討する必要がある。

3. アウトリーチ活動報告

該当なし