

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 9 年 度

研究開発課題名：

磁性超薄膜の界面効果

研究開発機関名：

三重大学 工学研究科

研究開発責任者

中村 浩次

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

3d、4d、5d 金属酸化物超薄膜を現デバイス構造の Fe 薄膜/MgO(001)薄膜の間に挿入した強磁性体 Fe 薄膜/金属酸化物超薄膜/MgO(001)構造に対して、結晶磁気異方性エネルギーと電圧効果を第一原理計算により計算し、結晶磁気異方性と電圧効果を評価する。また、電圧トルク MRAM への適用可能な磁性超薄膜材料の設計指針を探る。

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

3d(Fe, Co, Ni)、4d(Ru, Rh, Pd)、5d(Os, Ir, Pt)金属酸化物単原子層膜を強磁性体 Fe 薄膜と MgO(001)薄膜の間に挿入した強磁性体 Fe 薄膜/金属酸化物超薄膜/MgO(001)構造を用いて、第一原理計算により結晶磁気異方性エネルギーと電界効果を計算した。具体的に、6 原子層からなる MgO(001)薄膜、3 原子層の Fe 薄膜、3 原子層の Au 薄膜からなる薄膜に金属酸化単原子層を挿入した Au 薄膜/強磁性体 Fe 薄膜/金属酸化物単原子層/MgO(001)構造に対して、界面の磁気構造を強磁性的な配列に仮定し、零電場及び外部電場($\pm 0.5\text{V}/\text{\AA}$)下で界面の電場誘起原子変位を考慮して界面構造を決定し、結晶磁気異方性エネルギーを計算した。引き続き、上述 5d 金属酸化物層挿入は、重金属であるため、磁気抵抗比を著しく下げるなどデバイス応用上好ましくないことから、3d 金属酸化物層の膜厚をチューニングすることにより大きな電界効果が出現する可能性を検討した。ここでは、FeO、CoO、NiO の 2 原子層の場合についてさらに計算した。

2-2 成果

Au 薄膜/強磁性体 Fe 薄膜/金属酸化物単原子層/MgO(001)構造の結晶磁気異方性エネルギーと電界効果を、挿入遷移金属元素がもつスピン軌道相互作用力の大きさと整理した結果を図 1 に示す。比較のため、金属単原子層を挿入した系の結果についても示す。挿入層が金属及び金属酸化物の場合も、スピン軌道相互作用力が大きくなるにつれて結晶磁気異方性エネルギーと電界効果が大きくなる傾向にある。特に、OsO 層と IrO 層の挿入の場合、結晶磁気異方性エネルギーがそれぞれ 44.6 と 27.8 mJ/m² の巨大な結晶磁気異方性エネルギーとなり、大きな垂直磁気異方性を示した。また、電界効果も、金属層の挿入の場合と比べて、OsO 層と IrO 層ではそれぞれ -490、-496

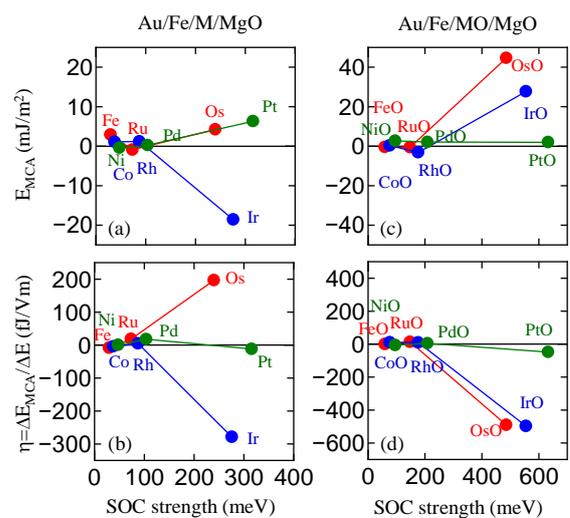


図 1. Au/Fe/M/MgO 及び Au/Fe/MO/MgO の結晶磁気異方性エネルギーとその電界効果。横軸は挿入金属元素のスピン軌道相互作用力を表す。

fJ/Vmの電界効果が得られ、2倍程度大きくなることがわかった。

3d 金属酸化物を単原子層及び2原子層挿入した場合の結晶磁気異方性エネルギーと電界効果を図2に示す。FeO及びNiOを挿入した場合、膜厚に依存せず、結晶磁気異方性エネルギーに変化は見られず、FeOの挿入では僅かに負の値となることから面内方向に磁化容易軸を持ち、NiOの挿入では正の値であることから垂直方向に磁化容易軸を持つことがわかった。しかし、CoOを挿入した場合、挿入層が単原子層の時は磁化容易方向が垂直であるのに対して、2原子層の場合には、磁気異方性エネルギーが約5 mJ/m²の負の大きな値となり、強い面内方向の磁化容易軸を示すことがわかった。電界効果においても、FeO及びNiOを挿入した場合、挿入層の膜厚依存性はほとんど見られなかったが、CoOを挿入した場合、2原子層の挿入で89 fJ/Vmとなり、単原子層挿入に比べ10倍程度の大きな電界効果が得られた。各原子層による結晶磁気異方性エネルギーに対する寄与を考察した結果、電場印加によるCoO/MgO界面のCo d軌道電子状態の変化が電界効果に大きく寄与していることがわかった。

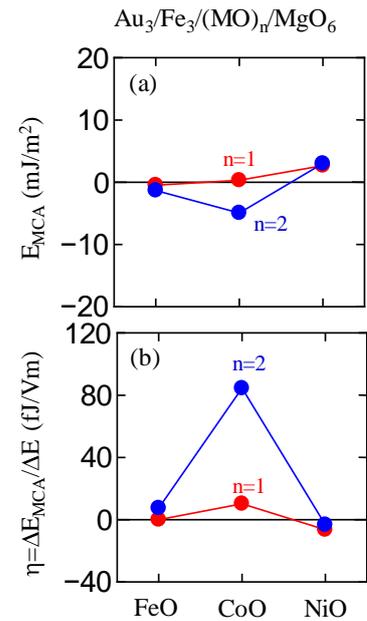


図2. Au/Fe/MgOのFe/MgO界面に単原子層及び2原子層の3d金属酸化物(FeO, CoO, NiO)を挿入した場合の結晶磁気異方性エネルギーと電界効果。

以上の計算結果から、現デバイス構造のFe薄膜/MgO(001)薄膜の界面に金属酸化物を挿入することも、結晶磁気異方性エネルギーの電界効果を大きくする一つの手段であることを示唆できた。

2-3 新たな課題など

第一原理計算を一般密度勾配近似で仮定していることから、定量的な予測に向け、強相関効果を取り入れた計算が今後望まし。

3. アウトリーチ活動報告

なし