

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：磁性超薄膜の界面効果

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：

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 金属からなる磁性超薄膜を現デバイス構造の Fe 薄膜層/MgO(001) 薄膜層の間に挿入した強磁性体 Fe 薄膜/磁性超薄膜/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評価し、結晶磁気異方性と電圧効果の物理的メカニズムを解明する。また、結晶磁気異方性と電圧効果が共に向上し且つ電圧トルク MRAM への適用可能な磁性超薄膜材料の設計指針を提示する。

## 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

基板の無いフリースタンディングな遷移金属単原子層膜における零電場及び  $1\text{ V/\AA}$  (真空層における電場) 下における結晶磁気異方性エネルギーを第一原理計算により求めた。ここでは、MgO(001) の格子定数を仮定した 3d 金属の Fe, Co, Ni、4d 金属の Ru, Rh, Pd、5d 金属の Os, Ir, Pt 単原子層膜について検討した。計算には、一般化勾配近似を仮定した全電子フルポテンシャル線形化補強平面波 (FLAPW) 法を用い、結晶磁気異方性エネルギーは第二変分法とフォース理論を用いて、薄膜の磁化が面内方向と面直方向の場合のエネルギー差から算出した。引き続き、Au<sub>3</sub> 原子層膜/Fe<sub>3</sub> 原子層膜/MgO<sub>6</sub> 原子層膜モデルに対して、Fe/MgO 界面に前述の遷移金属単原子層膜を挿入した系の結晶磁気異方性エネルギーと電界効果の計算を実施した。なお、これらの系の計算において、取り扱う原子数が比較的多く、また重金属を取り扱い、構造の対称性も悪いことから、セルフコンシステント計算と格子緩和の計算の収束が悪かったため、第一原理計算手法のプログラムの改良を行った。ここでは、電荷密度の混合過程で直接混合法とブロイデン混合法を融合させたプログラムを開発することにより安定なセルフコンシステント解が比較的容易に得られたこと、また、格子緩和には準ニュートン法である Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno 法を導入することにより格子緩和の収束回数を大幅に減らすことができた。これらの改良により、当初計画よりも早く研究を実施することができた。

### 2-2 成果

フリースタンディング遷移金属単原子層膜の結晶磁気異方性エネルギーと電界効果を遷移金属の d 軌道に働くスピン軌道相互作用力で整理した。図 1 に計算結果を示す。電界効果は  $1\text{ V/\AA}$  と零電場における結晶磁気異方性エネルギーの差から見積もった。Fe 属 (Fe, Ru, Os)、Co 属 (Co, Rh, Ir)、Ni 属 (Ni, Pd, Pt) 系列で整理できる傾向にあった。遷移金属のスピン軌道相互作用力に対して結晶磁気異方性エネルギーは 2 次関数的な、電界効果は線形的な関係を示した。この計算結果から、スピン軌道相互作用力の大きい重い金属元素の超薄膜を Fe/MgO 界面に挿入することが一つの設計指針であることが示唆される。しかし、重い金属元素はフェルミ準位のスピン分極率が一般に小さくなり TMR 比が顕著に減少するであろうことが予測される。

Au/Fe/金属単原子層/MgO モデルに対して、金属層単原子層としてFe属 (Ru, Rh)、Co属 (Co, Rh, Ir)、Ni属 (Ni, Pd, Pt)系を挿入した場合の、結晶磁気異方性エネルギーと電界効果の計算結果を図1に示す。フリースタンディング単原子層と同様に、d 電子の電子数と挿入金属のスピ軌道相互作用力の大きさで系統的に整理できる傾向を確認した。また、フリースタンディング単原子層の場合に比べ、電界効果が2倍以上大きくなる傾向にあった。これは、フリースタンディング単原子層で見られる遮蔽効果に加え、金属単原子層/MgO 界面の原子間距離が電場により強く依存するためである。本計算では、特に、後者の界面の原子間距離変化による効果が大きいことがわかった。

以上のことから、強いスピ軌道相互作用を持つ重金属超薄層を挿入することにより結晶磁気異方性エネルギー及び電界効果を得ることができると示唆される。また、MgO の比誘電率を考慮することにより、それぞれが  $2\text{mJ/m}^2$  と  $10^3\text{fJ/Vm}$  以上の目標値以上の値になることが期待される。

### 2-3 新たな課題など

次年度計画ではさらに複雑な構造を対象とすることから大容量計算が不可欠となり、第一原理計算のプログラムの改良を早急に実施する必要がある。

## 3. アウトリーチ活動報告

なし

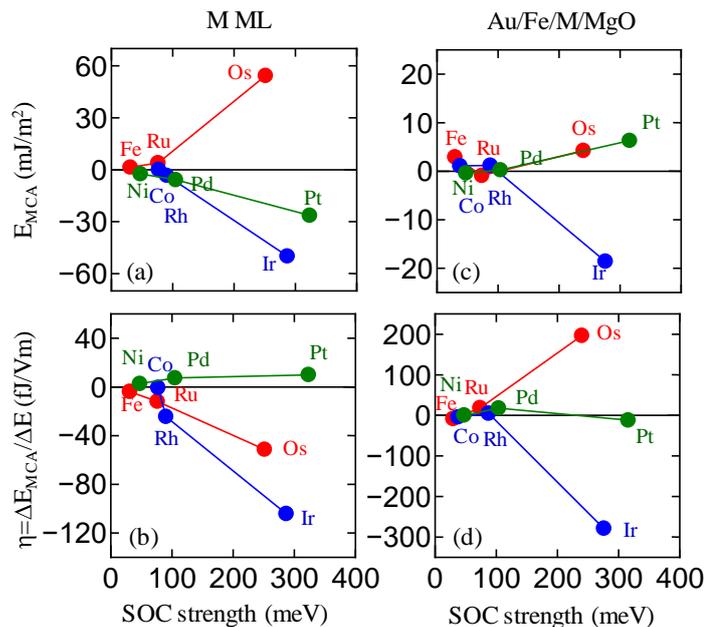


図1. フリースタンディング単原子層 M (左図) 及び Au/1 Fe/M/MgO (右図) の結晶磁気異方性エネルギーとその電界効果。横軸は挿入金属のスピ軌道相互作用力を表す。