

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 :

磁気異方性の界面効果物理

研究開発機関名 :

金 沢 大 学

研究開発責任者

小 田 竜 樹

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

電界効果100 f J/Vm級 (MgOFeMgO) および400 f J/Vm級 (CrFeMgO) の薄膜について、密度汎関数理論に基づく第一原理計算結果より導出した電子状態に基づき、電界効果の物理的メカニズムを解明し、垂直磁気異方性および電圧効果に関して高性能値を示す薄膜の条件を理論的に明らかにする。特に界面共鳴状態を制御することにより高性能値を目指す。高スピン軌道相互作用や反強磁性による近接効果を導入した薄膜において、高い磁気異方性を維持しつつ1000 f J/Vm級の電圧効果を発現する薄膜材料の設計指針を研究開発する。

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

電界効果400 f J/Vm級について密度汎関数理論 (DFT) に基づく第一原理計算結果を実施し、磁気異方性エネルギー (MAE) および電界効果 (EFE) における強磁性膜厚依存性、格子定数依存性を中心に調査を進めた。電界効果100 f J/Vm級については、電界効果の物理メカニズムに関して400 f J/Vm級の研究と重複する部分があることが分かったため、調査を深化させていない。高スピン軌道相互作用の近接効果については、いくつかの典型的積層膜において調査を実施した。反強磁性による近接効果については、第一原理計算の準備のみに留まった。

メカニズム解明	○
100fJ/Vm級	△
400fJ/Vm級	○
高スピン軌道	△
反強磁性	×

2-2 成果

強磁性金属と酸化物絶縁体の界面電子状態に基づいたMAEとEFEに関するメカニズムの概容を解明することができた。特に400 f J/Vm級のMAEについては、定量的解析を試みることにより、実験結果との定量的対応を得ることに成功した。このことにより、MAEについての設計指針をより高精度に構築することが可能となった。EFEについては、ある強磁性膜厚 (t_c) を境に、MAEとEFEについて膜厚依存性の挙動に質的変化が現れることに着目して、低膜厚系と高膜厚系に大別することができると分かった。膜厚 t_c の高膜厚側と低膜厚側の界面共鳴状態 (IRS) を詳細に調査した。その結果 (図1参照)、フェルミ準位 (E_F) 付近では、高膜厚側についてIRSの部分状態密度 (PDOS) のピークが E_F から離れ、低膜厚側についてはピークが E_F に近づくとともにピークが先鋭化していることが得られた。この先鋭化により電界効果の増大が期待されることが得られた。次に金属層で磁性層と下地層の合金化効果を調べたところ (図2参照)、IRS-PDOSの先鋭化が増強される場合があることが分かった。EFEを高性能化する指針として、合金化を適切に制御することが挙げられることが分かった。

金属/酸化物界面のIRSは、不純物や過度の酸化等の欠陥に対して敏感であり、これらはIRSを非局在化させ電子状態の異方性を低下させるため、MAEやEFEの高性能化は期待できないことが予測された。

表1 進捗状況

○良好、△遅延、×大幅遅延

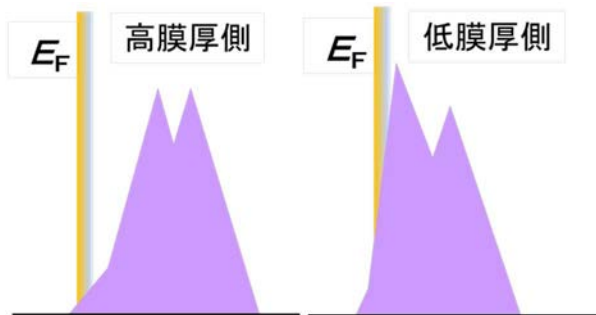


図1 ある膜厚の高膜厚側と低膜厚側での界面共鳴状態密度。 E_F はフェルミ準位を示す。

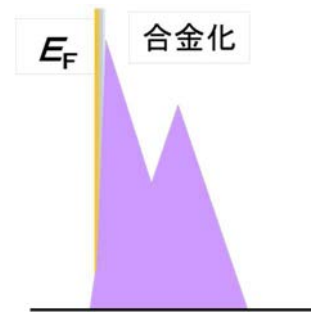


図2 合金化による界面共鳴状態密度の先鋭化

2-3 新たな課題など

上で述べた高膜厚側では、E F Eについて実験で期待される第一原理計算結果を得ているものの、低膜厚側ではその界面電子状態からE F Eの増大が期待されるが、計算結果として増大したE F Eが得られていない。電子数依存性を詳細に探索することにより高E F Eを実証し、高性能化に対する設計指針の高信頼化を図る。

合金化が高E F Eの鍵となっているが、これは研究開発上考慮する界面の構造モデル数の増大とそれに伴う計算量の増大を意味する。そこでより簡便な計算見積もり方法を採用することで研究開発指針の構築を進める。

3. アウトリーチ活動報告

研究開発を行った成果を普及させるアウトリーチ活動については該当なし。産学連携を推進するため計算科学的研究開発手法を含む ImPACT プロジェクトの取り組みを紹介した。研究開発の促進を図るため計算科学に関する国際的研究会を後援した。