

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 (MgO/Fe/MgO) および400 f J/Vm級 (CrFe/MgO) 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とともに、400 f J/Vm級での薄膜材料に関連して材料設計指針の構築を行う。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。特に磁性層膜厚が小さいときを重点的に調べた。電界効果100 f J/Vm級については、研究開発に向けて第一計算を継続実施し、大きなMAEを得たが、電界効果400 f J/Vm級と重なる部分以外にEFEを高める要因を見つけることはできなかった。高スピン軌道相互作用の近接効果については、昨年度から継続して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がEFEを大きく高める要因になる結果は見当たらなかった。

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

進捗状況(H30年3月)  
◎or○良好、△遅延、×大幅遅延

### 2-2 成果

MAEとEFEに関するメカニズム解明に関して、酸化物絶縁体層の誘電率について結晶の誘電率よりも大きく増強する可能性があることが判明し、EFEを増大させる足がかりと成り得ると分かった。

400 f J/Vm級のMAEとEFEについては、膜厚が小さいときに厚いときに比べてその特徴が異なっていると同時に大きなEFEを発現する可能性が明らかになった。そのときの状態密度は図1 (左図) に示す。このとき電子枯渇条件の電界でMAEが減少して、大きなEFEを実現する可能性がある。膜厚が大きい場合 (右図)

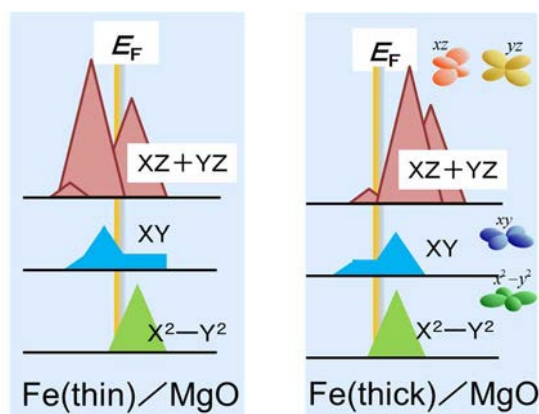


図1 膜厚が小さい場合 (左図) と大きい場合 (右図) の界面共鳴状態。EFはフェルミ準位を示す。

に比較して大きく界面共鳴状態が変化しており、その変化を反映してE F Eが逆符号となることが計算結果から示された。

スピン軌道近接効果の探索をPtおよびIrに対して実施し、大きなMAEを与える場合があることが明らかになった。反強磁性による近接効果（交換バイアス効果）の探索をMnIrに対して実施したが、MAEとE F Eを制御することができることが分かった。

界面をもつ薄膜系において形状磁気異方性エネルギーをより精度良く評価する計算手法を開発することに成功した。

### 2-3 新たな課題など

400 f J/Vm級について高膜厚において、小さい面内格子定数に対する依存性を中心に探索を進め、電子枯渇条件におけるE F Eに対して大きな負値が得られている。大きなE F Eのための設計指針としてさらに具体化することを図る。

MAEとE F Eについて温度変化を考察することが重要である。計算結果からフェルミ準位付近の界面共鳴状態が温度変化に対して敏感である可能性が高いことが想定される。このこととE F Eとの関係を明らかにすることが設計指針の構築に役立つはずである。

反強磁性層の近接効果は強磁性層との界面で交換バイアス効果が存在するが反強磁性層を工夫して面直MAEを制御する可能性が期待される。研究開発過程で新しく見出された形状磁気異方性エネルギー計算手法を用いることで高精度にMAEを評価可能となる。

新しい形状磁気異方性エネルギーの計算手法では、強磁性層と酸化物絶縁体層の界面では、従来の寄与である強磁性層の大きな面内MAEを減少させる界面効果が生じる可能性が明らかとなった。このような寄与はこれまで考慮されていないため、MAEを精度よく評価するためにさらなる調査を行うことが可能となった。また従来の起源が明確ではない磁気消失層を仮定して説明される薄膜磁性材料の特性において、磁化と磁気異方性との関係がより明確になる可能性がある。このことがより高精度な磁気異方性設計の構築に役立つ可能性が分かった。

## 3. アウトリーチ活動報告

国際的大学間交流の振興活動を通じてImPACTプロジェクトの取り組みを紹介するとともに、研究開発活動の成果に関連した計算科学的研究開発手法を含む事項を紹介した。