

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：

磁気摩擦係数の界面効果物理

研究開発機関名：

京都工芸繊維大学

研究開発責任者

三浦 良雄

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

1. 界面磁気摩擦の電界効果の材料依存性の解明と大きな電界効果を得るための接合系の理論提案

強磁性体材料として 3d 遷移金属 (Fe, Co, Ni およびその合金) 及び、これら強磁性体と絶縁体の界面に大きなスピン軌道相互作用を有する W を数原子層挿入した多層膜を取り上げる。そして、強磁性体材料によって界面ダンピング定数や界面磁気異方性の電界効果の変化を明らかにする。

2. Mn 系磁気トンネル接合のトンネル磁気抵抗効果と界面磁気異方性の理論解析

B2-CoGa/L10-MnGa/MgO 界面の磁気トンネル接合では、MgO 界面に Mn 層を挿入することで TMR 比と PMA が大きくなることが実験的に報告されているが、挿入した Mn 層の磁気構造やその TMR 及び PMA への寄与はよくわかっていない。第一原理計算によって、計算科学の立場から、界面層の TMR および PMA への寄与及びその電圧効果を明らかにする。

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. 界面磁気摩擦の電界効果の材料依存性の解明と大きな電界効果を得るための接合系の提案

・ MgO/Fe 界面および MgAl₂O₄/MgO 界面に W を 3 層以上挿入して面内に圧縮歪を加えることにより大きな界面垂直磁気異方性および電圧依存性が得られることを提案した。

2. Mn 系磁気トンネル接合のトンネル磁気抵抗効果と界面磁気異方性の理論解析

・ MnGa/MgO 界面に形成された Mn 層 (3ML) の垂直磁気異方性と磁気抵抗効果への寄与を明らかにした。特に磁気抵抗効果については増大させる効果があることを見出した。

2-2 成果

1. 界面磁気摩擦の電界効果の材料依存性の解明と大きな電界効果を得るための接合系の提案

Fe/MgO 界面の結晶磁気異方性や磁気ダンピング定数の電圧依存性を大きくするには界面にスピン軌道相互作用の大きい 5d 遷移金属の 1 つである W を挿入することが考えられる。このアイデアは、W/Fe(001) 多層膜の結晶磁気異方性の W 膜厚依存性の実験・理論に基づいている。この実験では多層膜の W の膜厚を変化 (減少) させて W に Fe 層からの圧縮歪を面内方向に加えることにより、W の膜厚が厚い時に面内磁気異方性を示した膜が、W の膜厚の減少とともに大きな垂直磁気異方性を示すことが報告されている。また、理論計算においても W が歪むことにより W の大きなスピン軌道相互作用と Fe からの誘起磁気モーメントにより W が結合して垂直磁気異方性をもたらしることがわかっている。

本研究では Fe/W/MgO(001) 界面において面内格子定数を bcc-Fe に合わせることで面内方向に圧縮歪を与えた状態で結晶磁気異方性・磁気ダンピングとその電圧依存性を

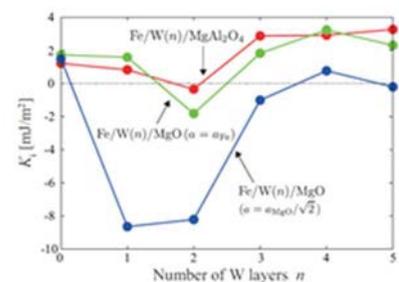


図 1: Fe/MgO, Fe/MAO 界面に W を挿入した場合の結晶磁気異方性

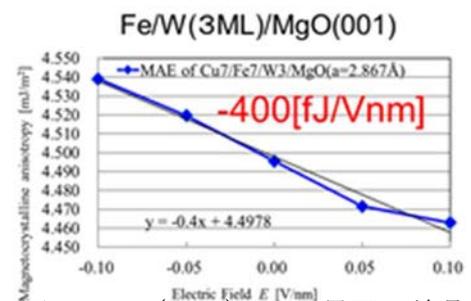


図 2: Fe/W(3ML)/MgO 界面の結晶磁気異方性の電界依存性

明らかにした。図 1 に示すように Fe/MAO 界面及び Fe/MgO 界面に W を 3 層-5 層挿入すると、W の大きなスピン軌道相互作用によって垂直結晶磁気異方性およびその電圧変調効果の増大が得られる。ただし、Fe/MgO 界面に W を挿入して垂直磁気異方性が増大するのは、面内格子定数が Fe に一致している場合のみである。よって、W 挿入においては Fe との格子の整合性のよい MAO 障壁の方が MgO 障壁よりも有利であるといえる。今回、W を 3 層挿入した場合の結晶磁気異方性の 2 次摂動解析より、挿入した W の 3 層すべてが垂直磁気異方性に寄与していることがわかっている。

また、磁気異方性の電圧効果についても解析し、図 2 のように W を Fe/MgO 界面に挿入することで 3 倍~5 倍程度の電圧効果が得られることを示した。磁気ダンピングについても W 挿入効果の解析を行ったが、結果は W の挿入層数や面内格子定数により敏感に変化し系統的な結果は得られなかった。

2. Mn 系磁気トンネル接合のトンネル磁気抵抗効果と界面磁気異方性の理論解析

近年、L10 型 MnGa の薄膜の作製が行われ、B2 構造の CoGa 薄膜の上に作製された、L10 型 MnGa に対して、 $6.2-11.3 \text{ Merg/cm}^3$ の垂直磁気異方性と 300K (5K) で 18% (38.4%) の Mn 系合金では比較的大きなトンネル磁気抵抗 (TMR) 比が得られている。そこで本研究では、L10-MnGa の垂直磁気異方性の起源と MgO 界面における磁気異方性および TMR 特性を第一原理計算により調べた。実験では MnGa/MgO 界面に 3 層程度の Mn が確認されているので計算では MnGa/Mn(3)/MgO 構造を用いた。図 3 に Mn を挿入していない MnGa/MgO 界面と Mn3ML を挿入した MnGa/Mn/MgO の構造と磁気モーメントおよび結晶磁気異方性を示す。磁気構造は MgO との界面にある Mn のスピンモーメントが反転する磁気構造が最も安定になった(図 3 の真ん中)。MgO 界面から 3 つ Mn 原子のスピンモーメントはそれぞれ $-1.03 \mu_B$, $+1.80 \mu_B$, $+2.91 \mu_B$ である。またこの構造での結晶磁気異方性は 2.16 meV/cell となり MnGa (5.5ML) / MgO (Ga 終端) 界面との結晶磁気異方性と比較すると増加している。構造は界面第 1 層の Mn と第 2 層の Mn 間の界面垂直方向の距離が 1.16 \AA と非常に近くなっているのが特徴である。これは bct の反強磁性 Mn が界面で局所的に形成されていることに相当する。また準安定構造として MgO 界面から 3 つの Mn スピンモーメントが $-2.82 \mu_B$, $+3.03 \mu_B$, $-2.56 \mu_B$ となる磁気構造も得られた(図 3 右)。この磁気構造も出現する可能性は十分にある。結晶磁気異方性は、 2.81 meV/cell で最安定構造よりも高く、Ku に直すと $2.2 \times 10^7 \text{ erg/cm}^3$ となる。MnGa/MgO(001) の Mn 終端構造(図 3 左)の Ku が $1.94 \times 10^7 \text{ erg/cm}^3$ であるため、準安定構造の磁気構造では Ku は増加している。実験では界面に Mn を過剰に添加した構造において Ku の増加がみられているので、実際には準安定構造の磁気配置が実現している可能性がある。

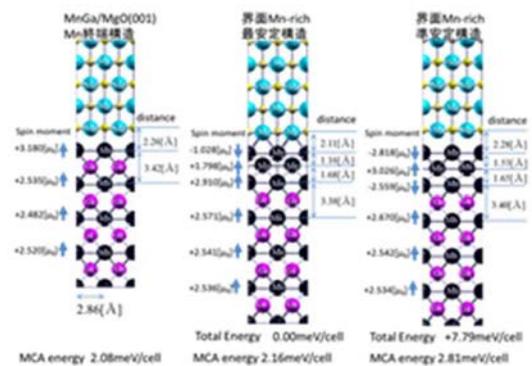


図 3: MnGa/Mn(3ML)/MgO 界面の構造と磁気構造

図 3 に Mn を挿入していない MnGa/MgO 界面と Mn3ML を挿入した MnGa/Mn/MgO の構造と磁気モーメントおよび結晶磁気異方性を示す。磁気構造は MgO との界面にある Mn のスピンモーメントが反転する磁気構造が最も安定になった(図 3 の真ん中)。MgO 界面から 3 つ Mn 原子のスピンモーメントはそれぞれ $-1.03 \mu_B$, $+1.80 \mu_B$, $+2.91 \mu_B$ である。またこの構造での結晶磁気異方性は 2.16 meV/cell となり MnGa (5.5ML) / MgO (Ga 終端) 界面との結晶磁気異方性と比較すると増加している。構造は界面第 1 層の Mn と第 2 層の Mn 間の界面垂直方向の距離が 1.16 \AA と非常に近くなっているのが特徴である。これは bct の反強磁性 Mn が界面で局所的に形成されていることに相当する。また準安定構造として MgO 界面から 3 つの Mn スピンモーメントが $-2.82 \mu_B$, $+3.03 \mu_B$, $-2.56 \mu_B$ となる磁気構造も得られた(図 3 右)。この磁気構造も出現する可能性は十分にある。結晶磁気異方性は、 2.81 meV/cell で最安定構造よりも高く、Ku に直すと $2.2 \times 10^7 \text{ erg/cm}^3$ となる。MnGa/MgO(001) の Mn 終端構造(図 3 左)の Ku が $1.94 \times 10^7 \text{ erg/cm}^3$ であるため、準安定構造の磁気構造では Ku は増加している。実験では界面に Mn を過剰に添加した構造において Ku の増加がみられているので、実際には準安定構造の磁気配置が実現している可能性がある。

次に、これらの系で TMR 比を計算すると Mn を挿入しない系では Mn 終端面(上図の左端)で 10000%以上、Ga 終端界面では 400%の TMR が得られた。形成エネルギーを見積もると Mn 終端と Ga 終端では Ga 終端の方が安定であるため、実際には TMR は絶対零度で 400%程度と予測される。その構造に Mn3ML を挿入した場合 TMR 比は、2 つの界面磁気構造に対して約 4000%であり、増加してい

る。この原因の1つの可能性として、界面に磁性原子が来ることにより界面スピン偏極率が増加しTMR比が増大したと考えられる。

2-3 新たな課題など

Fe/MgO 界面およびFe/MgAl₂O₄ 界面へのWの3ML以上の挿入が大きな垂直磁気異方性とその電圧効果を得るために有効であることを示したが、1-2MLとWの膜厚が薄い場合はその効果が十分でない。一方、界面にWを挿入すると磁気抵抗比は下がることが理論的に予測されているため界面構造の工夫が必要である。

3. アウトリーチ活動報告

該当なし