

水上 成美

東北大学材料科学高等研究所
教授

計算科学を用いた磁気抵抗スイッチ素子基盤材料の創出

§ 1. 研究実施体制

(1) 「材料」グループ

- ① 研究代表者: 水上 成美 (東北大学材料科学高等研究所 教授)
- ② 研究項目
 - ・新ハーフメタル材料素子の研究
 - ・低温プロセスに向けた新絶縁体バリア材料の研究
 - ・素子温度特性データ取得

(2) 「評価」グループ

- ① 主たる共同研究者: 廣畑 貴文 (英国ヨーク大学電子工学科 教授)
- ② 研究項目
 - ・素子材料の結晶化プロセスと界面欠陥の研究
 - ・素子界面構造・物性データ取得

(3) 「計算」グループ

- ① 主たる共同研究者: 白井 正文 (東北大学電気通信研究所 教授)
- ② 研究項目
 - ・素子ヘテロ接合の物性データベース構築

§ 2. 研究実施の概要

本年度は、研究課題のうち、素子基盤材料の研究開発ならびに、素子データベースの構築と解析について、材料、評価、計算グループが各々を進めた。

まず、材料グループでは大きなトンネル磁気抵抗効果を発現する素子の基盤となる材料の開発を目指し、新しいハーフメタル材料素子の研究ならびに実用的な低温プロセスに向けた新絶縁体バリア材料の研究を進めた。新しいハーフメタル材料の候補として、 $X'XYZ$ 等原子組成 4 元合金を用いた素子の作製条件を検討し、 MgO バリア層の上下に(001)配向した単結晶薄膜電極を成長する条件を見出すとともに、トンネル磁気抵抗効果を観測した(下図)。他方、新絶縁体バリア材料の低温作製プロセス開発の一環として、新しいスパッタ製膜プロセスの立ち上げを行った。新プロセスによって従来の $CoFeB$ 磁性体と MgO バリアを用いた素子の作製と評価を進めトンネル磁気抵抗効果を観測することに成功した。次に、評価グループでは、材料中の様々な欠陥ならびに素子プロセスに起因する欠陥が素子の特性を劣化させることから、それらの欠陥を調べ材料グループにフィードバックすることを目指し、その予備的な実験を進めた。最後に、計算グループでは、磁気トンネル接合素子に適した物性を有する強磁性合金を探索するために、 $X'XYZ$ 等原子組成 4 元合金の電子状態を第一原理計算し、約 3700 種類の合金について物性値をデータベースに収録した。得られたデータベースから素子電極材料として適した特性を示す合金を選択し、絶縁体とのヘテロ界面における磁気特性の第一原理計算を実行し、その結果のデータベースへの収録を開始した。また、強磁性合金の絞り込みを加速するために、合金の仮想スクリーニングのための機械学習モデルを構築した。形成エネルギーおよびキュリー温度の予測モデルが完成し、仮想スクリーニングを用いた効率的な合金探索の準備が整った。

これらの研究成果をベースに、次年度は目標達成に向けた計画を本格的に推進する。

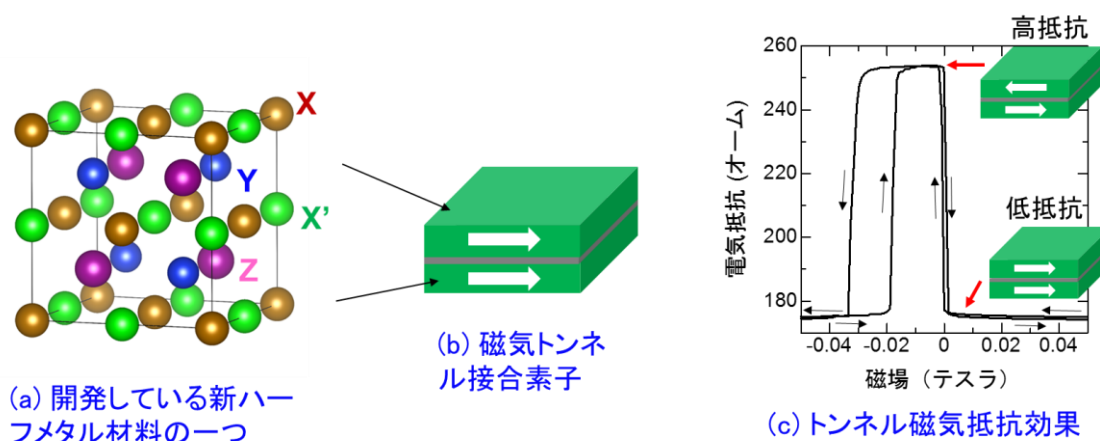


図 開発しているハーフメタル材料の一つである $X'XYZ$ 等原子組成 4 元合金 (a)、ならびに素子 (b)の模式図。H29 年度に得た素子特性(トンネル磁気抵抗効果)の一例。