

実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新
2017年度採択研究代表者

2018年度
実績報告書

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. 研究成果の概要

ナノメートルスケールの厚みを有する磁性体／絶縁体／磁性体構造、いわゆる磁気トンネル接合素子の各層の材料ならびに界面を実験ならびに計算・データ科学の手法で研究する。実用に資する新材料やプロセスを開発し素子特性を飛躍的に向上させることで、新しい産業への展開に寄与する。本年度は、三つのグループが連携することで、素子の基盤となる磁性体材料や絶縁体材料の広範囲な探索を本格的に開始すると同時に、素子データベースの構築と解析を進めた。

材料グループでは、ダメージレスの絶縁体層形成を狙った設備を導入しその製膜プロセスを立ち上げた。従来材料であるアモルファス磁性体とマグネシアを用いた素子において 300%を超えるトンネル磁気抵抗比を観測し新プロセスの端緒を付けた(図 1)。また新絶縁体材料の広範囲探索の一端として、アモルファス絶縁体ならびに(111)結晶面配向の絶縁体を有する素子の研究を進めた。他方、様々な元素を含む磁性体をスループットよく探索するため、計画の多元製膜装置の導入と立ち上げを行った。これにより、(100)結晶面配向のホイスラー合金薄膜の物性と素子の特性について研究するとともに[1,2]、(111)結晶面配向の新磁性体の研究を進めた。評価グループでは、これら材料グループで作製された素子の電子顕微鏡によるナノ構造観察を様々に行い、ナノ構造と素子特性の関係について知見を得た。また、(110)結晶面配向のホイスラー合金において低温結晶化を研究した[3]。これらの研究の過程で、200%を超えるトンネル磁気抵抗比を示す新材料素子を見出した(図 1)。

並行して計算グループでは、前年度から継続し、 $X'XYZ$ 等原子 4 元ホイスラー合金(X' 、 X 、 Y は遷移元素、 Z はIII、IV、V族元素)のうち、四千種を超える組成のバルク物性を第一原理計算によってデータベース化した。前年度に構築したランダムフォレストに基づく予測モデルを用いて、約十万種の合金組成から、形成エネルギーが負でかつ高い磁気転移温度をもつこれまで未知の磁性体合金を探索した。約五百種の合金組成を候補材料として予測することができた。そのうち、約四百種の合金組成を第一原理計算で検証し、目的とする素子に要求されるバルク物性を示す合金組成を複数個見出した。これらの候補となる磁性体について、材料ならびに評価グループが薄膜作製と評価を進めた。また、計算グループでは、候補となる様々な $X'XYZ$ 合金とマグネシアからなる接合素子の界面物性を第一原理から計算することで、約三百種のヘテロ接合についてデータベース化し、狙いとする接合素子の機械学習ならびに予測の端緒を開いた。

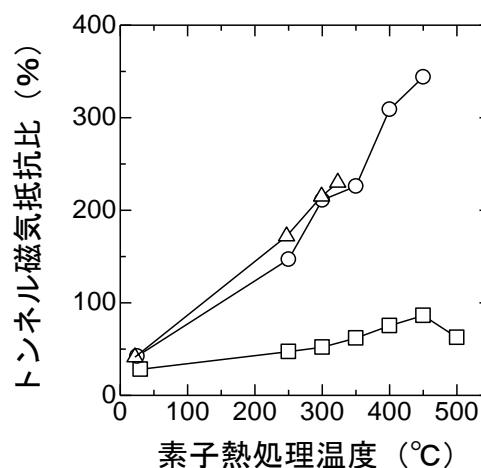


図 1 研究開発した材料素子の特性と素子熱処理温度のデータの例。ダメージレスプロセスで作製したマグネシアとアモルファス鉄コバルト合金を用いた従来材料素子(○)、新材料素子(△)、コバルトと鉄を基本とする等原子ホイスラー合金を用いた素子(□)。

【代表的な原著論文】

1. L. Bainsla, R. Yilgin, M. Tsujikawa, K. Z. Suzuki, M. Shirai, and S. Mizukami, “Low magnetic damping for equiatomic CoFeMnSi Heusler alloy”, *J. Phys. D Appl. Phys.* 51, 495001 (2018).
2. T. Tsuchiya, T. Roy, K. Elphick, J. Okabayashi, L. Bainsla, T. Ichinose, K. Suzuki, M. Tsujikawa, M. Shirai, A. Hirohata, and S. Mizukami, “Epitaxial magnetic tunnel junctions with an equiatomic CoFeCrAl Heusler alloy”, arXiv:1905.04070 (2019).
3. W. Frost, M. Samiepour and A. Hirohata, “Low-temperature deposition of Heusler alloys with perpendicular magnetic anisotropy”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 484, 100 (2019).

§ 2. 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

(2)「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
 - ・ ベイズ最適化による高効率素子探索