

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

2019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、既存産業や新産業創出に貢献する。本年度は、三つのグループが有機的に連携し、実験主導ならびに計算主導の両面から材料開発を推進した。材料グループと評価グループから成る実験グループは、前年度に見出した準安定 bcc 相を示す新磁性体である CoMn 合金の素子研究を今年度も実験主導で進めた[1]。

また、さらに新しい材料と MgO バリアからなる素子で 300%を超える室温トンネル磁気抵抗比を観測した[図 1(a)]。他方、実験グループはアモルファス BN バリア[2]や他のコランダム、ウルツ鉱型、岩塩型等、様々な絶縁体バリアの研究を進め基本的なデータを収集した。計算グループは機械学習に基づいた効率的な素子開発を目指し、 $XX'YZ$  四元等原子ホイスラー合金と MgO バリア界面の物性値を第一原理計算しデータベースに収録した。界面磁気物性値の予測モデルを構築することにも成功した。また機械学習の予測精度向上のために、三次元畳み込みニューラルネットワークの開発を進めた。材料グループと評価グループは、素子を機械学習予測するための特徴量となりうる界面物性値の研究を並行して進め、その知見を得た。また、それら実験値と第一原理計算の比較を進め今後の機械学習に

よる素子開発の指針を得た。素子機械学習の基盤構築の過程で、計算グループはこれまで知られていない新しい組成の  $XX'YZ$  四元等原子ホイスラー合金を機械学習によっていくつか発掘した。その一つである IrCoMnAl [3]について、材料グループはその薄膜の作製を進め、単相試料が得られることを実証した。これら実験ならびに計算主導の研究成果をもとに、次年度はより高い目標に向かって研究を推進する。

### 【代表的な原著論文】

1. K. Kunimatsu, T. Tsuchiya, K. Elphick, T. Ichinose, K.Z. Suzuki, A. Hirohata, and S. Mizukami, "Fabrication of magnetic tunnel junctions with a metastable bcc  $Co_3Mn$  disordered

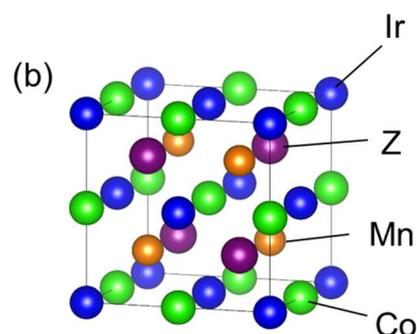
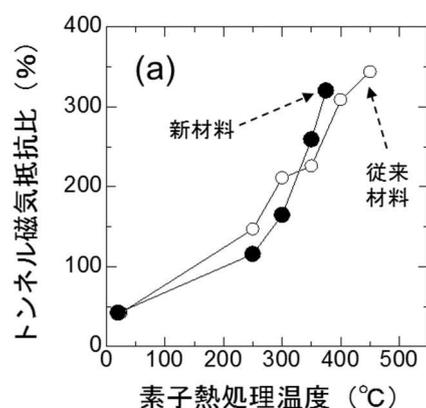


図 1 (a) 開発した素子の特性の熱処理温度依存性の一例。ダメージレスプロセスで作製したマグネシアとアモルファス鉄コバルト合金を用いた従来材料素子(昨年度報告)(○)、今年度開発した新材料素子(●)。(b) 機械学習によって発掘された四元素の等原子ホイスラー合金。ZにはAl等が入る。実験でその単相薄膜が形成できることを示した。

- alloy as a bottom electrode”, Jpn. J. Appl. Phys. **58**, 080908(R) (2019).
2. T. Ichinose, K. Elphick, A. Hirohata, and S. Mizukami, “Tunnel Magnetoresistance in the Magnetic Tunnel Junctions with an Amorphous Boron Nitride Barrier Formed via Nitrogen Diffusion”, ACS Appl. Electron. Mater. **1**, 2220 (2019).
  3. T. Roy, M. Tsujikawa, T. Kanemura, and M. Shirai, “*Ab-initio* study of electronic and magnetic properties of CoIrMnZ (Z = Al, Si, Ga, Ge) Heusler alloys”, J. Mag. Mag. Mater., **498**, 166092 (2020).

## § 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

### (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
  - ・ ベイズ最適化による高効率素子探索