

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

2020 年度 年次報告書

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

磁性体/絶縁体/磁性体からなる磁気トンネル接合素子の材料ならびに界面を、実験および計算・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、素子の示すトンネル磁気抵抗(TMR)効果を飛躍的に向上させ、産業に貢献する。本年度も三つのグループが有機的に連携し、実験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、計算グループの支援を受け、人が材料探索する手法にベイズ推定等のデータ科学的最適化手法を援用することで研究を進めた。新 Co 系準安定相磁性体/MgO バリア素子を研究開発し、全層スパッタ法による製膜により、350-400°C 程度の低い熱処理温度にて室温 350%以上(低温 1000%超)の巨大 TMR 比を達成した。また、計算グループの第一原理計算によって予測された新しい絶縁体トンネルバリアを有する素子の作製に成功し、TMR 比の観測まで研究を進めた。

計算グループは、四元等原子ホイスラー合金/MgO バリア素子の界面データベースの構築を進め、データ駆動型材料探索(機械学習)を行うための機械学習モデルの開発に取り組んだ。開発した予測モデルを素子界面の探索に適用、一定の精度まで到達し、TMR 比の温度依存性を低減できる新しいホイスラー合金の候補をいくつか見出した。実験グループは、計算グループの機械学習・第一原理計算の予測する新しいホイスラー合金の実験実証を進め、その素子作製・評価まで研究を進めた。

材料グループは、本課題で研究開発された新磁性材料を独自のマンガン系垂直磁化材料と組み合わせ用い、メモリに応用される垂直磁化磁気トンネル接合/MgO バリア素子を試作した。マンガン系垂直磁化磁気トンネル接合では過去最高となる 100%程度の TMR 比を得ることに成功した。

§ 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
 - ・ 新材料を用いた素子の高度化ならびに絞り込み

(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
- ・ 欠陥の少ない界面・結晶の低温プロセス開発

(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
 - ・ 高効率素子探索用ニューラルマシン開発

【代表的な原著論文情報】

- [1] “Magnetic tunnel junctions with metastable bcc Co_3Mn electrodes”, K. Kunitatsu, T. Tsuchiya, T. Roy, K. Elphick, T. Ichinose, M. Tsujikawa, A. Hirohata, M. Shirai, and S. Mizukami, *Appl. Phys. Express* 13, 083007 (2020).
- [2] “Structural and magnetic properties of CoIrMnAl equiatomic quaternary Heusler alloy epitaxial films designed using first-principles calculations”, R. Monma, T. Roy, K. Suzuki, T. Tsuchiya, M. Tsujikawa, S. Mizukami, and M. Shirai, *J. Alloys Compd.* 868, 159175 (2021).
- [3] “Experimental inspection of a computationally-designed NiCrMnSi Heusler alloy with high Curie temperature”, Y. Onodera, K. Elphick, T. Kanemura, T. Roy, T. Tsuchiya, M. Tsujikawa, K. Yoshida, Y. Nagai, S. Mizukami, A. Hirohata, and M. Shirai, *Jpn. J. Appl. Phys.* 59, 073003 (2020).
- [4] “Ab initio study of electronic and magnetic properties of $\text{Mn}_2\text{RuZ}/\text{MgO}$ (001) heterojunctions ($Z = \text{Al}, \text{Ge}$)”, Tufan Roy, Masahito Tsujikawa and Masafumi Shirai, *Journal of Physics: Condensed Matter.* 33, 145505 (2020).