

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

2021 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

磁性体と絶縁体バリアからなる磁気トンネル接合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、素子の示すトンネル磁気抵抗(TMR)効果を飛躍的に向上させることで、産業に貢献する。本年度も三つのグループ(以下G)が緊密に連携し、実験・計算の両面から材料開発を推進した。

材料Gと評価Gから成る実験Gは、計算G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てきた。これまで開発した新Co系準安定相磁性体/MgOバリア素子は低温約1000%、室温約350%のTMRを示す。今年度はその温度依存性を改善するための研究を進め、界面の原子構造や化学状態を明らかにし、室温で巨大TMRを得るための指針を得た。また、新磁性材料の微視的な磁性について明らかにするとともに[1]、当該材料の特異な弾性的性質と素子特性の関連性を追究し[2]、FeCo(B)等の従来磁性材料に対する優位性や相違を報告した。並行して、実験Gは新材料バリアを有する素子の研究を進め、30%以上の室温TMRを観測することに成功した。

他方、計算Gはデータ駆動型材料探索を行うため、ホイスラー合金バルクデータベース(約6千種類)ならびにホイスラー合金/MgOバリア素子界面データベース(約千種類)の構築を達成し、界面機械学習モデルの開発を進めた。その過程で、 Co_2MnSi といった従来ホイスラー合金の示すTMRの強い温度依存性を克服できる新ホイスラー合金を見出すことに成功した。並行して、実験Gは、計算Gの予測するいくつかの新ホイスラー合金やその素子([3]等)の実験実証を進めた。

材料Gは、開発された新材料素子の産業展開を図るため、不揮発性磁気抵抗メモリ応用に求められる特性について評価し、従来材料に対する優位性を見出すとともに、新磁性材料と垂直磁化材料を融合した新垂直磁化磁気トンネル接合素子の実証データも報告した[4]。

§ 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
 - ・ 低温プロセスに向けた新絶縁体バリア材料の研究
 - ・ 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
 - ・ 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
 - ・ 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) K. Kunimatsu, T. Roy, J. Okabayashi, T. Tsuchiya, T. Ichinose, M. Tsujikawa, M. Shirai, and S. Mizukami, “Structure and magnetism in metastable bcc $\text{Co}_{1-x}\text{Mn}_x$ films”, J. Magn. Magn. Mater. 548, 168841 (2022).
- (2) K. Elphick, K. Yoshida, T. Roy, T. Ichinose, K. Kunimatsu, T. Tsuchiya, K.Z. Suzuki, M. Tsujikawa, Y. Nagai, S. Mizukami, M. Shirai, and A. Hirohata, “Lattice Softening in Metastable bcc $\text{Co}_x\text{Mn}_{100-x}(001)$ Ferromagnetic Layers for a Strain-Less Magnetic Tunnel Junction”, Phys. Rev. Appl. 16, 054052 (2021).
- (3) T. Roy, M. Tsujikawa, and M. Shirai, “IrCrMnZ (Z = Al, Ga, Si, Ge) Heusler alloys as electrode materials for MgO-based magnetic tunneling junctions: a first-principles study”, J. Phys. D: Appl. Phys. 55, 125303 (2022).
- (4) K.Z. Suzuki, T. Ichinose, S. Iihama, R. Monma, and S. Mizukami, “Enhanced tunnel magnetoresistance in Mn-based perpendicular magnetic tunnel junctions utilizing antiferromagnetically coupled bcc-Co-based interlayer”, Appl. Phys. Lett. 118, 172412 (2021).