

前川 禎通

東北大学金属材料研究所・教授

数値シミュレーションによる新材料・新機能の開発

1. 研究実施の概要

電子は電荷とスピンの2つの内部自由度を持つ。電荷は電気のもとであり、その流れが電流である。一方、スピンは磁気のもとでありその流れをスピン流と呼ぶ。スピン流は電流と違って、普通 $1\mu\text{m}$ 程度以下で減衰するため、ナノ領域でのみ利用可能な量である。また、スピンの効果は電子間相互作用及びデバイスのナノ構造に強く依存する。そのため、その研究には数値シミュレーションが有力な手段である。本研究では、様々な電子状態計算手法を駆使して数値シミュレーションを行い、スピンと電荷のそれぞれの流れおよび相互変換を制御し、「スピンエレクトロニクス」、「強相関エレクトロニクス」、「量子コンピューティング」における従来のエレクトロニクスをはるかに越えるナノデバイスの新原理、新機能を提案するとともに、そのための新材料の設計を行う。平成 20 年度では、(1)「スピン熱電対」の開発、(2)トンネル接合による「スピン起電力」の開発、(3)酸化物界面制御のためのシミュレーション、(4)スピン起電力デバイスのためのシミュレーションの開発を行った。今後は、これらの成果をベースにし、より効率的な「スピン熱電対」、「スピン起電力デバイス」等の開発、及びそれらのための材料探索を行う。

2. 研究実施内容(文中にある参照番号は 4.(1)に対応する)

(A) スピン流生成:

電子は電気と磁気を併せ持っている。電気のみを利用してきた従来のエレクトロニクスに磁気も積極的に取り入れることで、新しい機能や特性の創出を目指す試みが世界的規模で盛んに行われている。現在の IT 社会を支えているハードディスクの磁気ヘッドや MRAM(磁気ランダムアクセスメモリ)などの磁気デバイス技術の更なる発展には、スピン流を自在に制御することが非常に重要な課題となっており、スピン流生成技術の開拓が急務となっている。平成 20 年度、我々は新しいスピン流生成技術を、以下に述べる二通りの方法で確立した。

—スピンゼーベック効果—金属の両端に温度差を与えると電圧が生じるという現象はゼーベック効果として古くから知られており、同様に熱によって磁気が湧き出る現象、すなわちスピン版のゼーベック効果が世界中の研究者によって探し求められてきた。熱でスピン流を駆動できれば、

電流や磁界を用いずに小型で汎用性の高い磁気源を構築することが可能になり、磁気記憶素子における新しい書き込み・読み出し技術や次世代スピントロニクスコンピューター素子の開発に大きなブレークスルーをもたらす。実験グループとの共同研究において鉄とニッケルの合金と白金から成る素子を作製し、白金層における磁気・電気変換現象(スピンホール効果)を用いることで、温度差をつけた鉄・ニッケル層から湧き出した磁気の流れの検出に初めて成功した¹⁾。熱で誘起されたスピン流を観測した素子はミリメートルサイズであり、スピン流を従来技術より1000倍以上長い距離にわたり生成可能なことを初めて確認し、その現象論を構築した⁷⁾。

—スピン起電力—古典的な電磁気学では、磁場の中に電気回路を置いたとき、磁場の時間的な変化が回路に起電力をもたらす。これは1831年にファラデーが発見した電磁誘導の法則であり、さまざまな電気機器の動作原理となっている。この起電力は磁場が電子の「電荷」に作用する力(ローレンツ力)を反映している。一方、ミクロな世界を扱う量子力学では、磁場が電子の「スピン」にも力を及ぼす。我々は、磁性材料を含むナノ構造においては時間的に変化しない静磁場の中でも起電力を発現できることを理論的に示し、このスピンの起因する起電力を「スピン起電力」と名付けた[S.E. Barnes and S. Maekawa, Phys. Rev. Lett. 98, 246601 (2007)]。今回、実験グループとの共同研究において特殊な磁石であるMnAs(マンガン砒素)のナノ粒子を電極とする磁気トンネル素子を作製し、これに静磁場(時間変化しない一定の大きさの磁場)を印加し、起電力の発生を観測することに初めて成功した¹²⁾。さらに、スピン起電力とナノ粒子のクーロンブロック効果により、これまでの約1000倍となるきわめて大きな磁気抵抗効果(抵抗比100,000%以上)を実現した。この原理を用いれば、磁気エネルギーから電気エネルギーへの効率的な変換が可能になり、新しいタイプの電池(スピン電池)としての応用が考えられる。また、同時に発見された100,000%を超えるきわめて大きな磁気抵抗効果は、超高感度磁気センサーとしての応用が期待される。

(B) 酸化物界面制御:

近年、電子間相互作用の強い典型的な系(いわゆる強相関電子系)である様々な遷移金属酸化物を用いたヘテロ構造化合物の研究が、国内外において盛んに行われている。それは、酸化物ヘテロ構造体でのみ示す新奇な量子状態を探究する基礎学理のみならず、遷移金属酸化物の示す多彩な特性を利用することにより、半導体デバイスに置き換わるであろう次世代デバイスを目指す、新しいエレクトロニクス—強相関エレクトロニクス—創出において重要だからである。

本研究は、様々な遷移金属酸化物ヘテロ構造化合物の界面・表面での電子状態の理解、及び、界面(表面)電子構造が電流・スピン流・熱流などの輸送現象に与える影響を、大規模シミュレーションを用いて理解することを目指している。また、強相関電子系に対する非平衡(輸送)現象の新しいシミュレーション法の開発も同時に目指している。

今年度は、まず、強相関電子系の典型的な例であるマンガン酸化物を取り上げた。マンガン酸化物は、ハーフメタルとよばれる強磁性状態を示し、スピンエレクトロニクスにおいて非常に重要な物質である。まず、非平衡な状況下で、エネルギーがどのように流れるかを調べた。そこでのエネルギーの伝達において、異なる電子状態間での量子力学的遷移が本質的であることを明らかにした。続いて、マンガン酸化物を用いたヘテロ化合物の界面電子状態及び輸送特性を、モンテカルロシミュレーションを用いて研究した。そこでは、バルクな物質では反強磁性絶縁体であるにも関わらず、同じ化学組成を持つマンガン酸化物ヘテロ構造体では強磁性金属になることがわかっ

た²⁾。さらに、ヘテロ構造界面では、バルク物質では見られない特有のd電子軌道秩序が出現することを指摘した。これらの結果は最近の実験とも一致している。

この研究を行うにあたり、古典スピン系に対する古典分子動力学法と電子系に対する量子分子動力学法をハイブリッドした新しいシミュレーション法の開発も行っている。この方法は、今後、スピンダイナミクスを調べるために盛んに用いられている現象論的なランダウ・リフシッツ・ギルバート方程式を数値的に解く方法を超える、より第一原理的な手法に発展していくと期待している。

(C) スピン起電力シミュレーション:

スピン起電力は、系の磁気的エネルギーの分布が移動することで誘起される。スピン起電力デバイスのシミュレーション技術を構築するためには、磁気的エネルギー分布の詳細な解析が必須の要素技術である。磁気的エネルギーの分布は、まず与えられた磁化配置に対し、入力電流に応じたスピントルクを導き、スピントルクを反映した磁化ダイナミクスの解析することで得られる。

われわれは、与えられた磁化配置に対しスピン流およびスピントルクの計算を確立した^{10,11)}。対象とした系は、スピントルク型磁性ランダムアクセスメモリ (SPRAM) である。この系の特徴は、積層フェリ磁性 (SyF) 層を有することである。SyF 層のスピントルクは詳しく調べられていないため、我々の要素技術構築の検証に適した系である。図 1 の F1、F2 が SyF 層を構成する 2 つの磁性層である。ここでは、F1、F2 は常に反平行で、左端に位置する固定層に対し任意の角度を有すると仮定する。境界条件として系の左端から電子を入射し、スピン流、およびスピントルクを解析した。図 2(a)、(b) がそれぞれ F1、F2 にはたらくスピントルクである。この結果の意味するところは、F1、F2 には互いに逆向きのトルク、つまり同一方向の回転を与える共同的なトルクがはたらくことである。工学的には、2 つの磁性層の間に働く反強磁性的交換相互作用を適切に制御すれば、磁化反転に必要な臨界電流密度の低減が可能であることを示唆する。

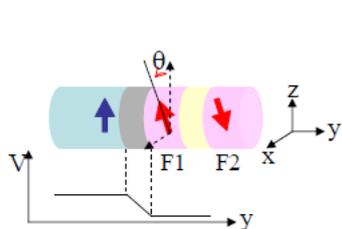


図 1 SyF フリー層の構成

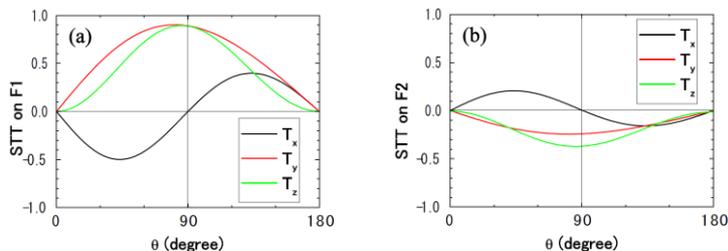


図 2 F1 層にはたらくトルク(a)、 F2 層に働くトルク (b)

3. 研究実施体制

(1) 「東北大学金属材料研究所」グループ

① 研究分担グループ長: 前川 禎通 (東北大学、教授)

② 研究項目

- 量子モンテカルロ法を用いた磁性半導体、酸化物磁性体等の高機能化に向けた材料設計
- 磁性体における熱・スピン効果の研究と熱スピン流の高効率生成に向けた物質探索
- 磁性半導体、磁性金属等を用いたスピンエレクトロニクスデバイスにおける一般化ファラデーの法則に基づく新機能創出

4. 強磁性／超伝導体ナノデバイスに向けた量子伝導機構と量子コンピューティングデバイス動作原理の創出

(2)「理化学研究所」グループ

① 研究分担グループ長: 柚木 清司 ((独)理化学研究所、准主任研究員)

② 研究項目

1. モンテカルロ法を用いたマンガン酸化物ヘテロ界面の電子状態の研究
2. 酸化物ヘテロ構造体デバイスの輸送特性理論の構築、及び、それらを用いたシミュレーションコードの整備
3. 磁性体におけるスピンの運動と緩和過程を伴う輸送方程式のシミュレーション

(3)「日立製作所」グループ

① 研究分担グループ長: 市村 雅彦 (日立製作所、主任研究員)

② 研究項目

1. 磁化反転電流低減に向けたスピントルク、磁化ダイナミクスシミュレーションの整備
2. スピン起電力解析のためのアルゴリズムの構築
3. デバイス集積化、高密度化のための検討

4. 研究成果の発表等

(1) 論文発表 (原著論文)

1. K. Uchida, S. Takahashi, K. Harii, J. Ieda, W. Koshibae, K. Ando, S. Maekawa and E. Saitoh, "Observation of the spin Seebeck effect", Nature 455, 778-781 (2008).
2. S. Dong, S. Yunoki, R. Yu, A. G. Alvarez, J.-M. Liu, E. Dagotto, "Magnetism, conductivity, and orbital order in $(\text{LaMnO}_3)_{2n}/(\text{SrMnO}_3)_n$ superlattices", Phys. Rev. B 78, 201102 (2008).
3. B. Gu, N. Bulut, and S. Maekawa, "Crystal structure effect on the ferromagnetic correlations in ZnO with magnetic impurities", J. Appl. Phys. 104, 103906 (2008).
4. S. Hikino, M. Mori, S. Takahashi, and S. Maekawa, "Sign reversal of ac Josephson current in a ferromagnetic Josephson junction", J. Phys. Soc. Jpn. 78, 014708 (2009).
5. B. Gu, N. Bulut, T. Ziman, and S. Maekawa, "Possible d(0) ferromagnetism in MgO doped with nitrogen", Phys. Rev. B 79, 024407 (2009).
6. G.-Y. Guo, S. Maekawa, and N. Nagaosa, "Enhanced Spin Hall Effect by Resonant Skew Scattering in the Orbital-Dependent Kondo Effect", Phys. Rev. Lett. 102, 036401 (2009) (Editor's suggestion).
7. K. Uchida, S. Takahashi, J. Ieda, K. Harii, K. Ikeda, W. Koshibae, S. Maekawa, and E. Saitoh, "Phenomenological analysis for spin-Seebeck effect in metallic magnets", J. Appl. Phys. 105, 07C908 (2009).
8. M. Mori, G. Khaliullin, T. Tohyama, and S. Maekawa, "Mechanism on spatial variation of pairing gap by apical atoms in cuprates", J. Phys: Conf. Ser. 150, 052169 (2009).

9. S. Hikino, M. Mori, S. Takahashi, and S. Maekawa, “Phase and spin dynamics in a superconductor/ferromagnet/superconductor junction”, J. Phys: Conf. Ser. 150, 052069 (2009).
10. M. Ichimura, T. Hamada, H. Imamura, S. Takahashi, and S. Maekawa, “Spin transfer torque in magnetic tunnel junctions with synthetic ferromagnetic layers”, J. Appl. Phys. 105, 07D120 (2009).
11. R. Sugano, M. Ichimura, S. Takahashi, and S. Maekawa, “Landau-Lifshitz-Gilbert study of the effect of pulse width on spin-transfer torque magnetization switching”, J. Appl. Phys. 105, 07D130 (2009).
12. P. N. Hai, S. Ohya, M. Tanaka, S.E. Barnes, and S. Maekawa, “Electromotive force and huge magnetoresistance in magnetic tunnel junctions”, Nature 458, 489 (2009).

(2) 特許出願

平成 20 年度 国内特許出願件数 : 0 件 (CREST 研究期間累積件数 : 0 件)