電流誘起磁化反転における電子散乱過程に関する非平衡第一原理計算

Non-equilibrium First-Principles Study on Electron-Scattering Processes in Current-Induced Magnetization Switching

○洗平 昌晃 [1]、山本 貴博 [2]、白石 賢二 [1]（1. 名大院工、2. 東理大工）
°M. Araidai[1], T. Yamamoto[2], K. Shiraishi[1] (1.Nagoya Univ. , 2.Tokyo Univ. of Sci.)
E-mail: araidai@cse.nagoya-u.ac.jp

磁気抵抗メモリは，不揮発性・高速動作・高書換え耐性というメモリに求められる全ての要素を併せ持っており，次世代のメモリデバイスとして期待されている．中でも電流誘起磁化反転型（CIMS） [1,2]の磁気抵抗メモリは，そのエネルギー効率の良さから，特に注目を集めている[3]．磁化反転に関して様々な理論研究がなされている一方で，原子・電子レベルでの研究はあまりなされておらず，その詳細な解析が求められている．そこで，電流誘起磁化反転における電子散乱過程に関して，第一原理非平衡電子状態計算を用いて研究を行った[4].

Fig.1 は計算モデルである．電流は左右に流れ，電流に垂直な方向には周期境界条件が課せられている．中心部は典型的な Fe/MgO(001)/Fe 磁気トンネル接合であるが，反転層（右側の薄い Fe 層）に常磁性 Ta 電極が接続されている．固定層（左側の Fe 層）はそのまま Fe 電極に接続されている．これにより，固定層の磁化は完全に固定され，左側からはスピン偏極電流が，右側からは常磁性電流が流れてくることになる．このモデルに，非平衡グリーン関数法と密度汎関数法を組み合わせた第一原理非平衡電子状態計算手法を適用した．この計算手法により，バイアス印加時の電子状態（すなわち２つの強磁性層間の磁化配置や電子散乱過程など）や電流－電圧特性を自己無撞着に計算することができる．

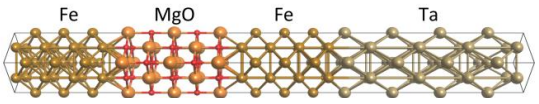

Fig. 1 Fe/MgO/Fe 磁気トンネル接合の計算モデル.

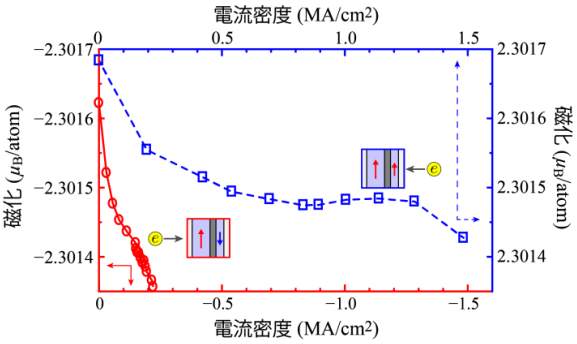

Fig. 2 磁化反転層内の Fe 原子の平均磁化の電流密度依存性．実線は反平行磁化配置の結果，破線は平行磁化配置の結果である．

今回の計算では，磁化反転の全過程を考えるのではなく，CIMS の前駆現象に着目する．すなわち，負バイアスにおける反平行（AP）磁化配置と正バイアスにおける平行（P）磁化配置を考える．前者は AP-to-P 磁化反転の初期状態に，後者は P-to-AP 磁化反転の初期状態に相当する．

Fig.2 は反転層内の Fe 原子の平均磁化の電流密度依存性を示す．実線は負バイアスにおける AP 磁化配置の結果，破線は正バイアスにおける P 磁化配置の結果である．この図から２つのことがわかる．１つ目は，反転層のマジョリティスピンが電流とともに減少することである．これはまさに磁化反転の前駆を表している．２つ目は，AP 磁化配置における磁化の減少率は P 磁化配置に比べて非常に大きいことである．この事実は，AP-to-P 磁化反転が P-to-AP 磁化反転よりも低電力で実現されることを意味する．この振舞いは実験結果ともよく一致しており[3]，我々のシミュレーション結果の妥当性を示している．

Fig.2 で見られた磁化の振舞いは，有限バイアス下での状態密度を詳細に解析することによって理解できる．なぜなら，その状態密度は電子散乱過程を直接的に反映しているからである．発表では、電子散乱過程から見た磁化反転過程の詳細についても報告する予定である。

References
[1] J. C. Slonczewski, J. Magn. Magn. Matter., Vol. 159, pp. L1-L7, December 1996.
[2] L. Berger, Phys. Rev. B, Vol. 54, No. 13, pp. 9353-9358, October 1996.
[3] S. Ikeda, et al., Nat. Mater., Vol. 9, pp. 721-724, September 2010.
[4] M. Araidai, et al., Appl. Phys. Express, Vol. 7, pp. 045202(1)-045202(3), March 2014.

© 2015年 応用物理学会