

CoFe₃N/BaTiO₃ 接合界面における電気分極反転に伴う巨大な磁気モーメント変化
Huge magnetic-moment variation at CoFe₃N/BaTiO₃ interfaces induced by electric-polarization reversal

1. 東北大学電気通信研究所、2. スピントロニクス学術連携研究センター

○(M2)隈田 壮¹、辻川 雅人^{1,2}、白井 正文^{1,2}

1.RIEC, Tohoku Univ., 2.CSRN, Tohoku Univ.

° So Kumata¹, Masahito Tsujikawa^{1,2} Masafumi Shirai^{1,2}

E-mail: b1tb2072@riec.tohoku.ac.jp

強磁性体と強誘電体のヘテロ界面では、電気磁気結合および逆磁歪効果を利用した磁性や磁気抵抗特性の電界制御が報告されている。本研究では、逆ペロブスカイト型遷移金属窒化物(Fe₄N, CoFe₃N)に着目し、電気分極反転に伴う巨大な磁気モーメント変化を得られる強誘電体との接合界面の設計を目標とする。今回は、Fe₄N/BaTiO₃/Fe₄N と CoFe₃N/BaTiO₃/CoFe₃N ヘテロ構造における界面電気磁気効果について第一原理計算を用いて調べた結果を報告する。計算には平面波基底の Projector Augmented Wave (PAW) 法の計算コード VASP を用いた。交換相互ポテンシャルには一般化密度勾配近似 (GGA) を用いている。

Fe₄N(CoFe₃N) 9層と BaTiO₃ 13層からなるヘテロ構造(図1)について BaTiO₃ の電気分極方向と Fe および Co の磁気モーメントの関係について調べた。逆ペロブスカイト型遷移金属窒化物の体心に位置する Fe を Fe(II)、特に界面から2層目に位置する Fe を Fe(II') とする。まずは安定な界面構造を決定するために、終端面を変えて形成エネルギーの比較を行ったところ Fe₄N/BaTiO₃ と CoFe₃N/BaTiO₃ 界面共に図1に示すような Fe₂N/TiO の終端構造が最安定であることが確認された。次に、分極方向による磁化の変化を調べたところ、Fe₄N/BaTiO₃ 界面と CoFe₃N/BaTiO₃ 界面にてそれぞれ、1.37 μ_B、1.34 μ_B と非常に大きな変化が得られた。また、この巨大な磁化の変化は Fe(II') 原子が正極、負極側でそれぞれ低スピン、高スピン状態をとることに起因する。正極側の界面では Fe₄N(CoFe₃N) の層間距離が縮っており、Fe 原子間距離が短くなったことで低スピン状態が安定化したと考えられる。

本研究の一部は、東北大学電気通信研究所共同プロジェクト「強誘電体障壁を有する Fe₄N 基トンネル接合素子の開発」ならびに科学研究費補助金基盤研究(A) (No. 26249037) により助成を受けて実施した。

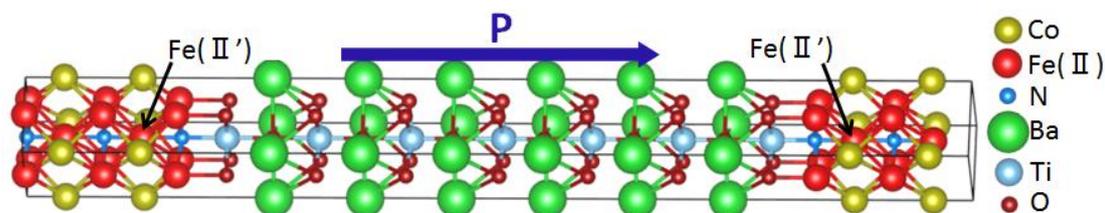


図1. 強誘電状態における CoFe₄N/BaTiO₃/CoFe₄N ヘテロ構造の構造図