

磁気抵抗素子の界面磁気結合とスピン依存伝導に関する理論研究

A theoretical study on interfacial magnetic coupling and spin-dependent transport in magnetoresistive sensor

京都工芸繊維大学¹, 物質・材料研究機構², [○]レンデ ユージン悟¹, 三浦 良雄²

Kyoto Institute of Technology¹, National Institute for Materials Science²,

[○]Eugene S. Rende¹, Yoshio Miura²

E-mail: m7621054@edu.kit.ac.jp

【はじめに】磁気メモリや超高感度磁気センサーの実現に向けて、高い磁気抵抗効果をしめす高スピン偏極な強磁性体金属材料（ハーフメタル）が求められている。その1つとしてホイスラー合金がこれまでさかんに研究されてきた。しかしながら、高スピン偏極ホイスラー合金を電極層に用いた磁気トンネル接合(MTJ)のトンネル磁気抵抗(TMR)効果では、室温における TMR 比の低下が大きな課題になっている。要因の1つとして、絶縁体障壁とのヘテロ接合界面領域において、特に Co 終端界面での交換結合がバルク領域と比較して著しく低下していることが報告されている^[1,2]。すなわち、界面において局所的に強磁性転移温度が低下し、室温において局在スピンの揺らぎが生じていることが TMR 比低下の要因と考えることができる。そこで本研究では、界面における交換結合と電子状態との相関について明らかにすることを目的として、高スピン偏極ホイスラー合金を含んだ遷移金属強磁性体と MgO 界面における交換結合定数をノンコリニアスピン系の第一原理計算^[2]により解析した。

【計算方法】遷移金属強磁性体電極の構造決定、界面の構造最適化、電極と MgO の界面におけるノンコリニアスピン系エネルギー計算の全てにおいて、VASP-PAW コードを用いた。MgO を9層と設定し、Fe₃Si/MgO, Fe₃Al/MgO の、電極の終端面をそれぞれ Fe 終端とした場合と FeZ 終端とした場合の2種類ずつ、CoFe/MgO についても同様に Co 終端と Fe 終端の2種類、Fe/MgO、bcc-Co/MgO の計8の界面構造を決定したあと、界面層の原子のみの局在スピンモーメントの角度を他のスピンモーメントに対して変化させたときの全エネルギー変化を計算した。

【計算結果】図1に、各構造の界面原子層の局在スピンモーメントの角度に対する全エネルギーの変化を示す。図1を見てわかるように、交換結合は CoFe/MgO の特に Co 終端の場合で最も大きい。一方、ホイスラー合金の中では、Fe₃Al/MgO の FeAl 終端界面の交換結合が最も大きい。発表では、各界面構造のスピン依存伝導度の $k_{||}$ 依存性について議論する。

【謝辞】本研究は科学研究費補助金・基盤研究(S),(B)(17H06152, 16H03852)に基づいて行われたものである。

【参考文献】

- [1] A. Sakuma, et al., J. Appl. Phys. 105 (2009)07C910.
- [2] Y. Miura, et al., Phys. Rev. B 83 (2011) 214411.

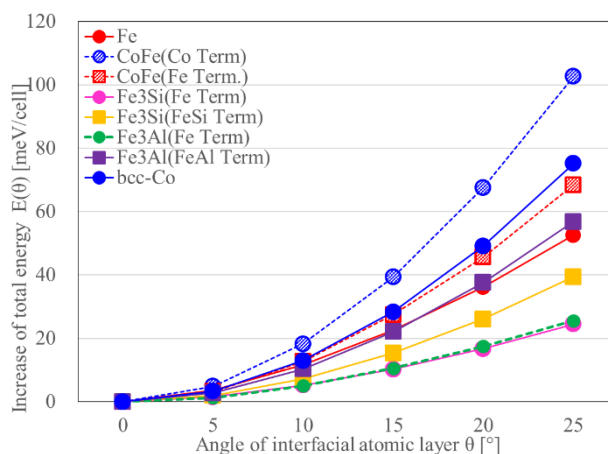


図1. 遷移金属強磁性体/MgO の界面原子層の局在スピンモーメントの角度 θ に対する全エネルギーの変化 $E(\theta)$