

磁気抵抗素子の強磁性体/非磁性体界面における交換結合の第一原理計算

A first-principles study on exchange coupling at interfaces of ferromagnetic materials and non-magnetic materials in magnetoresistive sensor

京都工芸繊維大学 電子システム工学専攻, ○レンデ ユージン悟, 三浦 良雄

Kyoto Institute of Technology, ○Eugene S. Rende, Yoshio Miura

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示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。CPP-GMR素子においても同様にホイスラー合金とスペーサー界面でスピン揺らぎが生じていると考えられる。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Ag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Ag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。Agを9層と設定し、 X_2YZ (Co_2MnSi , Co_2CrSi , Co_2FeGe , Co_2VSi , Co_2TiSi , Fe_3Si , Fe_3Al)/Agの、電極の終端面をそれぞれX終端とした場合とYZ終端とした場合の2種類ずつ、CoFe/Agについても同様にCo終端とFe終端の2種類、Fe/Ag、bcc-Co/Agの計18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/Agの特にCo終端の場合で最も大きい。一方、ハーフメタル性を示すホイスラー合金の中では、 Co_2FeGe /AgのFeGe界面の交換結合が最も大きい。また、ハーフメタルではないが Fe_3Al /AgのFeAl界面では、 Co_2FeGe /AgのFeGe終端よりも交換結合が大きいことがわかった。発表では、交換結合と各d軌道の占有数との関係を明らかにすることで界面交換結合の違いについて議論する。

【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.

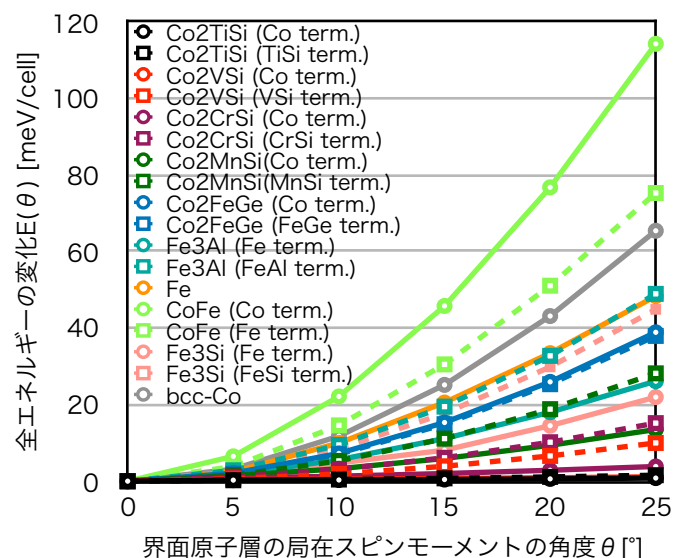


図1. 遷移金属強磁性体/Ag の界面原子層の局在スピンモーメントの角度 θ に対する全エネルギーの変化 $E(\theta)$