

全ホイスラー型半金属 GMR 素子の第一原理的研究

First-Principles Study on All Heusler Based Semimetal GMR Junction

阪大産研¹, 阪大ナノ², 阪大 CSRN³, 物材研 MaDIS⁴

○(DC)黒田 文彬^{1,4}, 福島 鉄也^{2,3}, 小口 多美夫^{1,2,3,4}

ISIR, Osaka Univ.¹, INSD, Osaka Univ.², CSRN, Osaka Univ.³, MaDIS, NIMS⁴

○(DC)Kuroda Fumiaki^{1,4}, Tetsuya Fukushima^{2,3}, Tamio Oguchi^{1,2,3,4}

E-mail: fkuroda@cmp.sanken.osaka-u.ac.jp



近年、高密度ハードディスクドライブや Gbit クラスの磁気ランダムアクセスメモリの実現のため、高い磁気抵抗比と小さい面抵抗値を持つ巨大磁気抵抗(GMR)接合が求められている。従来の面直電流型(CPP-GMR)接合は、小さい面抵抗値をもつものの、高い磁気抵抗比は得られなかった。そこで、我々は半金属を用いた新規 GMR 接合について注目した。特に本研究では、第一原理計算に基づき、半金属 Fe_2VAI を用いた全ホイスラー型 GMR 接合の界面での磁気結合とスピン依存伝導について議論した。スピン注入源の強磁性体としては、 Mn_2VAI を用いた。この物質は、高い磁気転移温度をもつハーフメタルフェリ磁性体であり、低飽和磁化による磁化反転電流の低減が期待されている。界面での磁気結合については Korringha-Kohn-Rostoker (KKR) Green's 関数法を用いて議論し、スピン依存伝導については、Quantum-Espresso に実装されている PWCOND パッケージを用いた。その結果、 MnMn-VAI 端において、界面の Mn は Fe_2VAI 中の V と反強磁性的に結合していることがわかった。さらにその界面においても、ホイスラー構造によりハーフメタル性が保たれていることを確認した。伝導特性は V-d 状態由来の電子面が支配しており、中間層である Fe_2VAI に少量の電子ドーピングした場合、コンダクタンスは大きくなり、ホールドーピングの場合はコンダクタンスを下げる傾向にある。これは、スピン注入源 Mn_2VAI と中間層 Fe_2VAI の双方の V-d 状態バンドの対称性が、マッチングしていることが原因である。また半金属 Fe_2VAI は、低キャリア濃度のため、通常の金属に比べてゲート電圧の効果が遮蔽されにくい。そのため、このようなコンダクタンスの振る舞いは、中間層に少量の化学ドーピングやゲート電圧によりキャリア濃度を変化させることで、GMR 素子の伝導特性を大きく変化させることができることを示唆している。さらに、比較のために他のハーフメタルホイスラー合金 Co_2MnSi をスピン注入層として用いた場合についても議論を行い、 $\text{Mn}_2\text{VAI}/\text{Fe}_2\text{VAI}$ が有望な半金属 GMR 素子となることがわかった。