

Fe/MgO 界面への窒素不純物が磁気異方性と TMR に与える影響について

Effect of Nitrogen Impurity Atoms at Fe/MgO Interface on Magnetic Anisotropy and TMR

名大院工¹, 名大未来研², 東北大国際集積セ³, 東北大通研⁴, [○]小川湧太郎^{1,*}, 洗平昌晃^{1,2},
遠藤哲郎^{3,4}, 白石賢二^{1,2,3}

Nagoya Univ.¹, IMaSS, Nagoya Univ.², CIES, Tohoku Univ.³, RIEC, Tohoku Univ.⁴,

[○]Yutaro Ogawa^{1,*}, Masaaki Araidai^{1,2}, Tetsuo Endoh^{3,4}, Kenji Shiraishi^{1,2,3}

E-mail: ogawa.yutaro2119@gmail.com

1. はじめに

STT-MRAM は高速動作が可能な次世代の不揮発性メモリとして期待されている[1]。STT-MRAM で使われている磁気トンネル接合(MTJ)は Fe 系金属薄膜と MgO 膜で構成されている[2,3]。Fe/MgO 界面の第一原理計算は報告されているが[4]。MRAM の製造過程では SiN 被膜によって MTJ を酸化から保護することから、MTJ に N 不純物が混入すると考えられる。そこで、本研究では Fe/MgO/Fe MTJ モデルを作成し、N 不純物が MTJ 特性に与える影響を第一原理計算で考察した。

2. 計算手法と計算モデル

本研究では密度汎関数理論に基づく第一原理計算を行った。計算は局在基底を用いた擬ポテンシャル法のプログラムである QuantumATK[5]を使用した。計算に用いたモデルを Fig.1 に示す。まず Fe 5 層、MgO 4 層、Fe 5 層からなる 3×3 Fe/MgO/Fe MTJ のモデルを作成した。これを pure モデルとする。さらに窒素不純物を配置したモデルを 3 種類用意した。MgO 界面の O 原子を N に置換した substitutional モデル、Fe/MgO 界面にある Mg の上に N を挿入した interfacial モデル、Fe 層の内部に N を挿入した hollow-site モデルと呼ぶ。

3. 計算結果

Fig.1 の各モデルについて第一原理計算を実行し、得られた垂直磁気異方性(iPMA)エネルギーと TMR 比を Tab.1 に示した。これによると窒素混入により iPMA エネルギーと TMR 比が低下したことが分かった。Fig.2 に、MgO 層付近の状態密度を示す。Fig.2(a), (b)は Fig.2 の各 MTJ モデルを右側へトンネルしていく電子の局所状態密度(LDOS)である。Fig.2(a)は平行磁化状態における LDOS を示している。MgO/Fe 界面付近となる 15.8 Å の位置における LDOS の値をみると、pure モデルに比べて substitutional モデルで 1/2、hollow-site モデルでは 1/3 に減少した。界面を渡って伝導するために必要な状態数が、窒素不純物の影響で減少してしまっていることが分かる。Fig.2(b)は反平行磁化における LDOS である。特に interfacial モデルでは右側 MgO/Fe 界面での状態数が大幅に増加しており、Fe/MgO 界面を渡ってトンネルしやすくなっていることが分かる。これにより、interfacial モデルにおいて特に TMR 比が低下したのは、反平行磁化における界面状態数が著しく増加したからだと分かる。

4. 結論

本研究では STT タイプの磁気メモリ(STT-MRAM)に用いられる Fe/MgO/Fe MTJ に対し、デバイス製造プロセス中で混入する可能性のある窒素不純物の影響を、第一原理計算によって明らかにした。その結果、Fe/MgO/Fe MTJ の界面における iPMA 及び TMR 比が

減少した。iPMA は室温の熱エネルギーによる擾乱に耐えてデータを保持し続けるのに重要であり、また TMR 比はデータの読み取りや微細化可能性に直結する。今回の結果から、そのどちらにも窒素不純物が悪影響を及ぼすことが分かった。したがって窒素混入が起こらないような対策をすべきだと考えられる。

[1] T. Endoh, et al., 2020 IEEE Symposium on VLSI Technology, 1-2 (2020).

[2] S. Ikeda, et al., Appl. Phys. Lett. **93**, 082508 (2008).

[3] J. Mathon et al., Phys. Rev. B **63**, 220403 (2001).

[4] K. Nakamura et al. Phys. Rev. B **81**, 220409, (2010).

[5] S. Smidstrup, et al., J. Phys.: Condens. Matter **32**, 015901 (2020).

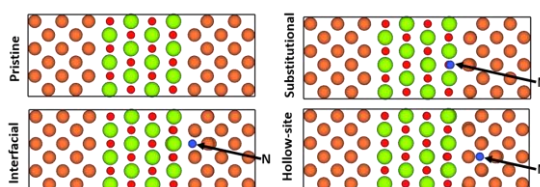


Fig.1 The side views of optimized atomic structures of Fe/MgO/Fe MTJ we used. There are no impurities in “pure” model. In “substitutional” model, an O atom close to the right interface is replaced with an N atom. In “interfacial” model, an N is placed at the interstitial site of the right interface. In “hollow-site” model, an N resides at the interstitial site of the right Fe thin film. Fe, O, Mg atoms are colored with orange, red and green, respectively.

Table.1 iPMA energies and TMR ratios for each model.

Model	iPMA [meV]	TMR [%]
Pure	14.8	6398
Substitutional	14.1	4008
Interfacial	13.8	1768
Hollow-site	11.8	3614

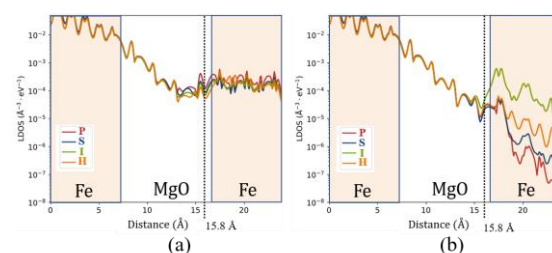


Fig.2 The density of states of up-spin electrons at Fermi level around MgO layer as a function of the distance from the left-most boundary of the calculation box. (a) and (b) are the results of parallel and antiparallel magnetization configurations, respectively.

* 現キオクシア株式会社