

# 第一原理計算に基づく磁気トンネル接合素子 Fe-LiF-MgO の電子状態

## Electronic states of Fe-LiF-MgO magnetic tunnel junction device based on the first-principles calculations

新潟大院自然<sup>1</sup>、新潟大理<sup>2</sup> ○関川卓也<sup>1\*</sup>、高田和樹<sup>1</sup>、大野義章<sup>2</sup>

Niigata Univ. Takuya Sekikawa\*, Kazuki Takada, Yoshiaki Ōno

E-mail: f20j003c@mail.cc.niigata-u.ac.jp

野崎らは、フッ化リチウム(LiF)と酸化マグネシウム(MgO)を組み合わせたトンネル障壁層を用いた新構造の磁気トンネル接合素子を開発し、磁気メモリー(MRAM)の記録保持特性の指標となる垂直磁気異方性の改善に成功した。実験的に、鉄(Fe)と MgO の間にわずか 1~2 原子層の非常に薄い LiF を導入することで、Fe の磁化の向きが膜面垂直方向に安定化することを見出した。この新構造 MTJ 素子は電圧書き込み型 MRAM においてもギガビット級の大容量化を可能とすると考えられて、低消費電力性と高い記録保持特性を必要とする脳型コンピューティング MRAM の開発を加速する技術として期待されている<sup>1)</sup>。

そこで本研究では、第一原理計算ソフトウェア OpenMX<sup>2)</sup>を用いて、スラブ近似を用いて Fe-MgO、Fe-LiF-MgO の界面の電子状態を議論する。Fe-MgO 界面に関しては MgO を 8 原子層、Fe を 8 原子層のスラブモデルを組み合わせて構成し、界面系を構成した。また、Fe-LiF-MgO 界面に関しては MgO を 8 原子層、LiF を 1 原子層、Fe を 8 原子層のスラブモデルを組み合わせて構成し、界面系を構成し最安定構造、LiF の挿入前・挿入後の波動関数(図)をはじめとした電子状態を得た。この構造に基づいて電子状態を議論し、特に界面に由来する特殊な電子状態を議論する。また、ノンコリニア計算により Fe 層のスピン状態を計算し LiF 層の寄与による垂直磁気異方性の安定化の起源を当日議論する。



1) Nozaki et al. NPG Asia Materials (2022) 14:5.

2) Open source package for Material eXplorer, <http://www.openmx-square.org>.