

平成21年 5月29日現在

研究種目：基盤研究（C）
 研究期間：2007～2008
 課題番号：19560013
 研究課題名（和文） 強磁性絶縁体・ハーフメタルを用いた高スピン偏極電流生成デバイスの理論的研究
 研究課題名（英文） Theoretical study of highly spin-polarized current generator using ferromagnetic insulator and halfmetal
 研究代表者
 伊藤 博介（ITOH HIROYOSHI）
 関西大学・システム理工学部・准教授
 研究者番号：00293671

研究成果の概要：室温で高スピン偏極電流を生成可能なデバイスの材料として、強磁性絶縁体とハーフメタルを理論的に検討した。ダブル・ペロブスカイト $\text{La}_2\text{NiMnO}_6$ 、スピネル・フェライト Fe_2O_3 、ホイスラー合金 Co_2MnSi と $(\text{Fe-Mn})_3\text{Si}$ 、バリステック擬ハーフメタル CoFeB/MgO の電子状態をバンド計算し、スピン依存伝導特性を調べた。その結果から、これらの材料を用いることで高いスピン偏極率を持つ電流を生成可能であることが明らかとなった。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	2,300,000	690,000	2,990,000
2008年度	800,000	240,000	1,040,000
年度			
年度			
年度			
総計	3,100,000	930,000	4,030,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎

キーワード：新機能材料，スピントロニクス，計算物理，磁性，メゾスコピック系

1. 研究開始当初の背景

スピンの自由度を利用した新機能デバイスを創製しようとするスピントロニクスの研究分野において、偏極度の高いスピン偏極電流をいかに作り出すかが重要な課題の一つとなっている。特にデバイスへの応用を考える場合には、高いスピン偏極度を持つ電流を室温において実現する必要がある。

スピントロニクスの分野で、現在の所もっとも成功しているデバイスの一つとして、強磁性体で絶縁体をはさんだ強磁性トンネル接合がある。単結晶 Fe/MgO/Fe トンネル接合は、非常に大きなトンネル型磁気抵抗効果 (TMR) を示し究極のメモリとして期待され

る磁気ランダム・アクセス・メモリ (MRAM) に応用され、現在も開発が進められている。しかしながら、MRAM の集積度は未だ低く、MRAM の大容量化を図るためには、より大きな TMR、すなわち、よりスピン偏極度の高い電流を作り出すことが求められている。

また従来は、金属材料ベースのスピントロニクス・デバイスの研究が主に行われてきたが、最近では半導体ベースのスピントロニクスの研究も行われるようになってきた。しかしながら、 $(\text{Ga,Mn})\text{As}$ 等の希薄磁性半導体のキュリー温度は 150K 程度と室温に比べ低い。このため、室温動作を考える場合には、希薄磁性半導体の代わりに強磁性金属等のキュ

リー温度の高い物質から半導体にスピンを注入することが必要となる。より多くのスピンを半導体に注入するためには、注入効率の改善だけでなく、スピンの偏極度の高い電流を作り出すことのできる素子(スピン注入源)を開発しなければならない。

強磁性絶縁体やハーフメタルは、半導体や金属において高スピン偏極電流を実現するためのスピン注入源として注目されている物質である。

2. 研究の目的

本研究の目的は、スピン偏極度の高い電流を室温において生成することが可能なデバイス、すなわちスピン偏極電流生成デバイスを開発することである。

スピン偏極電流生成デバイスに用いる材料として、Fe/MgO 接合(または Fe/MgO/Fe 接合)、強磁性(またはフェリ磁性)絶縁体、ハーフメタルが考えられる。本研究では特に、室温において完全にスピン偏極した電流の生成を目指すため、キュリー温度が室温に比べ高く、また電子状態のスピン依存性が大きい物質(強磁性絶縁体: ダブル・ペロブスカイトおよびスピネル・フェライト、ハーフメタル: ホイスラー合金, CoFeB/MgO)に注目し、スピン偏極電流生成デバイスに用いる物質の提案、およびデバイスの設計指針の構築を行う。

3. 研究の方法

電子状態の計算には、第一原理バンド計算(GGA および GGA+U)を用いる。さらに得られた電子状態の結果を、タイト・バインディング模型に焼き直す。また、コンダクタンスの計算にはリカーシブ・グリーン関数法に基づく Lee-Fisher 公式あるいはトンネル・ハミルトニアン法を用いる。

4. 研究成果

室温で動作する高スピン偏極電流生成デバイスの材料として、ダブル・ペロブスカイト $\text{La}_2\text{NiMnO}_6$ 、スピネル・フェライト Fe_2O_3 、ホイスラー合金 Co_2MnSi と $(\text{Fe-Mn})_3\text{Si}$ 、およびバリスティック擬ハーフメタル CoFeB/MgO に注目して研究を行った。電子状態とスピン依存伝導特性に関して得られた主な成果は以下の通りである。

(1) ダブル・ペロブスカイト $\text{La}_2\text{NiMnO}_6$ (強磁性絶縁体): $\text{La}_2\text{NiMnO}_6$ の電子状態を第一原理バンド計算により求め、Lee-Fisher 公式を用いてトンネル接合のコンダクタンスを計算した。バンド・ギャップ中のフェルミ準位の位置がスピン偏極度にとって重要であること、また常磁性金属電極として LaNiO_3 を用いた場合に高スピン偏極電流が得られることが示された。

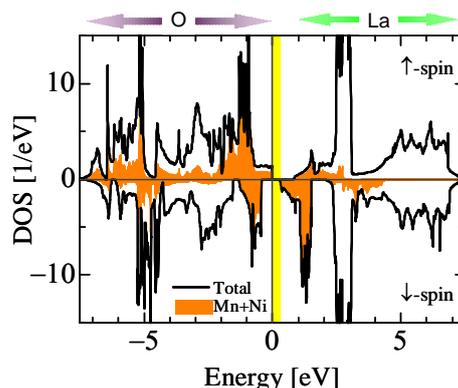


図1 $\text{La}_2\text{NiMnO}_6$ の状態密度

(2) スピネル・フェライト Fe_2O_3 マグヘマイト(フェリ磁性絶縁体): 160 個の原子を単位胞に含む Fe_2O_3 に対して第一原理バンド計算(GGA+U)を行った。基底状態としてフェリ磁性絶縁状態が得られ、そのバンド・ギャップの大きさは conductive AFM の実験と矛盾しないことが明らかとなった。ただし、組成がずれて Fe が過剰な場合には、少数スピンのフェルミ準位近傍にギャップ内状態が形成されることもわかった。このギャップ内状態は局在性が強く、薄膜の実験で観測されているホッピング伝導の原因となりうることを示された。

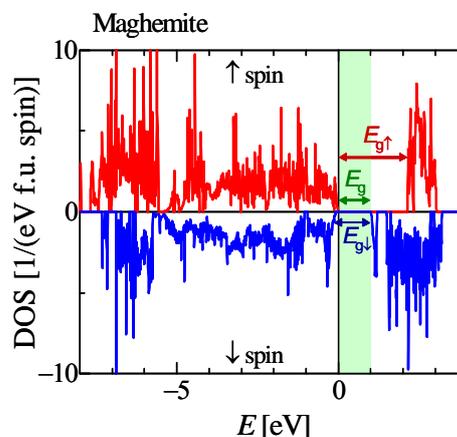


図2 Fe_2O_3 の状態密度

(3) ホイスラー合金 Co_2MnSi (ハーフメタル): 第一原理バンド計算を用いて Co_2MnSi の電子状態を調べた。これにより、少数スピン電子の電子状態に見られるギャップ構造とクーロン相互作用の大きさとの関係を明らかにした。また、得られた電子状態をもとにトンネル・ハミルトニアン法を用いて、接合中の電流を計算した。ただし、スピン反転散乱の効果は現象論的に取り扱い、電流および磁気抵抗効果の温度依存性を調

べた。この結果、接合の界面近傍に存在する磁性不純物等によるスピン反転散乱が、磁気抵抗効果減少の主要因の一つであることが明らかとなった。このことは、界面エンジニアリングによって、界面構造、界面電子状態を制御することで、磁気抵抗効果の温度による減少を改善できることを示唆している。

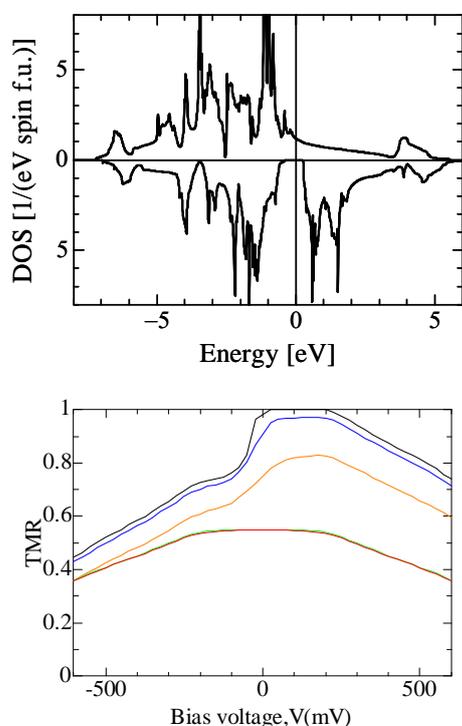


図3 Co_2MnSi の状態密度 (上図), Co_2MnSi を電極にした強磁性トンネル接合における TMR 比の温度依存性 (下図)

(4) ホイスラー合金 $(\text{Fe-Mn})_3\text{Si}$ (ハーフメタル)：第一原理バンド計算を用いて $(\text{Fe-Mn})_3\text{Si}$ の電子状態と磁性を調べた。比較的幅広い Mn 組成の領域でハーフメタル的な電子状態が実現することが明らかとなった。また、半導体 Ge や GaAs との格子不整合は数%であり、不整合による界面格子歪みがあったとしても、電子状態密度のスピン偏極率は 90% と高いままであることもわかった。これらの結果から、 $(\text{Fe-Mn})_3\text{Si}$ は半導体中に高スピン偏極電流を注入するための注入源として有望であることが示された。

(5) MgO バリアを用いたバリスティック擬ハーフメタル接合：単結晶 MgO バリアを用いた強磁性トンネル接合は、トンネル電流を支配するバンドに注目すればハーフメタル的な磁気抵抗特性を示す。強磁性電極として bcc-Co および CoFeB を用いた強磁性トンネル接合におけるトンネル分光の実験結果を、単純なモデルを用いて解析した。この結果、トンネルスペクトルには強磁性体電極のバン

ド構造、界面マグノンの影響が現れていることが明らかとなった。

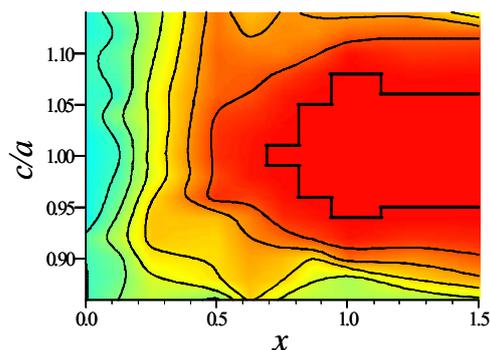


図4 $\text{Fe}_{3-x}\text{Mn}_x\text{Si}_3$ におけるスピン偏極率の Mn 組成(x)および歪み(c/a)依存性

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計5件)

- ① K. Hamaya, H. Itoh, O. Nakatsuka, K. Ueda, K. Yamamoto, M. Itakura, T. Taniyama, T. Ono, and M. Miyao: "Ferromagnetism and Electronic Structures of Nonstoichiometric Heusler-Alloy $\text{Fe}_{3-x}\text{Mn}_x\text{Si}$ Epilayers Grown on Ge(111)", *Physical Review Letters*, Vol. 102, pp. 137204-1~4 (2009). 査読有り
- ② 高田一朗, 井上順一郎, 伊藤博介: "ホイスラー合金を用いた強磁性トンネル接合の TMR に対するスピン反転散乱の効果", *Journal of Magnetic Society of Japan*, Vol. 32, pp. 338~342 (2008). 査読有り
- ③ Do Bang, T. Nozaki, D. D. Djayaprawira, M. Shiraishi, Y. Suzuki, A. Fukushima, H. Kubota, T. Nagahama, S. Yuasa, H. Maehara, K. Tsunekawa, Y. Nagamine, N. Watanabe, H. Itoh: "Inelastic tunneling spectra of MgO barrier magnetic tunneling junctions showing large magnon contribution", *Journal of Applied Physics*, Vol. 105, pp. 07C924-1~3 (2008). 査読有り
- ④ S. Nishioka, R. Matsumoto, H. Tomita, T. Nozaki, Y. Suzuki, H. Itoh, S. Yuasa: "Spin dependent tunneling spectroscopy in single crystalline bcc-Co/ MgO/ bcc-Co (001) junctions", *Applied Physics Letters*, Vol. 93, pp. 122511-1~3 (2008). 査読有り
- ⑤ I. Takada, H. Itoh, J. Inoue: "Effects of spin-flip tunneling on temperature and voltage dependence of TMR", *physica status solidi (b)*, Vol. 244, pp. 4452~4455 (2007). 査読有り

[学会発表] (計6件)

- ①伊藤博介, 本多周太, 井上順一郎, 柳原英人, 喜多英治: " γ -Fe₂O₃ (マグヘマイト)の電子状態とスピン・フィルター効果", 日本物理学会「第64回年次大会」(2009.03.27~30, 立教学院).
- ② H. Itoh, S. Honda, J. Inoue, H. Yanagihara E. Kita: "Electronic structure and spin-filter effect of γ -Fe₂O₃ (maghemite)", March Meeting 2009, American Physical Society (2009.03.16~20, Pittsburgh, USA).
- ③高田一朗, 井上順一郎, 伊藤博介: "ホイスラー合金を用いた強磁性トンネル接合のTMRに対するスピン反転散乱の効果", 第31回日本応用磁気学会学術講演会(2007.09.11~14, 学習院大学).
- ④高田一朗, 井上順一郎, 伊藤博介: "ホイスラー合金を用いたトンネル接合のTMRに対するスピン反転散乱の効果", 2007年秋季第68回応用物理学会学術講演会(2007.09.04~08, 北海道工業大学).
- ⑤I. Takada, H. Itoh, J. Inoue: "Effects of spin-flip tunneling on temperature and voltage dependence of TMR", International Symposium on Advanced Magnetic Materials and Applications (2007.05.28~06.01, Jeju island, Korea).
- ⑥J. Ozeki, K. Ito, H. Itoh, and J. Inoue: "Electronic structure and spin-filter effect of spinel ferrites", International Symposium on Advanced Magnetic Materials and Applications (2007.05.28~06.01, Jeju island, Korea).

6. 研究組織

(1) 研究代表者

伊藤 博介 (ITOHI HIROYOSHI)
関西大学・システム理工学部・准教授
研究者番号: 00293671

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

井上 順一郎 (INOUE JUN-ICHIRO)
名古屋大学・大学院工学研究科・教授
研究者番号: 60115532
本多 周太 (HONDA SYUTA)
名古屋大学・大学院工学研究科・PD