

自己評価報告書

平成23年 3月22日現在

機関番号：14101

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2008～2011

課題番号：20540334

研究課題名（和文） 表面界面のスピン構造とスピン制御：第一原理計算による理論的予測

研究課題名（英文） Spin structures and material design at surfaces and interfaces: first principles predictions

研究代表者

中村 浩次（NAKAMURA KOHJI）

三重大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号：70281847

研究分野：表面界面磁性学

科研費の分科・細目：物理学・物性Ⅱ

キーワード：表面界面磁性、第一原理計算

1. 研究計画の概要

次世代の情報処理・通信技術を発展させる上で、表面や界面のスピン構造とその物性を制御することは重要な研究課題である。本研究ではノンコリニアスピンを考慮した第一原理 FLAPW 法を用いて、スピントロニクス分野で重要な以下の研究に取り組む。

- A. ハーフメタル強磁性体／反強磁性体界面のスピン構造の理論的予測：電子スピンの自由度を最大限に生かしたスピントロニクスデバイスを開発するためにはフェルミ面上の電子が完全にスピン偏極したハーフメタル強磁性体の活用が有効である。本研究では半導体構造と整合性のよいハーフメタル強磁性体と反強磁性体の界面のスピン構造を解析し、界面のハーフメタル特性と交換バイアス効果について考察する。
- B. 強磁性体／反強磁性誘電体界面のスピン構造の理論的予測：電気磁気効果は電気と磁気的信号をカップリングさせ、応用面の上で注目されている。本研究では、反強磁性強誘電体／強磁性体界面のスピン構造を解析して、強磁性と強誘電性を備え持つ人工格子材料を提案する。また、反強磁性強誘電体の電気磁気効果と強磁性体／反強磁性体による交換バイアスを活用して、電場による強磁性体のスピンの向きの制御法を考察する。
- C. 磁性金属薄膜のナノスピン構造の理論的予測：表面界面では構造の低対称化や配位数の低下、基板の効果により様々な磁気構造や磁気的性質を示す。本研究では、基板の種類及び面方位の制御による単原子層薄膜等の人工ナノスピン構造の解析を行う。また磁化容易軸や熱安定性、保持力

などを決める、ナノ構造体において特に重要な結晶磁気異方性の考察や、ナノ構造体における磁壁やスピンスパイラル構造の安定性について考察する。

- D. 有限温度における表面・界面スピン構造とスピンドイナミクス：有限温度における表面界面のスピン構造の安定性とスピンドイナミクスに関する理論的計算手法の開発を行う。

2. 研究の進捗状況

- A. 半導体と整合性の良い閃亜鉛鉱型結晶構造を有する遷移金属カルコゲナイド系の CrSe/MnSe 及び CrTe/MnTe の第一原理計算の結果、界面ではハーフメタル的な電子構造を持つことを明らかにした。また、電子相関を考慮した場合も考慮しない場合と同様に界面ではハーフメタル的な性質になることを確認した。また、モンテカルロシミュレーションを用いて磁場・磁化特性を解析した結果、交換バイアスの発生が可能であることを示唆できた。
- B. 電気磁気効果を示すコランダム型結晶構造を持つ Cr₂O₃ 反強磁性体の表面及び Cr₂O₃/Pt 界面構造を第一原理計算より決定した。また、両表面・界面において、磁気構造は表面や界面構造の緩和に強く依存することを明らかにした。引き続き、Fe/MgO 界面の構造を決定し、結晶磁気異方性の外部電場依存性、及びその機構を明らかにした。
- C. スピン軌道相互を導入した第一原理ノンコリニア FLAPW 法のプログラム開発を行い、基板の無いフリースタンディングな Fe 単原子層膜及び W(110) 基板上的 Fe 単原子層膜に対して、スピンスパイラル構造の

安定性を解析した。引き続き、*4d*と*5d*非磁性金属 (Mo、Nb、Ta) 基板上のFe単原子層膜におけるスピンスパイラル構造について計算し、薄膜と基板界面で生じる強いスピン軌道相互作用の効果について考察した。

- D. 有限温度下におけるスピン構造の安定性を解析するための、メトロポリスモンテカルロ法に基づいた計算手法を開発した。

3. 現在までの達成度

②おおむね順調に進展している。

(理由)

上記課題A及びB,Cに対してほぼ計画内容を遂行した。課題Dは来年度に実施予定であるが、一部プログラム開発に取りかかっている。

4. 今後の研究の推進方策

ノンコリニア磁気構造を持つ表面や界面のスピン依存電流を解析するために、ノンコリニア磁性を考慮した電気伝導のプログラム開発を開始する。また、有限温度効果を考慮したモンテカルロ法計算手法の完成とこの効果を陽に取り入れた第一原理計算手法の検討を行う。

5. 代表的な研究成果

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計5件)

- ① K. Nakamura, T. Akiyama, T. Ito, M. Weinert, A. J. Freeman, Role of an interfacial FeO layer in the electric-field-driven switching of magnetocrystalline anisotropy at the Fe/MgO interface, *Phys. Rev. B* **81**, 220409-1-4, 2010, 査読有。
- ② K. Nakamura, T. Akiyama, T. Ito, Spin-spiral and domain wall structures in monolayer Fe/W(110), *Appl. Surf. Sci.*, **256**, 1249-1251, 2009, 査読有。
- ③ K. Nakamura, R. Shimabukuro, Y. Fujiwara, T. Akiyama, T. Ito, and A. J. Freeman, Giant Modification of the Magnetocrystalline Anisotropy in Transition-Metal Monolayers by an External Electric Field, *Phys. Rev. Lett.* **102**, No.18, 187201, 2009, 査読有。
- ④ K. Nakamura, R. Shimabukuro, Y. Fujiwara, T. Akiyama, T. Ito, and A. J. Freeman, Giant Modification of the Magnetocrystalline Anisotropy in Transition-Metal Monolayers by an External Electric Field, *Phys. Rev. Lett.* **102**, No.18, 187201, 2009, 査読有。
- ⑤ K. Nakamura, T. Akiyama, T. Ito, and A. J. Freeman, Role of spin-orbit coupling in spin-spiral structures in Fe monolayer on W(110): A first-principles noncollinear

magnetism study, *J. Appl. Phys.* **105**, No.7, 07C304-1-3, 2009, 査読有。

[学会発表] (計5件)

- ① Y. Kato, K. Nakamura, T. Akiyama, T. Ito, Structural and magnetic stability at Cr₂O₃ (0001) surfaces under external electric field, International Conference of Asian Union of Magnetic Societies, December 8, 2010, Jeju, Korea.
- ② K. Nakamura, T. Akiyama, T. Ito, M. Weinert, A.J. Freeman, Electric field-driven modification of magnetocrystalline anisotropy in transition-metal films and metal-insulator interfaces, International Conference of Asian Union of Magnetic Societies, December 6, 2010, Jeju, Korea.
- ③ K. Nakamura, T. Akiyama, T. Ito, M. Weinert, A.J. Freeman, Electric field-driven magnetocrystalline anisotropy switching of surface Fe monolayer on MgO, The 55th Magnetism and Magnetic Materials Conference, November 16, 2010, Atlanta, USA.
- ④ K. Nakamura, R. Shimabukuro, T. Akiyama, T. Ito, A.J. Freeman, Electric field-induced change in magnetocrystalline anisotropy in ferromagnetic transition-metal thin films, International Conference on Magnetism, July 30, 2009, Karlsruhe, Germany.
- ⑤ K. Nakamura, T. Akiyama, T. Ito, A. J. Freeman, Role of spin-orbit coupling in spin-spiral structures in Fe monolayer on W(110): A first-principles noncollinear magnetism study, 53rd Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials, November 12, 2008, Austin, USA.