

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 24 年 5 月 30 日現在

機関番号：11301
 研究種目：若手研究(B)
 研究期間：2010 ～ 2011
 課題番号：22760003
 研究課題名（和文） 強磁性体／半導体界面における結晶磁気異方性の電界効果に関する理論研究
 研究課題名（英文） Theoretical study on an electric filed effect of magneto-crystalline anisotropy of Ferromagnetic-metal/Semiconductor interfaces
 研究代表者
 三浦 良雄 (MIURA YOSHIO)
 東北大学・電気通信研究所・助教
 研究者番号：10361198

研究成果の概要（和文）：

垂直磁化型の半導体への高スピン偏極電流注入源の理論設計を目的として、Fe/GaAs(001)界面における結晶磁気異方性エネルギー(MAE)の第一原理計算を行った。多層膜構造のFe(13層)/GaAsのMAEは、As終端界面で0.898 [mJ/m²]、Ga終端界面で0.469[mJ/m²]となり、どちらも垂直磁気異方性が得られた。しかしFe13層の磁化の反磁界エネルギーは約2[mJ/m²]とMAEよりも大きいため、実際に垂直磁化膜を得るためにはFe層を1nm以下まで薄くする必要がある。

研究成果の概要（英文）：

We investigate and discuss the magneto-crystalline anisotropy (MCA) of Fe(13-layer)/GaAs(001) interface. Purpose of this work is theoretical design of the highly spin-polarized spin injection devices into the non-magnetic semiconductor with perpendicular magnetization. We obtained perpendicular MCA both for As and Ga terminations. MCA energies are 0.898 [mJ/m²] for As termination and 0.469 [mJ/m²] for Ga termination. However, due to the large demagnetizing field energy of Fe-layer, the thin Fe-layer less than 1nm will be needed to obtain the perpendicular magnetization at the Fe/GaAs interface.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	1,600,000	480,000	2,080,000
2011年度	1,600,000	480,000	2,080,000
年度			
年度			
年度			
総計	3,200,000	960,000	4,160,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物性・結晶工学

キーワード：スピントロニクス

1. 研究開始当初の背景

大容量・超高速・低消費電力が期待される電子スピンドバイスの実現に向けた課題の

1つとして、デバイスの高密度化に伴う磁化の熱揺らぎ耐性の向上が挙げられる。この課題を達成するために強磁性層として垂直磁気材料が有望である。しかしながら、大き

な結晶磁気異方性を示す垂直磁気材料は素子の微細化における熱安定性の確保に優れている反面、磁化反転において大きなエネルギーが必要であるという問題点がある。このような互いに対極の立場にある問題を解決するために、電界アシスト磁化反転が提案されている。この提案では、結晶磁気異方性を有する垂直磁気材料を電子スピンドバイスの強磁性層に用いて微細化に伴う素子の熱安定性を確保する一方で、書き込みの際は電界を印加して結晶磁気異方性を小さくして磁化反転を容易に行う。

これまで、東北大学・電気通信研究所の研究グループにおいて、希薄磁性半導体 GaMnAs の磁化ベクトルを電界によって制御した実験結果が報告されている[1]。また大阪大学の研究グループでは、磁気メモリ等への応用に向けて Au/Fe/MgO の系において電界による Fe 薄膜の磁気異方性の変化が実験的に確認されている[2]。理論的には、Fe/Ba₂TiO₄ 接合界面[3]、Fe(Co)数原子層薄膜[4,5]、Pt/Fe 薄膜およびその MgO 接合界面[6]などにおいて、結晶磁気異方性の電界効果が調べられ、電界によって界面領域の電子状態を変化させ結晶磁気異方性を制御することが可能であることが立証されている。

電界アシスト磁化反転を磁気メモリ等への応用を考えた場合、標準的な電場によって効率的に磁気異方性を変化させるためには誘電率の大きな絶縁体と強磁性体との接合界面を形成すればよいという指針が得られている。一方スピン電界効果トランジスタ (spinFET)[7]やスピン MOSFET[8]等トランジスタへの応用を考えた場合、強磁性体/半導体界面での電界による結晶磁気異方性制御が重要となる。しかしながら半導体は絶縁体と比較して誘電率が小さいため、理論研究の立場から強磁性体/半導体接合系の結晶磁気異方性の電界効果を高める新たな物理的要因を解明し、磁気異方性の効率的な電場制御へ向けた実験指針を示すことが必要不可欠である。

応募者はこれまで、主としてスピントロニクス材料 (ハーフメタル・垂直磁気材料) と絶縁体・半導体界面における電子状態・磁気構造・電気伝導等の第一原理計算に関する研究を行ってきた。これらの研究において、ヘテロ接合界面での結合状態・電荷移動・磁気構造の理解が系の諸物性(スピン偏極率や電気伝導度、磁化特性など)の制御において必要不可欠であることを示した。また得られた研究成果を更に発展させるため、電子スピンドバイスにおいて重要な物理因子となる結晶磁気異方性や電界効果を取り入れることの必要性を認識した。以上の点を踏まえ、本研究課題の着想に至った。

2. 研究の目的

近年、電子スピンドバイスにおける高速でかつ低消費電力な磁化反転技術として電界アシスト磁化反転が注目を集めている。本研究では高効率な電界アシスト磁化反転が可能な高スピン偏極電流注入源の理論設計を目的として、強磁性体/半導体接合界面領域における有限電場での電子状態計算を行う。電場を印加した状態での接合界面における結晶磁気異方性、弾道的スピン依存電気伝導度及び磁化ダンピング定数の第一原理計算を行い、電場印加がスピン軌道相互作用を通じて接合界面領域の電子状態・磁気構造・電気伝導に及ぼす影響について解明する。得られた成果は高性能なスピン系電界効果トランジスタの実現に向けた足がかりとなることが期待できる。

3. 研究の方法

本研究は、経験的パラメータを含まない第一原理計算によって強磁性体/半導体界面における電子状態・磁気構造・電気伝導の解析を行い、半導体接合系における結晶磁気異方性の電界効果を解明する。強磁性体には 3d 遷移金属薄膜(Fe,Co,Ni)、垂直磁気材料 (L1₀型合金、人工多層膜) 及び高スピン偏極材料 (ホイスラー合金) を取り上げ、特に化合物半導体 GaAs また IV 族半導体 Si との接合について解析を行う。電子状態の計算はスピン軌道相互作用を含むノンコリニアスピン系での第一原理計算[9]によって行う。電界印加は有効遮断媒質(ESM)法[10]、弾道的電気伝導計算法にはランダウアー公式をベースとした散乱方程式法[11]、磁気緩和定数の計算には磁場に対する磁化の線形応答理論に基づいたトルク補正モデル[12]をそれぞれ用いる。また、局所密度近似による半導体のバンドギャップ過小評価を改善するため自己相互作用補正[13]を取り入れる。

4. 研究成果

本研究では、Fe/MgO(001) 界面における垂直磁気異方性の起源を理論的にあきらかにするため、Fe/MgO界面構造と結晶磁気異方性の相関を第一原理計算により解析した。まず、界面のFeが酸素の直上にくる0-top構造とMgの直上にくるMg-top構造で結晶磁気異方性エネルギーを比較した。その結果、0-top構造では垂直磁気異方性が得られたのに対し、Mg-top構造では面内磁化が安定となった。0-topの界面ではFeのdz₂軌道と酸素のpz軌道の結合により、面内に磁化を向かせるFe(dz₂)軌道の電子数が減少して垂直磁気異方性が発現したと考えられる。一方、Mg-topの場合は、Fe(dz₂)軌道とMg(pz)軌道の結合が弱いいため、面内磁気異方性を示したと考えられる。また、これらの界面結合状態の磁気異方性への影響は、

MgOとの格子ミスマッチによるFeの正方晶歪みの効果よりも大きいことが分かった。エネルギー的には0-top構造の方がMg-top構造のより安定であるため、実験的に大きな垂直磁気異方性を得るには0-top構造を有する急峻な清浄界面をいかに形成するかが重要であるといえる。また、垂直直磁化型の半導体への高スピン偏極電流注入源の理論設計を目的として、Fe/GaAs(001)界面における結晶磁気異方性の第一原理計算を行った。ここでは磁気異方性エネルギー(MAE)が正の場合に磁化容易軸は面直方向になっている。面内格子定数はFeの2.833[Å]とした。まず形成エネルギーの計算より、熱的に安定な界面はAs終端であることが分かった。また多層膜構造のFe(13層)/GaAs(13層)のMAEは、1界面当たりAs終端界面で0.898 [mJ/m²]、Ga終端界面で0.469[mJ/m²]となり、どちらも垂直磁気異方性が得られた。これらの値はFe(001)表面のMAEの値0.851[mJ/m²]と同程度となっている。面直磁化の軌道磁気モーメントと面内磁化の軌道磁気モーメントの差は、界面第1層のFeのみ大きいことからFe/GaAs(001)界面の垂直磁気異方性は界面に起因すると考えられる。状態密度の解析から、特に界面Feのdx²-y²軌道とdxy軌道が垂直磁化に大きく寄与している。しかしながら、Fe13層の磁化の反磁界エネルギーは約2[mJ/m²]とMAEよりも大きいため、実際に垂直磁化膜を得るためにはFe層を1nm以下まで薄くする必要がある。以上の結果は、今後Fe/GaAs系で垂直磁化型のスピン注入素子を実現するうえで大きな指針となることが期待される。

5. 主な発表論文等

(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3件)

1. Y. Miura, K. Abe, and M. Shirai, Physical Review B, 84 巻, 134432 頁, 2011 年、査読有
2. Y. Miura, K. Futatsukawa, S. Nakajima, K. Abe, and M. Shirai, Physical Review B, 83 巻, 214411 頁, 2011 年、査読有
3. M. Nobori, T. Nakano, J. Hasegawa, G. Oomi, Y. Sakuraba and K. Takanashi, Y. Miura, Y. Ohdaira and Y. Ando, Physical Review B, 83 巻, 104410 頁, 2011 年、査読有

[学会発表] (計15件)

1. 森 大樹, 三浦 良雄, 阿部 和多加, 白井 正文, 2011 年春季第 58 回応用物理学関係連合講演会、平成 23 年 3 月 26 日、神奈川工科大学

2. Y. Miura, 5th International Workshop on Spin Currents, 2011 年 7 月 27 日、仙台

3. E. Nagata, Y. Miura, K. Abe, and M. Shirai, 5th International Workshop on Spin Currents, 2011 年 7 月 27 日、仙台

4. Y. Kuwahara, S. Ozaki, Y. Miura, K. Abe, and M. Shirai, 5th International Workshop on Spin Currents, 2011 年 7 月 27 日、仙台

5. S. Ozaki, Y. Miura, K. Abe, and M. Shirai, 56th Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials, 2011 年 11 月 1 日、Scottsdale (USA)

6. Y. Miura, K. Abe, and M. Shirai., 2nd CSIS International Symposium on Spintronics-based VLSIs and 8th RIEC International Workshop on Spintronics, 2012 年 2 月 2 日、仙台

7. M. Tsujikawa, Y. Miura, and M. Shirai., 2nd CSIS International Symposium on Spintronics-based VLSIs and 8th RIEC International Workshop on Spintronics, 2012 年 2 月 2 日、仙台

8. D. Mori, M. Tsujikawa, Y. Miura, K. Abe, and M. Shirai., 2nd CSIS International Symposium on Spintronics-based VLSIs and 8th RIEC International Workshop on Spintronics, 2012 年 2 月 2 日、仙台、山形

9. 森 大樹, 辻川雅人, 三浦 良雄, 阿部 和多加, 白井 正文, 2011 年秋季 第 72 回 応用物理学学会学術講演会、2011 年 8 月 30 日、山形

10. 三浦良雄, 辻川雅人, 阿部 和多加, 白井 正文日本物理学会 2011 年秋季大会、2011 年 9 月 22 日、富山

11. 三浦良雄, L1₀-FeNi および FeNi 多層膜の結晶磁気異方性の第一原理計算、日本物理学会 2011 年秋季大会、2011 年 9 月 22 日、富山

12. 尾崎 翔, 辻川雅人, 三浦 良雄, 阿部 和多加, 白井 正文, 2012 年春季 第 59 回 応用物理学関係連合講演会、2012 年 3 月 16 日、東京

13. 森 大樹, 辻川雅人, 三浦 良雄, 阿部 和多加, 白井 正文, 2012 年春季 第 59 回 応

用物理学関係連合講演会、2012年3月17日、東京

14. 松澤雄一郎, 三浦 良雄, 阿部 和多加, 白井 正文、2012年春季第59回応用物理学関係連合講演会、2012年3月17日、東京

15. 三浦良雄, 辻川雅人, 阿部 和多加, 白井 正文、Fe/GaAs界面の結晶磁気異方に関する理論研究、日本物理学会 2012年年次大会、2012年3月24日、西宮
[図書] (計0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計0件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況 (計0件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

[その他]

ホームページ等
該当なし

6. 研究組織

(1) 研究代表者

三浦 良雄 (MIURA YOSHIO)

東北大学・電気通信研究所・助教

研究者番号：10361198