

研究種目： 特定領域研究  
研究期間： 2007～2010  
課題番号： 19048002  
研究課題名（和文） 高効率スピン源の理論設計

研究課題名（英文） Theoretical Design of Efficient Spin Sources

研究代表者

白井 正文 (SHIRAI MASAFUMI)  
東北大学・電気通信研究所・教授  
研究者番号：70221306

研究分野：物理学

科研費の分科・細目：物理学・物性II

キーワード： スピンエレクトロニクス、スピン流、計算物理、ハーフメタル、垂直磁気材料

1. 研究計画の概要

スピン流を利用した次世代エレクトロニクス素子を実現するためには、非磁性半導体もしくは非磁性金属にスピン偏極した電子を高効率に注入することが不可欠である。本研究課題は、電子状態の第一原理計算に基づいて高効率なスピン源を理論設計することを目的として、高スピン偏極強磁性体（ハーフメタル）を利用したヘテロ構造やスピントラップ機能を発現する量子ナノ構造におけるスピン依存電気伝導を第一原理計算する。ヘテロ接合界面や量子ナノ構造における原子配列と電子状態およびスピン依存電気伝導との関連を明らかにして、スピン源として有効な材料・構造を理論的に設計する。また、スピン軌道相互作用やスピン配列の熱ゆらぎがスピン源としての機能に及ぼす影響を理論的に検討すると共に、磁気異方性の電界制御を利用したスピン注入磁化反転の臨界電流密度の低減策を提案する。

2. 研究の進捗状況

(1) 高スピン偏極ホイスラー合金と MgO の接合界面の電子状態を第一原理計算し、CrAl 終端 Co<sub>2</sub>CrAl/MgO(100) 接合界面では高スピン偏極率が保持されることを見出した。界面における Cr 磁気モーメントの著しい増大が、その要因であることを解明した。

(2) 高スピン偏極ホイスラー合金と IV 族半導体の接合界面の電子状態を第一原理計算し、(110) 界面において高スピン偏極率が保持されることを見出した。(110) 界面には対称性の異なる IV 族原子位置が存在することが、その要因であることを解明した。

(3) 高スピン偏極ホイスラー合金 Co<sub>2</sub>MnSi

と非磁性金属を積層した三層構造の電子状態と電気伝導を第一原理計算した。その多数スピン電子の伝導特性には、ホイスラー合金と非磁性金属のフェルミ面形状の整合性が重要な役割を果たしていることを解明した。

(4) 高スピン偏極ホイスラー合金 Co<sub>2</sub>MnSi と MgO の接合界面における終端面構造を、X 線吸収磁気円二色性 (XMCD) 測定と第一原理計算により決定した。Co<sub>2</sub>MnSi 膜厚の減少に伴うスピン磁気モーメントの増大が、MnSi 終端界面の証拠であることを解明した。

(5) 垂直磁気異方性を示す FePt/MgO/FePt (001) 接合における電気伝導を第一原理計算し、3～4 原子層の Fe 原子層を挿入することにより、Fe/MgO/Fe (001) 接合と同程度の 1000% を超える巨大なトンネル磁気抵抗 (TMR) 比が得られることを理論的に検証した。

(6) 垂直磁気異方性を示す Pt/Fe/Pt (001) および MgO/Pt/Fe/Pt (001) 薄膜における磁気異方性の電界依存性を第一原理計算した。MgO を接合することにより、磁気異方性の電界依存性は、MgO の比誘電率に比例して増大することを理論的に初めて見出した。

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)

当初の主要な研究目的である高効率スピン源として有力な候補であるホイスラー合金と非磁性半導体もしくは絶縁酸化物の高スピン偏極接合界面の理論設計を達成することができたため。さらに、磁気異方性の電界効果を定量的に評価するための計算手法を確立することができたため。

#### 4. 今後の研究の推進方策

(1) 高スピン偏極ホイスラー合金と非磁性金属・半導体・酸化物とのヘテロ接合を利用した高効率スピン源を引き続き理論的に探索する。特に、スピン配列の熱ゆらぎがスピン源の性能に及ぼす影響を理論的に評価し、その抑止策を検討する。

(2) 強磁性二重トンネル接合および強磁性絶縁体（フェライト）のスピンフィルタ効果を利用した高効率スピン源を理論的に探索する。また、負のスピン偏極率を有する窒化鉄のスピン源としての有用性を理論的に検証する。

(3) 垂直磁気異方性を示す強磁性金属薄膜および強磁性金属／酸化物接合における磁気異方性の電界効果を第一原理計算する。その知見を基にしてスピン注入磁化反転の臨界電流密度の低減を可能とし、熱ゆらぎ耐性に優れたヘテロ接合を理論設計する。

#### 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15件）

1. T. Saito, T. Katayama, T. Ishikawa, M. Yamamoto, D. Asakura, T. Koide, Y. Miura, and M. Shirai, Interface structure of half-metallic Heusler alloy  $\text{Co}_2\text{MnSi}$  thin films facing an MgO tunnel barrier determined by x-ray magnetic circular dichroism, Physical Review B, Vol. 81, Article No. 144417, pp. 1-6, 2010, 査読有.

2. M. Tsujikawa and T. Oda, Finite electric field effects in the large perpendicular magnetic anisotropy surface Pt/Fe/Pt (001): A first-principles study, Physical Review Letters, Vol. 102, Article No. 247203, pp. 1-4, 2009, 査読有.

3. K. Miyamoto, A. Kimura, Y. Miura, M. Shirai, M. Ye, Y. Cui, K. Shimada, H. Namatame, M. Taniguchi, Y. Takeda, Y. Saitoh, E. Ikenaga, S. Ueda, K. Kobayashi, and T. Kanomata, Absence of temperature dependence of the valence-band spectrum of  $\text{Co}_2\text{MnSi}$ , Physical Review B, Vol. 79, Article No. 100405 (R), pp. 1-4, 2009, 査読有.

4. K. Abe, Y. Miura, Y. Shiozawa, and M. Shirai, Half-metallic interface between a Heusler alloy and Si, Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 21, Article No.

064244, pp. 1-5, 2009, 査読有.

5. Y. Miura, H. Uchida, Y. Oba, K. Abe, and M. Shirai, Half-metallic interface and coherent tunneling in  $\text{Co}_2\text{YZ}/\text{MgO}/\text{Co}_2\text{YZ}$  (YZ = MnSi, CrAl) magnetic tunnel junctions: A first-principles study, Physical Review B, Vol. 78, Article No. 064416, pp. 1-9, 2008, 査読有.

〔学会発表〕（計52件）

〔図書〕（計2件）