

平成21年 5月 8日現在

研究種目：基盤研究 (C)

研究期間：2007～2008

課題番号：19560006

研究課題名 (和文) 磁性積層膜の界面における磁気構造とスピン動力学に関する理論研究

研究課題名 (英文) Theoretical study on the magnetic structures at the interfaces of magnetic multi-layers and the spin dynamics

研究代表者 佐久間 昭正 (SAKUMA AKIMASA)

東北大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号：30361124

研究成果の概要：強磁性 (FM) / 非磁性 (NM) あるいは強磁性 (FM) / 反強磁性 (AF) 界面における電子状態と磁気構造を明らかにする目的で、磁気モーメントのノンコリニア配列とスピン軌道相互作用の両者を効果を考慮した電子状態計算プログラムを作成した。本手法により、任意の磁気構造の予測とその安定性、および結晶磁気異方性エネルギーなどの評価が可能となった。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	2,600,000	780,000	3,380,000
2008年度	1,000,000	300,000	1,300,000
年度			
年度			
年度			
総計	3,600,000	1,080,000	4,680,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎 応用物性・結晶工学

キーワード：磁性体、スピントロニクス、磁性薄膜、GMT,TMR

1. 研究開始当初の背景

1988年の巨大磁気抵抗 (GMR) 効果の発見に始まった磁性人工格子の研究は、ここに来てスピントロニクスの旗印のもと、ナノテクノロジーの先導役として IT 技術全体の重要な担い手となっている。特に、CPP(current perpendicular to plane)-GMR 素子やトンネル磁気抵抗 (TMR) 素子および磁気ランダムアクセスメモリ (MRAM) は次世代磁気デバイスとして精力的に研究が行われている。

これらの磁性積層膜のデバイス (伝導) 特性は全て強磁性層 (FM) / 非磁性層 (NM) あるいは強磁性層 (FM) / 反強磁性層 (AF) の界面における電子状態と磁気構造によつ

て支配されているといっても過言ではない。また、上述した次世代磁気デバイスにおいては電流は膜の積層方向に流れることとなるが、この場合、電荷の流れ (即ち電流) のみならずスピンの流れ (スピン流と呼ばれる) も重要な情報を持つ。例えば、スピン流のスピン分極方向が磁性層界面で空間的に変化するような場合、角運動量を保存するように磁性層の磁化に (スピン流のスピン分極方向の変化と逆向きの) トルクが働くこととなる。これがスピン注入磁化反転と呼ばれる現象であり、これを磁性層の磁化反転に用いようという目的で現在世界中で活発な研究が行われている。当然、このスピン流は上述した

磁性層界面の磁気構造とその安定性に強く影響されるため、磁気構造とスピン流に関する十分な理解と評価は磁気デバイスの開発において不可欠となる。

しかしながら、これらの実験的な評価は決して容易ではなく、現時点でも全くといっていいほど明らかになっていない。一方、理論的には、大規模系のノンコリニアな磁気構造（磁気モーメント間の相対角度が0や π と異なる磁気配列）の扱いや、スピン流の微視的立場からの記述などに関し、ソフト（計算手法）とハード（計算機の環境）の両面での難しさがあり、殆ど未着手の状況にある。

2. 研究の目的

本研究では、1) ノンコリニア磁気配列を考慮した第一原理計算（局所密度汎関数近似に基づくバンド計算）の手法を用いて、GMRやTMR素子の電子状態を定量的に評価し、これら素子のFM/NMとFM/AF界面における磁気構造とその安定性を明らかにする、2) 磁性積層構造の有限バイアスにおける電流とスピン流に関する微視的立場からの理論を構築し、スピン流の挙動とスピン注入磁化反転の機構を明らかにする、3) 実際の磁性積層膜における電流とスピン流を第一原理的計算手法で評価する計算プログラム、およびスピン流を考慮したマイクロ磁気シミュレータを開発し、物質の個別性を反映したデバイス特性の定量評価とその予測・設計を行う、ことを目的とする。

3. 研究の方法

反強磁性層や強磁性層は、多くの場合不規則（Mn-Ir系合金やFe-Ni合金など）であるため、これらに対してはコヒーレントポテンシャル近似（CPA）を適用して対応する予定である。スピン軌道相互作用を含む系におけるCPAの扱いについては更に何らかの近似理論が必要であり、平成19年度下期は主にこの理論手法と計算プログラムの開発を行う。このCPAは、強磁性/反強磁性および強磁性/非磁性界面における原子配列の乱れに対しても適用でき、界面の原子配列の乱れがGMRやTMR素子における電子状態や磁気構造およびスピン分極率に与える影響について調べることができる。スピン分極率PはCPP-GMR（電流を積層方向に流すGMR）素子やTMR素子における抵抗変化率（MR比）を支配するとされる重要なパラメータであり、また、コヒーレントポテンシャルの虚数部は電気伝導に関与する電子の寿命（の逆数）に対応する。従って、これらの評価から材料の個別性を反映したデバイス（伝導）特性の微視的理解と予測が可能となる。

4. 研究成果

1、強磁性（FM）/非磁性（NM）あるいは強磁性（FM）/反強磁性（AF）界面における電子状態と磁気構造を明らかにする目的で、磁気モーメントのノンコリニア配列とスピン軌道相互作用の両者を効果を考慮した電子状態計算プログラムを作成した。本手法により、任意の磁気構造の予測とその安定性、および結晶磁気異方性エネルギーなどの評価が可能となった。具体的な計算例を以下に示す。（1）永久磁石材として知られるNd₂Fe₁₄Bとbcc-Feを(100)面で接合させた場合、両層の磁化が反平行配列する可能性があることを示した。また、このとき、界面近傍のNdイオンの結晶磁気異方性定数は負となり磁化の容易方向がNdFeBバルクと異なる結果となった。本研究は交換スプリング磁石の磁気特性を微視的立場から評価した初めての例である。（2）磁気記録材料媒体として期待されるL1₀型FePt薄膜の電子状態と磁気構造およびその安定性（交換相互作用強度）を評価した。FePtの結晶磁気異方性エネルギーはFeとPtがそれぞれ一層の極薄膜においてもバルクと同等の値（ $\sim 10^7$ erg/cc）を有することを示した。また、ギルバート緩和定数を第一原理的に評価したところ、Ptの大きなスピン軌道相互作用定数に起因して、FeやCoより1桁大きい値を持つことを示した。

2、上記の磁性体の電子状態の計算手法（第一原理計算）のもとで、電気伝導度を計算するプログラムを作成し、スピントロニクス分野での応用が期待されている遷移金属合金Fe_{1-x}Ni_x、Fe_{1-x}Co_xおよびホイスラー合金Co₂MnAl_{1-x}Si_xを取り上げ、電気伝導度の評価を行った。得られた電気抵抗率は低温における実験結果と定量的によく一致しており、スピン別の電気伝導度から得られるスピン分極率はFe₂₀Ni₈₀、Fe₅₀Co₅₀において80%程度であることがわかった。

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16件）

- ① A. Sakuma, Y. Toga, and H. Tsuchiura, Theoretical study on the stability of magnetic structures of Heusler alloys, Co₂MnAl and Co₂MnSi, Journal of Applied Physics, 105, (2009), 07C910-1-07C910-3. 査読有
- ② Y. Kota, T. Takahashi, H. Tsuchiura and A. Sakuma, Spin-polarized electronic structures and transport properties of Fe-Co alloys, Journal of Applied Physics, 105, (2009),

- 07B716-1-07B716-3. 査読有
- ③ H. Moriya, H. Tsuchiura, and A. Sakuma, First-Principles Calculation of the Crystal Field Parameter near the Surfaces and Interfaces of Nd₂Fe₁₄B, *Journal of Applied Physics*, 105, (2009), 07A740-1-07A740-3. 査読有
- ④ Yohei Kota, Hiroki Tsuchiura, and Akimasa Sakuma, Ab-initio Study on the Magnetic Structures in the Ordered Mn₃Pt Alloy, *IEEE TRANSACTIONS ON MAGNETICS*, 44 (11), (2008), 3131-3133. 査読有
- ⑤ N. D. Telling, P. S. Keatley, G. van der Laan, R. J. Hicken, E. Arenholz, Y. Sakuraba, M. Oogane, Y. Ando, K. Takanashi, A. Sakuma and T. Miyazaki, Evidence of local moment formation in Co-based Heusler alloys. [*Physical Review B*, 78, (2008), 184438-1-184438-7. 査読有
- ⑥ C. Mitsumata, A. Sakuma, K. Fukamichi, M. Tsunoda, and M. Takahashi, Critical Thickness of Antiferromagnetic Layer in Exchange Biasing Bilayer System, *Journal of the Physical Society of Japan*, 77 (4), (2008), 044602-1-044602-6. 査読有
- ⑦ H. Tsuchiura, A. Sakuma and K. Takaki, Impurity-induced states in inhomogeneous superconductivity in high-T_c cuprates *Journal of Physics: Conference Series*, 108, (2008), 012035-1 - 012035-4. 査読有
- ⑧ T. Shimatsu, Y. Okazaki, H. Sato, H. Muraoka, H. Aoi, T. Sakurai, S. Okamoto, O. Kitakami, S. Tanii and A. Sakuma, Uniaxial magnetic anisotropy in Co and Co-Pt based perpendicular olms in relation to lattice deformation, *Journal of Applied Physics*, 103, (2008), 07F524-1-07F524-3. 査読有
- ⑨ R. Y. Umetsu, K. Kobayashi, A. Fujita, R. Kainuma, K. Ishida, K. Fukamichi, and A. Sakuma, Magnetic properties, phase stability, electronic structure, and half-metallicity of L21-type Co₂(V_{1-x}Mnx)Ga Heusler alloys, *Physical Review B*, 77, (2008), 104422-1-104422-8. 査読有
- ⑩ R. Y. Umetsu, K. Fukamichi and A. Sakuma, Electronic Structures and Magnetic Phase Stability of L10 and B2-Type MnRh Equiatomic Alloys, *Journal of the Physical Society of Japan*, 76 (10), (2007), 104712-1-104712-6. 査読有
- ⑪ S. Kokado, K. Ueda, K. Harigaya, and A. Sakuma, Theoretical study of a localized quantum spin reversal by the sequential injection of spins in a spin quantum dot, *Physical Review B*, 76, (2007), 54451-1-54451-11. 査読有
- ⑫ S. Kokado, K. Ueda, K. Harigaya, and A. Sakuma, Localized quantum spin reversal by spin injection in a spin quantum dot: A model calculation, *phys. stat. sol. (a)*, 204 (6), (2007), 1937-1943. 査読有
- ⑬ N. Yamada, A. Sakuma and H. Tsuchiura Decoherence processes of a quantum two-level system coupled to a fermionic environment, *Journal of Applied Physics*, 101, (2007), 09C110-1-09C110-3. 査読有
- ⑭ H. Tsuchiura, K. Takaki, S. Kashiwaya, A. Sakuma, Inhomogeneous electronic states due to out-of-plane disorder in the t-t'-J model, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 310, (2007), 514-516. 査読有
- ⑮ Y. Sakuraba, M. Hattori, M. Oogane, H. Kubota, Y. Ando, A. Sakuma and T. Miyazaki, Half-metallic band structure observed in Co₂MnSi-based magnetic tunnel junctions, *Journal of Physics D: Applied Physics*, 40, (2007), 1221-1227. 査読有
- ⑯ C. Mitsumata, A. Sakuma and K. Fukamichi, Exchange Bias of Antiferromagnetic/Ferromagnetic Bilayer with Cubic Anisotropy in Antiferromagnetic Layer, *Journal of Physical Society of Japan*, 76 (2), (2007), 024704-1-024704-7. 査読有

[学会発表] (計 14 件)

- ① 土浦宏紀, 梅裕太、守谷浩志、佐久間昭正, Nd₂Fe₁₄B磁石の界面における結晶場の第一原理的評価, 日本金属学会 2009 年春季大会, 2009 年 3 月 29 日, 東京
- ② 佐久間昭正, 小田洋平、土浦宏紀, 遷移金属合金の電気伝導度とスピン分極率の第一原理計算, 日本物理学会第 64 回年次大会, 2009 年 3 月 28 日, 東京.

- ③ 守谷浩志, 土浦宏紀, 佐久間昭正, Nd₂Fe₁₄Bにおける結晶場パラメータの第一原理的評価, 応用物理学会東北支部第63回学術講演会, 2008年12月5日, 仙台.
- ④ A. Sakuma, N. Yamada, and H. Tsuchiura, Microscopic description of the Gilbert damping coefficient based on the s-d model, MMM 53rd Magnetism and Magnetic Materials Conference, 2008年11月13日, Austin, USA.
- ⑤ A. Sakuma, T. Takahashi, Y. Kota, and H. Tsuchiura, First-principles calculations for the electrical conductivities of transition metal alloys, MMM 53rd Magnetism and Magnetic Materials Conference, 2008年11月12日, Austin, USA.
- ⑥ Y. Kota, T. Takahashi, H. Tsuchiura, and A. Sakuma, Spin-polarized electronic structures and transport properties of Fe-Co alloys: ab initio study, MMM 53rd Magnetism and Magnetic Materials Conference, 2008年11月12日, Austin, USA.
- ⑦ T. Kubota, J. Hamrle, Y. Sakuraba, O. Gaier, M. Oogane, A. Sakuma, B. Hillebrands, K. Takanashi, and Y. Ando, Brillouin Light Scattering Investigations on Co₂MnAl_xSi_{1-x} Heusler Thin Films, MMM 53rd Magnetism and Magnetic Materials Conference, 2008年11月12日, Austin, USA.
- ⑧ A. Sakuma, Y. Toga, and H. Tsuchiura, Theoretical study on the stability of magnetic structures of Heusler alloys, Co₂MnAl and Co₂MnSi, MMM 53rd Magnetism and Magnetic Materials Conference, 2008年11月12日, Austin, USA.
- ⑨ H. Moriya, H. Tsuchiura and A. Sakuma, First-Principles Calculation of the Crystal Field Parameter near the Surfaces and Interfaces of Nd₂Fe₁₄B, MMM 53rd Magnetism and Magnetic Materials Conference, 2008年11月12日, Austin, USA.
- ⑩ 榎裕太, 土浦宏紀, 佐久間昭正, Nd₂Fe₁₄B/ α -Fe交換スプリング磁石の界面近傍における磁気特性の第一原理計算, 第32回日本磁気学会学術講演会, 2008年9月15日, 仙台
- ⑪ 小田洋平, 土浦宏紀, 佐久間昭正,

Mn₃Pt/Co界面の磁気構造に関する第一原理計算, 第32回日本磁気学会学術講演会, 2008年9月15日, 仙台.

- ⑫ 佐久間昭正, 高橋智洋, 土浦宏紀, Fe_{1-x}Ni_x合金の電気伝導度の第一原理計算, 第32回日本磁気学会学術講演会, 2008年9月14日, 仙台
- ⑬ Y. Kota, H. Tsuchiura and A. Sakuma, Ab initio study on the magnetic structures in the ordered Mn₃Pt alloy, INTERMAG 2008, 2008年5月8日, Madrid, Spain.
- ⑭ K. Hasu, H. Tsuchiura, and A. Sakuma, Enhancement of Gilbert damping due to non-local spin-spin correlation via spin currents, 52nd Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials, 2007. 11. 7 Tampa Marriott Hotel, USA.

[図書] (計0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計0件)

○取得状況 (計0件)

[その他]

6. 研究組織

(1) 研究代表者 佐久間 昭正

(SAKUMA AKIMASA)

東北大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号: 30361124

(2) 研究分担者 土浦 宏紀

(TSUCHIURA HIROKI)

東北大学・大学院工学研究科・助教

研究者番号: 30374961

(3) 連携研究者

なし