

5d 遷移金属単原子層による Fe および Co 表面における 磁気異方性の電界変調増強

辻川 雅人^{1,2}, 白井 正文^{1,2}
(東北大通研¹, 東北大 CSRN²)

Enhancement of electric-field modulation of the magnetic anisotropy at Fe and Co surfaces covered by
5d transition-metal monolayer

Masahito Tsujikawa^{1,2}, Masafumi Shirai^{1,2}
(¹RIEC, Tohoku Univ., ²CSRN, Tohoku Univ.)

はじめに

巨大な磁気異方性エネルギー(MAE)の電界変調を示す材料の開発は、超低消費電力かつ高速な電圧駆動型のスピントロニクスデバイスを実現する上で重要な課題である。直径 10 nm サイズの素子にて電圧磁化反転を実現するには 1000 fJ/Vm を超える MAE の電界変調率が必要とされる。最近、MgO/Fe/Cr 膜にて 300 fJ/Vm [1] と大きな値も報告されているが、あと数倍大きな効果が必要である。本研究では、巨大な MAE の電界効果を得るために 5d 遷移金属の巨大なスピン軌道相互作用を利用することを考えた。Fe または Co と 5d 遷移金属からなり、巨大な MAE の電界変調率を示す積層構造の理論設計を第一原理計算により行った。

方 法

bcc-Fe(001)および hcp-Co(111)表面を 5d 遷移金属単原子層で覆った Cu/Fe(Co)/TM 膜 (TM = Hf, Ta, W, Os, Ir, Pt, Au) について MAE の電界効果の大きさを系統的に調べた。計算には平面波基底と Projector Augmented Wave 法を用いた第一原理計算コード vasp を用いた[2]。MAE の見積りは force theorem を用いて行った。面内格子定数はそれぞれ bcc Fe (2.86 Å)および hcp Co (2.51 Å)のバルク値に合わせている。MAE の電界変調率 γ の符号は正の場合に表面の電子蓄積に対して垂直磁気異方性エネルギーが低下するよう定義した。

結 果

各薄膜の MAE と γ の大きさを Fig. 1 に示す。Fe 表面上では Ta, Os, Ir が、Co 表面上では Hf, W, Ir が 100 fJ/Vm を超える大きな電界効果を示している。これらの膜は MgO の比誘電率を考慮すると MgO との接合構造にて 1000 fJ/Vm を超える電界効果を示すことが期待できる。最も顕著な電界効果が得られた Co/Hf 膜では、表面原子当たり僅か 0.01 個の電子数変化に対して 0.25 meV の MAE 変化が生じる。また、Co/Ir 膜では MAE が 4.5 mJ/m²、 γ が 136 fJ/Vm と垂直磁気異方性エネルギーと電界効果が共に大きな値を示す結果が得られた。講演では大きな MAE の電界変調が得られた起源についても議論する。

謝 辞

本研究は、内閣府 総合科学技術・イノベーション会議により制度設計された革新的研究開発推進プログラム (ImPACT) により、科学技術振興機構を通して委託された。

参考文献

- 1) T. Nozaki *et al.*, Phys. Rev. Appl. **5** (2016) 044006.
- 2) G. Kresse and J. Furthmüller, Vienna *Ab-initio* Simulation Package, University of Wien, 2001.

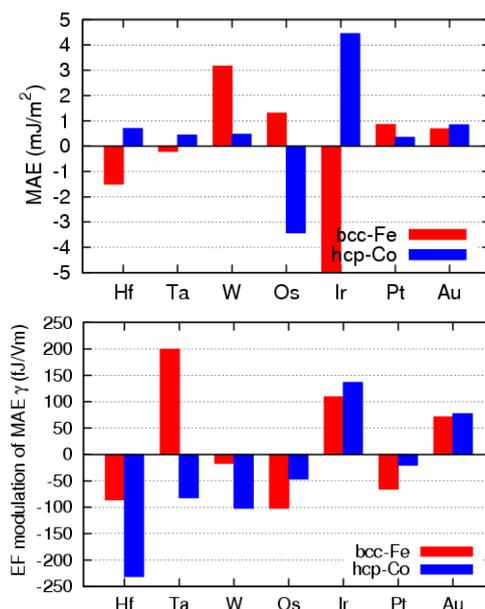


Fig. 1 Magnetic anisotropy energy (MAE; top panel) and the electric-field variation of MAE (bottom panel) in Cu/Fe(Co)/5d transition-metal films.