

磁気トンネル接合 Fe/MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe における磁気抵抗効果の印加電圧依存性  
: 第一原理計算によるアプローチ

増田啓介, 三浦良雄  
(物材機構)

Bias voltage dependence of magnetoresistance ratio in Fe/MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe junction  
: First-principles theoretical approach  
Keisuke Masuda and Yoshio Miura  
(NIMS)

2004年の巨大磁気抵抗比の報告 [1,2] 以来, MgO トンネルバリア層を用いた磁気トンネル接合 (MTJ) について数多くの研究がなされてきた. その一方, MgO と格子不整合が大きい強磁性体について, MgO 以外のトンネルバリア層を用いて同様の高い磁気抵抗比 (MR 比) を得ようとする試みが精力的に進められている. スピネルバリア MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>を用いた MTJ, Fe/MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe に関する研究はそのような試みの 1 つであり, これまでに室温で 300% 程度の高い MR 比が得られている [3]. この MTJ には, 界面での格子不整合が非常に小さい (0.1% 程度) ことや, MR 比が良好な電圧依存性を持つことなど様々なメリットが存在する. Fe/MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe と Fe/MgO/Fe の相違点を詳細に比較検討することは MTJ の磁気伝導特性をより深く理解する上で重要である.

本研究では, 第一原理計算を用い Fe/MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe の MR 比の印加電圧依存性について解析し, Fe/MgO/Fe の場合との差について考察を行った. 我々は構造を最適化した Fe/MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe と Fe/MgO/Fe の超格子に対し密度汎関数法と非平衡 Green 関数法を適用することで, それぞれの系の MR 比の電圧依存性を計算した. まず Fe/MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe, Fe/MgO/Fe の場合に共通した結果として, MR 比が印加電圧とともに単調に減少しある臨界電圧  $V_c$  で 0 となる振る舞いが得られた. さらにこの臨界電圧  $V_c$  について, Fe/MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe の  $V_c$  が Fe/MgO/Fe のそれに比べ顕著に大きいことがわかった. このような臨界電圧  $V_c$  の差の起源を明らかにするため, 我々は両 MTJ について透過率のエネルギー依存性及び電極のバンド構造の詳細な解析を行った. スピネル構造を持つ MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> バリアの面内格子定数は bcc Fe の面内格子定数の 2 倍であるため, Fe/MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe においては電極のバンド構造が単純な bcc Fe のバンド構造を面内で折りたたんだ構造を持つ (バンド折りたたみ効果) [4,5]. 我々の解析の結果, このようなバンド折りたたみ効果によって生み出される Fe の付加的な多数スピンバンドが Fe/MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/Fe における大きな臨界電圧  $V_c$  の起源であることがわかった [6].

本研究の一部は TDK 株式会社, 科研費基盤 S (16H06332), 基盤 B (16H03852), 革新的研究開発推進プログラム (ImPACT) の援助を受け行われたものである.

- 1) S. S. P. Parkin *et al.*, Nat. Mater. **3**, 862 (2004).
- 2) S. Yuasa *et al.*, Nat. Mater. **3**, 868 (2004).
- 3) M. Belmoubarik *et al.*, Appl. Phys. Lett. **108**, 132404 (2016).
- 4) Y. Miura *et al.*, Phys. Rev. B **86**, 024426 (2012).
- 5) H. Sukegawa *et al.*, Phys. Rev. B **86**, 184401 (2012).
- 6) K. Masuda and Y. Miura, Phys. Rev. B **96**, 054428 (2017).