

Fe/MgAl₂O₄ 界面の垂直磁気異方性(PMA)と W 挿入による PMA 増大に関する理論研究

増田啓介, 三浦良雄
(物材機構)

Theoretical study on perpendicular magnetic anisotropy at Fe/MgAl₂O₄ interface
Keisuke Masuda and Yoshio Miura
(NIMS)

磁気トンネル接合 (MTJ) を磁気ランダムアクセスメモリ (MRAM) に応用する際, 高い磁気抵抗比 (MR 比) に加え, 微細化に伴う熱安定性の確保が重要となるため, 薄膜の膜面垂直方向に磁化する垂直磁気材料が必要不可欠となっている. これまでにバルクとして大きな結晶垂直磁気異方性を有する強磁性体 ($D0_{22}$ Mn₃Ga, $D0_{22}$ Mn₃Ge, $L1_0$ MnGa, $L1_0$ FePt 等) が MTJ の電極材料として検討されてきたが, 現時点では CoFeB や bcc Fe を超える高い MR 比が得られていない. 一方, CoFeB/MgO [1] や Fe/MgO [2] では, 界面状態の寄与により 1.5~2.0 mJ/m² 程度の比較的大きな界面垂直磁気異方性が得られている. このような経緯から強磁性体と酸化物の界面における界面垂直磁気異方性が注目を集めてきた.

スピネルバリア MgAl₂O₄ を用いた Fe/MgAl₂O₄/Fe MTJ [3] は界面での格子整合性が大変良いという大きな利点を有し, 既に室温で 300% 程度の大きな MR 比 [4] も得られている. Fe/MgO の場合と同様, Fe/MgAl₂O₄ の界面磁気異方性について複数の実験が行われており [5,6], Fe/MgO よりも若干小さいものの垂直磁気異方性が得られることが報告されている. Fe/MgO の垂直磁気異方性については複数の理論研究が行われ, その理論的な理解が進んでいる一方, Fe/MgAl₂O₄ に対しては本研究以前に理論研究が行われておらず, 垂直磁気異方性の起源, および Fe/MgO との差についての理解が不十分であると考えられる.

本研究では, 第一原理計算を用い Fe/MgAl₂O₄ の界面磁気異方性について理論的な解析を行い, Fe/MgO の結果と比較検討をした. 我々は構造を最適化した Fe/MgAl₂O₄ および Fe/MgO の超格子に対して密度汎関数法と force theorem を適用することで界面磁気異方性係数 K_i を算出した. Fe/MgO については面内格子定数 a に比較的大きな不整合があるために, Fe に合わせた値 ($a=a_{\text{Fe}}$) と MgO に合わせた値 ($a=a_{\text{MgO}}/\sqrt{2}$) の 2 通りで計算を行った. これらの計算の結果, Fe/MgAl₂O₄ の K_i ($K_i \approx 1.2$ mJ/m²) は 2 種の Fe/MgO の K_i ($K_i \approx 1.4 \sim 1.7$ mJ/m²) よりも若干小さいことがわかった. この結果は先述の実験結果と符合するものである. 磁気異方性エネルギーの 2 次摂動解析, および界面の局所状態密度 (LDOS) 解析を行った結果, このような Fe/MgAl₂O₄ の K_i は良く知られた Bruno 則で説明可能であることがわかった [7]. また Fe/MgO に比べ小さな K_i が得られた理由については, Fermi 準位付近でのスピン反転散乱の寄与が小さいことが原因であると考えられる. 我々はさらに Fe/MgAl₂O₄ の垂直磁気異方性を向上させる方法として界面への W 原子層挿入を検討した. 計算の結果, 3~5 層の W 挿入によって K_i の値が 2~3 倍に増大することを見出した [7].

本研究の一部は科研費基盤 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. Ikeda *et al.*, Nat. Mater. **9**, 721 (2010).
- 2) J. W. Koo *et al.*, Appl. Phys. Lett. **103**, 192401 (2013).
- 3) H. Sukegawa *et al.*, Appl. Phys. Lett. **96**, 212505 (2010).
- 4) M. Belmoubarik *et al.*, Appl. Phys. Lett. **108**, 132404 (2016).
- 5) J. Koo, H. Sukegawa, and S. Mitani, Phys. Status Solidi RRL **8**, 841 (2014).
- 6) Q. Xiang *et al.*, Appl. Phys. Express **11**, 063008 (2018).
- 7) K. Masuda and Y. Miura, arXiv: 1803.10428.