

Fe/CuIn_{1-x}Ga_xSe₂における界面垂直磁気異方性の理論予測

増田啓介, 葛西伸哉, 三浦良雄
(物材機構)

Theoretical prediction of perpendicular magnetic anisotropy at Fe/CuIn_{1-x}Ga_xSe₂ interface

Keisuke Masuda, Shinya Kasai, and Yoshio Miura

(NIMS)

磁気トンネル接合 (MTJ) を超高密度ハードディスクドライブの読み取りヘッドや磁気ランダムアクセスメモリ (MRAM) へ応用する際, 高い磁気抵抗比 (MR 比) に加え, $1 \Omega\mu\text{m}^2$ 程度の低い面積抵抗 (RA) が必要である. このような目的のもと, 近年葛西ら [1] は中間バリア層に化合物半導体 CuIn_{1-x}Ga_xSe₂ (CIGS) を使用した MTJ を開発し, 高い MR 比と低い RA が同時に得られることを示した. また, この CIGS MTJ における高い MR 比は, Δ_1 波動関数のスピン依存トンネル伝導によるものであることが明らかにされた [2,3].

特に CIGS MTJ の MRAM への応用を考える際, さらなる鍵を握るのは強磁性電極の磁気異方性である. MTJ デバイスの微細化に伴う熱安定性の確保の観点から, 強磁性電極は垂直磁気異方性を持っていることが望ましい. また特に, スピン注入磁化反転 MRAM (STT-MRAM) に関しては磁化反転の臨界電流を低減させるため [4], 電圧トルク MRAM (Voltage-torque MRAM) に関しては書き込みエラー率を下げる [5] 目的で, 大きな垂直磁気異方性を有する材料が必要とされている. しかしながら CIGS MTJ の垂直磁気異方性に関する実験的, 理論的検討は本研究以前には行われてこなかった.

本研究では第一原理計算を用い, Fe と様々な半導体バリアの界面での磁気異方性について解析を行った. 半導体バリアとしては, 上記 CIGS をはじめ, その他のカルコパイライト型半導体, また閃亜鉛構造を持つ ZnSe, GaAs などの半導体も考慮に入れた. 各系について密度汎関数法と force theorem を用いて界面磁気異方性係数 K_i を算出することで界面磁気異方性を評価した. 計算の結果, 今回調べたほぼ全ての系で正の K_i が得られ, これらの系が界面垂直磁気異方性を持つことがわかった. また K_i の値と界面軌道磁気モーメントの異方性を比較した結果, これらの垂直磁気異方性が良く知られた Bruno 則で説明可能であることがわかった [6]. 特に Fe/CuInSe₂(001) においては今回考慮した系の中で最も大きな K_i ($K_i=2.3 \text{ mJ/m}^2$) が得られた. この値は, 同条件で計算した Fe/MgO での値 ($K_i=1.4 \text{ mJ/m}^2$) の約 1.6 倍に相当する. このような Fe/CuInSe₂ の大きな垂直磁気異方性の起源を明らかにするため, 我々は界面付近での局所状態密度 (LDOS) の解析を行った. その結果, この系の界面原子配置が垂直磁気異方性の鍵を握っていることが明らかになった. Fe/CuInSe₂(001) においては Fe の斜め上方に Se が位置する界面構造がエネルギー的に安定となる. この構造は Fe の真上に O が位置する Fe/MgO(001) の界面構造とは異なるものであり, これにより Se の p_z 軌道と Fe の d 軌道の特徴的な混成が生じ大きな垂直磁気異方性が得られたと考えられる [6].

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. Kasai *et al.*, Appl. Phys. Lett. **109**, 032409 (2016).
- 2) K. Masuda and Y. Miura, Jpn. J. Appl. Phys. **56**, 020306 (2017).
- 3) K. Masuda and Y. Miura, J. Magn. Soc. Jpn. **42**, 37 (2018).
- 4) B. Dieny, R. B. Goldfarb, and K. J. Lee, *Introduction to Magnetic Random-access Memory* (Wiley, Hoboken, NJ, 2016).
- 5) Y. Shiota *et al.*, Appl. Phys. Express **9**, 013001 (2016).
- 6) K. Masuda, S. Kasai, Y. Miura, and K. Hono, Phys. Rev. B **96**, 174401 (2017).