

ハーフメタルホイスラー合金多層膜の電子状態に対する第一原理計算

福ヶ迫和輝、本多周太、伊藤博介
(関西大学)

First principles calculations for magnetic multilayers based on half-metallic Heusler alloys
K. Fukugasako, S. Honda, and H. Itoh
(Kansai Univ.)

はじめに

ハーフメタル材料はスピン分極率が 100%であるため、次世代 MRAM の MTJ 材料への応用が期待されている。一方、反強磁性体は内部で磁気モーメントを打ち消しあい外部に磁場を漏洩させないため、高密度に集積しても隣接 MTJ 間の相互作用を生じない。この 2 つの性質を併せ持つ”反強磁性ハーフメタル”を開発することで、これまでにない新しいスピン素子を作成できる。ハーフメタル材料の 1 つであるホイスラー合金(X_2YZ 構造)はバルクでは強磁性またはフェリ磁性である。そこで、2 種類のホイスラー合金を組み合わせた多層膜を作成し、反強磁性ハーフメタルを実現しようという試みが行われてきた(中尾昌夫, 2008)。

本研究では様々なホイスラー合金多層膜に対して電子状態と磁性を計算し、新たな反強磁性ハーフメタル材料を探索する。そして、計算結果から応用上有益となる材料選択の指針を提案する。

模型と計算方法

様々なホイスラー合金多層膜 X_2YZ [1ML]/ X'_2YZ [1ML] の (001) 積層(Fig. 1 参照)における電子状態密度、スピン分極率および磁気モーメントを、PAW と GGA を用いた第一原理計算で求める。

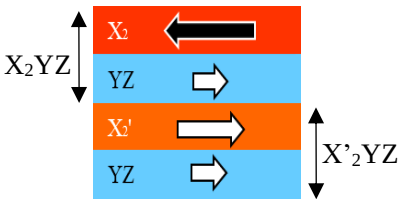


Fig. 1 Magnetic multilayer based on half-metallic Heusler alloys

計算結果

Co_2ScAs/Mn_2ScAs 多層膜に対して得られた状態密度の結果を Fig.2 に示す。下向きスピン電子のバンドギャップの極近傍にフェルミ準位が位置し、ほぼハーフメタルとなっている。TABLE 1 は本研究と先行研究(SabamTirpanci et al., 2013)における磁気モーメント M と状態密度のスピン分極率 P の典型的な結果である。本研究では、より M が小さく P が大きな多層膜（すなわち、より反強磁性ハーフメタルに近い材料）の候補を見つけることができた。

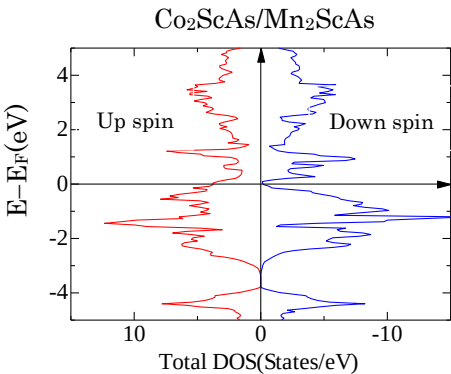


Fig. 2 Spin-resolved DOS

	Multilayers	M[μB]	P[%]
This Work	Fe ₂ CrGa/Mn ₂ CrGa	0.08	84.2
	Co ₂ ScAs/Mn ₂ ScAs	0.03	92.7
S.Tirpanci	Co ₂ TiGe/Mn ₂ TiGe	0.15	69.6
	Co ₂ VGa/Mn ₂ VGa	0.10	67.5

TABLE 1 Magnetic moment and spin polarization