

Co₂ScAs/Mn₂ScAs 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 Co₂ScAs/Mn₂ScAs

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”の候補として、ホイスラー合金多層膜 Co₂ScAs[2 ML]/Mn₂ScAs[2 ML]を提案した。しかし、薄膜としての応用を考えた場合、膜厚の薄さ、安定した磁性が不明瞭な点が課題となった。

本研究では Co₂ScAs/Mn₂ScAs 多層膜の膜厚と磁性を変化させ、それぞれの電子状態やエネルギーについて計算し、応用上の有用性を調査する。

模型と計算方法

Fig. 1 に示すように、2 種類のホイスラー合金からなる多層膜 Co₂ScAs[2n ML]/Mn₂ScAs[2n ML]の(001)積層について磁性、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

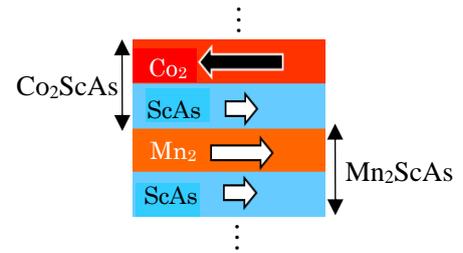


Fig. 1 Magnetic multilayer based on half-metallic Heusler alloys

計算結果

Co₂ScAs 層と Mn₂ScAs 層の磁化が反平行な状態 (反強磁性) のエネルギー E_{ap} および平行な状態 (強磁性) のエネルギー E_p について、計算で得られたエネルギー差を Fig. 2 に示す。 $n = 1 \sim 5$ 全ての膜厚において $E_{ap} < E_p$ となり、反強磁性が安定な状態であることが分かった。また、このエネルギー差は膜厚の増加とともに一定値に収束していくと予想される。TABLE 1 は磁気モーメント M とスピン分極率 P の結果を膜厚ごとに示している。全ての膜厚で、 M が小さく P が大きな状態 (反強磁性ハーフメタル) となっていることがわかる。

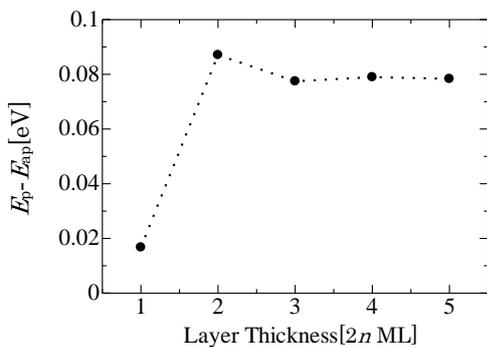


Fig. 2 Energy difference ($E_p - E_{ap}$)

| Layer Thickness[ML] | M [μ B] | P [%] |
|---------------------|----------------|---------|
| 1 | 0.0334 | 88.1 |
| 2 | 0.0082 | 99.7 |
| 3 | 0.0570 | 95.4 |
| 4 | 0.0572 | 97.6 |
| 5 | 0.0738 | 95.6 |

TABLE 1 Magnetic moment and spin polarization