

## MgO ベース磁気トンネル接合における $d^0$ 強磁性と自己組織化ナノ構造

### $d^0$ Ferromagnetism and self-organized nano-structures of MgO-based magnetic tunnel junctions

清家聖嘉<sup>1</sup>、福島鉄也<sup>1</sup>、佐藤和則<sup>2</sup>、吉田博<sup>1</sup>

M. Seike<sup>1</sup>, T. Fukushima<sup>1</sup>, K. Sato<sup>2</sup> and H. Katayama-Yoshida<sup>1</sup>

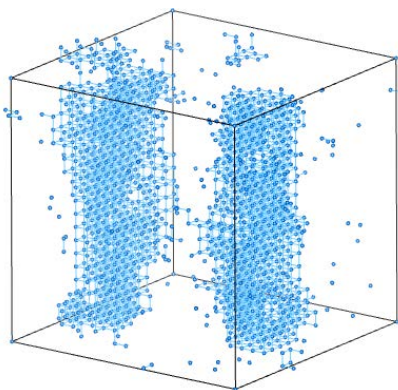
<sup>1</sup>大阪大学大学院基礎工学研究科、<sup>2</sup>大阪大学大学院工学研究科

<sup>1</sup>Graduate School of Engineering Science, Osaka University,

<sup>2</sup>Graduate School of Engineering, Osaka University

遷移金属を含まない  $d^0$  強磁性体のデザインが第一原理電子状態計算に基づき精力的に行われている[1]。我々のグループでは N や Mg 空孔を添加した MgO ベース磁性半導体で強磁性発現の可能性があることを示しその起源について議論してきた[2, 3]。本研究では特に MgO ベース磁気トンネル接合におけるナノ構造の自己組織化と  $d^0$  強磁性の関係について議論する[4, 5]。酸化物を取り扱うことから計算には自己相互作用補正をとり入れた KKR-CPA 法およびハイブリッド法 (HSE06) を用いた。

(Mg, V<sub>Mg</sub>)O において室温程度のキュリー温度を実現するためには 15% の高濃度添加を実現する必要があるが、このような高濃度添加は相分離による自己組織化を利用することで局所的に実現可能である。有効原子対相互作用の計算によると V<sub>Mg</sub> 間には引力的な相互作用が働いておりそのため相分離を起こす。この引力的な相互作用のため Layer-by-layer の結晶成長下では円柱状のナノ構造が自己組織化される。図は V<sub>Mg</sub> の自己組織化のモンテカルロシミュレーションの結果である。V<sub>Mg</sub> 間の引力的な相互作用は第 2 近接が主要でその他は無視できるため、V<sub>Mg</sub> は Mg 副格子上で単純立方格子状に配置し局所的な濃度は 25% となる。このように自己組織化ナノ構造中では欠陥が高濃度に存在するため高いキュリー温度が実現できる。磁気的な異方性が大きければ超常磁性ブロッキング現象によりある磁化過程にヒステリシスが現れると期待される[4]。さらに、我々の計算結果と過去の実験報告を併せて評価した結果、この自己組織化ナノ構造は MgO ベース磁気トンネル接合においても形成されている可能性が示唆されている。本知見は、MgO ベース磁気トンネル接合の伝導度、トンネル障壁、量子振動[5]の統合的理解に向けた基礎を築き得るものである。



#### 参考文献

- [1] K. Kenmochi, et al., Jpn. J. Appl. Phys., 73, L2952 (2004).
- [2] M. Seike et al., Jpn. J. Appl. Phys. 50, 090204 (2011).
- [3] M. Seike et al., Physica B 407, 2875 (2012).
- [4] M. Seike et al., Jpn. J. Appl. Phys., 51, 050201 (2012).
- [5] M. Seike et al., Solid State Commun. (in press).

図: MgO 中 Mg 空孔の自己組織化シミュレーション。Mg 空孔の位置を点で示した。