

## 磁性薄膜および MgO 界面の磁気異方性とその電界効果に関する第一原理的研究

### First-principles study on magnetic anisotropy and its electric field effect in magnetic thin films and interfaces with MgO

小田 竜樹<sup>1,2</sup>、田口裕作<sup>2</sup>、吉川大輝<sup>2</sup>、小幡 正雄<sup>2</sup>、中村 慎<sup>2</sup>

Tatsuki Oda<sup>1,2</sup>, Yusaku Taguchi<sup>2</sup>, Daiki Yoshikawa<sup>2</sup>, Masao Obata<sup>2</sup>,  
Makoto Nakamura<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 金沢大学理工研究域

<sup>2</sup> 金沢大学自然科学研究科

<sup>1</sup>Institute of Science and Engineering, Kanazawa University, Kanazawa 920-1192

<sup>2</sup>Graduate School of Natural Sciences and Technology, Kanazawa University, Kanazawa 920-1192

スピントロニクスにおける研究は、MRAM 開発の分野等で強力に推進されている。スピン注入やスピントランスファートルク等の技術において、メモリ密度や書き換え時間などの面で優れた技術が開発されつつあるが、微細化に伴って磁化反転の際の低消費電力化は実現すべき課題[1]である。電場により磁性を制御することで、閾値電流を低減させる方法が提案されてきた。また磁性薄膜の実験でイオン液体など高誘電率物質層を使い、電場を印加することより保磁力または磁気異方性変化、強磁性転移温度の変化が報告された[2,3]。電場印加に伴い磁性金属層への電場侵入を考慮する必要があるが、電場による変調を理論計算の立場から明らかにすることは必要不可欠である。これまで MgO/Fe/M 及び MgO/M/Fe/Au (M=Pt, Au 等)[4,5]において Pt は磁気異方性電界効果を高めることを見出した。

本研究では、まず試料作製の過程で界面に堆積する可能性がある元素の影響を調べるために、スピン軌道相互作用を考慮した相対論的計算の枠組みで、MgO/Au(1 or 2ML)/Fe/Au(001)の系について第一原理計算を行い、磁気異方性エネルギー(MAE)を見積もった。第二に、理論計算で得られた MAE に対する電界変調の定性的特徴が、実験測定結果と対応しない例が報告されており、Fe2 原子層を用いて MAE の電界変調の特徴を解析した。

計算の結果、MgO/Au(1ML)/Fe/Au(001)の MgO 層と Fe 層の間の Au を 1 原子層から 2 原子層へ増やすことで、電界効果が失うわれることが分かった[6]。この結果は、実験結果[7]と良く対応し、MgO/Fe 界面に Au1 原子層が挿入されている場合においても、観測可能な電界効果が存在することを示唆している。また、挿入層を除去することができれば、異なった電界変調を得ることができて、変調効果を増強することの可能性がある。得られた結果を素直に採用すると、何らかの方法により Fe 層の電子数を変化させることにより、これまでの数倍の変調効果が期待される。

発表では、Au 原子層の挿入により電界効果が失われた原因について、および Fe 層の電子数依存性について、バンド構造や状態密度等の電子状態の立場から議論を行う。

[1] Y. Shiota et al., Nature Materials **11**, 39 (2012).

[2] K. Shimamura et al., Appl. Phys. Lett., **100**, 122402 (2012).

[3] D. Chiba et al., Nature Materials **10**, 853 (2011).

[4] M. Tsujikawa et al., J. Appl. Phys., **109**, 07C107 (2011); J. Appl. Phys., **111**, 083910 (2012).

[6] Y. Taguchi et al., ICM2012, Busan, Korea (2012).

[7] 村上真一ら, 日本物理学会第 65 回, 2010 年 3 月; F. Bonell et al., Surf. Sci., 2013, in press.