

ポストムーア時代のスピントロニクス技術に貢献する シミュレーション法の調査研究

(一財)高度情報科学技術研究機構 副主任研究員 近藤 恒

スピントロニクスの技術を応用した ICT 基盤は、省エネルギー社会、安全安心な耐災害性社会、低希少元素化社会の実現に貢献することが期待されている。また、半導体技術の微細化によるデバイスの高性能化が限界を迎える将来、いわゆるポストムーア時代の到来に向けた、シリコン半導体を用いたスピントロニクス技術に代わる技術を用いたデバイスの作成が求められ、ポストムーア時代に用いられるスピントロニクス技術の研究開発が望まれている。この研究開発の実施には、省エネルギー化や低希少元素化等を実現するための多様な機能を実現する新奇材料の候補が無限に存在するため、シミュレーションを利用した物質探索等の研究の実施が不可欠となることが予想され、スピントロニクス技術の探索や特性の解明に貢献するシミュレーション手法の動向についての情報を得ておく必要がある。このため、新奇デバイスの探索に貢献するだけでなく、今後のデバイス開発の低コスト化に資することを目的とした、スピントロニクス技術の探索や特性の解明に貢献するシミュレーション手法の現状の調査研究を実施した。

スピントロニクス材料および有機エレクトロニクス材料の研究開発については、日本物理学会第 71 回年次大会、応用物理学会春季講演会、日本化学会第 96 春季年会に参加しての調査、および学会誌等の文献による調査を実施した。また、シミュレーションの現状については、日本物理学会第 71 回年次大会に参加して、また国立研究開発法人物質・材料研究機構を訪ね、聞き取り調査を実施した。

スピントロニクスデバイスに対する研究は、1980 年代に鉄バルク(磁性金属)間にクロム層(非磁性金属)を挿入した系で巨大磁気抵抗が観測されたことに端を発している。この系では、鉄バルク(磁性金属)間の磁化が相関により反平行化しているが、そのような効果がなくても、磁場を用いて巨大磁気抵抗を得ることができることが知られている。この系では、一方の磁性金属層をわずかな磁場で磁化反転可能なフリー層と、もう一方を同じ磁場では磁化反転しない(より強い磁場をかけないと磁化反転しない)固定層とすることで巨大磁気抵抗が得られる。このような両端の磁性金属の磁化が平行な場合と反平行の場合の抵抗の変化を利用したものがスピバルブである。

これに関連して、非磁性金属の代わりに酸化アルミニウムや酸化マグネシウムといった半導体を挿入することでも磁気抵抗効果が観測され、それをトンネル磁気抵抗効果と呼ぶ。また、トンネル磁気抵抗効果を実現する系において、非磁性金属薄膜を非磁性半導体と磁性金属の間に挿入し、両磁性金属間に挟まれた層にスピン分極を持たせることで、磁気抵抗は変化する、スピン偏極共鳴トンネル効果が観測されている。

半導体デバイスの代替の候補として有機分子を用いたデバイスが考えられ、有機分子を用いたスピントロニクスデバイスとして、コバルトバルク間の多層カーボンナノチューブにおいてスピン依存伝導現象が観測され、その後も単層カーボンナノチューブ等で磁気抵抗効果の観測を試みられて

いる。また、素子化の際に電極との接触面積が大きくとれ、接触抵抗を下げるができるグラフェンの系において、スピン注入されていることが確認されている。

これらの磁気抵抗効果の理解は磁性金属のバンド構造を用いて、次のようになされる。強磁性金属では上向きスピンと下向きスピンのフェルミエネルギーにおける電子の状態密度が異なるが、挿入された非磁性金属・非磁性半導体の両端の磁性金属の磁化が平行の場合は、フェルミエネルギーにおける各スピンの状態密度は同じであるために低抵抗となる一方、両端の磁性金属の反平行の場合は、大きな状態密度と小さなそれとの間の伝導となるため大きな抵抗となる。このように、上向きスピンと下向きスピンの電子状態の違いにより、磁性金属間の磁化が平行の場合の抵抗と反平行の場合の抵抗の差が生じ、磁気抵抗効果が得られることとなる。

スピンに依存した電子状態によって説明されるが、この電子状態はその電子が受ける相互作用に依存するものであるため、電子状態に大きな影響を及ぼす相互作用について理解する必要がある。以下では、電子状態に影響を及ぼす相互作用のうち、スピン・軌道相互作用に着目する。このスピン・軌道相互作用は、スピンを緩和させる効果を持つため、スピントロニクス機能に対しては負の効果を持つと考えられてきた。このことから、炭素等の軽い元素からなる分子材料を用いたスピントロニクスデバイスに関する研究は盛んに実施されている。一方で、以下のようにスピン・軌道相互作用がスピントロニクス機能の起因となる場合がある。

まず、スピンホール効果について記載する。スピンホール効果とは、電場と垂直方向にスピン流を生成される現象である。通常のホール効果は電場と垂直に磁場をかけて測定されるが、スピンホール効果の場合には磁場は用いていないことが特徴である。スピンホール効果はスピン・軌道相互作用によって引き起こされることが分かっている。

このスピンホール効果により生成されるスピン流を用いてスピン注入磁化反転を実現するスピン軌道トルクが報告されている。膜厚が数原子層程度のコバルト鉄ボロン磁性層を、タンタル金属層と酸化マグネシウム絶縁層で挟んだ磁性ナノヘテロ接合を作成し、電流を流すことで、タンタル金属層にスピン流が発生し、そのスピン流によってホウ化コバルト鉄の磁化が反転していることを見出した。この報告では、コバルト鉄ボロンの磁化に働くトルクは、タンタル金属層の層厚に依存し、タンタル金属層が厚くなるとトルクが大きくなることが報告されている。この現象は、スピン流の発生に重金属が用いられており、その重金属内の大きなスピン・軌道相互作用の存在がこの現象の発現の起因となっている。

以上のように、これまでスピントロニクス機能に対して、スピンを緩和させるという負の効果と及ぼすスピン・軌道相互作用は、新奇な物性をもたらすものであるという認識も同時にされるようになった。このため、スピントロニクス機能の物性の理解のため、また、スピントロニクスデバイスの素子になりうる新規物質の探索のために、スピン・軌道相互作用の効果を含んだシミュレーションを実施する必要性が益々高まることが予想される。一般の周期境界条件を課される系に対する第一原理シミュレーションにおいて、スピン・軌道相互作用の効果を含んだものの実施のために、2成分スピノル標記を導入する拡張が必須となり、スピンはノンコリニアな磁性を求めることが可能となる。擬ポテンシャル法を採用する場合、スピン・軌道相互作用の与え方は2通

りある。一つの方法はスピン・軌道相互作用の効果を通常の Kohn-Sham ハミルトニアンに追加する方法であり、他方は擬ポテンシャルを2成分標記し、その効果を導入する方法である。

スピン・軌道相互作用の導入によって、シミュレーションは、一般に収束性が悪くなる他、スピノル標記するため、スピンを考慮していない場合の4倍の大きさの関数を用意する必要がある、固有値問題の計算に対しては対象の行列が2倍となるので8倍の計算量となる、そして、スピノルが実空間に依存するノンコリニアなスピノルに依存したシミュレーションとなっているため実空間に貼るメッシュを細かくとる必要がある、という特徴を持ち、計算量が増大する。

スピントロニクスデバイスを含むナノデバイスの構造は、ソース、ドレインの電極間に、ソース、ドレインとは異なる構造体が挿入された系としてモデル化されたものとなる。このような系の境界条件は、開放系の境界条件と呼ばれる。開放系の境界条件のもとで、周期境界条件を課すことなく系の特性をシミュレーションする手段として、原子軌道による線形結合法に基づく密度汎関数理論および非平衡グリーン関数法を用いた計算法が開発されている。この手法におけるシミュレーションの特徴としては、電荷密度の計算において複素平面におけるグリーン関数の積分を行うため、積分点の数が実軸上での積分に比べて減らすことが可能であること、また、周期系と比較して電荷密度の収束性が悪くなることがあげられる。

開放系の境界条件を持つ系の性質を求めることが可能なシミュレーションコードを用いて、スピノルに依存したシミュレーションは実施可能となっているが、スピン・軌道相互作用の導入については1つのコードに実装例が確認された。そのコードについては、スピン・軌道相互作用の効果を Kohn-Sham ハミルトニアンに追加する方法によって実現されている。なお、スピン・軌道相互作用の導入した、開放系の境界条件のもとでのシミュレーションの例は、スピノルに依存した計算と異なり、確認できなかった。

このシミュレーションの特徴は、周期境界条件を課される系を対象とするシミュレーションと同様、一般に収束性が悪くなる他、スピノル標記するため、スピンを考慮していない場合の4倍の大きさの関数を用意する必要がある、グリーン関数の計算に対しては対象の行列が2倍となるので8倍の計算量となる、そして、スピノルが実空間に依存するノンコリニアなスピノルに依存したシミュレーションとなっているため実空間に貼るメッシュを細かくとる必要がある、という特徴を持つことが考えられる。開放系の境界条件が課される系において、収束性の詳細についての情報を得ることはできなかったが、周期系の計算と比較して収束は難しく、また、より計算規模が大きくなる傾向があるため、現在のスーパーコンピュータでの実施には困難が伴うと考えられ、今後のスーパーコンピュータの発展に伴って計算可能となるものと考えられる。

まとめると、これまで存在しない方がよいと考えられてきたスピン・軌道相互作用がスピントロニクスの機能の出現に大きく寄与していることが分かった。一方で、第一原理シミュレーションについては、それを指向したコード開発が実施されているが、実用的な利用例は多くない。特にデバイス構造をモデル化した開放系に対しては、その傾向が強いものと思われる。今後はスピン・軌道相互作用の効果を導入した開放系の境界条件を持つ系を対象としたシミュレーションコードの開発、および収束性の考察も含んだ、その有効性の検証がなされることが望まれる。