

(19)日本国特許庁(JP)

(12)公開特許公報(A)

(11)公開番号

特開2023-178103

(P2023-178103A)

(43)公開日 令和5年12月14日(2023.12.14)

(51)国際特許分類	F I	テーマコード(参考)
C 2 2 C 19/07 (2006.01)	C 2 2 C 19/07	C 5 E 0 4 9
H 0 1 L 29/82 (2006.01)	H 0 1 L 29/82	Z 5 F 0 9 2
H 1 0 N 50/10 (2023.01)	H 0 1 L 43/08	Z
H 0 1 F 10/16 (2006.01)	H 0 1 F 10/16	

審査請求 未請求 請求項の数 8 O L (全13頁)

(21)出願番号	特願2022-91171(P2022-91171)	(71)出願人	301023238 国立研究開発法人物質・材料研究機構 茨城県つくば市千現一丁目2番地1
(22)出願日	令和4年6月3日(2022.6.3)	(72)発明者	クルニアワン イヴァン 茨城県つくば市千現一丁目2番地1 国立研究開発法人物質・材料研究機構内
		(72)発明者	三浦 良雄 茨城県つくば市千現一丁目2番地1 国立研究開発法人物質・材料研究機構内
		(72)発明者	宝野 和博 茨城県つくば市千現一丁目2番地1 国立研究開発法人物質・材料研究機構内
		F ターム(参考)	5E049 AA04 BA16 5F092 AA08 AC06 AC12 AD23 AD25 BB23 BB31 BB32 最終頁に続く

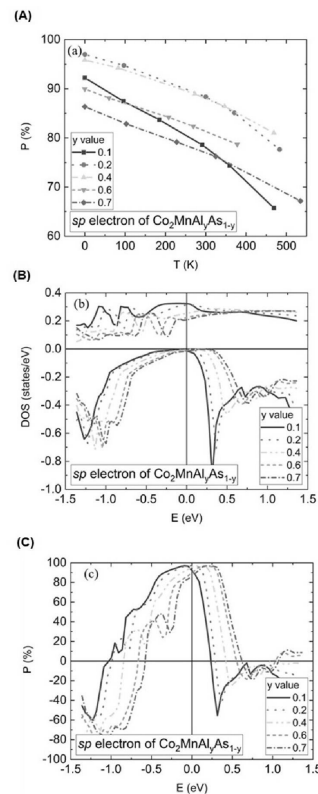
(54)【発明の名称】 室温高スピン偏極のホイスラー合金、並びにこれを用いた膜面垂直電流巨大磁気抵抗素子、トンネル磁気抵抗素子、及びこれらを用いた磁気デバイス、並びにこれを用いた半導体

(57)【要約】

【課題】室温における高いスピン偏極率が保持されている室温高スピン偏極ホイスラー合金を提供すること。

【解決手段】ホイスラー合金 A_2BC のAサイトにCo、BサイトにMnまたはFe、CサイトにAsとAlまたはAsとGaを配置し、室温においてスピン偏極率が75%以上となるホイスラー合金。好ましくは、前記ホイスラー合金は、 $Co_2MnAl_yAs_{1-y}$ ($y = 0.10 \sim 0.70$)、 $Co_2MnGa_yAs_{1-y}$ ($y = 0.10 \sim 0.70$)、 $Co_2FeAl_ySn_{1-y}$ ($y = 0.20 \sim 0.99$)、又は $Co_2FeGa_yIn_{1-y}$ ($y = 0.00 \sim 0.99$)の組成である。

【選択図】図1



【特許請求の範囲】

【請求項 1】

ホイスラー合金 A_2BC の A サイトに Co、B サイトに Mn、C サイトに As 及び Al または As 及び Ga を配置し、若しくはホイスラー合金 A_2BC の A サイトに Co、B サイトに Fe、C サイトに Al 及び Sn または Ga 及び In を配置し、

室温においてスピン偏極率が 75% 以上となるホイスラー合金。

【請求項 2】

前記ホイスラー合金は、 $Co_2MnAl_yAs_{1-y}$ ($y = 0.10 \sim 0.70$)、又は $Co_2MnGa_yAs_{1-y}$ ($y = 0.10 \sim 0.70$) である請求項 1 に記載のホイスラー合金。

10

【請求項 3】

前記ホイスラー合金は、 $Co_2FeAl_ySn_{1-y}$ ($y = 0.20 \sim 0.99$)、又は $Co_2FeGa_yIn_{1-y}$ ($y = 0.00 \sim 0.99$) の組成である請求項 1 に記載のホイスラー合金。

【請求項 4】

請求項 1 乃至 3 の何れかに記載のホイスラー合金が強磁性金属層として含まれる、膜面垂直電流巨大磁気抵抗 (CPP-GMR) 素子。

【請求項 5】

請求項 1 乃至 3 の何れかに記載のホイスラー合金が強磁性金属層として含まれる、トンネル磁気抵抗 (TMR) 素子。

20

【請求項 6】

請求項 4 に記載の膜面垂直電流巨大磁気抵抗 (CPP-GMR) 素子、又は請求項 5 に記載のトンネル磁気抵抗 (TMR) 素子を有する磁気デバイス。

【請求項 7】

請求項 1 乃至 3 の何れかに記載のホイスラー合金が強磁性金属層として含まれる、半導体スピン注入素子。

【請求項 8】

請求項 7 に記載の半導体スピン注入素子を有する発光素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

30

【0001】

本発明は、室温高スピン偏極のホイスラー合金に関する。

また、本発明は、室温高スピン偏極のホイスラー合金を用いた膜面垂直電流巨大磁気抵抗素子、トンネル磁気抵抗素子、及びこれらを用いた磁気デバイスに関する。

更に、本発明は、室温高スピン偏極のホイスラー合金を用いた半導体スピン注入素子、及びこれを用いた発光素子に関する。

【背景技術】

【0002】

磁気抵抗素子は、高密度ハードディスクドライブの磁気ヘッド、高感度磁気センサー、およびスピントルク高周波発振器などの次世代高性能磁気デバイスを実現するために必要不可欠な技術である。膜面垂直電流型巨大磁気抵抗 (CPP-GMR; Current Perpendicular-to-Plane Giant Magnetoresistance) 素子は強磁性層 / 非磁性スペーサ層 / 強磁性層の積層構造及びトンネル磁気抵抗 (TMR; Tunnel Magnetoresistance) 素子は、強磁性層 / 非磁性絶縁体層 / 強磁性層の積層構造を有し、直径サブミクロン以下のサイズのピラー形状に加工することで作製されて、2つの強磁性層の相対的な磁化配置の変化 (平行か反平行) に伴う磁気抵抗 (MR; Magnetoresistance) の変化によって機能を発現する。

40

【0003】

特許文献 1 では、GMR 効果または TMR 効果に基づいて、ハードディスク・ドライブ

50

上で高い記録密度（最大 8 ギガビット / cm^2 ）を達成することができる入手可能な材料として、半金属強磁性体であるホイスラー相を有する材料を提案している。「ホイスラー相」は、一般式 X_2YZ を有する金属間化合物であり、結晶して BiF_2 タイプの構造になる。

特許文献 2 では、磁気デバイスにおいて使用可能な磁気接合を提案する。その磁気接合は、ピンド層と、非磁性スペーサ層と、自由層とを含む。自由層及びピンド層のうち少なくとも一方は少なくとも一つの半金属を含むものであり、半金属は非常に高いスピン偏極（100% 近く）を有する強磁性体であり、一方のスピン配向において金属であり、他方のスピン配向において絶縁性である。スピン偏極（P）は、フェルミ準位における強磁性体のアップ（ダウン）スピンのパーセンテージからダウン（アップ）スピンのパーセンテージを引いたものとして定義可能である。

10

【0004】

従来技術においては、特に CPP-GMR 素子や TMR 素子の性能指標となる MR 比（平行磁化の抵抗 R_P と反平行磁化の抵抗 R_{AP} の差の比、 $MR = (R_{AP} - R_P) / R_P \times 100$ ）を向上させるため、高いバルクのスピン偏極率（P）を有するホイスラー合金が強磁性層の材料として用いられてきた。例えば、非特許文献 1、2 では、ホイスラー合金の極低温（絶対零度）での電子構造を元に、その高スピン偏極率を実証されていた。そして、ホイスラー合金 Co_2MnSi と酸化マグネシウム MgO を用いた TMR 素子では、低温（4 K）で最高 2600% の MR が得られている。

しかし、室温（300 K）付近では 400% と大きく下がってしまうことが問題となっている [非特許文献 3 参照]。CPP-GMR 素子でも同様に低温と室温の MR 比の減少が大きいことが報告されている [非特許文献 4 参照]。

20

【先行技術文献】

【特許文献】

【0005】

【特許文献 1】特許第 4285632 号

【特許文献 2】特開 2013-21328 号

【非特許文献】

【0006】

【非特許文献 1】I. Galanakis, et al, Phys. Rev. B 66, 174429 (2002).

【非特許文献 2】X. Hu, et al., J. Phys.: Condens. Matter 32, 205901 (2020).

【非特許文献 3】H. Liu, et al., J. Phys. D: Appl. Phys. 48 (2015) 164001

【非特許文献 4】Y. Sakuraba et al., Appl. Phys. Lett. 101, 252408 (2012).

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0007】

磁気抵抗素子は室温付近で動作すべきデバイスであるため、MR 比の温度依存性はできる限り抑制する必要がある。他方で、ホイスラー合金を用いた TMR 素子や CPP-GMR 素子では、低温（4 K）では非常に大きな MR 比（TMR 素子で 1000%、CPP-GMR 素子で 100%）が得られているがデバイスの動作環境温度である室温（300 K）付近では MR 比が大きく減少してしまう（TMR 素子で 500% 以下、CPP-GMR 素子で 100% 以下になる）という課題がある。

この課題を解決するために、既存の高スピン偏極ホイスラー合金だけでなく、新たな材料系を探索する必要がある。

40

【0008】

本発明はこのような課題を解決するもので、室温においてスピン偏極率が 75% 以上と

50

なるホイスラー合金 A_2BC を新たに提案する。特に、 A_2BC の A サイトに Co、B サイトに Mn または Fe、C サイトに As と Al または As と Ga を配置することにより広い組成範囲で室温においてスピン偏極率が 75% 以上となる材料を提案した。

従来のホイスラー合金は、B サイトおよび C サイトに 2 種類以上の元素を混晶させる場合は、周期表の隣り合う元素間の混晶 (Fe - Mn、Al - Si、Ga - Ge など) が主であった。今回の提案ではホイスラー合金の C サイトにおいて、As - Al、As - Ga や Sn - Al、In - Ga など広い組成範囲にわたる室温高スピン偏極材料を提案する。具体的には $Co_2MnAl_yAs_{1-y}$ ($y = 0.10 \sim 0.70$)、 $Co_2MnGayAs_{1-y}$ ($y = 0.10 \sim 0.70$)、および $Co_2FeAl_ySn_{1-y}$ ($y = 0.20 \sim 0.99$)、 $Co_2FeGay_{1-x}In_{1-y}$ ($y = 0.00 \sim 0.99$) の組成である。これらの材料を TMR 素子や CPP - GMR 素子、および半導体へのスピン注入源として用いることで、デバイスの動作環境温度で高いスピン分極特性を得ることが可能となる。

10

【課題を解決するための手段】

【0009】

本発明者は、有限温度でのスピン偏極率を機械学習と電子構造計算から予測すれば、室温付近で 75% 以上の *sp* 状態のスピン偏極率を有する新たな材料候補の組成を探索できるのではないかと考えて、本発明を想到するに至った。具体的には、古典統計モデルの範囲内で有限温度におけるスピン揺らぎを平均場近似として取り入れた密度汎関数理論に基づく第一原理計算を実行し、室温付近でも高いスピン偏極率が維持される材料を計算により合理的に期待できる材料を探索して、本発明の室温高スピン偏極ホイスラー合金を想到するに至った。

20

【0010】

〔1〕本発明の室温高スピン偏極ホイスラー合金は、例えば図 5 A に示すように、ホイスラー合金 A_2BC の A サイトに Co、B サイトに Mn、C サイトに As と Al または As と Ga を配置し、若しくはホイスラー合金 A_2BC の A サイトに Co、B サイトに Fe、C サイトに Al 及び Sn または Ga 及び In を配置し、室温においてスピン偏極率が 75% 以上となるホイスラー合金である。

〔2〕本発明の室温高スピン偏極ホイスラー合金〔1〕において、好ましくは、前記ホイスラー合金は、 $Co_2MnAl_yAs_{1-y}$ ($y = 0.10 \sim 0.70$)、又は $Co_2MnGayAs_{1-y}$ ($y = 0.10 \sim 0.70$) であるとよい。

30

〔3〕本発明の室温高スピン偏極ホイスラー合金〔1〕において、好ましくは、前記ホイスラー合金は、 $Co_2FeAl_ySn_{1-y}$ ($y = 0.20 \sim 0.99$)、又は $Co_2FeGayIn_{1-y}$ ($y = 0.00 \sim 0.99$) の組成であるとよい。 $Co_2FeGayIn_{1-y}$ については、さらに好ましくは、($y = 0.01 \sim 0.99$) の組成であるとよく、最も好ましくは ($y = 0.10 \sim 0.90$) の組成であるとよい。

【0011】

〔4〕本発明の膜面垂直電流巨大磁気抵抗 (CPP - GMR) 素子は、例えば図 6 に示すように、〔1〕～〔3〕の何れかに記載のホイスラー合金が強磁性金属層として含まれるものである。

40

〔5〕本発明のトンネル磁気抵抗 (TMR) 素子は、例えば図 7 に示すように、〔1〕～〔3〕の何れかに記載のホイスラー合金が強磁性金属層として含まれるものである。

〔6〕本発明の磁気デバイスは、〔4〕に記載の膜面垂直電流巨大磁気抵抗 (CPP - GMR) 素子、又は〔5〕に記載のトンネル磁気抵抗 (TMR) 素子を有するものである。

【0012】

〔7〕本発明の半導体スピン注入素子は、例えば図 8 に示すように、〔1〕～〔3〕の何れかに記載のホイスラー合金が強磁性金属層として含まれるものである。

〔8〕本発明の発光素子は、〔7〕に記載の半導体スピン注入素子を有するものである。

【発明の効果】

【0013】

50

本発明の室温高スピン偏極ホイスラー合金によれば、室温における高いスピン偏極率が保持されているので、TMR素子やCPP-GMR素子において、高いMR比を室温付近で実現する強磁性電極材料となり得る。また、スピンフィルター素子としても応用できるため半導体へのスピン注入源としての応用も期待できる。

【図面の簡単な説明】

【0014】

【図1】本発明の一実施例を示す $\text{Co}_2\text{MnAl}_y\text{As}_{1-y}$ における(A)各組成 y における s_p 状態のスピン偏極率 P_{s_p} の温度依存性を示す図、(B)フェルミエネルギー $E=0$ (eV)付近の s_p 状態の状態密度を示す図、(C) P_{s_p} のフェルミエネルギー付近でのエネルギー依存性を示す図である。

10

【図2】本発明の一実施例を示す $\text{Co}_2\text{MnGa}_y\text{As}_{1-y}$ における(A)各組成 y における s_p 状態のスピン偏極率 P_{s_p} の温度依存性を示す図、(B)フェルミエネルギー $E=0$ (eV)付近の s_p 状態の状態密度を示す図、(C) P_{s_p} のフェルミエネルギー付近でのエネルギー依存性を説明する図である。

【図3】本発明の一実施例を示す $\text{Co}_2\text{FeAl}_y\text{Sn}_{1-y}$ における(A)各組成 y における s_p 状態のスピン偏極率 P_{s_p} の温度依存性を示す図、(B)フェルミエネルギー $E=0$ (eV)付近の s_p 状態の状態密度を示す図、(C) P_{s_p} のフェルミエネルギー付近でのエネルギー依存性を示す図である。

【図4】本発明の一実施例を示す $\text{Co}_2\text{FeGa}_y\text{In}_{1-y}$ における(A)各組成 y における s_p 状態のスピン偏極率 P_{s_p} の温度依存性を示す図、(B)フェルミエネルギー $E=0$ (eV)付近の s_p 状態の状態密度を示す図、(C) P_{s_p} のFermi準位付近でのエネルギー依存性を示す図である。

20

【図5A】本発明の一実施例において、ホイスラー合金の結晶構造と材料探索で考慮した元素の種類を説明する図である。

【図5B】本発明の一実施例である、機械学習の1つであるベイズ最適化の手順を示す機能ブロック図である。

【図5C】本発明の一実施例である、有限温度第一原理計算の模式図とスピン偏極率の定義を説明する図である。

【図6】膜面垂直電流巨大磁気抵抗(CPP-GMR)素子10の三層積層構造の説明図である。

30

【図7】トンネル磁気抵抗(TMR)素子20の三層積層構造の説明図である。

【図8】半導体スピン注入素子の積層構造の説明図で、(A)は二層構造、(B)は三層構造を示している。

【発明を実施するための形態】

【0015】

以下、本発明を実施するための最良の形態について、詳細に説明する。

なお、範囲を示す『～』の上下限值に関しては、特に別段の表現を用いない限り、境界値を含むものとする。即ち、例えば『○○～』であれば、○○以上 以下を表している。

実施例のシミュレーションは、密度汎関数理論における有効ポテンシャルによる電子の多重散乱の効果グリーン関数によって取り入れた第一原理計算手法であるKKR(Korriga-Kohn-Rostker)法を用いて行った。KKR法に関しては、以下の文献に説明があり、本明細書の記載として援用する。

40

[1] J. Korringa, On the calculation of the energy of a Bloch wave in a metal, Physica 13 (1947) 392-400, doi: 10.1016/0031-8914(47)90013-X.

[2] W. Kohn, N. Rostoker, Solution of the schrodinger equation in periodic lattices with an application to metallic lithium,

50

Phys. Rev. 94 (1954) 1111-1120, doi: 10.1103/PhysRev.94.1111.

[3] M. Dane, M. Luders, A. Ernst, D. Koddertsch, W.M. Temmerman, Z. Szotek, W. Hergert, Self-interaction correction in multiple scattering theory: application to transition metal oxides, J. Phys. Condens. Matter. 21 (2009) 045604, doi: 10.1088/0953-8984/21/4/045604.

[4] 赤井久純, “Korringa-Kohn-Rostoker Method” (2000年3月17日), <http://kkriissp.u-tokyo.ac.jp/document/kkrnote.pdf> 【0016】

L₂₁構造のフルホイスラー合金A₂BCに対してAサイトにCo、BサイトにMnまたはFe、CサイトにAsとAl、AsとGa、SnとAlまたはInとGaを配置させて、その間の組成をCPA (Coherent-Potential-Approximation) 法によって一様に混ぜることで電子状態計算を実行した。格子定数はCサイトで原子が混ざっていない組成での格子定数から線形補間によって中間組成での格子定数を決定した。CPA法に関しては、以下の文献に説明があり、本明細書の記載として援用する。

[5] P. Soven, Coherent-Potential Model of Substitutional Disordered Alloys, Phys. Rev. 156, (1967) 809, doi: 10.1103/PhysRev.156.809.

[6] Fumiko Yonezawa, Kazuo Morigaki, “Coherent Potential Approximation. Basic concepts and applications”, Progress of Theoretical Physics Supplement, Volume 53, January 1973, Pages 1-76, doi: 10.1143/PTPS.53.1

CPA法に関しては、東京大学物性研究所を中核機関として実施している「計算物質科学ソフトウェアの開発技術の振興」に関連する、ソフトウェアが以下のホームページに開示されている。

<https://ma.iissp.u-tokyo.ac.jp/app-category/algorithm11?apo=2&order=ASC>

【0017】

また、交換相関項にはLSDA (Local spin density approximation) 法を用いた。k点数は第一ブリュアンゾーン内に8000点を考慮した。LSDA法に関しては、以下の文献に説明があり、本明細書の記載として援用する。

[7] J. P. Perdew and Y. Wang, Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy, Phys. Rev. B 45, (1992) 13244, doi: 10.1103/PhysRevB.45.13244.

【0018】

また、有限温度の計算は、DLM (Disordered Local Moment) 法を用いて行った。DLM法では古典統計力学に基づいて、各温度で自由エネルギーを最小にする内部磁場をセルフコンシステントに決定し、内部磁場と温度を平均場近似で対応づけることで有限温度での電子構造を決定する。DLM法に関しては、以下の文献に説明があり、本明細書の記載として援用する。

20

30

40

50

[8] B. L. Gyorffy, A. J. Pindor, J. Staunton, G. M. Stocks, H. Winter, A first-principles theory of ferromagnetic phase transitions in metals, *J. Phys. F Met. Phys.* 15 (1985) 1337-1386, doi: 10.1088/0305-4608/15/6/018.

[9] M. Lezaic, Ph. Mavropoulos, J. Enkovaara, G. Bihlmayer, S. Blugel, Thermal collapse of spin polarization in half-metallic ferromagnets, *Phys. Rev. Lett.* 97 (2006) 026404, doi: 10.1103/PhysRevLett.97.026404.

[10] J. D. Aldous, C. W. Burrows, A. M. Sanchez, R. Beanland, I. Maskery, M. K. Bradley, M. dos Santos Dias, J. B. Staunton, G. R. Bell, Cubic MnSb, Epitaxial growth of a predicted room temperature half-metal, *Phys. Rev. B.* 85 (2012) 060403, doi: 10.1103/PhysRevB.85.060403.

【0019】

次に、図5A～Cを用いて本発明の一実施例におけるシミュレーション手順を説明する。図5Aは、本発明の一実施例において、ホイスラー合金の結晶構造と材料探索で考慮した元素の種類を説明する図である。図5Aの結晶構造を持つホイスラー合金は、 $A_2(B_y B'_{1-y})(C_x C'_{1-x})(A = Fe, Co, Ru, Rh)$ 、 $(B, B' = Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Y, Zr, Nb, Mo)$ 、 $(C, C' = Al, Si, P, Ga, Ge, As, In, Sn, Sb)$ である。

【0020】

図5Bは、本発明の一実施例である、機械学習の1つであるベイズ最適化の手順を示す機能ブロック図である。ランダムに選択した初期候補合金50、高スピン偏極材料モデル部52、スピン偏極率演算部54、予測候補合金56を備えている。

ランダムに選択した初期候補合金50としては、図5Aの結晶構造を持つホイスラー合金 $A_2(B_y B'_{1-y})(C_x C'_{1-x})(A = Fe, Co, Ru, Rh)$ 、 $(B, B' = Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Y, Zr, Nb, Mo)$ 、 $(C, C' = Al, Si, P, Ga, Ge, As, In, Sn, Sb)$ 、 $(y = 0.0 \sim 1.0, 0.2 \text{ 刻み})$ 、 $(x = 0.0 \sim 1.0, 0.2 \text{ 刻み})$ を対象としている。候補材料組成の総数は73440個である。

【0021】

高スピン偏極材料モデル部52は、スピン偏極率演算部54で演算対象となる合金組成を一時記憶すると共に、ベイズ最適化によって解析する機能を有する。

スピン偏極率演算部54は、有限温度第一原理計算を用いて、スピン偏極率 P_{sp} を演算するもので、例えば次の式を用いている。

【数1】

$$T \propto \frac{1}{h}; P_{sp} = \frac{D_{\uparrow(s,p)} - D_{\downarrow(s,p)}}{D_{\uparrow(s,p)} + D_{\downarrow(s,p)}}$$

ここで、 D は状態密度で、 D_{\uparrow} は多数スピン状態、 D_{\downarrow} は少数スピン状態を意味する。 h は温度 T と対応する内部磁場を示している。

10

20

30

40

50

予測候補合金 56 では、高スピン偏極材料モデル部 52 の合金組成に対して、スピン偏極率演算部 54 で予測された合金組成を一時記憶すると共に、高スピン偏極材料モデル部 52 の合金組成に対してベイズ最適化により、最終的な予測合金組成として記憶している。

【0022】

図 5C は、本発明の一実施例である、スピン偏極率の定義を説明する図で、ワイス場 h を示している。図 5C において、 T_c は強磁性転移温度 (K) である。温度 T が絶対零度と等しい極低温状態では、各原子のスピンは揃っているため、ワイス場 h は高い値を有している。他方、温度 T が強磁性転移温度 (K) とほぼ等しい高温状態では、各原子のスピンは区々となっているため、ワイス場 h は低い値を有している。温度 T が絶対零度と強磁性転移温度 (K) の間の温度領域では、各原子のスピン方向は例えば $10^\circ \sim 30^\circ$ の範囲で大略揃っているものの、厳密には区々の方向となっているため、ワイス場 h は中間の値を有している。

10

【0023】

このように構成された装置においては、高スピン偏極材料モデル部 52 では、ランダムに選択した初期候補合金 50 からスピン偏極率演算部 54 でスピン偏極率 P_{sp} を演算して、予測候補合金 56 に一旦格納する。そして、予測候補合金 56 を高スピン偏極材料モデル部 52 に帰還入力して、スピン偏極率演算部 54 でスピン偏極率 P_{sp} を演算結果が収束するまで、予測候補合金 56 の合金組成の予測を繰り返す。

具体的なベイズ最適化の演算では、まず、ランダムに初期物質の組成を 20 個選び、それらの候補材料に対して有限温度第一原理計算を行う。得られた結果をベイズ最適化によって解析することにより、次の候補物質の組成を 20 個導出する。そして、それらの候補材料に対して同様に有限温度第一原理計算を行う。以上の手順を繰り返すことにより、室温付近でより高いスピン偏極率を有するホイスラー合金を探索する。

20

【0024】

次の実施例では、磁気抵抗効果を最も反映すると考えられている各原子軌道 s 軌道および p 軌道 (sp) 状態に対するフェルミエネルギーでのスピン偏極率 P_{sp} を計算し、高スピン偏極材料として有望な材料の判定を行っている。ここでフェルミエネルギーは電子の最高占有準位のエネルギーで、そのエネルギーでの電子構造が実際の電流に寄与する。

【実施例 1】

30

【0025】

図 1 は、有望な材料候補のなかから、特に $Co_2Mn_{1-y}Al_yAs_{1-y}$ のスピン偏極率の温度依存性と状態密度、およびスピン偏極率のエネルギー依存性を示している。組成範囲 $y = 0.10 \sim 0.70$ に対して室温 300 K 付近で 75% 以上の高い sp 状態のスピン偏極率が得られている。

【実施例 2】

【0026】

図 2 は、有望な材料候補のなかから、特に $Co_2MnGa_yAs_{1-y}$ のスピン偏極率の温度依存性と状態密度、およびスピン偏極率のエネルギー依存性を示している。組成範囲 $y = 0.10 \sim 0.70$ に対して室温 300 K 付近で 75% 以上の高い sp 状態のスピン偏極率が得られている。

40

【実施例 3】

【0027】

図 3 は、有望な材料候補のなかから、特に $Co_2FeAl_ySn_{1-y}$ のスピン偏極率の温度依存性と状態密度、およびスピン偏極率のエネルギー依存性を示している。組成範囲 $y = 0.20 \sim 0.99$ に対して室温 300 K 付近で 75% 以上の高い sp 状態のスピン偏極率が得られている。

【実施例 4】

【0028】

図 4 は、有望な材料候補のなかから、特に $Co_2FeGa_yIn_{1-y}$ のスピン偏極率

50

の温度依存性と状態密度、およびスピン偏極率のエネルギー依存性を示している。組成範囲 $y = 0.00 \sim 0.99$ に対して室温 300 K 付近で 75% 以上の高い s p 状態のスピン偏極率が得られている。

【0029】

続いて、本発明の室温高スピン偏極のホイスラー合金を用いた膜面垂直電流巨大磁気抵抗素子、トンネル磁気抵抗素子、及びこれらを用いた磁気デバイスについて説明する。

図 6 は、膜面垂直電流巨大磁気抵抗 (CPP-GMR) 素子 10 の三層積層構造の説明図である。

膜面垂直電流巨大磁気抵抗 (CPP-GMR) 素子 10 は、強磁性金属 11、非磁性金属 12、及び強磁性金属 13 の三層構造になっている。強磁性金属 11、13 には、本願発明のホイスラー合金 (Co_2MnAlAs , Co_2MnGaAs , Co_2FeGaIn , Co_2FeAlSn) が用いられる。非磁性金属 12 は、Ag, Cu, Cr 及びそれらの合金などが用いられる。

10

膜面垂直電流巨大磁気抵抗 (CPP-GMR) 素子 10 は、強磁性金属 11 がピンド層磁化を有するピンド層として作用し、非磁性金属 12 が非磁性スペーサ層として作用し、強磁性金属 13 は磁化容易軸を有する自由層とを備える磁気接合を有する磁気デバイスとして使用される。

このように構成された磁気接合を有する磁気デバイスにおいては、前記磁気接合が、書き込み電流が前記磁気接合に流された際に前記自由層が複数の安定磁気状態の間でスイッチング可能であるように構成されている。

20

【0030】

図 7 は、トンネル磁気抵抗 (TMR) 素子 20 の三層積層構造の説明図である。

トンネル磁気抵抗 (TMR) 素子 20 は、強磁性金属 21、非磁性絶縁体 22、及び強磁性金属 23 の三層構造になっている。強磁性金属 21、23 には、本願発明のホイスラー合金 (Co_2MnAlAs , Co_2MnGaAs , Co_2FeGaIn , Co_2FeAlSn) が用いられる。非磁性絶縁体 22 には、MgO, MgAl_2O_4 などが用いられる。

膜面垂直電流巨大磁気抵抗 (CPP-GMR) 素子 10 と、トンネル磁気抵抗 (TMR) 素子 20 は、磁気センサー又は磁気メモリに使用される。

【0031】

30

次に、本発明の室温高スピン偏極のホイスラー合金を用いた半導体スピン注入素子、及びこれを用いた発光素子について説明する。

図 8 は、半導体スピン注入素子の積層構造の説明図で、(A) は二層構造、(B) は三層構造を示している。二層構造の半導体スピン注入素子 30 は、強磁性金属 31、非磁性半導体 32 の二層構造になっている。三層構造の半導体スピン注入素子 35 は、強磁性金属 36、非磁性絶縁体 37、及び非磁性半導体 38 の三層構造になっている。強磁性金属 31、36 には、本願発明のホイスラー合金 (Co_2MnAlAs , Co_2MnGaAs , Co_2FeGaIn , Co_2FeAlSn) が用いられる。非磁性絶縁体 37 には、MgO, MgAl_2O_4 などが用いられる。非磁性半導体 32、38 には、GaAs, AlGaAs, Si, Ge などが用いられる。

40

半導体スピン注入素子 30、35 は、円偏光半導体レーザのような発光素子に使用される。

【0032】

なお、膜面垂直電流巨大磁気抵抗 (CPP-GMR) 素子、トンネル磁気抵抗 (TMR) 素子の磁気デバイスへの使用や、半導体スピン注入素子の発光素子への使用に関しては、以下の文献に説明があり、本明細書の記載として援用する。

[11] 周逸凱、朝日一、『半導体ナノスピントロニクス・デバイス』、J. Vac. Soc. Jpn. Vol. 49, No. 12, (2006)

【0033】

本発明のいくつかの実施形態を説明したが、これらの実施形態は、例として提示したも

50

のであり、発明の範囲を限定することは意図していない。これら新規な実施形態は、その他の様々な形態で実施されることが可能であり、発明の要旨を逸脱しない範囲で、種々の省略、置き換え、変更を行うことができる。これら実施形態やその変形は、発明の範囲や要旨に含まれるとともに、特許請求の範囲に記載された発明とその均等の範囲に含まれる。

【産業上の利用可能性】

【0034】

本発明の室温高スピン偏極ホイスラー合金によれば、室温における高いスピン偏極率が保持されているので、TMR素子やCPP-GMR素子において、高いMR比を室温付近で実現する強磁性電極材料となり得る。また、スピフィルター素子としても応用できるため半導体へのスピン注入源としての応用も期待できる。

10

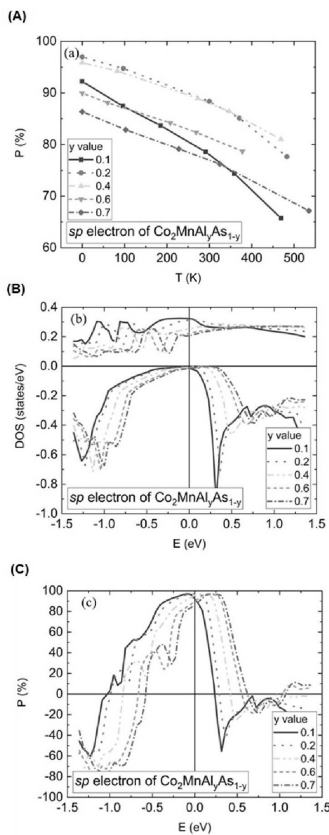
【符号の説明】

【0035】

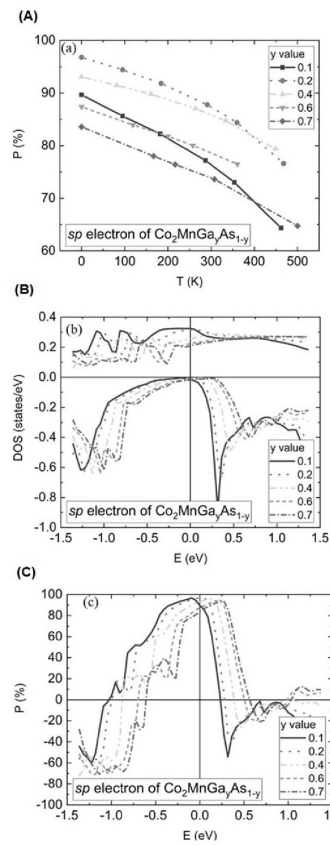
- 50 初期候補合金
- 52 高スピン偏極材料モデル部（ベイズ最適化）
- 54 スピン偏極率演算部
- 56 予測候補合金

【図面】

【図1】



【図2】



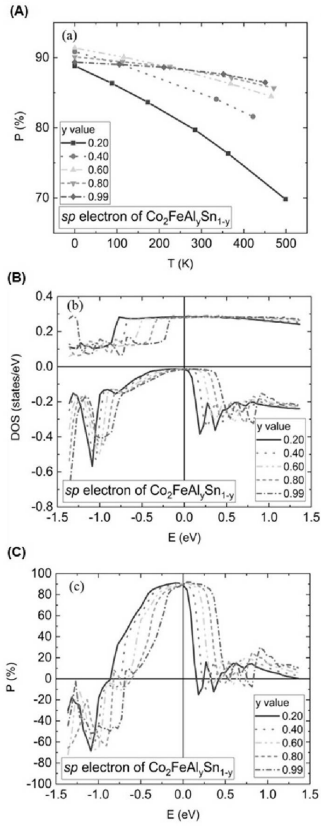
20

30

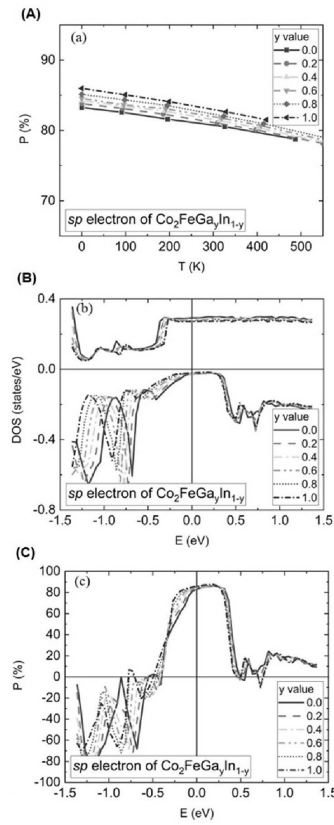
40

50

【 3 】



【 4 】

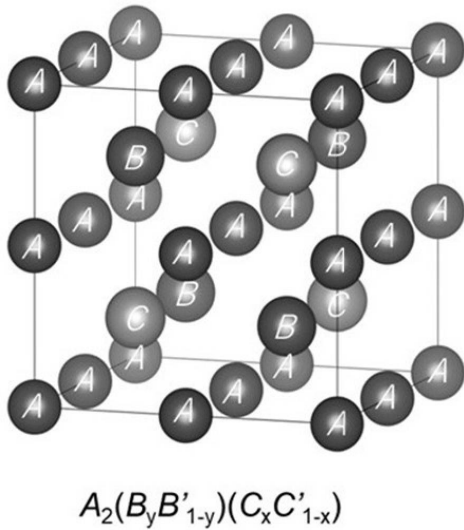


10

20

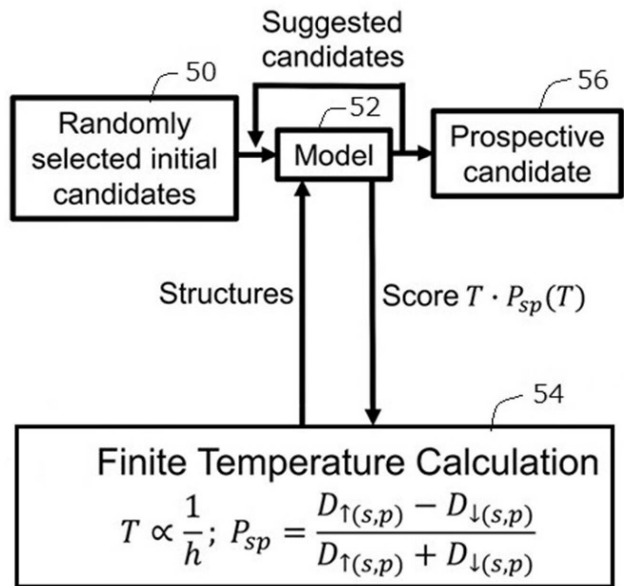
【 5 A 】

(a) Set of Candidates



【 5 B 】

(b) Bayesian Optimization

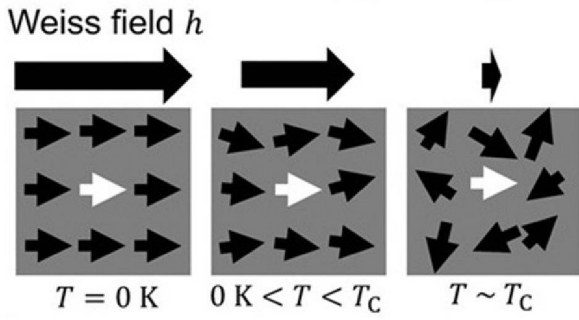


30

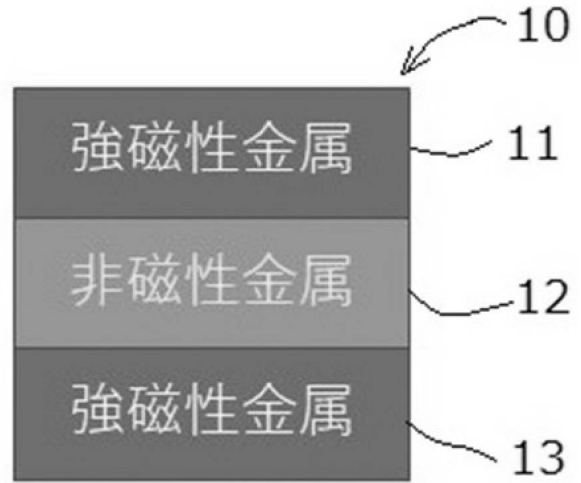
40

50

【 図 5 C 】

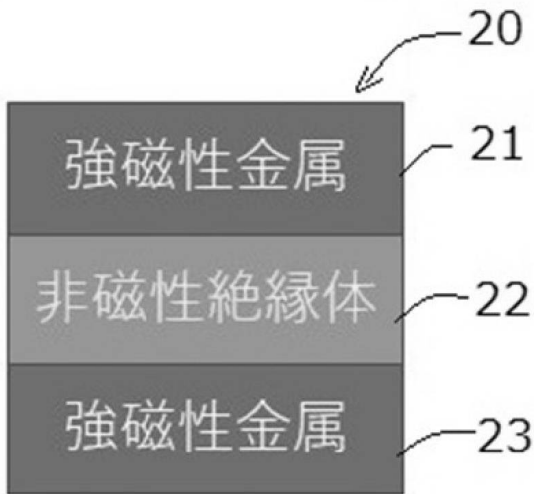


【 図 6 】

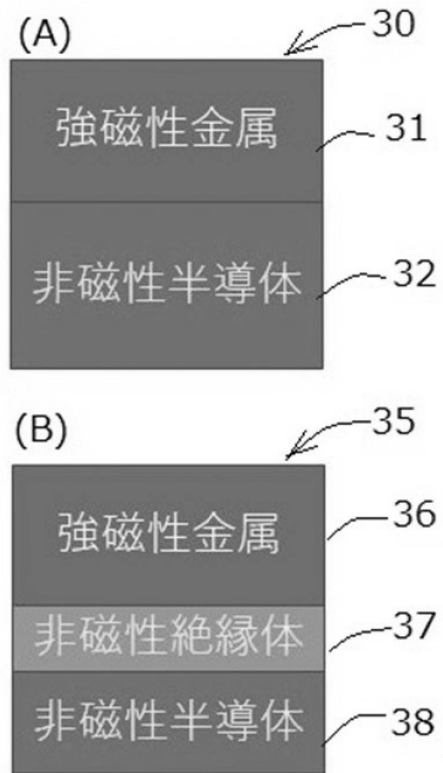


10

【 図 7 】



【 図 8 】



20

30

40

フロントページの続き

(54)【発明の名称】 スピン注入素子及びこれを用いた発光素子
Fターム(参考) BB35 BB36 BB43