

主 論 文 の 要 旨

論文題目 金属人工格子の電子構造・磁性
および輸送現象の理論
氏 名 伊藤 博介

論 文 内 容 の 要 旨

金属人工格子は、人工的な周期構造という秩序と、界面の乱れという不規則性とが同時に存在する系であり、さらにそこに磁性が絡むことにより、この系における輸送現象は非常に複雑となる。この複雑な輸送現象を理解するために、まず金属人工格子の周期構造が輸送現象に与える効果を忘れ、現実的なバンド計算による電子構造の計算を出発点とし、巨大磁気抵抗効果の起源および巨大磁気抵抗効果に対する描像を明らかにする。さらには巨大磁気抵抗効果の物質依存性を調べる。その後、周期構造が輸送現象、特に巨大磁気抵抗効果に与える影響について調べる。

金属人工格子における巨大磁気抵抗効果にとって、界面の乱れによって引き起こされるスピンに依存した散乱が重要であると考えられている。この界面で起こる散乱の様子は、界面近傍の電子構造や磁性と密接に関わっている。したがって、巨大磁気抵抗効果、とくにその物質依存性を調べるには、まず界面近傍の電子構造・磁性を理解する必要がある。しかし、金属人工格子の界面近傍の電子構造・磁性も十分には理解されておらず、それ自体非常に重要で興味深い問題を含んでいる。そこで、以下で述べるようなモデルと方法を用いて、まず界面近傍の電子構造・磁性を調べる。そしてこの結果を用いて、周期構造が巨大磁気抵抗効果に与える影響を無視する近似の範囲で、巨大磁気抵抗効果の物質依存性を調べる。本研究で対象とするのは Fe/遷移金属、Co/遷移金属人工格子（遷移金属：Sc, Ti, V, Cr, Mn, Ru, Rh, Pd）および Co-Ni/Cu 人工格子である。巨大磁気抵抗効果の物質依存性について調べることは、磁気抵抗効果

を用いた素子を実用化する上で重要な指針となる。

界面近傍の電子構造・磁性の計算をするために、タイト・バインディング模型を用いる。リカージョン法によって、界面近傍にある原子の局所状態密度と磁気モーメントを自己無撞着に計算する。計算の結果、Fe/遷移金属人工格子の遷移金属が周期表で Fe より左にある元素であれば、Fe の磁気モーメントが界面近傍で界面からの距離の関数として振動し、右にある元素であれば振動しないことが示された。また、Fe/遷移金属、Co/遷移金属人工格子の界面にある遷移金属原子の磁気モーメントは、遷移金属が Mn より左にある元素の場合 Fe あるいは Co 層の磁化と反平行であり、右にある元素であれば平行となっている。ここで得られた金属人工格子の界面近傍の磁気モーメントの振る舞いは、磁性合金で見られている振る舞いと良く似ていることが示された。また、Co-Ni/Cu 人工格子における界面近傍の Co と Ni 原子の局所状態密度は、Cu 中の Co あるいは Ni 不純物のそれと良く似ていることが示された。

巨大磁気抵抗効果に関しては、Fe/遷移金属と Co/遷移金属人工格子では Fe/Cr、Co/Ru 人工格子で最も大きな磁気抵抗比が得られ、遷移金属が周期表で Cr あるいは Ru から離れた金属であるほど磁気抵抗比は小さくなることが示された。この物質依存性は、磁性原子と非磁性原子の d 電子準位の相対的な位置関係によって以下のように理解できる。人工格子の界面では、磁性原子と非磁性原子が接しており、これらの原子の d 電子準位が異なれば、伝導電子は散乱を受け電気抵抗が生じる。しかも、磁性原子の d 電子準位はスピンの依存しているため、電気抵抗はスピンに依存したものとなる。Fe/Cr、Co/Ru 人工格子の界面で、Fe の少数スピンの d 電子準位と Cr の d 電子準位が、あるいは Co の少数スピンの d 電子準位と Ru の d 電子準位がほぼ等しくなることが、電子構造の計算によって示された。このことは Fe/Cr、Co/Ru 人工格子の界面で少数スピン電子はほとんど散乱を受けず、したがって大きな磁気抵抗効果を生じることを意味する。遷移金属が Cr (あるいは Ru) でない場合は、d 電子準位は Fe (あるいは Co) の少数スピン電子の準位からずれる。遷移金属が周期表で Cr (あるいは Ru) から遠いほど、このずれは大きくなり、電気抵抗のスピン依存性は小さくなるため磁気抵抗比は小さくなる。

次に、Co-Ni/Cu 人工格子の磁気抵抗効果に関しては、Ni の濃度が大きくなるにつれて磁気抵抗効果が小さくなることが示された。このことは、磁性原子の仮想束縛状態とフェルミ準位の相対的な位置関係によって以下のように理解

できる。Cu の d バンドがフェルミ準位より下にあるため、この人工格子の散乱の機構は Fe(あるいは Co)/遷移金属人工格子の場合と異なる。伝導は、おもに Cu の 4s 電子によって担われ、この伝導電子は、界面にある Co あるいは Ni の d 電子準位との s-d 相互作用によって散乱される。このとき磁性原子の d 電子準位は仮想束縛状態を形成する。Co の多数スピン電子の仮想束縛状態はフェルミ準位から低く離れたところにあり、少数スピン電子の仮想束縛状態はちょうどフェルミ準位のところに位置すること、さらに Ni の濃度が大きくなるにつれて少数スピン電子の仮想束縛状態はフェルミ準位の低エネルギー側へシフトしていくことが電子構造の計算によって示された。このため、Co/Cu 人工格子の界面では多数スピン電子はほとんど散乱されず、少数スピン電子はよく散乱され、電気抵抗のスピン依存性は大きく、大きな磁気抵抗効果が生じる。Ni の濃度が大きくなるにつれ、電気抵抗のスピン依存性は小さくなり、磁気抵抗効果も小さくなっていく。

本研究で得られた磁気抵抗効果の物質依存性は、実験結果と定性的によく一致している。このことから、界面の乱れによって生じるスピンの依存する散乱が、磁性層の磁化の配列の仕方によって変化し、大きな磁気抵抗効果を生じるという描像が明らかになった。また、磁気抵抗効果の物質依存性は、界面近傍の電子構造によってよく理解できることが明らかになった。

次に、金属人工格子の周期構造が巨大磁気抵抗効果に与える影響について調べる。人工格子の膜面に垂直に流れる電流に対する巨大磁気抵抗効果の方が、平行に流れる電流に対するそれよりも大きいという巨大磁気抵抗効果の異方性は、金属人工格子の周期構造と密接に結び付いた現象である。界面における乱れに加え、周期構造を考慮に入れるため、以下で述べるようなモデルを用い、巨大磁気抵抗効果の異方性の起源を明らかにする。より大きな磁気抵抗効果を得るのに、電流をどのような方向に流せばいいのかという問題は、応用上重要な問題である。

金属人工格子の周期構造を考慮に入れるため、膜面に垂直な方向に細長いセルをとり、このセルに対してコヒーレント・ポテンシャル近似を適用して界面の乱れを取り扱う。電気抵抗は線型応答理論により得られる。このような方法を用いることによって、膜面に平行な方向と垂直な方向に流れる磁気抵抗効果を同等に取り扱うことができる。

計算の結果、人工的な周期構造による電子の有効質量の異方性と、散乱を引

き起こす乱れが界面にしか存在しないということから、電気抵抗の異方性が生じることが明らかになった。また、電気抵抗の異方性は散乱ポテンシャルが大きなほど強く、散乱ポテンシャルがスピンに関して非対称であることが、巨大磁気抵抗効果の異方性の起源であることが明らかにされた。磁気抵抗比の大きさに関しては、上で述べた周期構造を無視したときの議論がほぼ成り立つこと、つまり磁性原子と非磁性原子のポテンシャル準位がどちらか一方のスピンに関して一致していれば大きな磁気抵抗比が得られることが示された。このことから、巨大磁気抵抗効果の物質依存性を定性的に議論するには周期構造の影響は重要でないこと、しかしながら周期構造は巨大磁気抵抗効果の異方性にとっては重要であると結論することができる。