## 研究課題別事後評価結果

- 1. 研究課題名: 計算科学を用いた磁気抵抗スイッチ素子基盤材料の創出
- 2. 研究代表者名及び主たる共同研究者名 (研究機関名・職名は研究参加期間終了時点) 研究代表者

水上 成美 (東北大学材料科学高等研究所 教授)

主たる共同研究者

白井 正文(東北大学電気通信研究所 教授)

廣畑 貴文(ヨーク大学(イギリス)電子工学科 教授)※

※2024年1月時点:東北大学先端スピントロニクス研究開発センター 教授)

3. 事後評価結果

○評点(2022年度事後評価時):

A+ 非常に優れている

## ○総合評価コメント:

## (以下、2022年度課題事後評価時のコメント)

本プロジェクトは、計算科学を用いたトンネル磁気抵抗素子基盤材料の創出を目指したもので、トンネル磁気抵抗比(TMR、室温)1000%以上を目標に掲げている。研究期間中の結果として TMR 値が最終目標に達していないものの、ポテンシャルの高い新物質を見出し、あとは界面・組成の最適化をすれば良いと思われるレベルにまで追い込むことはできている。 TMR 比を目的変数としてベイズ最適化を行い、磁気スティフネス係数をパラメータとした機械学習で、従来のモデルベースの材料探索空間を超えた広範囲で材料探索・検証を進め、MI の有効性を高めている。従来の酸化物系バリア膜から探索範囲を広げ、準安定窒化物バリアの有効性を見出している。論文発表と併せ、外国出願 2 件を含む十分な特許申請がなされている。また、チーム間の有機的連携を成果に上手く繋げており、CREST らしいチーム型の研究活動を展開したと判断される。

準安定磁性合金と準安定窒化物バリアという本プロジェクトで開発した新材料の組合わせにより、優れた MRAM 特性に到達できるかどうか、今後の進展に注目し、トンネル磁気抵抗素子のブレークスルーに繋げることを期待する。

## (2024年1月追記)

本チームは、研究期間を1年延長して磁気抵抗メモリ向けの実用特性を目指した研究に取り組み、準安定磁性合金/MgOバリア素子において垂直磁化を実証した。また、準安定立方晶窒化物半導体をバリア層に用いて、室温で100%を超えるトンネル磁気抵抗比と低抵抗を持つ素子を実現した。性能は未だMgO系に及ばないものの、酸化物よりバンドギャップの小さい窒化物系で新バリア材料を見出し、特許のPCT出願まで至ったことは、重要な進展と評価できる。研究手法に関しては、有限温度における素子界面の磁気物性値の予測を第一原理計算で可能にした。これは、実用上重要な有限温度における素子界面仮想スクリーニング手法の確立に資する成果である。成果の社会実装に関しても、企業のアドバイスを得ながら取り組みを開始しており、今後の結実に期待する。

以上により、本プロジェクトは1年間の延長により今後のイノベーションに向けた展開を一層後押し する成果を得たものと評価する。