

強磁性金属/2次元物質のヘテロ界面の電子・磁気状態の第一原理計算

First-principles study on the electronic and magnetic properties

of ferromagnetic alloy/2D material heterogenous interface

神戸大工¹, 東北大 CIES・工・CSRN・CSIS², 東大工³

○ 遠藤 竜佑 (M1)¹, 植本 光治¹, 永沼 博², 新屋 ひかり³, 小野 倫也¹

Kobe Univ.¹, Tohoku Univ. CIES², Univ Tokyo³,

°Ryusuke Endo¹, Mitsuharu Uemoto¹, Hiroshi Naganuma², Hikari Shinya³, Tomoya Ono¹

E-mail: 231t209t@stu.kobe-u.ac.jp

強磁性金属は高い垂直磁気異方性を持ち、スピントロニクス材料への応用が期待されている。強磁性金属ベースの磁気トンネル接合素子のバリア層とするため、炭素薄膜(グラフェン)を強磁性金属の上に積層した構造が実験的に合成される [1]。金属・バリア層界面の物性は磁気トンネル接合素子の磁気抵抗比を決定する要因となるため、金属表面の炭素原子配置や電子・磁気状態の実験・理論研究[2]がさかんに行われている。強磁性金属電極層としては、 $L1_0$ 秩序構造をもつ強磁性合金である鉄・パラジウム(FePd)や、グラフェンの格子とよく整合する Ni(111)、Co(0001)、FeNi(111)などが候補に挙げられている。しかしながら、FePd(001)/グラフェン界面のように格子の対称性が大きく異なる合金表面において、炭素原子がどのような配置をもつかまだ明らかになっていなかった。また、六方晶窒化ホウ素はグラフェンとよく似た特性を持つ2次元物質であるが、この物質が磁性合金である FePd(001)や FeNi(111)面に吸着する際にホウ素原子や窒素原子がどのような配置を取るのか、まだ明らかになっていない。

先行研究[3]では、第一原理計算を駆使しエネルギー的に安定と考えられる界面構造の予測とその電子・磁気状態の解析を行った。とくに安定な構造として、ツイスト界面モデルが $-0.19 \sim -0.22$ eV/atom の吸着エネルギーを持つことを明らかにした。また、吸着層間距離は STEM 測定による実験結果ともよく一致していた。さらに、グラフェン層にはモアレ状のバックリングが現れることを確認した。本研究では、グラフェンとよく似た構造を持つ六方晶窒化ホウ素を用いて、FePd(001)/六方晶窒化ホウ素、FeNi(111)/グラフェン、FeNi(111)/六方晶窒化ホウ素のそれぞれの構造について、2次元物質の原子がどのような配置を取るのかを第一原理計算で決定した。さらに第一原理伝導特性計算を用いて、それらの構造の磁気抵抗比を計算した。本発表ではそれらの結果について述べる。

参考文献

- [1] H. Naganuma, M. Nishijima, H. Adachi, M. Uemoto, H. Shinya *et al.*, ACS Nano **16**, 4139-4151 (2022).
- [2] M. Uemoto, H. Adachi, H. Naganuma, T. Ono, Journal of Applied Physics **132**, 095301(2022).
- [3] H. Naganuma, M. Uemoto, H. Adachi, H. Shinya, I. Mochazuki, M. Kobayashi, A. Hirata, B. Dlubak, T. Ono, P. Seneor, J. Robertson, K. Amemiya, J. Phys. Chem. C, in press (2023).