

Co/Pt 界面におけるスピン・軌道ホール伝導度と界面ラフネスの効果： 第一原理計算による考察

Effect of interfacial roughness on spin/orbital Hall conductivities of Co/Pt: first principles study

三重大院工 °(M1)石原 智規, (M2)辻出 裕至, 名和 憲嗣, 中村 浩次

Mie Univ. °Tomoki Ishihara, Yushi Tsujide, Kenji Nawa, Kohji Nakamura

E-mail: 424M203@m.mie-u.ac.jp

強磁性金属／重金属薄膜におけるスピンホール効果の解析・予測は、スピン軌道トルク磁気ランダムアクセスメモリ (SOT-MRAM) の開発など、高速且つ低消費電力の磁化反転技術を高めるうえで重要な知見である。また、近年では、軌道ホール効果による磁化反転機構の提案がなされている[1]。この背景のもと、我々は Co/Pt 界面におけるスピンホール伝導度 (SHC) および軌道ホール伝導度 (OHC) の第一原理計算を進め、特に、SHC が界面近傍の Pt 層で顕著に減衰することがわかってきた[2]。一方で、界面における OHC の理解は十分に至っていない。

本報告では、i) Co/Pt 界面における SHC と OHC の第一原理計算、ii) 界面近傍での SHC の減衰を抑えるための界面構造（ここでは原子配列の乱れによる界面ラフネスの導入）について検討する。第一原理計算には一般化勾配近似に基づく全電子フルポテンシャル線形化補強平面波法[3]を用い、内因性 SHC と OHC は久保公式から評価した。界面ラフネスが無い理想界面構造として、8 原子層 Pt(111)と単原子層 Co からなる Co_1/Pt_8 を仮定した。SHC と OHC はそれぞれ、1,730 および $5,660(\Omega \cdot \text{cm})^{-1}$ となり、また、界面近傍の Pt 層で SHC が著しく減衰することを確認した。界面ラフネスとして、界面に単原子層合金 $\text{Co}_{0.5}\text{Pt}_{0.5}$ を挿入した $\text{Co}_1/\text{Co}_{0.5}\text{Pt}_{0.5}/\text{Pt}_7$ モデルを用いた。計算の結果、SHC は $1,900(\Omega \cdot \text{cm})^{-1}$ 、OHC は $7,120(\Omega \cdot \text{cm})^{-1}$ となり、それぞれ約 10%、約 25% 増加することがわかった。次に原子配列の乱れによる界面ラフネスの効果を考察するために、バルク固溶体 $\text{Co}_{1-x}\text{Pt}_x$ における SHC と OHC を計算した。SHC と OHC とともに組成比 x に対してほぼ線形に変化し、これは界面ラフネスの導入による界面近傍の著しい SHC 減衰を抑える効果を示唆する。

[1] R. Gupta, *et al.*, Nat. Commun. **16**, 130 (2025)

[2] K. Nawa, *et al.*, Phys. Rev. Mater. **8**, 014405 (2024)

[3] K. Nakamura, *et al.*, Phys. Rev. B **67**, 014420 (2023)