

原子層に依存したグラフェン/磁性金属界面のスピン状態

Atomic Layer-dependent Spin States at the Graphene / Magnetic Metal Interfaces

原子力機構先端基礎セ¹, L.V. Kirensky Institute of Physics SB RAS²Pavel V. Avramov¹, Alex A. Kuzubov², 圓谷 志郎¹, 松本 吉弘¹, 大伴 真名歩¹, 檜本 洋¹, 境 誠司¹Advanced Science Research Center, JAEA¹, L.V. Kirensky Institute of Physics SB RAS²,Pavel V. Avramov¹, Alex A. Kuzubov², Shiro Entani¹, Yoshihiro Matsumoto¹,Manabu Ohtomo¹, Hiroshi Naramoto¹, and Seiji Sakai¹

E-mail: avramov.pavel@jaea.go.jp

グラフェンのスピントロニクスへの応用の検討が始まってから既に 5 年以上が経過した。グラフェンは、伝導に関与する π バンドの特に弱いスピン-軌道相互作用や無機半導体を超えるキャリア移動度から理想的なスピン輸送媒体として期待され、グラフェンをスピン輸送層とするスピンバルブ素子の物性研究が盛んである。例えば、スピントロニクス応用の第一ステップである磁性電極からのスピン注入について、磁性金属-グラフェン間の直接的接合や両者の間に酸化物バリア層を挿入した電極構造を持つスピンバルブ素子が作製され、素子特性からスピン注入効率が評価されてきた。しかし、多くの研究では低いスピン注入効率しか得られず、研究による特性の相違も著しいことなど、スピン注入の人為的制御は未解決の課題である。このような現状を踏まえると、マクロ特性の背景にあるグラフェンそのものや電極等との界面のスピン状態や磁氣的構造の微視的理解がスピン注入などスピン輸送過程の制御を実現する手がかりとして重要と考えられる。

本研究では、第一原理計算の手法(LDA/PW/PP/PBC)に基づき、ニッケル(Ni)結晶の(111)表面上に単～数原子層のグラフェンを接合した構造におけるグラフェン/Ni(111)界面近傍の Ni 及びグラフェン原子層のスピン状態の計算を行った[1]。

はじめに、単原子層グラフェン/Ni(111)構造について、グラフェンの原子配置は、top-fcc 配置(グラフェンの 2 種類の副格子に属する炭素原子がそれぞれ界面から第一層目および第三層目のニッケル原子上に位置する配置)が再安定であることが示された。これは低速電子線回折の結果[2]とも一致する。top-fcc 配置において、界面近傍の Ni 原子は、グラフェンと直に結合する第一層目から第三層目の範囲でバルクと比較して 20%前後のスピン密度(磁気モーメント)の減少を生じた。界面近傍での Ni のスピン密度の減少は、top-fcc 配置と同程度に安定な top-hcp 配置を取ることで抑制できる。top-fcc 配置において、グラフェンには Ni と同方向に 0.025 程度のスピン密度が生じたが、これは第一層目の Ni 原子から同原子上のグラフェン副格子へのスピントランスファーにより説明できる。さらに、複数原子層グラフェン/Ni(111)構造について計算を行った結果、グラフェンのスピン密度は界面からの距離(層数)により、原子層毎に大小や向きが変化することが示された。講演では、計算結果の詳細や講演者らが最近行った単原子層グラフェン/Ni(111)薄膜の深さ分解 X 線磁気円二色性分光の結果との対応等についても報告する。

[1] P. V. Avramov *et al.*, J. Appl. Phys. **112**, 114303 (2012). [2] Y. Gamo *et al.*, Surf. Sci. **374**, 61 (1997).