

Ni-C₆₀-Ni スピンバルブ素子の第一原理計算

First-Principles Study of the Ni-C₆₀-Ni Spin Valve Device

阪大院基礎工 ○大戸達彦, 山田亮, 多田博一

Σ -Osaka Univ , ○Tatsuhiko Ohto, Ryo Yamada and Hirokazu Tada

E-mail: ohto@molelectronics.jp

スピンバルブは、磁性電極の間に絶縁体を挟み、磁場を印可することで両電極間の磁化方向を変化させ、電流を制御するスイッチである。電極の磁化が平行、反平行での抵抗あるいは電気伝導度の比を磁気抵抗(MR)比とよぶ。絶縁体として分子を用いた分子スピンバルブは、理論的には高いMR比が予想され[1]、また分子や接合部位の構造制御によるMR比向上が期待される。近年分子スピンバルブの測定例は増えてきているが、磁化が反平行で伝導度が高くなる負のMR[2,3]が多く観測されており、その原因については議論が続いている。

本研究では、負のMRの起源を理論的に明らかにすることを目指し、Ni-C₆₀-Ni接合の第一原理伝導計算を行った。安定な二つの吸着構造について、分子と左右の電極間距離が対称な場合はフェルミ準位近傍で正のMRが見られるが、電極間距離の異なる非対称な接合では、MRは一部負となり、実験結果を再現した。しかし、MRの正負反転を示すエネルギーは吸着構造によって異なっており、図に示すHexagon, Pentagon吸着構造でそれぞれ-0.7, ~0 eVとなった。このことは、磁性金属に吸着する分子の状態密度を計算するだけでは分子スピンバルブ素子のMRの予測は困難であることを示唆している。射影分子軌道法[4]によって、電極との相互作用によるスピン分裂と分子への局在性を併せ持つ分子軌道が負のMRの原因となることを明らかにした。

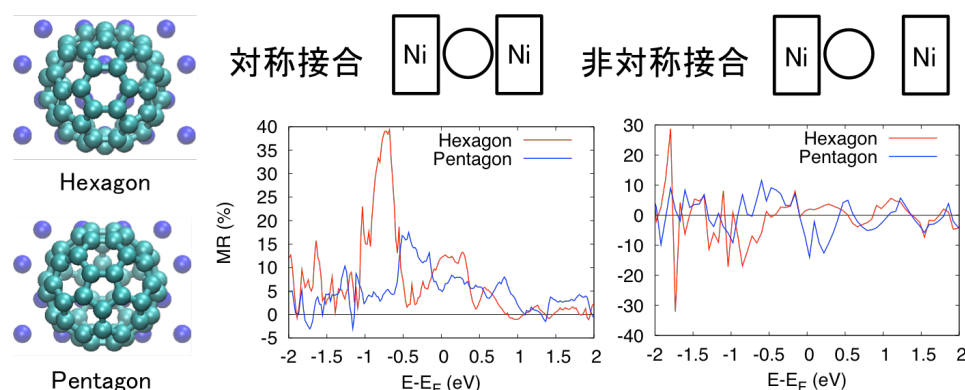


図 C60 の2つの吸着構造（6員環、5員環が表面を向いている）とMRの結果。

参考文献

- [1] A. R. Rocha et al., *Nat. Mater.* **4** (2005) 335.
- [2] R. Yamada et al., *App. Phys. Lett.* **98** (2011) 053110.
- [3] K. Yoshida et al., *Nano Lett.* **13** (2013) 481.
- [4] T. Ohto et al. *Phys. Rev. B* **84** (2011) 045417.