

Press Release

プレスリリース

2022年9月6日

国立大学法人 神戸大学

国立大学法人 東北大学

スピントロニクス向け強磁性合金材料と 二次元物質間の異種結晶界面の状態を 第一原理計算で予測 ～次世代スピントロニクスデバイスの シミュレーションへの応用を期待～

電子の電気と磁気の性質を利用するスピントロニクス素子は、現在の電子素子に比べて桁違いに少ない消費電力と、桁違いに高い演算速度を実現すると期待されています。その素子には、強磁性合金とグラフェンなどの二次元物質を接合する構造が提案されています。しかし強磁性合金とグラフェンの界面構造が未解明のため、最適な特性の素子を設計することはできませんでした。

神戸大学大学院工学研究科の植本光治助教、小野倫也教授、大学院生の安達隼人氏らと東北大学の永沼博准教授らの研究グループは、密度汎関数理論に基づく第一原理計算により、鉄パラジウム合金とグラフェンの異種結晶界面(FePd/Gr)の構造および特性のシミュレーションを行いました。

FePd/Grは最近実験的に合成された新材料で、スピントロニクスデバイスへの応用が期待されています。本研究では、これまでの実験では明らかにされていなかったFePd/Gr界面の炭素原子配置として考えられるいくつかのモデルを、計算により予測しました。

その結果、予測したFePd/Gr吸着距離の理論値は、実験値(約 2\AA = 100億分の2)をよく再現していること、また、先行実験で報告されている「異なる結晶界面の“つよく”・“しなやか”な結合」の存在を確認することができました。今後、本研究で提案された計算モデルは、強磁性トンネル接合素子などの機能予測や最適化、材料探索に役立つことが期待されます。この研究成果は、9月1日に Journal of Applied Physics でオンライン掲載されました。

ポイント

- ✓ FePd/Gr のツイスト界面の存在を第一原理計算から予測

- ✓ 界面モデルを機械的に探索する方法と安定な界面構造を得るための指導原理を提案
- ✓ ファンデルワールス力による物理吸着と化学吸着の中間的なふるまいが現れ、実験で報告された「つよく・しなやかな結合」の存在を確認
- ✓ FePd/Gr デバイスの磁気異方性やスピン伝導計算に適した低コスト計算モデルを提案

研究の背景

情報機器のさらなる高集積化や省エネルギー化を実現するため、電流・電圧により情報を処理する従来の半導体デバイスにかわり、電子スピンを利用した新たなエレクトロニクス技術である「スピントロニクス」の研究が近年注目を集めるようになってきています。このようなスピントロニクスの応用対象の一つに不揮発性磁気メモリ(MRAM)があります。

また、磁性材料として注目されている鉄・パラジウム(FePd)は、 $L1_0$ 秩序構造をもつ強磁性合金であり、高い垂直磁気異方性と低い磁気摩擦定数をもつため、デバイス材料への応用が期待されています。このFePdをMRAMの磁気トンネル接合素子(MTJ)として利用するために、FePdにグラフェンを積層した構造(FePd/Gr)が最近実験的に合成され、応用上良好な性質を持つことが報告されています。その一方で、理論計算によるシミュレーションモデルを構築するために必要となる、界面の原子スケールの構造はまだよくわかっていない状況でした。

研究の内容

本研究では、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いました。解析にあたり、FePd(001)面上の炭素原子配置を網羅的に生成し、ひずみの小さなモデルを自動的に探索する方法を構築しました。

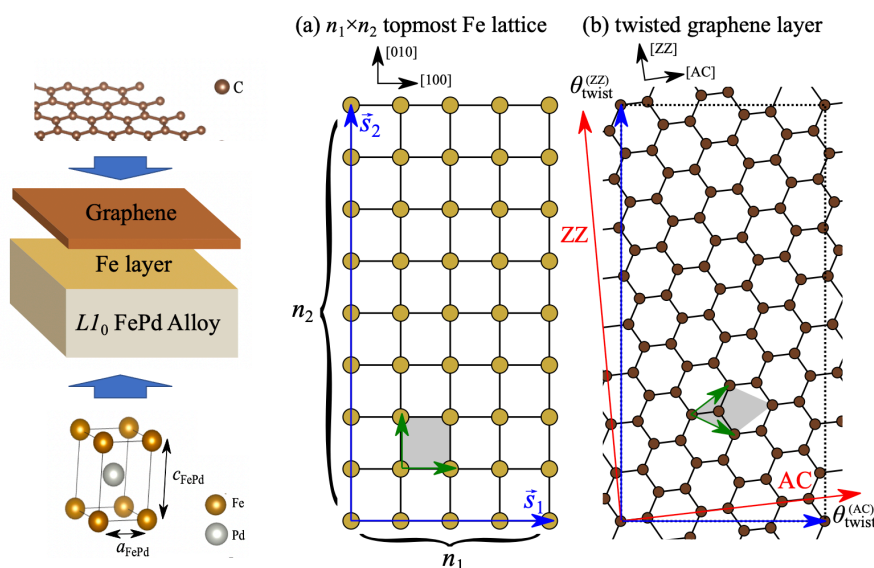


図 1 : FePd/Gr のツイスト界面モデルの例

いくつかの安定構造の候補のうち、ツイストした (Fe 格子とグラフェンが「ねじれた配置」で積層

された) 界面モデルが $-0.19 \sim -0.22 \text{ eV/atom}$ の大きな吸着エネルギーを持つことが明らかになりました (図 1)。また、吸着状態の特徴を調べると、ファンデルワールス力による物理吸着と化学吸着の中間的な振舞いが現れており、先行する実験でも報告されている「しなやかな」結合と「強い」混成軌道の存在が理論的にも確認されました。

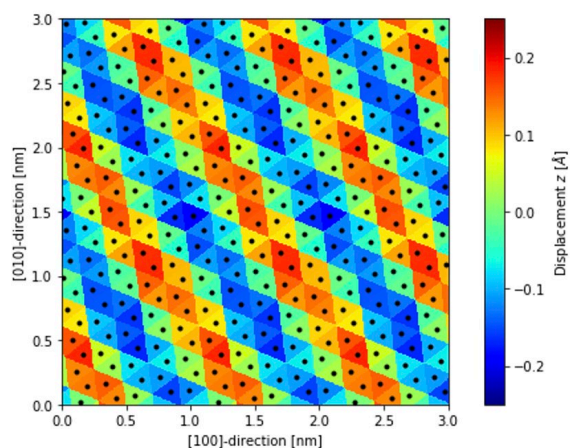


図 2 : ツイスト界面におけるグラフェン層の高さ分布
(黒丸は炭素原子、色は高さを表し、縞模様上の変形が発生している事がわかる)

また、吸着されたグラフェンにナノスケールのバックリング (図 2 のように層を構成する原子の上下位置が波状に変化する現象) が見られました。このような変形が FePd/Gr のような系に現れることはこれまで知られていませんでした。さらに、計算された層間距離や表面付近の磁氣的性質などに、実験結果とよく整合する振舞いが再現されていることが確認されました。

金属と二次元物質界面は理論・実験の両方から非常に興味を持たれている系です。先行する多くの研究はアルミニウムやニッケルなどの面心立方金属の(111)面と六方晶系のグラフェンなど格子対称性が整合する系を対象としています。このような系では、金属の組成の違いにより吸着メカニズム (物理吸着・化学吸着) が変化することや、モアレ超構造によるバックリングのような特徴的な振舞いが生じることが知られています。その一方で、今回我々が注目する $\text{FePd}(001)/\text{グラフェン}$ 界面のように格子対称性が大きく異なる合金表面において、原子配置や電子・磁気構造がどのようになるかはよく理解されているわけではありません。本研究の成果は、 FePd のほか FePt や CoPt などの強磁性合金と二次元物質界面の理論モデル構築に役立つと期待されます。

今後の展開

本研究では、 FePd/Gr 界面の様々なタイプの構造モデルを提案しています。少ない原子数で構築された計算モデルを用いれば、実際の実験を行うよりも低コストで研究開発を進めることが可能となります。磁気異方性や MTJ の伝導特性のように、スピントロニクスデバイスに重要な特性のシミュレーションが効率的に行えるようになり、デバイス機能予測やデザイン最適化、材料探索への応用が期待できます。

用語解説

①スピントロニクス

電流・電圧により情報を処理する従来の半導体デバイスにかわり、電子の磁氣的性質（スピン）も利用する新たなエレクトロニクス技術として近年注目を集める分野である。

低消費電力かつ高密度な磁気記録素子などの幅広い応用が期待される。

②グラフェン

固体炭素（グラファイト）を構成する原子1層だけからなる二次元層状物質である。炭素原子の共有結合による六員環を基本としたハニカム格子状の構造を有する。

③第一原理計算

量子力学の基礎方程式であるシュレディンガー方程式やコーンシャム方程式を解くことで物質の様々な特性を予測する手法である。物理学の基本定数のみにもとづく（経験的な予備知識をもちいない）理論計算であるため「第一原理」と呼ばれる。本研究では「密度汎関数理論」と呼ばれる枠組みに基づく手法を用いている。

④ファンデルワールス力

グラファイトなど層状物質において原子層間の引力の起源となる長距離相互作用である。今回のような金属・二次元物質界面の構造安定性を議論する際にファンデルワールス力は重要である。

謝辞

- ・本研究は、文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム「省エネルギー次世代半導体デバイス開発のための量子論マルチシミュレーション」(JPMXP1020200205)の一環として実施されたものです。
- ・本研究の一部は、スーパーコンピュータ「富岳」の計算資源の提供を受け、実施しました(課題番号: hp200122/hp150273)。
- ・本研究の一部は次の助成のもと行われました。
JSPS 科学研究費(JP16H03865) 日本学術振興会研究拠点形成事業(Core-to-Core Program, 課題番号 JPJSCCA20160005), 課題名「半導体集積デバイス向け二次元電子・スピン材料研究拠点」。
- ・計算資源として東京大学物性研究所の全国共同利用による System-B および System-C、筑波大学計算科学研究センター学際共同利用プロジェクトによるスーパーコンピュータ Oakforest-PACS および Wisteria Odyssey を使用しました。

論文情報

- ・タイトル

“Density functional study of twisted graphene $L1_0$ -FePd heterogeneous interface”

DOI : doi: 10.1063/5.0101703

- ・著者

Mitsuharu Uemoto, Hayato Adachi, Hiroshi Naganuma and Tomoya Ono

- ・掲載誌

Journal of Applied Physics

問い合わせ先

< 研究について >

■神戸大学大学院工学研究科電気電子工学専攻

助教 植本光治

TEL : 078-803-6497 E-mail : uemoto@eedept.kohe-u.ac.jp

教授 小野倫也

TEL : 078-803-6100 E-mail : t.ono@eedept.kobe-u.ac.jp

東北大学国際集積エレクトロニクス研究開発センター

准教授 永沼博

TEL : 022-796-3419 E-mail : hiroshi.naganuma.c3@tohoku.ac.jp

< 報道担当 >

■神戸大学総務部広報課

TEL : 078-803-5453 E-mail : ppr-kouhoushitsu@office.kobe-u.ac.jp

東北大学国際集積エレクトロニクス研究開発センター支援室

TEL : 022-796-3410 E-mail : support-office@cies.tohoku.ac.jp