OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	Theoretical Study on Electric Field Control of Magnetism in 2D Materials
Author(s)	Nguyen, Thi Phuong Thao
Citation	大阪大学, 2021, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/82218
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

Form 3

Abstract of Thesis

Name （NGUYEN THI PHUONG THAO）	
Title	Theoretical Study on Electric Field Control of Magnetism in 2D Materials （二次元物質における磁性の電場制御に関する理論的研究）

Abstract of Thesis

The electric field control of magnetism and magnetic properties has been achieved across several different materials systems in the fields of information storage and processing. For example, applying an electric field to ferromagnetic metals changes the Fermi level position at the interface that governs the magnetocrystalline anisotropy of the metal systems. In two-dimensional (2D) materials, voltage-controlled switching between antiferromagnetic and ferromagnetic states has been reported as a promising feature for potential applications. This thesis presents the first-principles study based on the density functional theory in the effect of the electric field in such materials, discusses our current understanding of the mechanisms. Firstly, the magnetocrystalline anisotropy of Co-based 3*d* transition-metal thin films is systematically investigated. The computational results predict that large perpendicular magnetocrystalline anisotropy can be achieved by tuning the atomic-layer alignments in Ni-Co thin film. I discovered that not only the on-site spin-orbit coupling of 3*d* elements determines the magnetocrystalline anisotropy energy but also the strong hybridization between these elements plays a constructive role to enhance the perpendicular magnetocrystalline anisotropy. The effect of the external electric field in the magnetocrystalline anisotropy is small in this Co-based thin film due to large screening effect in metallic system. Thus, playing with an insulating material to reduce the charge screening effect can promote the application of electric field.

Following by the above study, I focus on the electric field effect on magnetic properties of 2D VI_3 bilayer. My first-principles analysis highlights the role of trigonal crystal-field effects in comparison with the CrI_3 prototypical case, where the effects are absent. In VI_3 bilayers, the empty a_{1g} state consistent with the observed trigonal distortion is found to play a crucial role in both stabilizing the insulating state and in determining the inter-layer magnetic interaction in two different VI_3 stackings (labelled AB and AB'). Upon application of electric fields perpendicular to the slab, I find that the magnetic ground-state in the AB' stacking can be switched from antiferromagnetic to ferromagnetic, suggesting VI_3 bilayer as an appealing candidate for electric-field-driven miniaturized spintronic devices.

Keywords: Electric field, magnetocrystalline anisotropy, magnetic stability, thin films, 2D magnetic materials

様式 7

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏　名	（NGUYEN THI PHUONG THAO）		
	（職）		氏　名
論文審査担当者	主 査	教授	小口　多美夫
	副 査	教授	森川　良忠
	副 査	教授	浜口　智志
	副 査	准教授	佐藤　和則

論文審査の結果の要旨

二次元物質系における特異な電子状態に関する研究には長い歴史がある。近年、良質の薄膜試料の合成が可能となり、1980 年代における金属多層膜系での巨大磁気抵抗効果やトンネル磁気抵抗効果の発見以降、磁性デバイスへの応用で大きな展開を見せている。また、今世紀に入り、グラファイトの剥離により作られた単層膜グラフェンの物理は Dirac 電子の物理として学術的に大きな注目を集め、センサーデバイス等への応用にも大きな期待がなされている。本論文では、二次元物質系の磁気デバイスへの応用を見据えて、電場による磁性の制御について第一原理計算による電子論の立場からの研究が記述されている。電子のもつスピンは従来より永久磁石や記憶媒体としての応用がなされてきたが、巨大磁気抵抗効果の発見以降、省エネルギーに繋がる新たなデバイス応用の機構と強く認識され、スピントロニクス分野として発展を続けている。

本論文でまず注目されたのは金属多層膜における磁気異方性の電場制御である。Co 層と種々の遷移金属層を組合せて多層膜をモデル化し、その磁気異方性の積層構造依存性が第一原理計算により調べられている。その中で、Ni-Co 多層膜において大きな垂直磁気異方性を示す積層構造を発見し、その垂直磁気異方性の増大効果の起源について、純 Co 薄膜と Ni-Co 薄膜での機構の定性的違いをサイト間スピン軌道相互作用の重要性に基づき議論がなされた。また、fcc 様積層構造と hcp 様積層構造の相対的な安定性についてもエネルギー計算に基づき言及している。しかしながら、これら金属系多層膜での電場効果は伝導電子による電荷遮蔽に起因してたいへん小さく、応用への展開が難しいことが示された。

このことを踏まえて、層状構造を有する半導体系である VI_3 の解析がなされている。類似構造を有する CrI_3 では既に磁性の電場制御が報告されているが、VI_3 に関してはそのバルク合成と構造に関する研究はあるもののその磁性に関する詳細な解析はない。バルク構造から切り出した二種類の積層構造（AB 積層と AB’積層）の二重層 VI_3 をモデルとし、まず構造決定ののち電子状態計算が実行された。CrI_3 では Cr^{3+} から期待される d^3 配置により Cr 周りの配位構造は立方晶的に維持され三重縮退の t_{2g} 軌道が占有される。一方、VI_3 では、V^{3+} すなわち d^2 配置での t_{2g} 軌道はヤーン・テラー効果により a_{1g} 軌道と二重縮退の e_g’軌道に分裂し、その後者だけが占有され、配位構造もわずかに三方晶的に歪む。AB 及び AB’積層構造と二重層間が強磁性的及び反強磁性的な磁気秩序を有する 4 つ系のエネルギー計算から AB 積層構造では強磁性的磁気配置が安定で、AB’積層構造では反強磁性的磁気配置が安定であることが示された。V イオン間

の磁気的相互作用が見積もられ、磁性イオンに局在したワニエ軌道間の仮想ホッピング機構に基づく解析によりその符号と大きさが議論された。AB 積層と AB’積層をもつ二重層 VI_3 に対して積層方向に垂直に電場をかけることで、両積層構造共に強磁性的カップリングが増大し、AB’積層構造では元々安定な反強磁性的磁気配置から強磁性的磁気配置に転移する現象が見つけられた。この電場による磁気転移現象は、電場による二重層 V イオンの軌道準位の相対的変化を考慮した仮想ホッピング機構で解釈できることが示された。

以上のように、本論文は二次元物質系の典型としての金属多層膜と半導体薄膜に対して磁性における電場効果を議論したものであり、学術的にも意義が高く、応用面へのインパクトも大きい。

よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。