OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	Theoretical Study of Gap Opening/Closing Control of Dirac Cone Using Spin-dependent Potentials in Graphene-based Magnetic Junctions
Author(s)	Wicaksono, Yusuf
Citation	大阪大学, 2022, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/89505
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 （Yusuf Wicaksono）	
Title	Theoretical Study of Gap Opening/Closing Control of Dirac Cone Using Spin-dependent Potentials in Graphene-based Magnetic Junctions （グラフェン系磁気接合におけるスピン依存ポテンシャルを用いた ディラックコーンのギャップ開閉制御の理論的研究）

Abstract of Thesis

This thesis suggests a successful design of a graphene-based spintronic device with high performance by proposing a perspective of in-plane conductivity change of graphene by controlling the Dirac cone of graphene in a non-volatile way. For that purpose, a first-principles theoretical study is presented on the controllable mass-gapped Dirac cone (MGDC) mechanism of graphene using spin-dependent potentials in graphene-based magnetic junctions. Using a specific stacking configuration design at the interface of graphene sandwiching with magnetic materials, MGDC of graphene can be open and close depending on the magnetic alignment of the upper and lower magnetic materials.

The first investigation was done on Ni(111)/graphene/Ni(111) magnetic junction (MJ). In this MJ, the MGDC of graphene is successfully controlled using the magnetic alignment of the Ni slabs. When the magnetic moments of the upper and lower Ni(111) slabs have an antiparallel configuration (APC) state, the MGDC is open. However, when the magnetic moments of the upper and lower Ni(111) slabs have a parallel configuration (PC) state, the MGDC is closed. This characteristic implies that the pseudospin between sublattices A and B can be controlled to preserve or break the chiral symmetry, making the MGDC controllable.

This controllable MGDC on Ni/graphene/Ni MJ creates a colossal in-plane magnetoresistance (IMR) ratio for graphene. Transmission probability calculation, which represents the conductance, was done using Landauer-Buttiker formalism within non-equilibrium Green's function method. An atomic-scale width of Ni slabs is considered (~12.08 Å) sandwiching some graphene parts. From the calculation, a colossal IMR up to 3100% was observed at $E - E_F = 0.2$ eV. This colossal IMR comes from the electronic states created from pd-hybridization between graphene and Ni slabs. Its characteristics depend on Ni slabs' magnetic alignment; a high (low) density of states is created when the PC (APC) state is considered. On the other hand, when the nanometer scale width of Ni slabs is considered, a colossal IMR beyond 3100% was expected at $E - E_F = 0.65$ eV, which corresponds to the controllable MGDC of graphene.

The magnetoresistance changes beyond the charge neutrality point can be overcome by several methods—one of them by introducing a gate voltage. The hBN layer or atomic gas can be introduced between the graphene layer and Ni slabs to optimize the controllability of graphene's Fermi energy while keeping the performance of MGDC controllability. As a result, the controllable induced magnetic moment on graphene is replaced through charge transfer to magnetic proximity effect. The van der Waals interactions between graphene and hBN layers led to easy controllability of graphene Fermi energy by using gate voltage. Furthermore, it was found that controlling the induced magnetic moment on graphene can lead to controllable MGDC size. Additionally, the electronegativity and charge transfer at the interface are responsible for graphene's charge neutrality.

Finally, controlling MGDC of graphene through various approaches becomes a foundation for realizing a spintronic device based on graphene in-plane conductance. Furthermore, the new findings show the high performance of graphene-based magnetic junction spintronic devices and functionality beyond the conventional spintronic device.

様式７

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏　名　（　Yusuf Wicaksono　）			
	（職）		氏　　名
論文審査担当者	主 査	教　授	石原　一
	副 査	教　授	芦田　昌明
	副 査	教　授	田中　秀和
	副 査	教　授	草部　浩一　（兵庫県立大学大学院理学研究科）

論文審査の結果の要旨

グラフェンの特性であるゼロギャップ半導体としての性質を活用した電子デバイスは、単層グラフェンの電磁応答が報告されて以来、研究者を引き付け続けている。そこで、人工的な構造を付加して外場制御することによりディラック・コーンのギャップを開閉する方法を理論的解析から与えて、電子デバイスの物質解を提案することが、本博士論文の主要なテーマである。論文提出者のWicaksonoは、Niの微結晶によりグラフェンを上下から対称的に挟み込んだ構造が、その解を与えることを報告した。さらに現実的な構造でも充分な応答特性が現れることを、明らかにしている。

Wicaksonoは、特にスピンバルブ構造とトンネル磁気抵抗効果(TMR)素子において、グラフェンのギャップ開閉機構の応用が可能であることを論じている。電子状態理論に基づく計算科学的手法が有効であることを示した後、４つの章において、ナノメートルスケールの超微細構造が、高いTMRを発すること、それが強磁性Niからの磁気的近接効果によるスピン依存ポテンシャル制御方法を与えることを示した。カイラル対称性を人為的に変化させ、トポロジカル量子効果でギャップ開閉を行い、スピン依存トンネル電流を制御することが出来る。1nm程度の幅のNi構造でもこの効果は顕著なTMRを発生しうることが、非平衡グリーン関数法を応用した計算により示されている。

Wicaksonoは、さらにNiとグラフェンの間に単層hBNを挟んだNi/hBN/Graphene/hBN/Ni構造を用いると、ゲートバイアスを掛ける構造を設計することや、グラフェン面の横方向の位置に依存して電流が変化するメカトロニクス・デバイスも設計できることも示している。このような複数の出力準位を示す構造からは、次世代電子デバイスの設計が拓かれる可能性がある。

以上の成果は今後の炭素材料系研究の発展に貢献するものと判断される。よって、本論文を、博士（工学）の学位論文として価値のあるものと認める。