



Title	First-Principles Study on the Role of Vacancies in 2D Materials: Improving Magnetic Tunnel Junctions for Future Spintronics Applications
Author(s)	Harfah, Halimah
Citation	大阪大学, 2024, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/96104
rights	
Note	やむを得ない事由があると学位審査研究科が承認したため、全文に代えてその内容の要約を公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

Abstract of Thesis

Name (Halimah Harfah)	
Title	First-Principles Study on the Role of Vacancies in 2D Materials: Improving Magnetic Tunnel Junctions for Future Spintronics Applications (二次元材料における空孔の役割に関する第一原理研究：将来のスピン트로ニクス応用に向けた磁気トンネル接合の改善)
Abstract of Thesis This thesis presents a theoretical study based on first-principles calculations that focuses on the development and optimization of MTJ based on 2D materials. The investigation begins with an in-depth exploration of the physical and chemical characteristics of MTJ using 2D materials such as hBN and graphene. The importance of understanding the interface as well as its influence on the magnetic response and transport properties of MTJ is highlighted. Furthermore, the investigation also includes a systematic analysis of the impact of vacancies in hBN and graphene on the performance of MTJ devices. Firstly, we focus on the investigation of the interface between hexagonal boron nitride (hBN) and Ni(111) layers. We found that <i>pd</i>-hybridization bonds between the N and Ni atoms stabilized the structure with the antiparallel configuration (APC) showed the most favorable magnetic alignment, in agreement with previous experimental study. Interestingly, we observed a bistable state with electrical polarization when APC is chosen, revealing the spin-polarized current controlled by reversing the electric field-induced polarization. The second study focuses on the investigation of Ni/nhBN/Ni MTJs with different numbers of layers, <i>n</i> (2, 3, 4, and 5). Interestingly, the high TMR ratio occurred at slightly higher energies, specifically 0.28 eV for <i>n</i> = 2 and 0.34 eV for <i>n</i> > 2. When <i>n</i> > 2, a proximity effect occurs, resulting in the generation of an evanescent wave. To strengthen the proximity effect, the single layer hBN in the 3hBN insulator barrier is replaced with graphene (Gr), forming a hBN-Gr-hBN structure. Remarkably, this MTJ exhibits a TMR ratio as high as 1200% at energies slightly higher than the Fermi energy. However, to shift the high TMR ratio to the Fermi energy, doping the Ni layer can be done at the interface with an inert metal, such as platinum. Further, we introduced the monoatomic boron vacancy (V_B) in 2D materials of the MTJ device. At first, the effect of V_B was investigated on Ni/hBN(V_B)-hBN/Ni and Ni/hBN(V_B)-hBN(V_B)/Ni MTJs. Our results show that the vacancy reduces the transmission peak, but it can create a new transmission channel when two localized states interacted with each other. When Ni/hBN-hBN(V_B)-hBN/Ni MTJ was considered, the transmission of electrons was increased on the spin majority channel due to polarization of hBN(V_B). Finally, Ni/hBN-Gr(V)-hBN/Ni MTJ was considered, where the localized state creates a new transmission channel on spin majority and minority channels. Lastly, we utilized V_B to introduce a novel van der Waals-based MTJ with only three atomic layer thicknesses, namely hBN(V_B)/Gr/hBN(V_B). Transmission probability calculations revealed the highest TMR ratio observed with approximately 400% when Cu metal was used as electrodes. Additionally, the intriguing interaction between the vacancies opens promising prospects for utilizing this MTJ as an optimal neuromorphic device. Finally, a proposal was made for the successful design of a new MTJ device using modified graphene or hBN, by introducing a monoatomic vacancy in 2D materials. These findings highlight an important factor that could contribute to the future utilization of 2D materials as MTJ devices.	

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 (Halimah Harfah)			
論文審査担当者	(職) 氏 名		
	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 スピントロニクスデバイスの開発が進み、MRAM市場も成長を続けている。その基盤であるTMRデバイスやスピンバルブの特性は、原子スケールの物質構造に大きく依存する。既知のデバイスを超える特性を示す材料とデバイス構造の発見が求められている。 Halimah Harfahは、原子層材料である六方晶窒化ホウ素 (hBN) を応用し、理論計算から新たな知見を得てきた。大阪大学理論グループによって報告されたNi/(hBN)_n/Niトンネル接合では、1200を超えるトンネル磁気抵抗比 (TMR) が示唆されていた。しかし、Harfah自身も参加したこの研究でも、0.2eVを超えるゲート電圧を印加する必要があり、トンネル電流量も大きく減る欠点があった。Ni/hBN/Graphene/hBN/Ni構造でも、ゲートバイアスが必要で、さらなる改良が求められていた。これに対してHarfahは、単層hBNの特性を活用したデバイス構造を提案した。その最初のものがNi/hBN/Niにおける交差相関デバイスであった。彼女はさらに、ホウ素欠陥 (V_B) に着目し、B欠陥を持つhBN (V_B-hBN) を用いて自発磁化の発生を理論的に確認し、グラフェンとヘテロ構造を作成することで、ゼロバイアスでもTMR効果を発現する素子構造やトンネル電流量を確保できる素子構造を見出した。加えて、電極をCuに置き換えてもV_B-hBNの面内強磁性状態が維持されることを理論的に予測し、Cu/V_B-hBN/Graphene/V_B-hBN/Cu接合がスピン流発生を伴う強磁性フィルター素子となりうることを示した。V_BをもつhBNにおける自発磁化は、光学測定によっても確認されている。したがって、彼女が提案する構造は、実験で実現される可能性が十分に期待できる。複数の新しい特性を示すこれらのデバイス構造は、次世代のスピントロニクスデバイスを実現する可能性を秘めている。 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。			