

Magnétisme à l'interface métaux-molécules

K. Bairagi¹, A. Bellec¹, J. Lagoute¹, Y. Girard¹, C. Chacon¹, S. Rousset¹, V. Repain¹

¹ Laboratoire MPQ, UMR 7162, Université Paris Diderot et CNRS, 10 rue A. Domon et L. Duquet, 75205 Paris Cedex

La compréhension du couplage entre une couche moléculaire et une électrode magnétique est un élément central de l'électronique de spin moléculaire. Nous avons abordé cette question par des expériences sous ultra-vide de microscopie à effet tunnel polarisée en spin et d'effet Kerr magnéto-optique. Nous avons ainsi pu montrer qu'une molécule unique pouvait fortement se polariser en spin par contact avec un substrat magnétique¹, pour certaines géométries d'adsorption et symétries du substrat. Nous avons également mis en évidence l'influence importante d'une couche moléculaire sur l'anisotropie magnétique interfaciale, résultat a priori peu intuitif du fait du faible couplage spin-orbite des matériaux organiques^{2,3}.

Nous avons plus particulièrement travaillé sur les molécules de C₆₀, relativement simples à simuler de par leur haute symétrie. L'adsorption de ces molécules sur des substrats de cobalt et de chrome modifie ainsi leurs propriétés ainsi que celles du substrat.

Nous avons dans un premier temps réalisé des expériences de microscopie à effet tunnel polarisé en spin sur des molécules individuelles déposées sur une surface de chrome et de cobalt. Sur le chrome, nous avons mesuré une forte polarisation de spin du C₆₀ en géométrie d'adsorption pentagonale¹ alors qu'en géométrie hexagonale et aussi sur le cobalt, le C₆₀ ne montre pas de polarisation évidente dans les spectres tunnel. Des comparaisons avec des calculs ab initio réalisés au SPEC (CEA Saclay) permettent de mieux comprendre l'influence du substrat et des géométries d'adsorption sur les propriétés observées. Nous montrerons notamment que les spectres tunnel ne reflètent pas toujours les propriétés intrinsèques de la molécule.

Nous avons également étudié la modification du magnétisme du cobalt par magnéto-optique in situ lorsqu'une couche de C₆₀ ou d'alkanethiols est déposée sur des films ultraminces Co/Au(111) et Co/Pt(111)^{2,3}. Étonnamment, la couche moléculaire peut induire une transition de réorientation de l'aimantation, favorisant l'aimantation hors plan. Des mesures quantitatives d'anisotropie montrent que l'anisotropie d'interface induite par les molécules de C₆₀ est de l'ordre de 0,3 mJ/m² sur Co/Au(111). Des calculs ab initio également réalisés au SPEC montrent clairement que cette modification de l'anisotropie vient de l'hybridation spécifique entre les orbitales p_z des molécules et les orbitales dz² du cobalt. La généralité de ce résultat sera démontrée sur d'autres couples de molécules et substrats.

1. "Large Magnetoresistance through a Single Molecule due to a Spin-Split Hybridized Orbital", S. L. Kawahara, J. Lagoute, V. Repain, C. Chacon, Y. Girard, S. Rousset, A. Smogunov, and C. Barreateau, *Nano Letters* 12, 4558 (2012).

2. "Tuning the Magnetic Anisotropy at a Molecule-Metal Interface", K. Bairagi, A. Bellec, V. Repain, C. Chacon, Y. Girard, Y. Garreau, J. Lagoute, S. Rousset, R. Breitwieser, Yu-Cheng Hu, Yen Cheng Chao, Woei Wu Pai, D. Li, A. Smogunov, and C. Barreateau, *Physical Review Letters* 114, 247203 (2015).

3. "Change of cobalt magnetic anisotropy and spin polarization with alkanethiolates self-assembled monolayers", P. Campiglio, R. Breitwieser, V. Repain, S. Guitteny, C. Chacon, A. Bellec, J. Lagoute, Y. Girard, S. Rousset, A. Sassella, M. Imam, and S. Narasimhan, *New Journal of Physics* 17, 063022 (2015).