18a-S2-1

第一原理計算による Fe/Cu 薄膜の電子状態解析

Electronic structure analysis for Fe/Cu thin films by first-principle calculations

○立津 慶幸 [1]，常行 真司 [1,2]，合田 義弘 [1,3]

Univ. Tokyo [1], ISSP [2], Tokyo Tech. [3]

°Yasutomi Tatetsu[1], Shinji Tsuneyuki[1,2], and Yoshihiro Gohda[1,3]

E-mail: tatetsu@cms.phys.s.u-tokyo.ac.jp

近年、実験技術の向上を背景に薄膜などナノスケールでの磁性体開発が進んでおり、超高密磁性記憶デバイス等の応用例が考えられている。資源的、工業的な側面から使用する元素を考えると、鉄(Fe)は安価な上、磁性を示すため利用価値が高い。通常、fcc 構造を持つ Fe は約 900℃以上の温度領域で存在する。しかし室温またはそれ以下の温度領域において、fcc-Cu の金属基板上に Fe を堆積させることにより熱的非平衡である fcc 構造の Fe がエピタキシャル成長する。この状態における Fe の結晶構造および磁性状態に関しては多数の研究報告があり、Fe の原子層 (ML) 数の変化によって様々である。X 線磁気円二色性の実験においては、4ML 以下における各層の磁気構造は強磁性的で、面直磁気異方性を示し、スピン磁気モーメントは、2ML から 4ML においてそれぞれ 2.3μ_B、2.4μ_B、2.5μ_B であることが報告されている[1]。この値は bcc-Fe の値(2.2μ_B)に比べ大きい。また、Fe の層厚が 5ML から 11ML の場合、最表面の 2ML は互いに強磁性的に結合し、内側の層は反強磁性状態またはスピン密度波の状態が観測されており、磁気構造は複雑である[2]。

第一原理計算からの磁気構造解析も進められているが、手法もしくは精度上の問題からか 4ML 以下の磁気構造も解釈が異なる。そこで本研究では、fcc-Fe/Cu(001)における Fe の磁気構造の理解のために、強磁性状態が報告されている 4ML までの第一原理計算を行った。計算プログラムとしては、擬原子基底を用いた OpenMX を使用した[3]。全エネルギー計算における最小値から決定した Cu の格子定数は 3.64 Å であり、Fe の表面方向の格子定数もこれに一致させるように、結晶構造を仮定した。モデル構造としては、基板の Cu を 7ML、Fe を 1～4ML まで積み上げ、その上を真空層としたスラブモデルである。Fe の各層を強磁性状態と仮定して計算を行った場合、各 Fe 層のスピン磁気モーメントは、Cu との界面および表面で大きな値を示し、内部の層では理論計算によって求めた fcc-Fe バルクの値(2.59μ_B)に近い値を示す。講演では、より詳細な磁気構造および電子状態に関する発表を行う。

[1] H. Abe *et al*., Phys. Rev. B **77**, 054409 (2008).

[2] D. Li *et al*., Phys. Rev. Lett. **72**, 3112 (1994).

[3] http://www.openmx-square.org.

© 2014 年　応用物理学会