

Ag(111)表面上の Co 薄膜におけるモアレ構造と磁性の第一原理計算**Ab-initio calculation of the moiré structure and magnetism in Co thin film on Ag(111)**東大工¹, 東大物性研², [○]南谷英美¹, 吉田靖雄², 長谷川幸雄¹, 渡邊聡²Univ. Tokyo Dept. Eng.¹, Univ. Tokyo ISSP², [○]Emi Minamitani¹, Yasuo Yoshida², Yukio Hasegawa²,Satoshi Watanabe¹E-mail: eminamitani@cello.t.u-tokyo.ac.jp

薄膜やナノアイランドにおける磁性に対して、高密度情報ストレージデバイスへの応用に向けて盛んに研究が行われている。ストレージデバイスへの応用においてもっとも重要となる物性が磁気異方性である。これまでに、磁性薄膜、磁性ナノアイランドはバルクの場合とは異なる磁気異方性を持つことや、磁気異方に膜厚依存性が存在することが実験・理論の双方から報告されている。これらの表面ナノ構造における磁気異方性の変調の原因を探ることが、今後の応用展開に向けて重要であると考えられる。

本研究では Ag(111)表面上の Co 薄膜に注目する。金属表面上の Co 薄膜については、これまで Cu(111)表面や Pt(111)表面など、多数の表面においてアイランド構造が形成されることが確認されている。Ag(111)表面上においても同様のアイランド構造が形成されるが、興味深いことに走査トンネル顕微鏡 (STM) トポグラフ像にモアレ形状が現れ[1]、さらに強いモアレ形状と弱いモアレ形状を持つ 2 種類のアイランドが存在することが判明した。スピン偏極探針を用いた STM 観察結果は、強いモアレ形状と弱いモアレ形状を持つアイランドでは、磁場に対するアイランドが持つ磁化の応答が異なることを示した[2]。これらの結果は、モアレ形状と磁気異方に何らかの関係があることを示唆している。

本研究では、これらの原因が Co 薄膜の積層欠陥にあるのではないかと考えた。Co はバルクでは hcp 構造を取るが、Cu(001)表面に積層した場合には fcc 構造の薄膜が形成されることが報告されている[3]。そのため、薄膜においては、バルクと異なり hcp と fcc 両方の構造が積層欠陥を介して存在しているのではないかと考えられる。実験的には Co アイランドの膜厚は 5~6ML であると推定される。そこで、Ag(111)面上の 5ML Co 薄膜において hcp 構造と、中心に積層欠陥が存在し fcc 構造様のスタッキングを取る構造に対して、構造緩和計算と電子状態計算を行った。その結果、hcp 構造を取った状態では STM トポグラフ像のシミュレーション結果に強いモアレパターンが現れるが、fcc 構造の場合にはそのモアレパターンが弱まることを判明した。また、同様の hcp/fcc スタッキングを持ったフリースタンディングの 5ML Co 薄膜に対して磁気異方性エネルギーの計算を行ったところ、hcp 構造ではユニットセルあたり 0.42meV の垂直磁気異方性エネルギーを持つが、fcc 構造ではそれが 0.17 meV まで低下することが判明した。この磁気異方性の違いが、スピン偏極 STM 観察で得られた磁化応答の違いを生んでいると考えられる。

[1] T. G. Gopakumar *et al.*, Chem. Phys. Lett. 484, 59 (2009). [2] Y. Yoshida *et al.*, in preparation. [3] P. D. Zampieri *et al.*, Phys. Rev. Lett. 58, 933 (1987)