銅(111)上の鉄ナノワイヤーにおける磁性*

岸 智弥^{*1}・中西 寛^{*1}・笠井 秀明^{*1}Wilson Agerico DIÑO^{*1}・小森 文夫^{*2}

(受理2002年11月22日, 掲載決定2003年2月1日)

Magnetic Properties of Fe Nanowires on Cu(111)

Tomoya KISHI^{*1}, Hiroshi NAKANISHI^{*1}, Hideaki KASAI^{*1},Wilson A. DIÑO^{*1} and Fumio KOMORI^{*2}^{*1}(Department of Applied Physics, Osaka University, Suita, Osaka 565-0871, Japan)^{*2}(Institute for Solid State Physics, University of Tokyo, Kashiwa, Chiba 277-8587, Japan)

(Received November 22, 2002, Accepted February 1, 2003)

We investigate the magnetic properties of Fe nanowires on Cu(111), based on the density functional theory. As for the structures of Fe nanowires, we consider a linear structure and a zigzag structure with ferromagnetic state. We find that the magnetic moment of the Fe nanowire is larger than that corresponding to bulk Fe and a thin film of Fe. On the basis of numerical results, we discuss the origin of these magnetic properties.

1. はじめに

近年, 微細加工技術の発達によりナノメートルスケールの構造体が目を集めている. 特に磁性原子から成る薄膜, 多層膜, 原子架橋, 細線, ドットといったナノ構造体の研究はスピントロニクスデバイスの実現を目指して盛んに行われている¹⁻⁶⁾.

磁性ナノワイヤーの銅表面上での振る舞いを調べることもスピントロニクスにとって有用であり, すでに銅微斜面上に形成された鉄ナノワイヤーに関する研究は実験, 理論の両面から行われている^{7,8)}. また, 走査トンネル顕微鏡 (Scanning Tunneling Microscopy: STM) を用いた原子操作によって銅表面上に量子囲いや文字等, 任意の形状を人為的に作成できるようになっている⁹⁾. この技術を用いれば銅の平坦な表面にも鉄原子を1次元的に並べ, ナノワイヤーを実現することが可能であると考へ, 我々は銅(111)上に横たわる鉄ナノワイヤーについて研究を行った. その結果, ワイヤーの構造は表面に

対して平坦で, ワイヤーと銅表面の距離が0.205 nmの時に最も安定であることがこれまでにわかった¹⁰⁾. 本論文ではこの構造における磁性について調べた. 次章では計算方法を紹介し, 第3章では計算結果とその考察を示す. 最後に第4章をまとめとする.

2. 計算方法

本研究では銅(111)に銅3原子層のスラブ模型を用いた. 鉄ナノワイヤーとして Fig. 1 に示す1本間隔で並べられた直線構造とジグザグ構造の2通りを考えた. 各銅原子層はユニットセル内に4個銅原子を含み, 鉄ナノワイヤーはfccホローサイトに吸着させた2個の鉄原子で表した. ワイヤー内の鉄原子間の距離は表面の銅と同じ0.256 nmとなる. 隣接するスラブ間の真空層は銅5原子層分とした. 鉄ナノワイヤーは表面に平行で銅表面からの距離は0.205 nmである. このナノワイヤーについて第一原理計算を行った. 計算には平面波を基底関数にとり, 擬ポテンシャルを用いた第一原理計算コード DACAPO を用いて, 交換相関エネルギーを一般化密度勾配近似で取り扱った¹¹⁾. その際の平面波のカットオフエネルギーは35Ryとし, 2次元ブリュアンゾーン内の

* 平成14年10月17日 第43回真空に関する連合講演会で発表

^{*1} 大阪大学大学院工学研究科 (〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1)^{*2} 東京大学物性研究所 (〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5)

Fig. 1 Top view of our model system showing wires with a linear structure (a) and a zigzag structure (b) on the Cu(111). The rectangles indicate the surface unit cells. Gray circles indicate Cu atoms in the first layer and white circles indicate Fe atoms.

Fig. 2 Contour plot of the electron spin distribution in the cross section parallel to the surface at the position of the Fe nanowire for a linear structure with ferromagnetic state. Fe nanowire-Cu surface distance is 0.206 nm.

サンプリングポイントは18点とした。計算の初期状態としてワイヤーの鉄原子の磁気モーメントが $2.1 \mu_B$ である強磁性状態を与え、スピン偏極計算を行った。

3. 計算結果と考察

鉄ナノワイヤーのスピン密度分布を Fig. 2 および Fig. 3 に示す。どちらの構造においても電荷密度¹⁰⁾は最隣接鉄原子間に広く分布していたのに対してスピン密度分布は鉄原子に局在していることがわかる。このような分布は鉄バルクにおいても同様に見られる。これは、ワイヤーの鉄原子間距離がバルクでの値 0.248 nm とわずかしちかわらないためと考えられる。

鉄原子の磁気モーメントは直線構造とジグザグ構造の

Fig. 3 Same as Fig. 2, but for the zigzag structure.

Fig. 4 LDOS for (solid line) Fe atom and (dashed line) Cu atom of first layer. E_F is the Fermi level.

どちらにおいても原子1個あたり $3.1 \mu_B$ となった。これは鉄バルクにおける値 $2.0 \mu_B$ よりもかなり大きな値である。一方、銅原子の磁気モーメントは、ほぼ0である。この時の各原子におけるエネルギー局所状態密度 (Local Density of States: LDOS) を Fig. 4 および Fig. 5 に示す。鉄原子では、バルクの場合と比べて多数スピン電子のdバンドの幅が狭まり、状態密度が大きくなっている。逆に、少数スピン電子のdバンドは高エネルギー側にシフトし、少数スピン電子の数が減っていることがわかる。その結果、鉄ナノワイヤーの磁気モーメントが大きくなっている。銅(111)上の鉄1原子膜の磁気モーメントはワイヤーとバルクの中間の値 $2.7 \mu_B$ であり⁶⁾、構造の次元性が低下するにつれて上記状態密度の変化の傾向が顕著になり、磁気モーメントが大きくなることがわかる。銅第1層の状態密度は鉄ナノワイヤーのスピン偏極の影響を受け、スピンの対称性は崩れているが、dバンドがフェルミ準位以下にあるので状態密度が変化しても磁気モーメントは0のまま変化しない。銅第

Fig. 5 Same as Fig. 4, but for the zigzag structure.

2層から内部層ではスピンの対称性は回復し、銅バルクの状態密度に漸近していく。

4. ま と め

銅(111)上に形成された鉄ナノワイヤーの磁性について第一原理計算を用いて調べた。その結果、強磁性状態の鉄ナノワイヤーでは直線構造とジグザグ構造の両方で鉄原子1個あたりの磁気モーメントは $3.1 \mu_B$ と、バルクの場合と比べてかなり大きくなり、スピンは各鉄原子に局在していることがわかった。また、鉄ナノワイヤーのフェルミ準位付近での状態密度が少数スピン電子側に偏っていることから、ワイヤーにはスピン偏極電流が流れることが期待されるが、正確な議論のためにはフェルミ面近傍のバンド分散を詳細に調べる必要がある。この計算は現在進行中である。

このような銅(111)上の鉄ナノワイヤーは、スピン偏極電流の輸送やスピン注入素子としての応用が期待でき、学術的に興味深いばかりでなく産業への応用という点でも重要である。

謝辞

本研究は文部科学省科学研究費補助金、COE形成基礎研究(10CE2004)、基盤研究(C)(11640375, 13650026)、科学技術振興調整費(先導的研究等の推進)「ナノスピントロニクスデザインと創製」(平成14年度採択)、新エネルギー・産業技術総合開発機構「材料ナノテクノロジープログラム」、および科学技術振興事業団計算科学技術活用型特定研究開発推進事業の援助を受けています。また、本研究における計算の一部は東京大学物性研究所、京都大学基礎物理学研究所、および科学技術振興事業団の計算機を用いて行われています。

〔文 献〕

- 1) S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnar, M. L. Roukes, A. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova and D. M. Treger: *Science*, **294** (2000) 1488.
- 2) K.-D. Lee, T. Imori and F. Komori: *Surf. Sci.*, **454-456** (2000) 860.
- 3) Y. Morigaki, H. Nakanishi, H. Kasai and A. Okiji: *J. Appl. Phys.*, **88** (2000) 2682.
- 4) H. Nakanishi, H. Kasai, T. Kishi, F. Komori and A. Okiji: *Surf. Sci.*, **514** (2002) 156.
- 5) H. Kasai, H. Nakanishi, T. Kishi, F. Komori and A. Okiji: *Surf. Sci.*, **514** (2002) 161.
- 6) T. Kishi, H. Nakanishi, H. Kasai and A. Okiji: *J. Phys. Soc. Jpn.*, **71** (2002) 2983.
- 7) J. Shen, R. Skomski, M. Klaula, H. Jenniches, S. Sundar Manoharan and J. Kirschner: *Phys. Rev.*, **B 56** (1997) 2340.
- 8) D. Spišák and J. Hafner: *Phys. Rev.*, **B 65** (2002) 235405.
- 9) D. M. Eigler and E. K. Schweizer: *Nature*, **344** (1990) 524.
- 10) T. Kishi, H. Nakanishi, W. A. Diño and F. Komori: *Jpn. J. Appl. Phys.*, **42** (2003) No. 7B, in press.
- 11) B. Hammer, L. B. Hansen and J. K. Nørskov: *Phys. Rev.*, **B 59** (1999) 7413.