

Title	表面ナノ構造の磁性と伝導性に関する理論的研究
Author(s)	岸, 智弥
Citation	大阪大学, 2006, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/46933">https://hdl.handle.net/11094/46933</a>
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉</a> 大阪大学の博士論文について <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈/a〉</a> をご参照ください。

***Osaka University Knowledge Archive : OUKA***

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

Osaka University

氏名	岸 智 弥
博士の専攻分野の名称	博士(工学)
学位記番号	第 20296 号
学位授与年月日	平成 18 年 3 月 24 日
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当 工学研究科応用物理学専攻
学位論文名	表面ナノ構造の磁性と伝導性に関する理論的研究
論文審査委員	(主査) 教授 笠井 秀明  (副査) 教授 川上 則雄 教授 菅原 康弘 助教授 菅 誠一郎

### 論文内容の要旨

本論文は、スピントロニクスへの応用を視野に入れ、Cu、Ag および Si 表面上の表面ナノ構造の構造安定性、磁性および電気伝導性について理論的に調べたものであり、以下の 7 章により構成されている。

第 1 章では序論として研究背景を紹介し、本論文の位置付けと重要性を述べた。

第 2 章では、Cu (111) 表面上の Fe、Co、Ni 薄膜について調べた。その結果、Fe、Co 薄膜では磁気モーメントがバルクの値よりも大きくなり、Ni 薄膜では Ni 原子と基板 Cu 原子の電子軌道混成によって磁気モーメントが逆に小さくなることを明らかにした。さらに、薄膜表面近傍に局在するスピン分極した電子状態があることを見出した。薄膜の電気伝導性について経験的パラメーターによらない解析を行った結果、コンダクタンスはスピンに依存し、また、チップ間の距離が大きくなるにしたがってフェルミ波数に対応する振動を伴いながら減衰することがわかった。以上の結果を基に新規動作原理に基づく表面スピントロニクスデバイスを提案した。

第 3 章では、Cu (111) 表面上の Fe、Co、Ni ナノワイヤーについて調べた結果、磁気モーメントは約  $3.0 \mu_B$  と、バルク、薄膜の場合よりもさらに大きくなることを見出した。また、隣接するナノワイヤーと相互作用が弱い 1 次元的なエネルギーバンドが存在することを見出した。

第 4 章では、Cu (111) 上の Fe ナノアイランドについて調べた。その結果、ナノアイランドはナノワイヤーの場合と同程度の磁気モーメントを持ち、この磁気モーメントは Fe 原子と表面 Cu 原子との電子軌道混成およびナノアイランドの構造緩和によって変化することを見出した。

第 5 章では、Cu (111) 上および Ag (111) 上の Ru、Rh、Pd 薄膜、ナノワイヤーについて調べた。Cu (111) 上では、Ru、Rh、Pd 原子と基板原子の電子軌道混成によって磁気モーメントを持たないが、Ag (111) 上においては基板原子との電子軌道混成が弱くなり、磁気モーメントを持つことがわかった。さらに、電気伝導性を調べた結果、磁気モーメントでは Fe の方が大きい、コンダクタンスのスピン偏極率は薄膜表面近傍に局在した電子状態のエネルギーバンドがフェルミレベルを横切る Ru の方が大きくなることがわかった。これらの結果から表面スピントロニクスデバイスのスピン偏極を操作するデザイン指針を示した。

第 6 章では、Si (001) 表面上への Fe 原子の吸着について調べた。その結果、清浄な Si (001) では Fe 原子の吸着により表面格子構造が崩壊するが、水素終端 Si (001) では表面格子構造が崩れず吸着 Fe 原子がスピン偏極していることを明らかにし、Si 表面に表面スピントロニクスデバイスを作製可能であることを示した。

第7章では、本論文を総括し、今後の課題および展望について述べた。

### 論文審査の結果の要旨

近年、電子の電荷の制御のみを用いる従来のエレクトロニクスは、微細化の限界に達しようとしており、解決策として電子のスピン制御も用いるスピントロニクスが注目を集めている。本研究では、近年急速に作製技術が発達した表面ナノ構造の磁性と電気伝導性について、スピントロニクスへの利用を視野に入れ、理論的に調べている。磁性については密度汎関数理論に基づく第一原理計算を援用している。また、電気伝導性については表面グリーン関数でコンダクタンスの定式化を行い、第一原理計算から得られる電子状態の非経験的パラメータを用いて解析を行い、以下の結果を得ている。

(1)Cu (111) 表面上の Fe、Co、Ni 薄膜の磁性と電気伝導性について調べた結果、Fe、Co 薄膜では磁気モーメントがバルクの値よりも大きくなり、Ni 薄膜では Ni 原子と基板 Cu 原子の電子軌道混成によって磁気モーメントが逆に小さくなることを明らかにしている。さらに、薄膜表面近傍に局在するスピン分極した電子状態があることを見出している。また、薄膜のコンダクタンスはスピンに依存し、また、チップ間の距離が大きくなるにしたがってフェルミ波数に対応する振動を伴いながら減衰することを見出している。以上の結果を基に新規動作原理に基づく表面スピントロニクスデバイスの提案も行っている。

(2)Cu (111) 表面上の Fe、Co、Ni ナノワイヤーの磁性について調べた結果、構造次元性の低下によって生じる d バンドの狭まりによって、磁気モーメントは約  $3.0\mu_B$  と、バルク、薄膜の場合よりもさらに大きくなることを見出している。また、隣接するナノワイヤー間を  $8.87\text{\AA}$  離すことにより、ナノワイヤー間の相互作用が弱い 1 次元的なエネルギーバンドが現れ、ナノワイヤーに沿ったスピン伝導が効率よく行えることを見出している。

(3)Cu (111) 上の Fe ナノアイランドの磁性について調べた結果、ナノアイランドはナノワイヤーの場合と同程度の磁気モーメントを持ち、この磁気モーメントは Fe 原子と表面 Cu 原子との電子軌道混成およびナノアイランドの構造緩和から生じる Fe 原子同士の結合変化によって増減することを、各原子軌道の電荷移動から明らかにしている。また、ナノアイランド内の各原子のスピン配列について、様々な配列のエネルギーを比較することにより、ナノアイランド内の磁性状態は強磁性状態が基底状態であることを見出している。

(4)Cu (111) 上および Ag (111) 上の Ru、Rh、Pd 薄膜、ナノワイヤーの磁性について調べた結果、Cu (111) 上では Ru、Rh、Pd 原子と基板原子の電子軌道混成によって磁気モーメントを持たないが、Ag (111) 上においては基板原子との電子軌道混成が弱くなり、磁気モーメントを持つことを明らかにしている。これらは、波動関数の局在性が強い 3d 遷移金属の場合とは大きく異なる結果である。さらに、電気伝導性を調べた結果、Fe と Ru を比較した場合、磁気モーメントでは Fe の方が大きい、コンダクタンスのスピン偏極率は薄膜表面近傍に局在した電子状態のエネルギーバンドがフェルミレベルを横切る Ru の方が大きくなることを見出している。これらの結果から表面スピントロニクスデバイスのスピン備極を操作するデザイン指針を得ている。

(5)従来のエレクトロニクス技術との融合を計り、Si (001) 表面上への Fe 原子の吸着について調べた結果、清浄な Si (001) では反応性の強い Si 原子のダングリングボンドによって、Fe 原子と Si 原子が強く結合し、Si 表面格子構造が崩壊してしまうが、ダングリングボンドを水素原子で終端することによって、Si の表面格子構造が崩れず、吸着 Fe 原子がスピン偏極することを明らかにしている。これらの結果から水素終端処理により Si 表面に表面スピントロニクスデバイスを作製可能であることを指摘している。

以上のように、本論文は電子論に基づく微視的な立場から、表面ナノ構造における磁性と電気伝導性を理論的に解析したもので、基礎的な面のみならず、応用の面でも有益な知見を得ており、応用物理学、特に物性物理学に寄与するところが大きい。

よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。