3P056　強磁性 Fe_3Si 結晶の表面電子状態についての密度汎関数計算(2)

－スピントロニクスデバイスに優位な結晶面の探求－

（九大院総理工）　○ 執行 大輔，　森 寛敏，　小川 哲也，　吉武 剛，　三好 永作
E-mail：sigyod4@asem.kyushu-u.ac.jp

【はじめに】

電子の特徴のひとつである電荷を利用した半導体と，もうひとつの電子の特徴であるスピンを利用した磁性体は，現代のエレクトロニクスを支えている最も重要な材料である．近年，このように全く別々の分野で発展してきた二つの電子の特徴を同時に利用するスピントロニクス研究が盛んに行われている．スピトロニクスでは，スピンの特性をいかして，電荷に基づいた従来のエレクトロニクスでは不可能だったようなデバイスも実現できるようになる．Fe-Si 系には半導体相と強磁性体相がともに存在し，スピントロニクスの新しい系として興味深い．強磁性Fe_3Si は半導体相へのスピン注入用強磁性体として注目を集めているが，半導体とのヘテロ構造を作製する場合には以下の点を明らかにする必要がある．①バルクではDO3 型構造のものが生成するが，薄膜の場合ではB2 型構造のものが成長しやすい．B2 型構造の場合でも高い偏極率を期待できるのか．②高効率なスピン注入を実現するための結晶面はどれか[1].

これらの特性を評価するためのキーとなる情報は，Fe_3Si 薄膜の表面電子状態である．昨年の本討論会で、我々はDO3型(100) 面無限系薄膜においての電子状態について報告した[2]．今回は，昨年報告したDO3型(100) 面の結果に加え，DO3型(111) 面及びB2型Fe_3Si (100) 面，(111) 面の電子状態を密度汎関数法により計算し，Fe_3Si の様々な結晶面におけるフェルミ準位近傍の状態密度DOS(Density Of State)を調べたので報告する．

【計算方法】

DO3 型Fe_3Si の結晶構造は図１の通りである．この結晶中の黒丸サイトにSi 原子が位置し，その他のサイトにFe原子が位置している．B2 型Fe_3Si の結晶構造は黒丸サイトのSi と灰色丸サイトのFe がランダムに配置し，それ以外はDO3 型と同様の構造をとる．

両構造の(100) 面，(111) 面方向の数層を考え，水平方向については周期境界条件を使い，無限系を考える．Stevens らの有効内殻ポテンシャル(ECP：SBKLC)を使用し，基底関数に

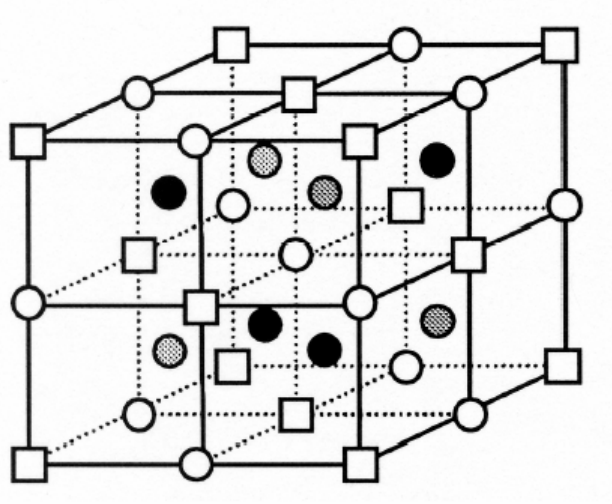

図 1.　DO3 型 Fe_3Si 結晶の構造

は，Fe：(8s8p6d)/[2s2p1d]，Si：(4s4p)/[1s1p]を使い，BLYP による密度汎関数計算を行った．

【結果と議論】

強磁性体としての特徴を十分に発揮するためには、スピンがより多く立っている状態、即ちスピン多重度が高いほうが良い。Fe_3Si 薄膜(100) 面での３原子層によるエネルギーのスピン多重度依存性の結果を図２に示す。図２より最安定状態のスピン多重度は１３重項であることが分かる。これは、実験により測定された Fe_3Si 結晶の磁気モーメントより予測されるスピン多重度と非常に近い値を示している。このことより、薄膜と結晶という違いはあるが、本研究の計算精度は妥当であると考えられる。次に最安定スピン多重度においての表面の電子状態密度 DOS の結果を図３に示す。最安定状態である１３重項ではアルファスピンとベータスピンの偏極率は約１０％と９０％であった。この値は理想的な１００％偏極という値に近く、デバイスとして用いる表面としては十分な値であると考えられる。その他の結晶面についての計算結果は，当日報告する．

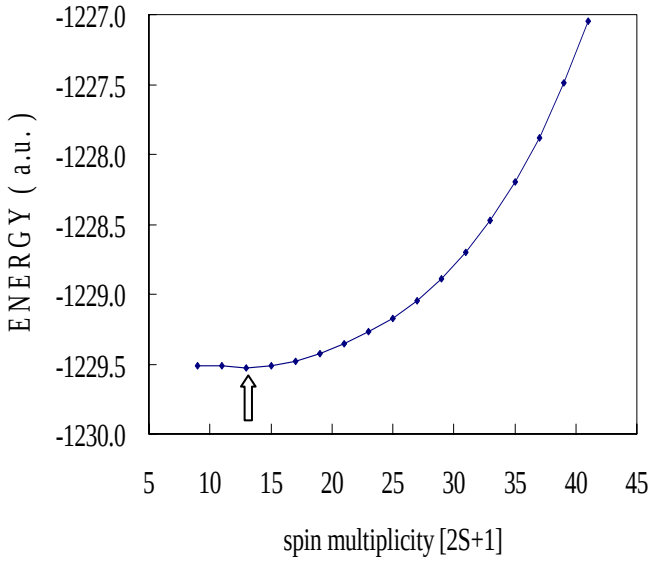

図２． DO3 型(100) 面におけるエネルギー変化

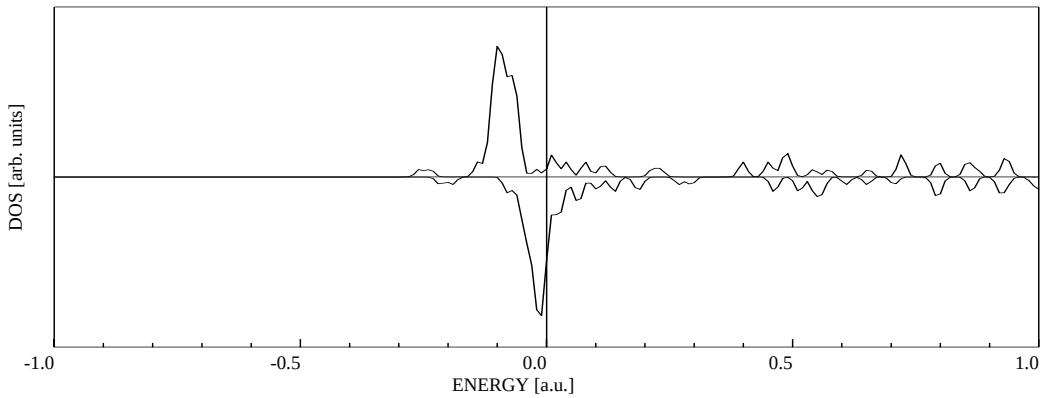

図３． DO3 型(100) 面の最安定スピン多重度における DOS

【参考文献】

[1] 執行大輔, 森　寛敏, 小川哲也, 吉武　剛, 三好永作,　第66回応用物理学会　(徳島, 2005)

[2] 執行大輔，森　寛敏，吉武　剛，三好永作，　分子構造総合討論会　(広島，2004)．
http://www.nabit.hiroshima-u.ac.jp/bk/2P/2P084.pdf