

# Mn/Fe(110)界面の電子状態とスピン構造の理論研究

物質科学コース 松原颯汰

## 1. 序論

Mn は 58 個の原子からなる立方構造を持ち、吸着する表面構造によって様々な磁気構造を持つ。Mn 単層についての安定構造は解明されていない部分が多い。Mn は単体では Bcc 構造の再隣接原子同士のスピン方向が反平行となっている反強磁性体が最も安定であり、全体として磁気モーメントを持たない。Fe(110)面は Fe 原子の磁気モーメントが同じ向きに揃っており強磁性を示している。

Fe(110)基盤上に Mn 薄膜を形成すると Fe と Mn の相互作用により安定構造が変化し、Mn は 3x2 の周期性を持つ。Mn 単層での安定構造を特定するために、Fe(110)基盤上に Mn 薄膜を置き Mn 原子の電子状態とスピン構造について DFT 計算を用いて研究した。

## 2. 実験

Fe との相互作用により Mn のスピン構造が変化すると考えられるため、Mn の安定した構造を特定するために全ての再隣接原子の距離が等価になる正三角形の構造と bcc の構造について 3x2 の結晶構造を用いて 12 個の原子のスピンの方向を変えながら DFT 計算を行いポテンシャルエネルギーを求めた。

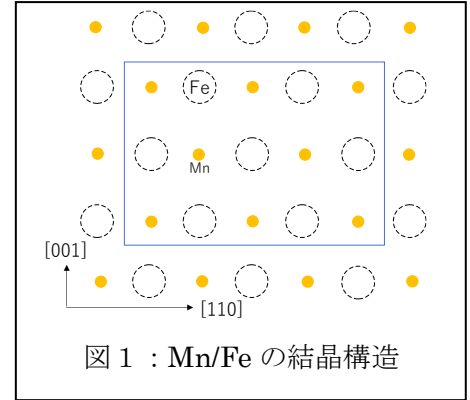
さらに、スピン構造や隣接原子の相互作用を調べるためにハイゼンベルクモデルを用いて相互作用の大きさを求めた。本実験で用いるハイゼンベルクモデルでは DFT 計算で求めた E とセル内のスピンベクトルの相互作用  $s_k \cdot s_{k'(e)}$  からスピン相互作用 J の大きさを求める計算を行った。

$$E = E_0 + \frac{1}{2} \sum_j^6 J^{(j)} n_j \quad n_j = \sum_{k=1}^{12} \sum_{e=1}^{n(j)} s_k \cdot s_{k'(e)}$$

Fe の場合 Mn と Fe の相互作用 h を考慮して下記の式を用いて計算を行った。

$$E = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{j=0}^6 n_j J^{(j)} + \sum_{i=0}^{12} h m_j \quad m_j = \sum_{i=1}^{12} s_i$$

また、本計算では原子間の相互作用の大きさを考慮し第 2 隣接原子までの相互作用について計算を行った。



## 3. 結果と考察

	J_1 (meV)	J_2 (meV)	J_3 (meV)	J_4 (meV)	h_1 (meV)
MLhexa	37		15		-
MnML2x3	99	29	8	-	-
MnonFe	84	8	-3	-	7

表 2 : 構造と相互作用の大きさ

DFT 計算結果から得られたエネルギーとハイゼンベルクモデルを用いて求めた相互作用の大きさを表 3 とした。表 3 から相互作用は遠くの原子ほど小さくなっていき、近くにある原子の影響を強く受けるということが分かった。h については Fe と Mn の相互作用が小さいという結果となった。

bcc 構造では歪みにより再隣接原子のスピン方向が反平行となっている構造がポテンシャルエネルギーが低くなり安定していることが分かった。

またスピンの向きが同じ構造でも内側の原子の相互作用の影響を大きく受けるためエネルギーに差が出た。

Fe は強磁性でありスピン方向が揃っているため Fe-Mn 間の相互作用を考慮すると Fe と反対方向のスピンが多い Mn 構造が安定であると考えられるが、反強磁性の構造を持つ Mn が最も安定しているという結果になった。今後はさらに複雑なスピン構造を考えて安定な構造を見つけていきたい。