

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 16 日現在

機関番号：12101

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2012～2013

課題番号：24760022

研究課題名(和文) - FeSi₂表面磁性発現の研究研究課題名(英文) the appearance of surface magnetism beta-FeSi₂

研究代表者

永野 隆敏 (Nagano, Takatoshi)

茨城大学・工学部・講師

研究者番号：70343621

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,400,000円、(間接経費) 720,000円

研究成果の概要(和文)：鉄シリサイドFeSi₂に対しての、表面観察と第一原理シミュレーションを合わせることで各表面構造に対応する電荷密度分布と原子位置の対応を可能とした。また、磁性発現の仕組みにおいて原子の表面や界面における乱れとの対応を可視化し、第一原理計算における粒界や表面における電荷密度分布評価が有効かどうかを評価するため、金属表面における偏析元素による電荷密度分布と照らし合わせ実験結果との比較も行った。

研究成果の概要(英文)：We study the atomic and electric structure on the (101) and (100) surface of beta-FeSi₂ by ab-initio calculation using the projector augmented wave method (PAW). The cohesive energy calculated with the slab model show that the structure Si layer biased in the surface is stable. The simulated STM images indicate that the charge in the neighborhood of Fermi level concentrated on Fe-Si bonding. Also, Ru films formed by this new process have (002) preferred orientation and Cu (111) was formed by plating. This result corresponded to the tendency predicted by ab initio calculations.

研究分野：工学

科研費の分科・細目：材料工学

キーワード：偏析

1. 研究開始当初の背景

鉄シリサイド FeSi_2 に対して 表面観察 (STM 像) と第一原理計算シミュレーションをあわせることで、鉄シリサイド系の一つである -FeSi_2 の表面及び界面における磁性発現の仕組み (付言しと磁性構造の関係) を第一原理計算において可視化が行われている。また、界面においても TEM によって直接可視可能となりつつある。しかし、磁性について直接観察は困難である。

2. 研究の目的

第一原理計算において粒界や表面における電荷密度分布あらくる評価が有効かどうかを実験的な観察と比較検討する必要がある。そこで、 -FeSi_2 の STM データを第一原理から計算した像と比較することで、比較検討する。また、磁性に対して表面構造と比較することでその磁性発現の仕組みについて比較検討する。

3. 研究の方法

Fe のような広がりを持つ電子軌道を扱うために、平面波基底を用いた第一原理計算法 (PAW 法) を用いる。表面解析には、スラブモデル近似をもちいて、その表面構造としての安定性も評価し、実験的に得られているであろう表面構造を計算手法から予知する。我々は -FeSi_2 表面構造において、実験事実と計算による結果の対応がすでに取れている。さらに、この手法を拡張し、直接 実験事実 (STM) と比較するために、実験的に観察される電子を抜き出し、画像として再構築する (フェルミレベル近傍における電荷の積分操作) ことで、実験的には不可能である表面の原子構造と電子密度分布状態の対応を可能とする。次に、対応の取れた原子位置と電子密度分布を拡張し、電子のスピン情報を追加する。スピン状態と原子位置、種類の対応を解析する (表面磁場は磁区によるスピンなどは観察可能であるが原子レベルでの対応は不可能)。そこから、磁性状態を利用するデバイスとして有効な原子構造を再現するための原子種を予測ために、Gd など磁気モーメントの大きい原子種を対象に、多層膜の構造を評価する。

(1) FeSi_2 の構造と (110) 面 (101) 面

-FeSi_2 は図 1 のように斜方晶 (直方晶) の結晶構造をとり、格子定数は $a=9.863$ 、 $b=7.791$ 、 $c=7.833$ である (図の x 軸は [100] 方向、 y 軸は [010] 方向、 z 軸は [001] 方向を示す。これ以降の図についても同様である)。鉄は 16 個、シリコンは 32 個の計 48 個の原子によって 1 つの単位格子を形成する。鉄は 8 つのシリコンと結合しており、シリコンは 4 つの鉄と結合している (図 1)。

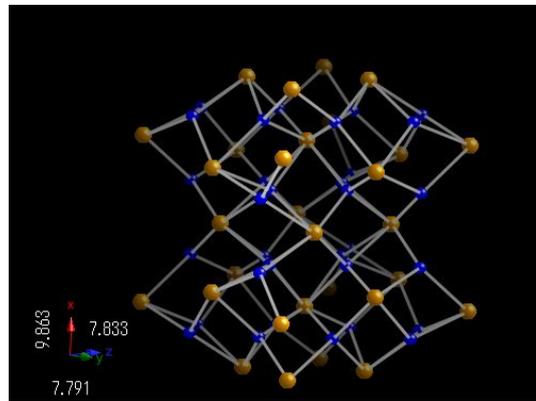


図 1 -FeSi_2 の単位格子

(110) 面と (101) 面はほぼ同じ構造をとっているが、 -FeSi_2 が斜方晶であるため、原子間距離が違っており、厳密には違う構造となっている。先に記述した通り、 -FeSi_2 の表面には (110) 面と (101) 面のどちらかを取り (どちらかは、現時点では不明) 本研究では (101) 面が表面になると仮定して計算を行い解析する (図 2)。

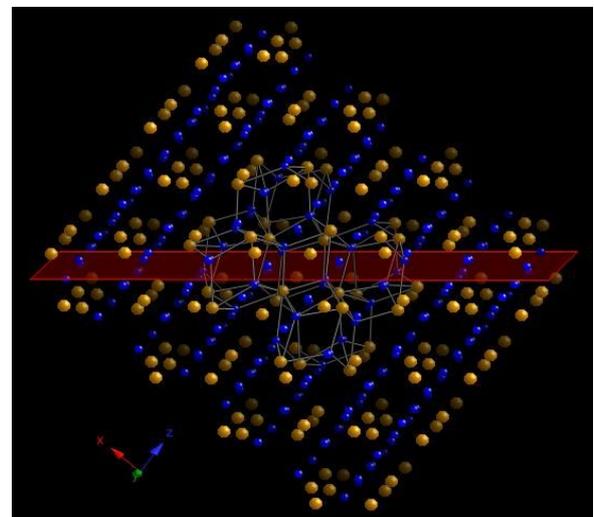
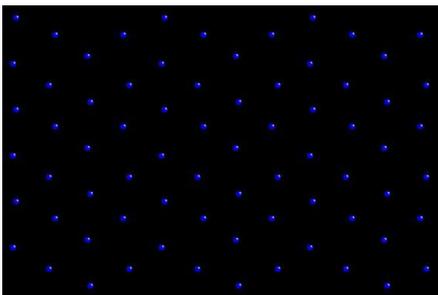
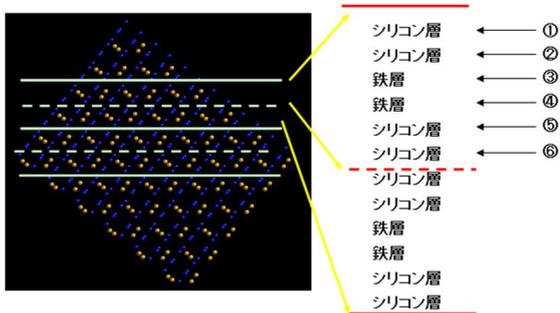


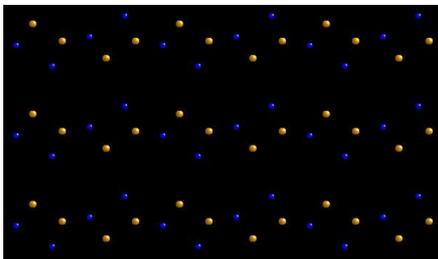
図 2 -FeSi_2 (110) 面

(2) 表面構造

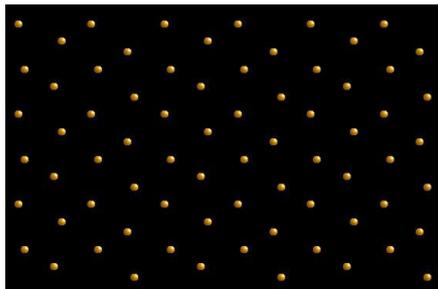
-FeSi_2 は結晶方位はわかったとしてもどの構造が表面となっているかが分かっていない。そのため 4-1 で、本研究では (101) 面が表面になると仮定して計算を行っていくと記述したが、更なる構造による場合分けを行い解析を行うことになる。 -FeSi_2 の構造を見ていくと図 3 に示す 6 つのパターンに分けられる。区別のため からの番号をそれぞれのパターンに割り振る。それぞれの番号の矢印が指す層がそれぞれのパターンにおける最外表面の層となり、下に向かうにつれて内側の表面になり、具体的には は SiSiFeFe の表面、 は SiFeFeSi の表面、 は FeFeSiSi の表面、 は FeSiSiSi の表面、 は SiSiSiSi の表面、 は SiSiSiFe の表面となっている。



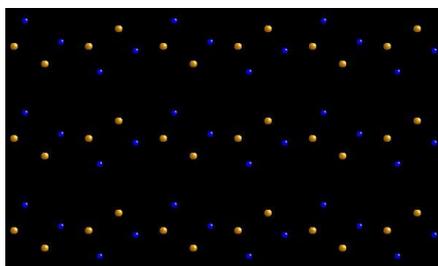
(a)



(b)



(c)



(d)

図3 (101)面のパターン分け
(a)SiSiFeFe表面(b)SiFeFeSi表面
(c)FeFeSiSi表面(d)FeSiSiSi表面

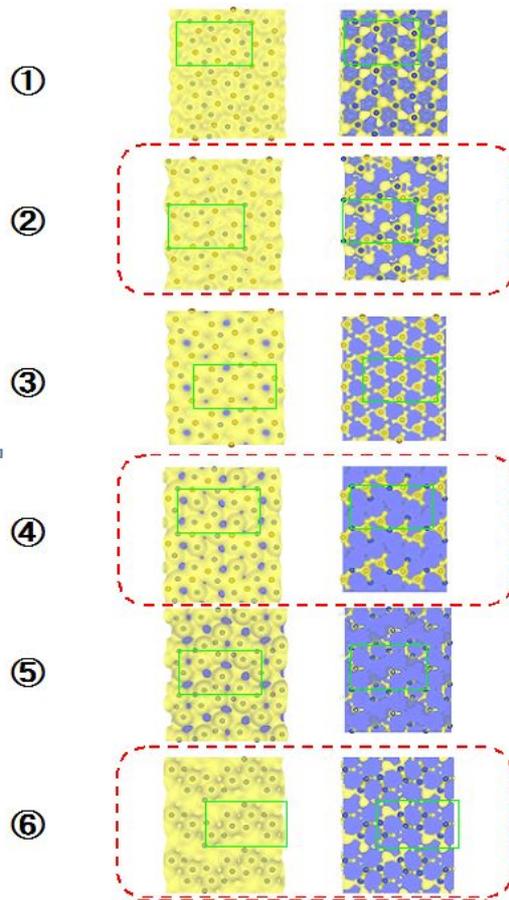


図4 STM画像(右)と計算で得られた電荷密度分布(左)の比較

STMでの観察で、表面から順に深い位置を観察すると、輝点がstraight、zig-zag、straightの繰り返しで現われることが確認された。

4. 研究成果

鉄シリサイドFeSi₂に対しての、表面観察と第一原理シミュレーションを合わせることで磁性発現の仕組みを可視化を実施した。また、第一原理計算における粒界や表面における電荷密度分布評価が有効かどうかを評価するため、金属表面における偏析元素による電荷密度分布と比較検討し、実験結果と比較することでそれを確認し、可能とした。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計2件)

永野隆敏、篠嶋 妥、『Cs-Corrected STEM Observation and Atomic Modeling of Grain Boundary Impurities of Very Narrow Cu Interconnect』、ECS Electrochemistry Letters、2巻、H23-H25、(2013)、査読有
金子智、永野隆敏、『Effect of Point Defects on Lattice Constant in MgO Thin Film Deposited on Silicon (001) Substrate』、

European Physical Journal - Applied
Physics, 58 巻、10302、2012、査読有

〔学会発表〕(計 5 件)

永野隆敏, 圓谷哲紀, 江口大貴, 篠嶋妥,
『微細 Cu 配線における粒界偏析元素の直接
観察と第一原理計算』、日本金属学会 2012 年
秋期大会、2012 年 9 月 19 日、愛媛大学城北
キャンパス

江口大貴, 永野隆敏, 圓谷哲紀, 篠嶋妥,
『超微細配線中の Cu 粒成長に及ぼす不純物
元素の影響』、日本金属学会 2012 年秋期大会、
2012 年 9 月 19 日、愛媛大学城北キャンパス

圓谷哲紀, 江口大貴, 永野隆敏, 篠嶋妥, 『Cu
薄膜の粒成長に及ぼす基板の影響』、日本金
属学会 2012 年秋期大会、2012 年 9 月 19 日、
愛媛大学城北キャンパス

圖師優磨, 山田翔世, 永野隆敏,
『a-SiGe/SiGe 粒界上偏析構造の第一原理計
算』、第 73 回応用物理学学会学術講演会、2012
年 9 月 13 日、松山大学文京キャンパス

山田翔世, 圖師優磨, 永野隆敏,
『a-SiGe/SiGe 粒界上偏析構造の第一原理計
算』、第 59 回応用物理学関係連合講演会、2012
年 3 月 16 日、早稲田大学、早稲田キャン
パス

6. 研究組織

(1) 研究代表者

永野 隆敏 (NAGANO TAKATOSHI)

茨城大学・工学部・講師

研究者番号：70343621