

# Cu(001)面上に形成した六方構造鉄窒化膜の構造モデル Structural Model for Hexagonal Iron Nitride Monolayer on Cu(001)

東大物性研 ○山田正理, 家永紘一郎, 高橋文雄, 宮町俊生, 小森文夫

Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo

○Masamichi Yamada, Koichiro Ienaga, Yukio Takahashi, Toshio Miyamachi, Fumio Komori.

Cu(001)面上に形成した鉄窒化膜では、 $\text{Fe}_2\text{N}$  という組成をもつ正方構造の窒化膜がよく知られている。<sup>1,2)</sup> 我々は最近、際立ったストライプパターンを示す、六方構造の単原子鉄窒化膜の形成を報告した。<sup>3)</sup> 本報告では、この六方構造鉄窒化膜の構造モデルを提案し、対称性の異なる正方構造 Cu(001)面上で、どのような機構で安定化しているかを考察する。

試料は清浄化した Cu(001)面に、イオン化した窒素を打込んだ後、直ちに鉄を蒸着し、アニールすることにより作製した。STM 測定は低温(77K)で行なった。

ストライプは、(1×1)周期を示す幅 1.5nm の A ストライプと、( $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ )周期を示す幅 2nm の B ストライプから成り、Cu(001)の最密充填方向である[110]から約 30°傾いた方向に走る。基板の対称性を反映して、4つのドメインが見られた。A、B ストライプ間は滑らかに遷移するので、パターンは化学組成の違いに起因するものではない。A ストライプの輝点間隔 0.31nm は、バルク物質、zinc blend 型立方晶 FeN ( $\gamma'$ -FeN)の Fe-Fe 原子間距離に近い。これらから、六方構造鉄窒化膜は、 $\gamma'$ -FeN の(111)面と類似した構造をもち、FeN という組成であると推定した。

B ストライプをはさむ2本の A ストライプの間には、ストライプ垂直方向の輝点配列が互いに反位相でありながら、それと 60°をなす2軸のうち1軸では輝点配列が同位相であるという際だった特徴が見られた。このことは、B ストライプに強い圧縮歪みがかかっていることを意味する。圧縮された B ストライプでは、その緩和のため、3個に1個の N 原子を押し上げるよう、周囲の Fe 原子三角形が縮小するような表面再構成が起き、その結果、B ストライプの $\sqrt{3}$ 構造が観測されていると考えられる。

A ストライプ間の半位相ずれのため、[110]方向に走る Fe 原子列は、A-B ストライプ境界において小さい角度(約 2°)で斜交接続し、ジグザグとなる。この境界での原子列屈曲は、あたかも最密充填 Cu 原子列が壁となり反射される形であり、ジグザグ Fe 原子列を、[110]方向トラフに沿って延伸させることとなる。それと垂直な[-110]方向では、ジグザグ Fe 原子列の間隔が Cu(001)の格子と整合している。こうして、Fe 原子は下地 Cu(001)の on-top サイトに載ることはなく、Fe 原子をすべてトラフに収めた安定な構造を実現していると考えられる。

- 1) J.M. Gallego, D.O. Boerma, R. Miranda, Felix Yndurain, Phys. Rev. Lett. 95 (2005) 136102.
- 2) Y. Takahashi, T. Miyamachi, K. Ienaga, N. Kawamura, A. Ernst, F. Komori, Phys. Rev. Lett. 116 (2016) 056802.
- 3) 家永 他、2014 秋物理学会(中部大学) 8aAK-2.