軟Ｘ線放射光を用いた新規ホイスラー型複合材料の電子構造の研究

Electronic structure of new Heusler-type materials with multi-functionality probed by soft X-ray synchrotron radiation

叶　茂[1)]、崔 芸涛[1)]、宮本幸治[1)]、木村昭夫[1)]、谷口雅樹[1)]、
藤森伸一[2)]、斉藤 祐児[2)]、鹿又武[3)]

Mao Ye [1)], Yitao CUI [1)], Kouji MIYAMOTO [1)], Akio KIMURA [1)], Masaki TANIGUCHI [1)],
Sin-ichi FUJIMORI [2)], Yuji SAITOH [2)], Takeshi KANOMATA [3)]

[1)]広島大学　[2)]原子力機構　[3)]東北学院大

（要約）軟 X 線放射光で励起した光電子分光を用いて、ホイスラー型複合材料 $Ni_{2-x}Co_xMnGa$ の価電子帯電子構造の直接観測を行った。その結果、x=0 および 0.2 では、フェルミエネルギー近傍の光電子強度がマルテンサイト相において減少した。これは Ni 3d eg 状態のエネルギー分裂に対応していることを示唆する。

キーワード：強磁性形状記憶、マルテンサイト変態、高スピン偏極、ホイスラー型合金、光電子分光、電子構造

１．目的

ホイスラー型合金 Ni_2MnGa は、キュリー温度 374K の強磁性体で、高温側では立方晶（オーステナイト相）となるが、約 200K 以下で、正方晶（マルテンサイト相）に構造相転移をすることが知られている [1]。この強磁性マルテンサイト相では、磁場による双晶バリアント再配列により大きな磁場誘起歪を生じることが報告された。これによって、高速で大変位が発生できる新しい磁場駆動アクチュエーター材料として大きな注目を集めている[2,3]。一方、同じ結晶構造を持つ Co_2MnGa も強磁性を示し、フェルミレベルの電子が高いスピン偏極度を持つことが知られる。これら強磁性形状記憶効果を示す Ni_2MnGa と高スピン偏極材料の Co_2MnGa を組み合わせた混晶系は、磁場駆動アクチュエータとスピン注入材料の新規複合材料として大きな期待がもたれる。

東北学院大・鹿又らは同複合材料の合成にはじめて成功し、Ni_2MnGa に Co を 10%程度添加しても、転移温度は低下するものの、マルテンサイト相が現れることが明らかになった。しかし、Co 組成がより大きい領域では、マルテンサイト相は消失することもわかった。また東北大通研・白井らによって KKR-CPA 法を用いた理論計算が行われ、磁化の絶対値ならびに組成依存性ともに実験結果と非常によい対応を示しており、第一原理計算に基づく物性予測の確からしさを裏づけている。

本研究では、$Ni_{2-x}Co_xMnGa$ について組成に依存した電子構造を系統的に評価するとともに、温度依存性を通じて、マルテンサイト変態の機構を電子構造の立場から明らかにすることを目的として軟 X 線放射光を用いた光電子分光を行った。

２．方法

光電子分光は、BL23SU・軟 X 線放射光ビームラインで行った。試料は超高真空中で破断することにより清浄表面を得た。主に、入射光エネルギー400eV を用い、全エネルギー分解能は 80meV に設定して実験を行った。

３．研究成果

まず Ni_2MnGa について、温度 260K（オーステナイト相）から 20K（マルテンサイト相）まで温度を変化させて光電子スペクトルの観測を行った。その結果、フェルミエネルギー（E_F）の近傍でオーステナイト相とマルテンサイト相でのスペクトル形状の違いが観測できた。フェルミレベル直下の束縛エネルギー約 200meV 付近の強度が、マルテンサイト相で減少した。また Ni サイトに Co 原子を置換した $Ni_{2-x}Co_xMnGa$ でも同様な温度依存性が観測された。

４．結論・考察

オーステナイト相での Ni_2MnGa の価電子帯光電子スペクトルが KKR-CPA バンド構造計算で得られた状態密度と良く対応していた。バンド構造計算では、E_F 近傍には主に Ni 3d 電子が寄与していることから、本実験で観測された E_F近傍での強度がマルテンサイト相で減少しているという実験結果は、Ni3d 状態密度の減少に対応していることが示唆される。これは、マルテンサイト変態において Ni3d eg 状態に分裂が起こり、E_Fから遠ざかる方に移動するという描像と矛盾しない。

５．引用(参照)文献等

[1] P.J.Webster et al., Philos. Mag. B 49 (1984) 295.

[2] K.Ullakko, J.K.Huang, C Kantner, C.O' Handley, and V.V. Kokorin., Appl. Phys. Lett. 69 (1996) 1966.

[3] A.Sozinov, A.A. Likhachev, N.Lanska, and K.Ullakko., Appl. Phys. Lett. 80 (2002) 1746.