課題番号　2013A　—E10

次世代スピントロニクス材料の内殻吸収磁気円二色性分光

X-ray magnetic circular dichroism study of next-generation spintronics materials

[1)]伊藤啓太, [1)]佐内辰徳, [1)]安富陽子, [1)]都甲薫, [2)]竹田幸治, [2)]斎藤祐児,
[3)]今井庸二, [4)]木村昭夫, [1)]末益崇
[1)]K. Ito, [1)]T. Sanai, [1)]Y. Yasutomi, [1)]K. Toko, [2)]Y. Takeda, [2)]Y. Saitoh,
[3)]Y. Imai, [4)]A. Kimura and [1)]T. Suemasu[1]
[1)]筑波大学　[2)]原子力機構　[3)]産業技術総合研究所　[4)] 広島大学

負の高スピン偏極材料として期待される Fe_4N 薄膜について高輝度放射光を利用した内殻吸収磁気円二色性（XMCD）分光スペクトルの高精度測定を行い、Fe L_{23} 吸収端、N K 吸収端の吸収スペクトル、XMCD スペクトルのスペクトル形状解析を行なった。この結果、Fe 3d-N 2p の軌道間混成により面心サイトの Fe 3*d* 軌道が結合性軌道と反結合性軌道に分裂していることを捉えた。さらには Fe_4N 薄膜の N *K* 吸収端の XMCD スペクトルの実験結果では大きな負の XMCD が観測されたが，第一原理計算で良く再現された。

キーワード：内殻吸収磁気円二色性（XMCD），負のスピン分極，分子線エピタキシー（MBE），スペクトル形状

１．目的

Fe_4N、Co_4N、Co_3FeN は、第一原理計算により大きな負のスピン分極が予言されており [1-3)]，これまでに，分子線エピタキシー（MBE）法により、$SrTiO_3$ (001)基板上へのエピタキシャル成長に成功した [4-6)]。また，Fe_4N と Co_4N の磁気モーメントの大きさを，内殻吸収磁気円二色性（XMCD）測定によって評価した（ナノネット支援課題 2010A3877, 2010B3876, 2011A3872）[7,8)]。一方，Co_3FeN については，バルクおよび薄膜試料の作製例がほとんど無く，基本的な磁気物性の評価が進んでいない。本研究では Fe_4N の X 線吸収スペクトル(XAS)の詳細な測定を行い，形状と XMCD の符号について、理論計算結果との比較を行った。

２．方法

MBE 法により、$LaAlO_3$(001)または $SrTiO_3$(001)基板上に Au(3 nm)/Fe_4N(10 nm)をエピタキシャル成長し、全電子収量法による XMCD 測定を行った。XMCD 測定は、試料の面直方向に±3 T の磁場を印加し、飽和磁化状態で行った。第一原理計算で求めた Fe_4N のスピン毎の状態密度をもとに、XAS および XMCD スペクトルを計算した。

３．結果及び考察

Fe_4N 薄膜の Fe $L_{2,3}$ 吸収端の XAS スペクトルでは，メインピークの約 2eV 高エネルギー側に肩構造が観測されている。このピーク分裂構造は，計算でも良く再現されることがわかった。これは，Fe 3d-N 2p の軌道間混成により面心サイトの Fe 3*d* 軌道が結合性軌道と反結合性軌道に分裂したことに起因する。また Fe_4N 薄膜の Fe $L_{2,3}$ 吸収端の XMCD スペクトルは軌道磁気モーメントの影響で，L_2 に対する L_3 の XMCD 強度が大きくなった。さらには Fe_4N 薄膜の N *K* 吸収端の XMCD スペクトルの実験結果では大きな負の XMCD が観測されたが，第一原理計算で良く再現された。

４．引用（参照）文献等

1)S. Kokado *et al*., Phys. Rev. B **73**, 172410 (2006). 2)Y. Imai *et al*., J. Magn. Magn. Mater. **322**, 2665 (2010). 3)Y. Takahashi *et al*., J. Magn. Magn. Mater. **323**, 2941 (2011). 4)K. Ito *et al*., J. Cryst. Growth **322**, 63 (2011). 5)K. Ito *et al*., J. Cryst. Growth **336**, 40 (2011). 6)T. Sanai *et al*., J. Cryst. Growth **357**, 53 (2012). 7)K. Ito *et al*., Appl. Phys. Lett. **98**, 102507 (2011). 8)K. Ito *et al*., Appl. Phys. Lett. **99**, 252501 (2011).