課題番号	:2017A-E22
利用課題名(日本語)	:元素置換により高い機能性を持つ磁性材料のX線内殻吸収磁気円二色性
Program Title (English)	:XMCD study of magnetic materials with higher functions via element substitution
利用者名(日本語)	:高田郁弥 ¹⁾ ,伊藤啓太 ²⁾ ,竹田幸治 ³⁾ ,斎藤祐児 ³⁾ , <u>木村昭夫⁴⁾</u> ,末益崇 ¹⁾
Username (English)	: F. Takata ¹⁾ , K. Ito ²⁾ , Y. Takeda ³⁾ , Y. Saitoh ³⁾ , <u>A. Kimura⁴⁾</u> , T. Suemasu ¹⁾
所属名(日本語)	:1) 筑波大学大学院数理物質科学研究科,2) 東北大学金属材料研究所,3) 日本原子力
研究開発機構, 4)広島大学大学院理学研究科	
Affiliation (English)	:1) Univ. of Tsukuba, 2) IMR, Tohoku Univ., 3) JAEA, 4) Hiroshima Univ.
キーワード	: 省エネルギー, 高スピン偏極伝導材料, XMCD, 優先占有サイト評価

<u>1. 概要(Summary)</u>

昨今の科学技術が目指す方向は省エネルギー化,もう 一つは環境に優しい材料を開発することである。本研究 では、母体の元素を一部置換することにより高い機能性を 発揮する磁性材料について、その置換元素の磁気モーメ ントの定量評価、さらには置換した元素、置換された元素 が担う役割を電子構造の立場から理解することを目的と する。具体的には、省エネルギー高スピン偏極材料として 注目される Ni_xFe_{4x}N (x = 0, 1, 3, 4) 薄膜について内殻 吸収磁気円二色性 (XMCD) 分光を行い、高スピン偏極 伝導の発現機構をミクロの立場から明らかにすることを目

的とした。逆ペロブスカイト 型強磁性窒化物[**FIG.1**]の 一つである $Ni_xFe_{4,x}N$ は, 理論計算から Ni_3FeN で大 きな負の状態密度のスピン 分極(P)が期待できるが, P の値は 3d 元素の占有サイ トに大きく影響される¹⁾。



FIG.1: Crystal structure.

我々はこれまでに X 線磁気円二色性測定(XMCD)測定 により類型の Co₃FeN 薄膜の電子構造を評価し, Co 原子 と Fe 原子がサイトをランダムに占有することを明らかにし た^{2,3)}。本研究では、XMCD 測定によりNi_xFe_{4-x}N(x = 1, 3) 薄膜中の 3d 元素の優先占有サイトを評価した。

2. 実験(目的,方法) (Experimental)

分子線エピタキシー法により、SrTiO₃(001)基板上へ Al(3 nm)/NiFe₃N(50 nm), Al(3 nm)/Ni₃FeN(50 nm)をエ ピタキシャル成長し測定に供した。XMCD 測定は全電 子収量法によりおこない、外部磁場±4 T を試料面直方 向に印加して温度 100 K で測定した。

<u>3. 結果と考察(Results and Discussion)</u>

その結果, Ni₃FeN では Ni、Fe-L_{2,3}吸収端ピークの高 エネルギー側に肩構造が観測されたのに対し, NiFe₃N では Fe-L_{2,3}吸収端のみで観測された。同様の肩構造は Fe₄N でも観測されており, 面心(II)サイトの Fe 3*d* と N 2*p*

の電子軌道混成に起因 する³⁾。Ni_xFe_{4x}Nでも 同様の起源で肩構造が 現れたと考えられ、 NiFe₃NではNi 3dとN 2pの電子軌道混成が 無く,Ni原子は角(I)サ イトを優先占有してい ると考えられる。また、 磁気光学総和則から算 出したNiFe₃N薄膜中 のNi原子のスピン磁 気モーメントの大きさ は,Ni原子がIサイト を占有した場合の理論



FIG.2: XAS and XMCD spectra in (a) Ni_3FeN and (b) $NiFe_3N$ films at $Ni-L_{2,3}$ edges. transition metal nitrides.

値と近く,Ni原子のIサイトへの優先占有を示唆する。 この傾向はメスバウア測定の結果とも一致する⁴⁾。

参考文献

- [1] F. Takata et al., J. Appl. Phys. 120, 083907 (2016).
- [2] K. Ito et al., Appl. Phys. Lett. 103, 232403 (2013).
- [3] K. Ito et al., J. Appl. Phys. **117**, 193906 (2015).
- [4] F. Li et al., Appl. Phys. Lett. 66, 2343 (1995).

<u>4. その他・特記事項 (Others)</u> 特になし。