17a-C15-3

XMCD スペクトル形状から見る Fe4N 薄膜の局所電子状態

Local electronic states of Fe₄N thin films revealed from XMCD spectral shapes 筑波大院 数理物質科学¹, 原子力機構 SPring-8², 大阪大 産研³, 広島大院 理学⁴ ^o伊藤啓太¹, 佐内辰徳¹, 安富陽子¹, 都甲薫¹, 竹田幸治², 斎藤祐児², 小口多美夫³, 木村昭夫⁴, 末益崇¹

Inst. of Appl. Phys., Univ. of Tsukuba¹, SPring-8, JAEA², ISIR, Osaka Univ.³, Grad. Sch. Sci., Hiroshima Univ.⁴ °K. Ito¹, T. Sanai¹, Y. Yasutomi¹, K. Toko¹, Y. Takeda², Y. Saitoh², T. Oguchi³, A. Kimura⁴ and T. Suemasu¹ E-mail: bk200511420@s.bk.tsukuba.ac.jp

【はじめに】 我々は、新たなスピントロニクス応用材料として、理論計算から大きな負のスピン偏極が予想される Co_xFe_{4-x}N に注目している¹⁻³⁾。これまでに、X 線磁気円二色性(XMCD)測定により、 Fe₄N、Co₃FeN、Co₄Nのスピンおよび軌道磁気モーメントの大きさを分離評価した^{4.5)}。Fe₄N について、硬 X 線光電子分光とスピン分解光電子分光により価電子帯の電子構造を調べたところ、第 一原理計算結果と良く対応し、フェルミ準位直下は負にスピン偏極していることを明らかにした⁶⁾。今回は、Fe₄Nの非占有側の電子状態についての知見を得るために、実験で得られた Fe₄NのX 線吸収スペクトル(XAS)の形状と XMCD の符号について、第一原理計算結果との比較を行った。 【実験】分子線エピタキシー法により、LaAlO₃(001)または SrTiO₃(001)基板上に Au(3 nm)/Fe₄N(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。全電子 FLAPW 法に基づく第一原理電

【結果・考察】図1に Fe₄N 薄膜の Fe $L_{2,3}$ 吸収端の XAS スペクトルの(a)実験結果と(b)計算結果を 示す。Fe $L_{2,3}$ 吸収端の高エネルギー側に観測されたサテライト構造が、計算で再現された。これ は、面心サイトの Fe 3d と N 2p 軌道間の強い混成により生じた反結合性軌道への遷移に対応する。 また、サテライト構造の XMCD シグナルがメインピークに比べ小さい点[図 2(a)]も、計算で再現 されている[図 2(b)]。これは窒素と隣接する Fe 3d のスピン磁気モーメントが比較的小さいことに 対応すると考えられる。図 3 に Fe₄N 薄膜の N K 吸収端の XMCD スペクトルの(a)実験結果と(b) 計算結果を示す。実験では、小さいながらも明確で Fe L_3 と同符号の XMCD シグナルが観測され た点が、計算結果と一致した。この結果は窒素の 2p 電子の軌道偏極の存在を示唆する。

子状態計算の結果を用い、フェルミの黄金則により、XAS および XMCD スペクトルを計算した。

【謝辞】XMCD 測定はナノネット支援課題(2010A3877, 2010B1738)のもと、日本原子力研究開発機構 SPring-8 BL23SU にて行った。

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.*, Appl. Phys. Lett. **98**, 102507 (2011). 5)K. Ito *et al.*, Appl. Phys. Lett. **99**, 252501 (2011). 6)K. Ito *et al.*, J. Appl. Phys. **112**, 013911 (2012).

