

XMCD 測定による $\text{Ni}_x\text{Fe}_{4-x}\text{N}$ ($x = 1, 3$) 薄膜中の $3d$ 元素の優先占有サイトの評価

Preferred site occupation for $3d$ atoms in $\text{Ni}_x\text{Fe}_{4-x}\text{N}$ ($x = 1, 3$) films revealed by XMCD

筑波大数理¹, 東北大金研², 東北大 CSRN³, 原子力機構⁴, 広島大理⁵

○高田郁弥¹, 伊藤啓太^{2,3}, 都甲薫¹, 竹田幸治⁴, 斎藤祐児⁴, 高梨弘毅^{2,3}, 木村昭夫⁵, 末益崇¹

Univ. of Tsukuba¹, IMR, Tohoku Univ.², CSRN, Tohoku Univ.³, JAEA⁴, Hiroshima Univ.⁵

°F. Takata¹, K. Ito^{2,3}, K. Toko¹, Y. Takeda⁴, Y. Saitoh⁴, K. Takanashi^{2,3}, A. Kimura⁵, and T. Suemasu¹

E-mail: bk1413075@bk.tsukuba.ac.jp

【背景】逆ペロブスカイト型強磁性窒化物(図 1)の一つである $\text{Ni}_x\text{Fe}_{4-x}\text{N}$ は、理論計算から Ni_3FeN で大きな負の状態密度のスピンの分極(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⁾。我々はこれまでに X 線磁気円二色性(XMCD)測定により類型の Co_3FeN 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 $\text{Ni}_x\text{Fe}_{4-x}\text{N}$ ($x = 1, 3$) 薄膜中の $3d$ 元素の優先占有サイトを評価した。

【実験方法】分子線エピタキシー法により、 $\text{SrTiO}_3(001)$ 基板上へ $\text{Al}(3 \text{ nm})/\text{NiFe}_3\text{N}(50 \text{ nm})$ 、 $\text{Al}(3 \text{ nm})/\text{Ni}_3\text{FeN}(50 \text{ nm})$ 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 $\pm 4 \text{ T}$ を試料面直方向に印加して温度 100 K で測定した。

【結果・考察】図 2 に、(a) NiFe_3N 、(b) Ni_3FeN 薄膜の Ni、Fe- $L_{2,3}$ 吸収端における X 線吸収スペクトルを示す。 Ni_3FeN 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(図中矢印)が観測されたのに対し、 NiFe_3N では Fe- $L_{2,3}$ 吸収端のみで観測された。同様の肩構造は Fe_4N でも観測されており、面心(II)サイトの Fe $3d$ と N $2p$ の電子軌道混成に起因する³⁾。 $\text{Ni}_x\text{Fe}_{4-x}\text{N}$ でも同様の起源で肩構造が現れたと考えられ、 NiFe_3N 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 NiFe_3N 薄膜中の Ni 原子のスピンの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⁾。

【謝辞】XMCD 測定は SPring-8 BL23SU (課題 No. 2017A3842)にておこなった。本研究の一部は、東北大学スピントロニクス学術連携研究教育センター(CSRN)の支援を受けた。

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).

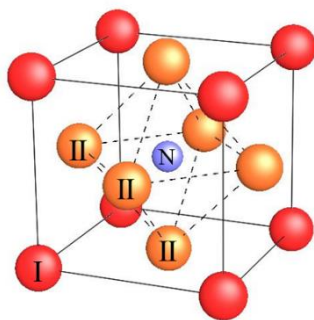


Fig. 1 Anti-perovskite type crystal structure.

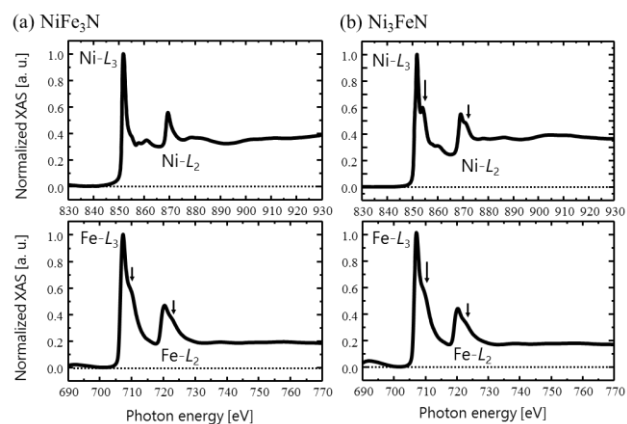


Fig. 2 X-ray absorption spectroscopy (XAS) spectra in (a) NiFe_3N and (b) Ni_3FeN films at Ni and Fe- $L_{2,3}$ edges.