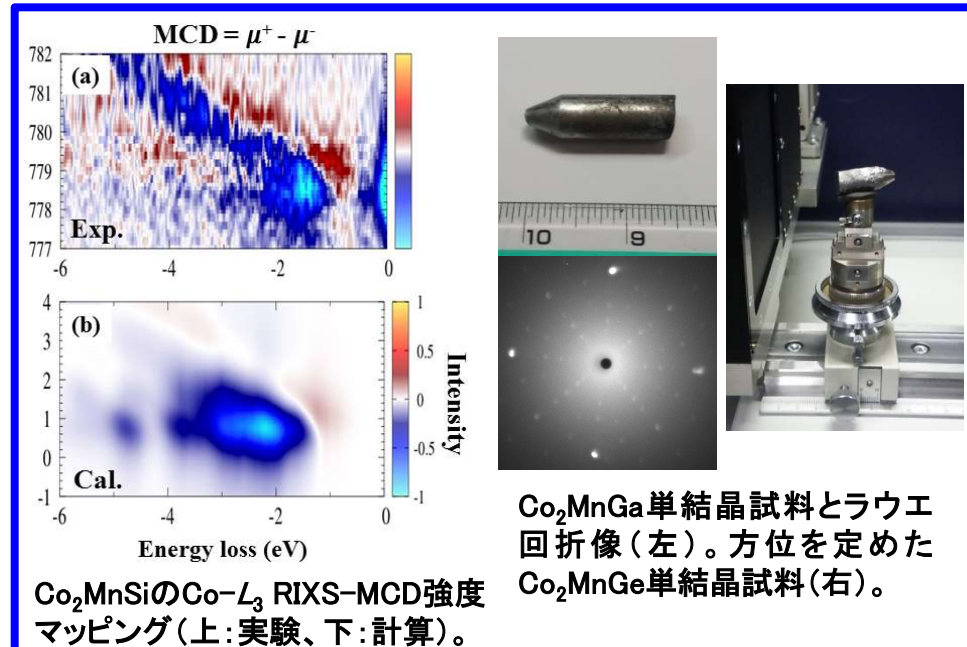


研究プロジェクト名: 高スピン偏極ホイスラー合金の規則度制御と電子状態

概要: 本研究では、ハーフメタル型電子状態を有すると示唆されているMn基、Co基ホイスラー合金を作製し、原子の規則配列や磁気特性などの諸物性と電子状態との関連性について調べることを目的としている。また、擬三元系(四元系)ホイスラー合金について高スピン偏極材料となりうる新規磁性材料の探索も行う。

コアメンバー: 梅津理恵、木村雄太(東北大金研)、関山グループ(阪大基礎工)、小口グループ(阪大産研)、原田グループ(東大物性研)、宮脇淳(QST)

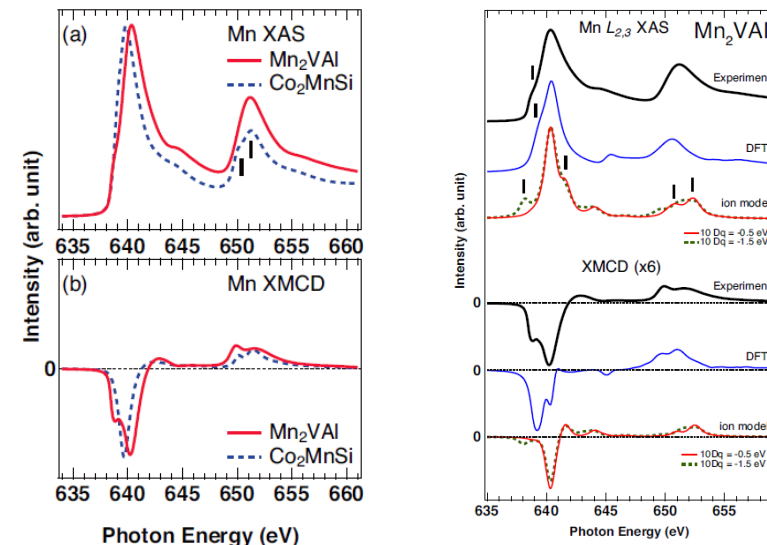
期待される研究成果: 昨年度に角度分解光電子分光測定で、ハーフメタル型バンド構造の観測に成功した Co_2MnGe 単結晶試料と、ワイル強磁性体として知られている Co_2MnGa について軟X線共鳴非弾性X線散乱(RIXS)を測定することを予定している。フェルミ面近傍の電子状態を詳細に調べ、両者の電子状態の特徴が、RIXSでどのように観測されるのか、系統的研究を行う。



研究プロジェクト名: 高スピン偏極ホイスラー合金の規則度制御と電子状態

概要: 本研究では、ハーフメタル型電子状態を有すると示唆されているCo基、Mn基ホイスラー合金に関して、原子の規則配列と磁気特性、および電子状態との関連性について調べることを目的としている。また、擬三元系ホイスラー合金について高スピン偏極材料となりうる新規磁性材料の探索も行う。

研究成果(実施状況): 高スピン偏極強(フェリ)磁性体である, Co_2MnSi 、 Mn_2VAl のバルク単結晶試料を作製し、X線吸収における磁気円二色性(XMCD)を調べた。同じ、MnのL端吸収スペクトルでも、 Co_2MnSi の場合はイオンモデル、 Mn_2VAl の場合はDFTによる計算スペクトルでよく再現でき、 X_2YZ で示されるホイスラー合金のうち、占有するサイトによって性質が異なることが分かった。



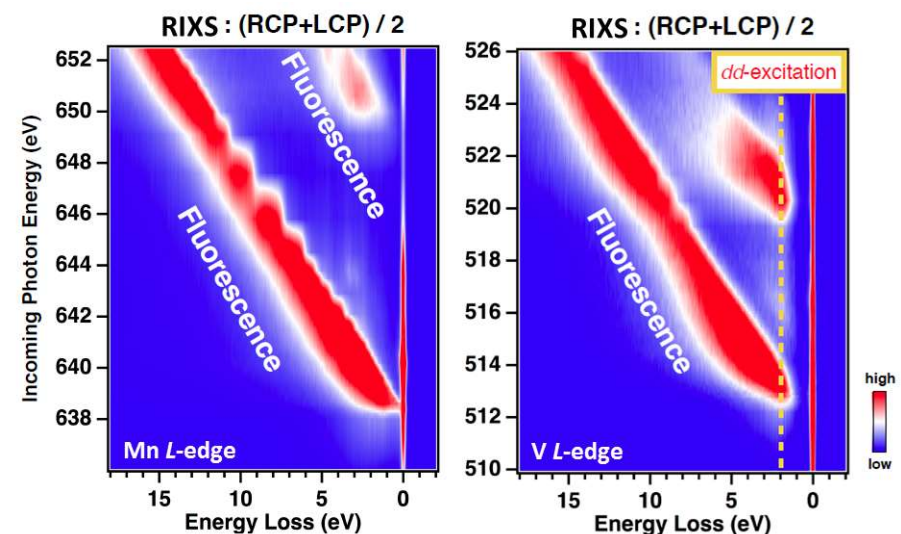
左: Mn_2VAl , Co_2MnSi のMn-L端吸収スペクトル(XAS).
 Mn_2VAl のMn-L端XASとXMCD(実験と計算スペクトル)

主要発表論文等: [1] K. Nagai et al., Phys. Rev. B, 97, 035143 (2018). [2] I. Shigeta et al., Phys. Rev. B, 97, 104414 (2018)

研究プロジェクト名: 高スピン偏極ホイスラー合金の規則度制御と電子状態

概要: ハーフメタル型電子状態を有すると示唆されているCo基、Mn基ホイスラー合金について、原子の規則配列と磁気特性、および電子状態との関連性について調べることが目的としている。また、擬三元系ホイスラー合金の中で高スピン偏極材料となりうる新規磁性材料の探索も行う。

研究成果(実施状況): ハーフメタル型フェリ磁性体であると予測されている Mn_2VAI 合金について、単結晶を作製し、共鳴非弾性X線散乱(RIXS)測定を行った。RIXSの磁気円二色性(MCD)スペクトルは、ハーフメタルであると仮定した際のDFT計算から得られるスペクトルと非常によく一致し、特徴的なRIXS-MCDスペクトルは $m_j = -3/2$ からの励起による発光成分が支配的であることが分かった。



Mn_2VAI 単結晶のMnとVのL端における、軟X線による磁場中共鳴非弾性X線散乱(SX-RIXS)のスペクトル [1].

主要発表論文等: [1] K. Nagai et al., Phys. Rev. B, 97, 035143 (2018). [2] R. Y. Umetsu et al., J. Phys. Condens. Matter, 31, 065801 (2019). [3] R. Y. Umetsu et al., Phys. Rev. B, in press.

研究プロジェクト名: 高スピン偏極ホイスラー合金の規則度制御と電子状態

概要: ハーフメタル型電子状態を有すると示唆されている Co_2MnSi ホイスラー合金の単結晶バルク試料を作製し、軟X線による共鳴非弾性X線散乱測定を磁場中で行うことにより、電子状態に関する知見を得た。

研究成果(実施状況): フェルミ面近傍の、占有・非占有電子状態を調べるために、 Co_2MnSi バルク単結晶について共鳴非弾性X線散乱(RIXS)測定を磁場中で行った。CoおよびMn- $2p_{3/2}$ 吸収ピークのRIXSスペクトル、 $h\nu = 779.0$ (右上図)、 640.5 eV (右下図)のどちらにおいても明瞭な蛍光成分が観測され、さらにそれらの円偏光依存性($\text{MCD} = \mu^+ - \mu^-$)が確認された。計算スペクトルとの比較から、正と負のMCDの成分は、それぞれ $2p\ m_j = +3/2$ と $-3/2$ からの蛍光の寄与が大きいことが分かり、さらに元素別に内殻分裂の大きさも概算できることが分かった。

主要発表論文等: [1] R.Y. Umetsu *et al.*, Phys. Rev. B 99 (2019) 134414

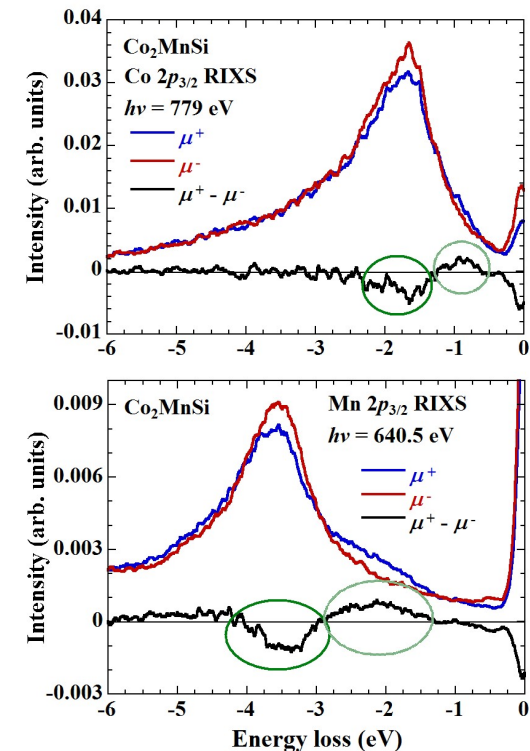
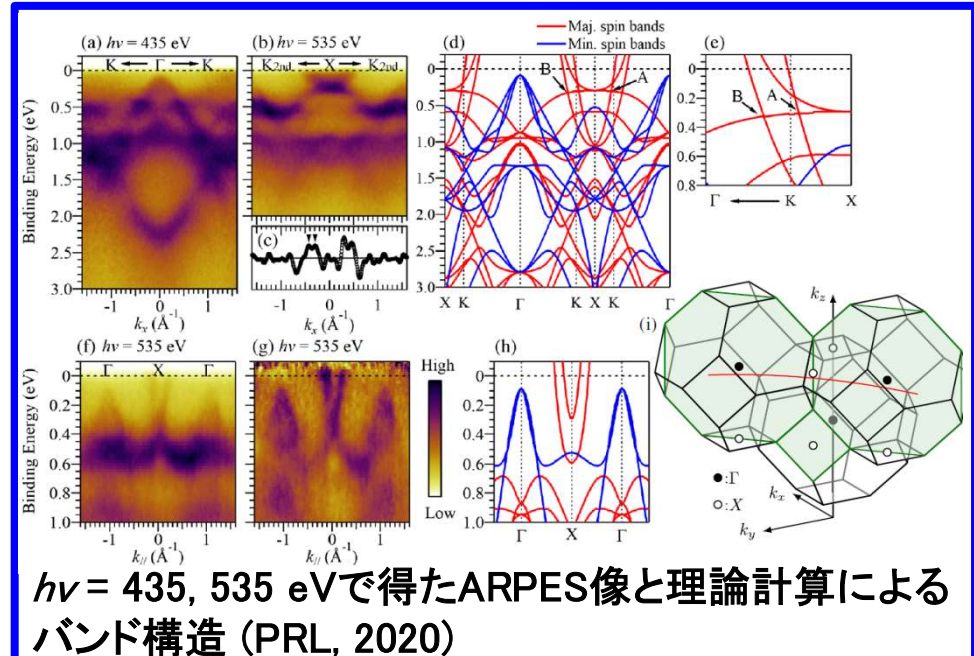


FIG. 磁場中・室温における Co_2MnSi のRIXSスペクトル。

研究プロジェクト名: 高スピン偏極ホイスラー合金の規則度制御と電子状態

概要: 本研究では、ハーフメタル型電子状態を有すると示唆されているMn基、Co基ホイスラー合金を作製し、原子の規則配列や磁気特性などの諸物性と電子状態との関連性について調べることを目的としている。また、擬三元系(四元系)ホイスラー合金について高スピン偏極材料となりうる新規磁性材料の探索も行う。

研究成果(実施状況): 高スピン偏極強磁性体であると期待されるホイスラー合金 Co_2MnGe の単結晶試料を作製し、軟X線角度分解光電子分光(ARPES)測定を行った。右の図に示されるように、 Co_2MnGe の3次元的なバンド構造を初めて観測した。さらに、そのバンド構造は理論計算結果とよく対応し、 Co_2MnGe がハーフメタルなバンド構造をもつことを実験的に明らかにした。

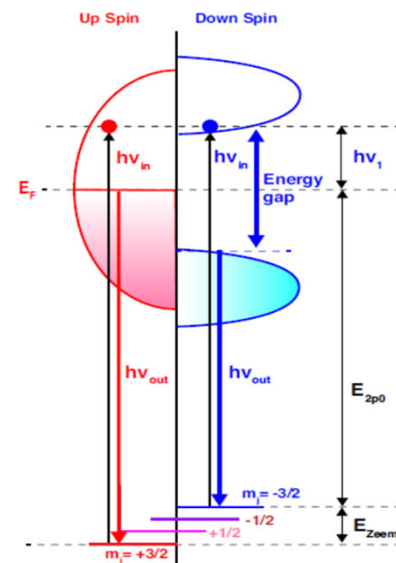
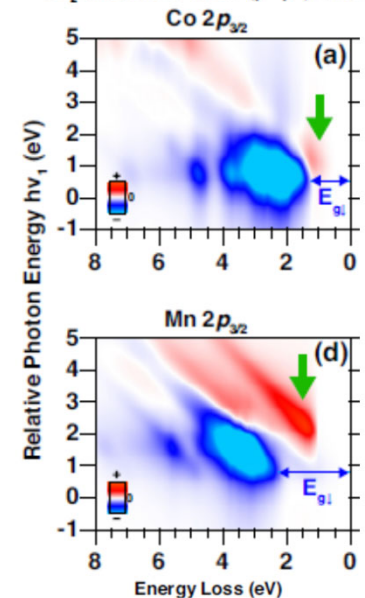


主要発表論文等: [1] Takashi Kono et al., Phys. Rev. Lett., 125, 216403 (2020).
[2] Rie Y. Umetsu et al., J. Alloys Compds., 855, 157389 (2021).

研究プロジェクト名: 高スピン偏極ホイスラー合金の規則度制御と電子状態

概要: 本研究では、ハーフメタル型電子状態を有すると示唆されている、Co基ホイスラー合金のバルク単結晶試料を作製し、磁場中における軟X線共鳴非弾性散乱(RIXS)とその磁気円二色性(MCD)より電子状態の観測を行った。また、 Co_2MnSi 単結晶については、X線吸収微細構造(EXAFS)も調べたところ明瞭なMCDが観測され、理論計算との比較・検討を行った。

研究成果(実施状況): Co_2MnSi や Mn_2VAI ホイスラー合金においてRIXS-MCDの測定を行った。観測結果と理論計算より得られるスペクトルとの比較・検討により、ハーフメタルのギャップが形成されるスピン成分($\uparrow$ or $\downarrow$)やそのギャップ幅とフェルミ面との相対的位置、さらにゼーマン分裂のエネルギー幅等が元素別に評価可能であることが判明した。 Co_2FeSi , Co_2MnGa , Co_2MnGe 単結晶試料についても系統的研究を進めていく。

Optical process of RIXS-MCD in Co_2MnSi  Co_2MnSi RIXS-MCD ($\mu^+ - \mu^-$) Theory

主要発表論文等: [1] H. Fujiwara et al., Sci. Rep. 11, 18654 (2021).
[2] J. Kogo et al., J. Phys. Soc. Jpn. 91, 034702 (2022)