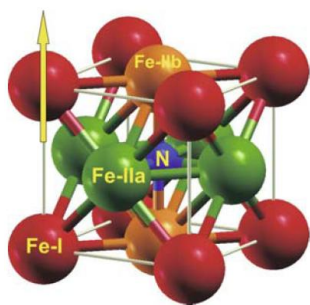


## DE MAGNETISATIE VAN DUNNE LAGEN $Fe_4N$

*Keywords: Ijzernitrides,  $Fe_4N$ , Magnetisme, Magnetisatiemetingen, Computersimulaties, DFT*



Het ijzernitride  $Fe_4N$  is een materiaal met een eenvoudige structuur (zie figuur) en desondanks verrassend rijke eigenschappen. Het wordt al 80 jaar bestudeerd in wisselende contexten: voor de oppervlaktebehandeling van staal, als katalysator, voor magnetische data-opslag, als component in toekomstige spintronica-toepassingen, en als modelsysteem voor diverse fundamentele aspecten van magnetisme.

In een omvangrijke studie die o.a. in Gent werd uitgevoerd, werd zoveel mogelijk bestaande experimentele informatie en theoretische inzichten voor dit materiaal gebundeld, en kritisch vergeleken met een systematische reeks *ab initio* berekeningen (hierbij worden materiaaleigenschappen rechtstreeks uit de kwantumfysica voorspeld). Hieruit bleek dat  $Fe_4N$  een materiaal is dat op de wip zit tussen een toestand met hoge en lage magnetisatie. Dat geeft mogelijkheden om de magnetisatie sterk te beïnvloeden, wat voor toepassingen interessant kan zijn. Uit deze studie bleek ook dat het heel onwaarschijnlijk is dat bulk  $Fe_4N$  een extreem hoge magnetisatie heeft, iets wat door recente metingen gesuggereerd was.

Als reactie op deze overzichtsstudie heeft een Japanse groep onlangs aan het SPring8 synchrotron in Harima een heel nauwkeurige meting gedaan van de magnetisatie van dunne lagen  $Fe_4N$  met de XMCD-methode (publicatie volgt). Ze vonden een waarde die verrassend genoeg een stuk *lager* blijkt te zijn dan wat vele eerdere studies vonden. Dit doet vermoeden dat er ergens een factor in het spel is waar niemand tot nu toe rekening mee gehouden heeft, en die er voor zorgt dat de magnetisatie soms hoog, soms gemiddeld en soms laag is. Een mogelijke verdachte is het substraat waarop  $Fe_4N$  gehecht is. Vooral bij extreem dunne lagen (enkele nanometers) zou dit een grote invloed op de magnetisatie kunnen hebben.

**Doelstelling** Daar waar vroegere *ab initio* berekeningen voor  $Fe_4N$  steeds over bulkmateriaal gingen, willen we voor deze thesis de magnetisatie van dunne lagen van  $Fe_4N$  op verschillende substraten berekenen. Hangt de lokale magnetisatie af van de afstand tot het grensvlak met het substraat? Heeft het ene substraat een andere invloed dan het andere? Zo ja, wat is het fysisch mechanisme daarachter? Bovendien willen we het aantal Fe-3d elektronen in deze verschillende situaties nauwkeurig berekenen. Dit is een parameter die nodig is om XMCD-experimenten goed te kunnen analyseren. In de huidige analyse van de SPring8-experimenten is deze parameter slechts geschat. Met een meer nauwkeurige waarde kan het experimentele resultaat voor de magnetisatie er misschien anders uitzien.

---

**Promotor/begeleiding:** Prof. Dr. S. Cottenier – [stefaan.cottenier@ugent.be](mailto:stefaan.cottenier@ugent.be) (09/264.65.63)

<http://molmod.ugent.be/student-corner>