18a-C15-8

FeNi 多層膜の結晶磁気異方性に関する第一原理計算

A first-principles study on magneto-crystalline anisotropy of FeNi multilayers

[1]東北大通研・[2]東北大 CSIS　尾崎 翔[1], ○三浦 良雄[1,2], 辻川 雅人[2], 阿部 和多加[1,2], 白井 正文[1,2]

[1]RIEC & [2]CSIS, Tohoku Univ. ,　S. Ozaki[1], ○Y. Miura[1,2], M. Tsujikawa[2], K. Abe[1,2], M. Shirai[1,2]

E-mail: miura@riec.tohoku.ac.jp

近年、希少金属を含まない垂直磁気材料の開発が盛んに行われている。その中でも $L1_0$-FeNi は、大きな飽和磁化と結晶磁気異方性が期待できることから、注目を集めている。これまで、Ni や Au-Cu-Ni バッファ上での FeNi 単原子交互積層膜が作製されており、垂直の結晶磁気異方性が報告されている[1,2]。また実験では、単原子交互積層法を用いて積層周期を変調した Fe_mNi_m(001)多層膜合金 (m=1,2,3)も作製され[3]、大きな結晶磁気異方性を示す構造の探索が行われている。そこで本研究では、Fe_mNi_n(001)多層膜合金(m,n)=1,2,3 の結晶磁気異方性を第一原理計算により解析し、大きな垂直磁気異方性が得られやすい多層膜構造を探索した。

結晶磁気異方性は密度汎関数理論に基づく第一原理計算によって行い、交換・相関ポテンシャルは一般化密度勾配近似により取り扱った。計算により求めた Fe_1Ni_1(001) つまり $L1_0$-FeNi の結晶磁気異方性定数 K_u の値は最安定な格子定数(a_0=3.5565Å, c/a_0=1.0078)に対して 5.65×10^6erg/cm^3 であり、実験結果 [2]と同程度の値が得られている。この $L1_0$-FeNi の垂直磁気異方性の起源は、Fe 軌道モーメントと Fe 局在スピンのスピン軌道相互作用にあり[4]、これは X 線磁気円二色性の実験による FeNi 交互積層膜の Fe 軌道モーメントの角度依存性の結果とも定性的に一致している[5]。Fig.1 は Fe_mNi_n(001)多層膜の結晶磁気異方性を Fe の層数 m と Ni の層数 n の関数として示している。この結果から明らかなように、Fe の層数を増やした Fe_2Ni_1(001)多層膜では、$L1_0$-FeNi(Fe_1Ni_1)よりも大きな垂直磁気異方性が得られている。一方、Ni の層数を増やした場合は大きな面内の結晶磁気異方性が得られた。Fe_2Ni_1(001)が $L1_0$-FeNi と比較して垂直磁気異方性が増加したのは、垂直磁気異方性に寄与する Fe が単位体積当たりで増加したことが要因と考えられる。講演では、更に他の Fe_mNi_n(001)多層膜構造での結晶磁気異方性の起源を構造の安定性とともに議論する。

【謝辞】本研究は、科学技術振興機構の産学共創基礎基盤研究プログラム「貴金属フリーＬ１０型規則合金磁石創製の指針構築」からの支援を受けて行った。

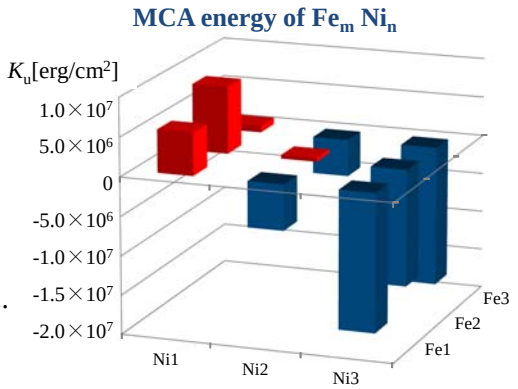

Fig. 1: Magneto-crystalline anisotropy (MCA) energies of Fe_mNi_n(001) multilayers for (m,n)=1,2,3 with equilibrium lattice parameters.

【参考文献】

[1] M. Sakamaki and K. Amemiya, APEX **4** (2011) 073002.

[2] M. Mizuguchi *et al*. Materia Japan. **50** (2011) 389.

[3] T. Kojima, *et al*., JJAP **51** (2012) 010204.

[4] Y. Miura, *et al*., JPCM **25** (2013) 106005.

[5] M. Kotsugi, *et al*., JMMM **326** (2013) 235.

© 2013 年　応用物理学会