

希土類金属超薄膜における結晶磁気異方性の第一原理計算

First principles calculations of magnetocrystalline anisotropy

in rare-earth metal ultra-thin films

○名和 憲嗣¹、池浦 雄志¹、中村 浩次¹、秋山 亨¹、伊藤 智徳¹、小口多美夫²

(1. 三重大院工、2. 阪大産研)

○Kenji Nawa¹, Yushi Ikeura¹, Kohji Nakamura¹, Toru Akiyama¹, Tomonori Ito¹, Tamio Oguchi²

(1. Mie Univ., 2. ISIR, Osaka Univ.)

E-mail: nawa12@nd.phen.mie-u.ac.jp

新規磁石や磁気デバイス材料の設計に向け、強いスピン軌道相互作用 (SOC) を持つ希土類金属の活用が一つのキーワードになっている。近年では、Fe や W などの遷移金属基板の希土類金属超薄膜成長[1-2]が可能になりつつあり、超薄膜化による二次元性と基板界面の混成による巨大な垂直磁気異方性の実現、さらに外部電場の印加による結晶磁気異方性の変調にも興味注がれている。我々は、これまでに、intra-atomic ノンコリニアスピン状態と SOC オンサイトクーロン相互作用+U を考慮した全電子フルポテンシャル線形化補強平面波法[3]を用いて、希土類金属の磁性に関する第一原理計算を行い、バルク及び薄膜で軌道磁気モーメントが十分に得られるなど、計算手法の妥当性を確認してきた。本発表では、同手法を用いて、希土類金属 (Nd, Sm, Eu, Gd) 単原子層膜における結晶磁気異方性エネルギー E_{MCA} を系統的に調べた結果を報告する。ここでは、基板の無いフリースタンディング及び基板上の希土類金属単原子層に対して、 E_{MCA} を、磁化が面内及び垂直方向に仮定したときの自己無撞着計算による全エネルギーの差から算出した。計算の結果、フリースタンディング希土類金属 (Nd, Sm, Eu, Gd) 単原子層では、図1に示すように、 E_{MCA} がそれぞれ 1.7, 26.7, -1.4, -0.7 meV/atom となり、Nd と Sm で磁化容易軸が面直方向に、Eu と Gd では面内方向になること、特に、Sm では E_{MCA} が遷移金属超薄膜系[3]と比較して1オーダーも大きな結晶磁気異方性エネルギーになることがわかった。この巨大な垂直磁気異方性の発現は、遷移金属超薄膜の場合とは異なり、磁化方向が面内と面直で隣接原子 d 軌道間の混成 (電荷分布) が変調され、フェルミ準位近傍の d 軌道局所状態密度が顕著に変化するためである。Fe(110)基板上でも E_{MCA} はそれぞれ 1.8, 4.9, 0.5, 1.9 meV/RE-atom となり、フリースタンディング単原子層と比べ低くなるが、Sm ではおよそ 5 meV/RE-atom もの大きな値である。また、基板種にも強く依存することが示唆される。

発表では、さらに外部電場下における結晶磁気異方性エネルギーの結果についても報告する。

[1] Yu. Dedkov et al., Surf. Sci. **601**, 4329 (2007)

[2] C. Nistor et al., Phys. Rev. B **90**, 064423 (2014).

[3] K. Nakamura et al., Phys. Rev. B **67**, 014420 (2003).

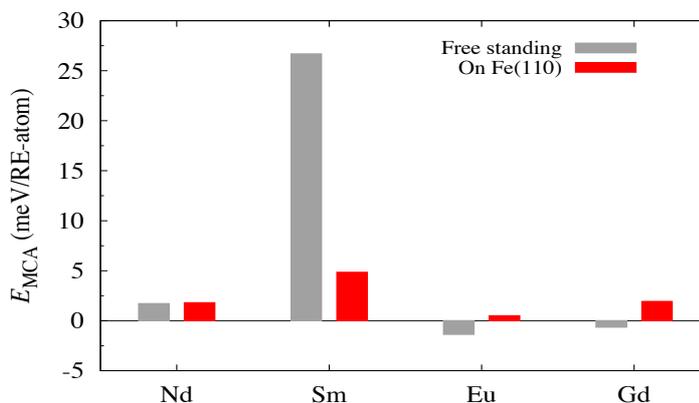


図1. フリースタンディング及びFe(110)基板上における希土類金属単原子層の結晶磁気異方性エネルギー。