

L_{10} -FeNi 規則合金への窒素添加効果

Effect of nitrogen insertion to L_{10} -ordered FeNi alloys

東北大金研¹, 東北大 CSRN² °伊藤啓太^{1,2}, 高梨弘毅^{1,2}

IMR, Tohoku Univ.¹, CSRN, Tohoku Univ.², °Keita Ito^{1,2}, Koki Takanashi^{1,2}

E-mail: itok@imr.tohoku.ac.jp

【背景】より高性能な永久磁石や、磁気ランダムアクセスメモリー等の高機能磁気記録デバイスの実現には、高い一軸磁気異方性エネルギー(K_u)を有する強磁性体材料が求められている。加えて、希土類や貴金属を用いず、資源が豊富な元素のみで構成される材料が望ましい。我々はこれまでに、希少元素を含まない高 K_u 材料として L_{10} -FeNi 規則合金に注目して、薄膜の作製と磁気特性の評価および第三元素の添加を行ってきた^{1,2}。本研究では新たに、第一原理計算を用いて L_{10} -FeNi への窒素添加の影響を調べた。

【計算】第一原理計算による L_{10} -FeNi および Ni_2Fe_2N に対する構造最適化計算を行い、結晶構造、スピン磁気モーメント等の物性値を予想した。続いて、構造最適化後の計算結果をもとにスピン軌道相互作用を考慮した計算を行い、磁化の向きを a 軸及び c 軸で変え、全電子エネルギーの差から K_u を算出した。第一原理計算には VASP による GGA-PBE を用いた。カットオフエネルギーは 500 eV、 k 点メッシュは構造最適化計算では $11 \times 11 \times 11$ 、スピン軌道相互作用を考慮した計算では $23 \times 23 \times 23$ とした。

【結果】Fig. 1(a)に L_{10} -FeNi、Fig. 1(b)に Ni_2Fe_2N の第一原理計算の結果を示す。Fig. 1(a)の結果は、過去の計算の報告例と近い³。Fig. 1(b)のように Fe 層に N が侵入した方が、Ni 層に侵入した場合よりも安定な構造となった。薄膜を仮定すると L_{10} -FeNi は形状磁気異方性エネルギーが K_u よりも大きい垂直磁化膜にならない予想となった。一方で、 Ni_2Fe_2N では L_{10} -FeNi への N の侵入による格子定数の増大等の影響により、体積当たりの飽和磁化(M_s)が 20%程度減少すると同時に、 L_{10} -FeNi の 2 倍超の K_u の発現が示唆された。 L_{10} -FeNi とは違い $K_u > 2\pi M_s^2$ となり、垂直磁化膜になる予想であることから、今後は Ni_2Fe_2N 薄膜を作製して磁気特性を評価する予定である。

【謝辞】本研究は、JSPS 科研費若手 B(No. 17K14651)、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。第一原理計算は、筑波大学末益崇教授と関西大学本多周太助教のご協力で行った。

1)T. Kojima *et al.*, Thin Solid Films **603**, 348 (2016). 2)T. Kojima *et al.*, J. Phys. D: Appl. Phys. **47**, 425001 (2014). 3)Y. Miura *et al.*, J. Phys.: Condens. Mater. **25**, 106005 (2013).

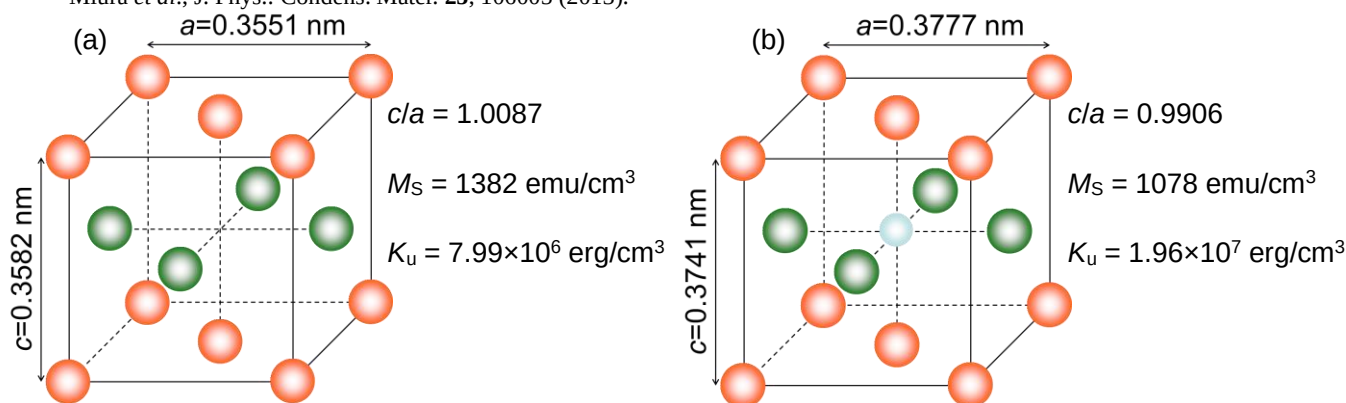


Fig. 1 Calculation results for (a) L_{10} -FeNi and (b) Ni_2Fe_2N . Orange, green, and blue spheres indicate Ni, Fe, and N, respectively.