

L₁₀-FeCoX (X=Cu, Ag, Ni) の結晶磁気異方性に関する第一原理計算
First-principles calculations on magneto-crystalline anisotropy of
L₁₀-FeCoX (X=Cu, Ag, Ni)

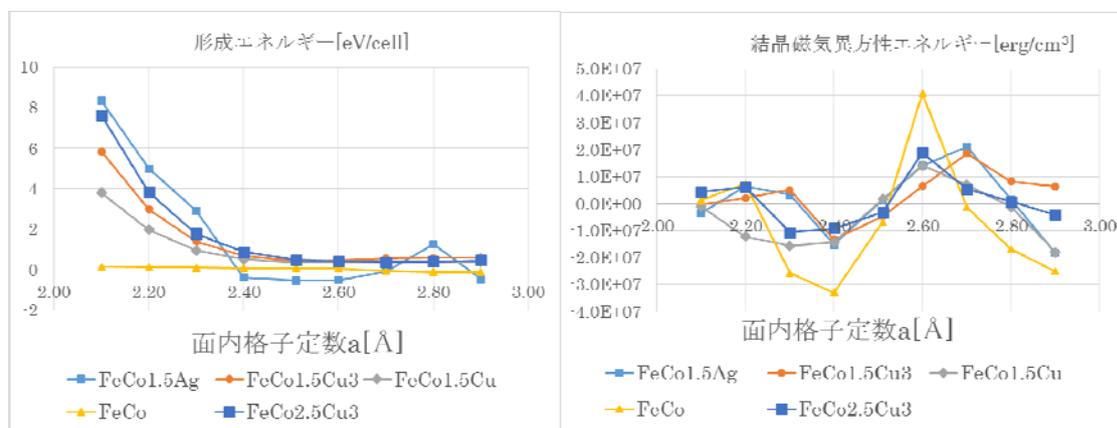
京都工繊大 ◦多田 皓之, 三浦 良雄

Kyoto Institute of Technology, Electrical Engineering and Electronics, ◦Hiroyuki Tada, Yoshio Miura

E-mail: sirokurozinntori@gmail.com

近年、L₁₀-FeCo が Nd₂Fe₁₄B を超える飽和磁化と結晶磁気異方性を持つことからレアメタルフリーの垂直磁気材料として注目を集めている。しかしながら、FeCo は本来結晶磁気異方性を持たない立方晶(B2 構造)が安定であり、面内方向に大きな圧縮歪を有する L₁₀-FeCo 薄膜の作製は容易ではない。実験的には、FeCo に面内の圧縮歪を加えるため、Cu₃Au をバッファ層として L₁₀-FeCo 薄膜の作製が試みられているが、FeCo の膜厚が増加すると立方晶の B2 構造に戻ることを報告されている[1]。そこで、実験では一定の FeCo 層を積層したのち、緩衝層として Cu を挿入することが検討されている。そこで、FeCo 層に Cu を挿入すると FeCo の面内圧縮歪による形成エネルギーの増大が制御できる可能性がある。そこで本研究では、L₁₀-FeCoX (X=Cu, Ag, Ni) の結晶磁気異方性の第一原理計算を行い、Cu や Ag など非磁性層挿入による結晶磁気異方性と形成エネルギーの変化について解析した。

第一原理計算には VASP-PAW コードを用いた。計算に用いた構造モデルとして、FeCo, (FeCo)1.5Cu, (FeCo)1.5Cu₃, (FeCo)2.5Cu, (FeCo)1.5Ag の多層膜合金に対して結晶磁気異方性と形成エネルギーの第一原理計算を行った。図に示すように (FeCo)1.5Cu, (FeCo)1.5Cu₃, (FeCo)2.5Cu においては 10⁷[erg/cm²]を超える十分に大きな垂直の結晶磁気異方性エネルギーを持っていたが、形成エネルギーが正であったため構造としては不安定であることが分かった。一方で、(FeCo)1.5Ag 合金は、形成エネルギーが最小となる面内格子定数において垂直の結晶磁気異方性が得られた。この結果は、FeCo 層に Ag を挿入することにより、安定な L₁₀-FeCo 薄膜が得られる可能性があることを示唆している。発表では、さらに Ni を挿入した系での結晶磁気異方性と形成エネルギーの計算結果を示し、垂直磁気異方性発現のメカニズムについて議論する。



[1] T. Ohtsuki, et al., JAP **115**, 043908 (2014)