FeCo*X*(*X*=Ag,Ni)多層膜合金の結晶磁気異方性に関する機械学習による解析

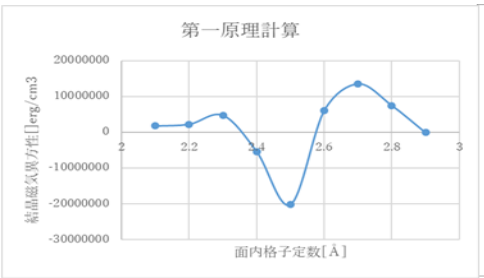
Machine learning on magneto-crystalline anisotropy of FeCoX(X=Ag,Ni) multilayer

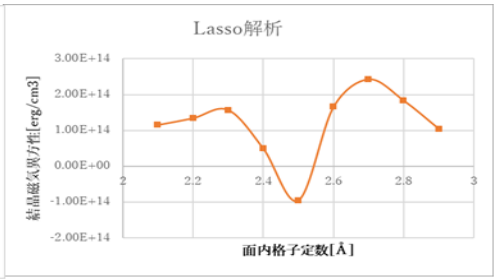
京都工繊大 [1], 物材機構 [2]　○(M1) 多田 皓之 [1], 三浦 良雄 [2]

Kyoto Institute of Technology[1],NIMS[2],°Hiroyuki Tada[1], Yoshio Miura[2]

E-mail: m7621021@edu.kit.ac.jp

近年、$L1_0$-FeCo が $Nd_2Fe_{14}B$ 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 $L1_0$-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、Cu_3Au をバッファ層として $L1_0$-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 構造に戻ることが報告されている[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 fcc 構造が最安定となる金属層(例えば 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。前回の発表では、L10-FeCo に Cu,Ag,Ni を挿入した FeCo*X*（*X*=Cu,Ag,Ni）の結晶磁気異方性の第一原理計算を行い、Cu,Ag,Ni 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。今回は、高い安定性と大きな垂直磁気異方性が得られた FeCoFeAg 多層膜と FeCoFeNi 多層膜に注目し、その垂直磁気異方性の起源について機械学習を用いて解析した結果について議論する。





多層膜合金においてどの原子の、どの軌道の電子が垂直磁気異方性の面内格子定数依存性に大きく寄与しているかを明らかにするため、LASSO(Least Absolute Shrinkage and Selection Operator)解析を行った。第一原理計算で得た２次摂動行列要素のデータをまとめ、各原子の d 軌道ごとの角運動量演算子に対する行列要素の値を説明変数、結晶磁気異方性エネルギーの値を目的変数として解析を行った。その結果、結晶磁気異方性に寄与している行列要素の数が、４０種類から１０種類に減らすことができた。また LASSO 解析で得られた結果から結晶磁気異方性の面内格子定数依存性を再現できるか確認した。第一原理計算で得た結晶磁気異方性の面内格子定数依存性と比較しても、よく一致していることがわかる。講演ではどの軌道が説明変数として重要となるか、に関して詳細な議論を行う。

[謝辞]本研究は科学研究費補助金・基盤研究(B)(16H03873)の補助を受けて行われた。

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

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