

FeCoX(X=Ag,Ni)多層膜合金の結晶磁気異方性に関する理論研究

Theoretical study on crystal magnetic anisotropy of FeCoX(X=Ag,Ni) multilayer

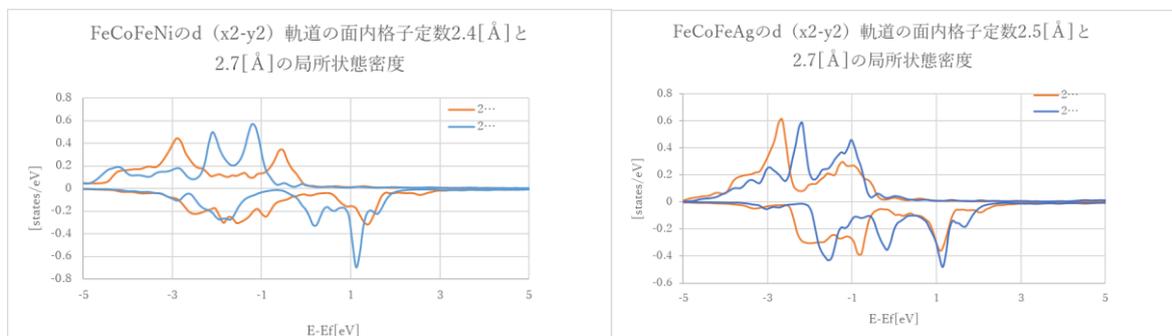
京都工繊大 ◯(M1)多田 皓之, 三浦 良雄

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

E-mail: oubutsu@jsap.or.jp

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 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 FeCoX (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議論する。

まず、スピン軌道相互作用を考慮した第一原理計算により FeCoFeAg 多層膜と FeCoFeNi 多層膜の結晶磁気異方性を計算した。さらに、磁気異方性の起源を解析するため、スピン軌道相互作用を摂動項として取り扱った 2 次摂動計算により、各原子・スピン・軌道ごとの結晶磁気異方性への寄与を計算した。その結果、Co 原子のもつ down スピン電子が最も異方性に寄与していることが分かった。次に、この Co 原子による異方性への寄与が面内格子定数 a の値が 2.4~2.7[Å]の間で大きく変化したことに注目して、Co 原子の局所密度を比較してみた。すると、寄与が最も低いときと最も高い時では、フェルミエネルギー準位付近の down スピン電子の数に大きな違いがあることが分かった。この事実から、この 2 つの多層膜合金の磁気異方性は Co 原子における down スピン電子の数がフェルミ準位付近で増加したことに起因することが分かった。



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

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