

小田洋平・今村裕志
(産総研ナノスピ)

Lattice distortion effect on magnetocrystalline anisotropy in corundum-type Cr_2O_3

Y. Kota and H. Imamura
(AIST Spintronics RC)

1 はじめに

近年, Cr_2O_3 に極薄の Co 層を積層した交換バイアス膜において垂直交換バイアスおよび Cr_2O_3 の電気磁気効果を利用した交換バイアス磁場の制御が実現されており [1], 酸化物を用いた電圧制御による低消費電力メモリや媒体の開発に関心が集まっている. しかしながら $\text{Cr}_2\text{O}_3/\text{Co}$ 交換バイアス膜のブロッキング温度は試料の作製条件等に依存し, かつ Cr_2O_3 のネール温度 (308 K) を大きく下回るのが現状である. Meiklejohn-Bean のモデルの考え方によれば交換バイアスのブロッキング温度は反強磁性層の磁気異方性定数に比例すると考えられおり, Cr_2O_3 の磁気異方性を分析することはブロッキング温度向上の指針を得るために重要である.

そこで本講演では, 局所スピン密度近似 (LSDA) に基づく電子状態の第一原理計算によりコランダム型 Cr_2O_3 の結晶磁気異方性エネルギーの計算を行った結果について報告する. 特に Cr_2O_3 層とその下地層との間の格子ミスフィットから生じる格子歪の影響について検証する. 電子状態の第一原理計算には Vienna *ab-initio* simulation package を用い, 遷移金属のオンサイトクーロンエネルギーの補正 (+ U) を考慮した. また Cr_2O_3 の格子定数と体積については実験値 [2] を参照した.

2 計算結果・考察

Figure 1(a) は磁気異方性定数 K と規格化された面内格子定数 a/a_0 との関係プロットしたものである. ただクーロンエネルギーの補正值 U は文献 [3] で与えられた参照値 ($U=3.3$ eV) を用い, また等体積変形となるように面直方向の格子定数を設定した. $K > 0$ ($K < 0$) のとき面直 (面内) 方向が容易軸方向となる. Figure 1(a) から K は a/a_0 に対して線形に振る舞い, a/a_0 が 1.00 近傍で K の符号が変化することが分かる. さらにここで Fig. 1(b) に経験的パラメータである U に対する Cr_2O_3 の結晶磁気異方性エネルギー ΔE の依存性を調べた結果を示す. a/a_0 が 0.98, 1.02 のとき, U が 3.3 eV 付近もしくはそれ以上の領域では U の増加とともに ΔE は一様にゼロに近づいている (ただし a/a_0 が 1.00 のときは $U > 6$ eV でゼロに近づいている). これは U の増加によって Cr_2O_3 のエネルギーギャップ, つまり占有状態と非占有状態との間のエネルギー差が大きくなることに起因するものと考えられる.

これらの結果から K には U に対する依存性があるものの, a/a_0 を大きくすることで K が増大するため, 面内伸張による $\text{Cr}_2\text{O}_3/\text{Co}$ のブロッキング温度の向上が期待できる. 講演では結晶磁気異方性の計算結果に加え, 磁気双極子相互作用由来の磁気異方性 [4] との競合についても議論する予定である.

References

- 1) Y. Shiratsuchi *et al.*, *Appl. Phys. Express* **3**, 113001 (2010); X. He *et al.*, *Nature Materials* **9**, 579 (2010); T. Ashida *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **104**, 152409 (2014).
- 2) L. W. Finger and R. M. Hazen, *J. Appl. Phys.* **51**, 5362 (1980).
- 3) N. J. Mosey *et al.*, *J. Chem. Phys.* **129**, 014103 (2008).
- 4) M. Tachiki and T. Nagamiya, *J. Phys. Soc. Jpn.* **13**, 452 (1958); J. O. Artman *et al.*, *Phys. Rev.* **138**, A912 (1965).

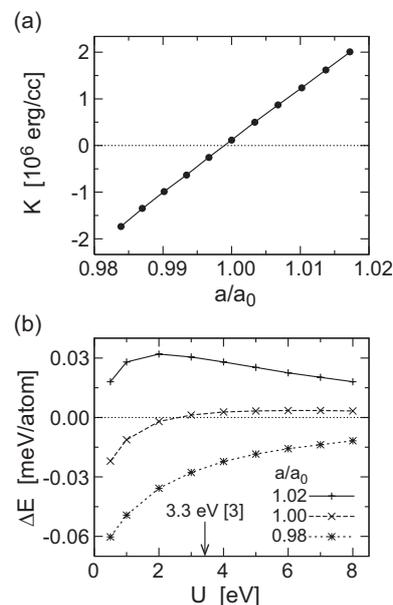


Fig. 1 (a) Magnetic anisotropy constants K of Cr_2O_3 as a function of normalized in-plane lattice constant a/a_0 . (b) U parameter dependence of magnetic anisotropy energy ΔE . Positive (negative) sign of K and ΔE indicates out-of-plane (in-plane) anisotropy.