

Rh 上に積層された bct-Fe₅₀Co₅₀ 合金の垂直磁気異方性に関する理論的評価

兵頭一茂*, 小田洋平**, 佐久間昭正*

(* 東北大, ** 産総研)

Theoretical evaluation with respect to perpendicular magnetic anisotropy of bct-Fe₅₀Co₅₀ stacked on Rh

K. Hyodo*, Y. Kota**, and A. Sakuma*

(*Tohoku Univ., ** AIST)

1 はじめに

bct-Fe₅₀Co₅₀ 合金は c 軸長と a 軸長の比 (c/a) を 1.25 に近づけることで、巨大な結晶磁気異方性定数 ($K_u \approx 100$ Merg/cm³) が得られることが理論的に予測されている¹⁾. この系の実現のため、近年下地層との格子ミスマッチによって bcc-FeCo 合金の格子を歪ませる (c/a>1) 試みがなされている^{2),3)}.

Lao らは fcc-Rh 層間に Fe, Co 層を交互積層させることで、c/a \approx 1.2 の bct-Fe₅₀Co₅₀ 合金を作製した³⁾. そして、測定された K_u から、現象論的に与えられた式

$$K_u \times t_{FM} = K_v \times t_{FM} + K_{int} \quad (1)$$

(t_{FM} : FeCo 合金の膜厚) へのフィティングによって、それぞれバルク磁気異方性定数 $K_v = (2.50 \pm 0.34) \times 10^7$ erg/cm³, 界面磁気異方性定数 $K_{int} = (0.68 \pm 0.34)$ erg/cm² と値を見積もっている. このように実験試料は薄膜であるのに対して、本材料に関して行われた既存の理論研究はバルクを想定したものであるため、新たに bct-FeCo 合金の薄膜化、並びに下地層が K_u に与える影響の理論的評価が必要である.

本研究では実験と同じ FeCo/Rh の K_v , K_{int} を第一原理計算を用いて評価し、各磁気異方性の起源を解明することを目的として以下の計算を行った. 手法として局所スピン密度近似に基づいた強結合線形マフィンティン軌道法を用い、fcc-Rh 層に挟まれた bct-Fe₅₀Co₅₀ 規則合金 (c/a=1.2) について、 t_{FM} を変えて K_u を計算した. そして、実験と同様に式 (1) へのフィティングから K_v と K_{int} を求めた.

2 結果および考察

計算結果から式 (1) へのフィティングで得られた K_v , K_{int} を fig.1 に示す. FeCo/Rh(FeRh), FeCo/Rh(CoRh) は、それぞれ Fe, Co 原子を Rh 界面に配置した場合の計算結果である. また FeCo/Rh(exp) は実験値のフィティング結果³⁾ であり、FeCo(bulk) は bct-FeCo(c/a=1.2) バルクでの計算値である. まず K_v に関して、各理論値と実験値のよい一致が確かめられた. また、FeCo/Rh(FeRh), FeCo/Rh(CoRh) で K_v はバルクの計算値とほぼ一致し、式 (1) が界面原子に依らず K_v を評価できていることが分かった.

一方、 K_{int} については、計算値は FeCo/Rh(FeRh), FeCo/Rh(CoRh) の両方で $K_{int} < 0$ となり、 $K_{int} > 0$ であった実験値とは符号すら一致しない結果となった. これは実験で作製された薄膜の界面が、計算で想定した理想的な系とは大きく異なる可能性を示唆している. 講演では、 K_{int} が実験と理論で大きく異なる理由について種々の観点から議論する予定である.

References

- 1) T. Burkert *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 027203 (2004)
- 2) B. Wang *et al.*, *Jour. Appl. Phys.*, **115**, 133908 (2014)
- 3) B. Lao, J. W. Jung and M. Sahashi, *IEEE. Trans. Magn.*, (in press)

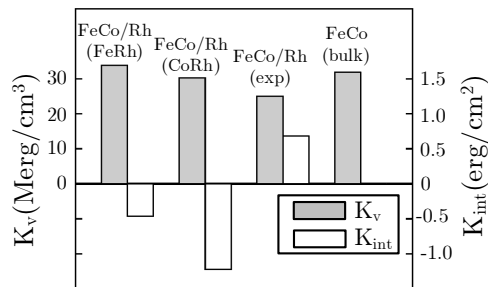


Fig. 1 Comparison of results between calculation (FeCo/Rh(FeRh), FeCo/Rh(CoRh), FeCo(bulk)) and experiment (FeCo/Rh(exp)) with respect to bulk anisotropy K_v and interface anisotropy K_{int} of bct-Fe₅₀Co₅₀ stacked on Rh.