

## 積層欠陥を含む hcp Co の磁気異方性に関する第一原理計算

小峰啓史, 斉藤伸\*

(茨城大, \* 東北大)

First principle study of magnetocrystalline anisotropy in hcp Co with stacking faults

T. Komine, and S. Saito\*

(Ibaraki Univ., \*Tohoku Univ.)

## 1 はじめに

六方晶 Co 基合金は、本来高い磁気異方性を有することが知られているが、薄膜作製時に含まれる積層欠陥が磁気異方性を劣化させることが報告されている<sup>1)</sup>。また、極薄 Co 基薄膜において、軸比  $c/a$  の増加により磁気異方性が劣化すると報告もある<sup>2)</sup>。我々は、第一原理計算を用いて、hcp-Co に fcc-like な積層欠陥を導入した構造モデルの磁気異方性を計算したところ、fcc 積層の混入割合よりも著しく hcp Co の磁気異方性が劣化する可能性を示した<sup>3)</sup>。本研究では、積層欠陥を含む hcp Co の軸比が磁気異方性に及ぼす影響を第一原理計算を用いて調べた。

## 2 計算方法

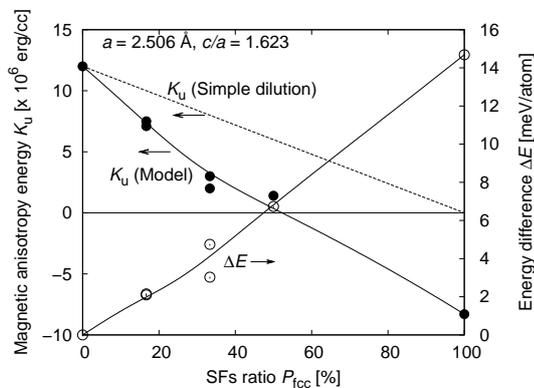
初めに、12 原子層の hcp Co の一部に fcc-like な積層欠陥を含んだ計算モデルを 6 種類仮定した。hcp, fcc いずれの積層でも軸比  $c/a$  を 1.623 に固定し、第一原理計算を用いて全エネルギー及び磁気異方性定数  $K_U$  を計算した。次に、軸比が pure hcp 及び pure fcc の磁気異方性に及ぼす影響を調べた。pure fcc は fcc[111] 方向に c 面配向した六方晶のユニットセルで計算した。一原子当りの体積を一定にして、hcp Co 及び fcc Co の磁気異方性の軸比  $c/a$  依存性を調べた。本研究では、第一原理計算 FP-LAPW(Full Potential Linearized Augmented Plane Wave) のソフトウェアである WIEN2k<sup>4)</sup> を用いた。交換相関ポテンシャルには、LSDA(Local Spin Density Approximation)<sup>5)</sup> を用いた。

## 3 結果および考察

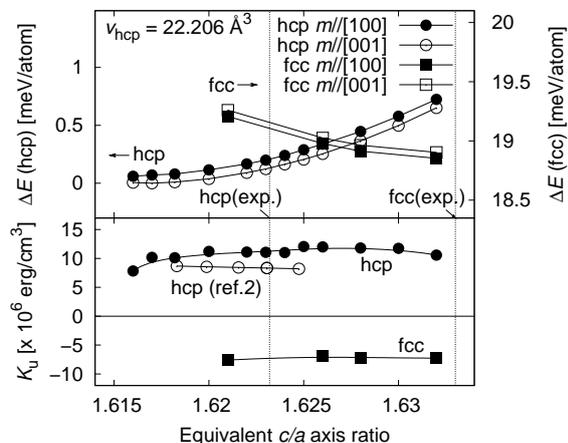
積層欠陥を含む各計算モデルの pure hcp を基準にしたエネルギー差  $\Delta E$  及び磁気異方性定数  $K_U$  を Fig.1 に示す。これを見ると、fcc-like な積層欠陥の割合  $P_{fcc}$  が増加するにつれて、hcp Co の磁気異方性の単純希釈よりも、著しく磁気異方性が劣化することがわかる。pure hcp 及び pure fcc の全エネルギー及び磁気異方性の軸比依存性を Fig.2 に示す。Fig.2 を見ると、hcp, fcc ともに磁気異方性の軸比依存性は比較的小さいことがわかる。一方、c 面配向した fcc Co は負の磁気異方性を有しており、(i) 実験で得られる hcp Co 薄膜中の fcc-like な積層欠陥が hcp Co の磁気異方性を著しく低下させている可能性や、(ii) 完全 fcc 積層を室温で凍結した Co 薄膜を形成できれば、新たな負の一軸結晶磁気異方性材料が見出される可能性を示しており極めて興味深い。

## References

- 1) S. Hinata, R. Yanagisawa, S. Saito, and M. Takahashi: *J. Appl. Phys.*, **105**, 07B718 (2009).
- 2) T. Shimatsu, *et al.*: *J. Appl. Phys.*, **103**, 07F524 (2008).
- 3) K. Iwai, T. Komine, S. Saito, and R. Sugita: *ICAUMS 2012 abstract*, 4pPS-13 (2012).
- 4) P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, S. B. Trickey: *Comput. Phys. Commun.*, **59**, 399 (1990).
- 5) J. P. Perdew and Y. Wang: *Phys. Rev. B*, **45**, 13244 (1992).



**Fig.1** Dependence of energy difference  $\Delta E$  and magnetic anisotropy  $K_U$  on fcc-like stacking faults (SFs) ratio  $P_{fcc}$ .



**Fig.2** Dependence of energy difference  $\Delta E$  and magnetic anisotropy  $K_U$  on equivalent axis ratio  $c/a$  in hcp- and fcc-Co.