

L1<sub>0</sub>-FePt, CoPt 合金の磁気異方性に与えるスピン揺らぎの影響

小林尚史, 兵頭一茂, 佐久間昭正

(東北大)

First principles study for the effect of spin fluctuation on the crystalline magnetic anisotropy in L1<sub>0</sub>-type ordered alloys

N. Kobayashi, K. Hyodo, and A. Sakuma

(Tohoku Univ.)

## はじめに

$K_u$  の温度依存性の一つの起源として、強磁性体中のスピンの熱揺らぎが挙げられる。絶対零度において磁化容易軸方向を向いている各サイトの磁気モーメントは、温度が上昇するとそれぞれ異なる方向を向くようになり、結果として平均の磁気モーメントが小さくなる。このようにスピンの熱揺らぎは磁気モーメントの減少として観測される。そこで本研究では  $K_u$  の温度依存性の起源とされているスピン揺らぎの大きさを変化させた場合の、 $K_u$  の値を理論的に調べることで、 $K_u$  の温度依存性に関する理解を得ることを目的とした。

計算対象は、磁気異方性定数  $K_u$  が高い FePt, CoPt とした。これらの合金は L1<sub>0</sub> 構造と呼ばれる Fe(Co) と Pt が交互に層状に重なった結晶構造を有している。

本研究では熱揺らぎによって磁気モーメントが取り得る方向を、2つの方向に限った上で、スピン揺らぎを  $(\text{Fe}\uparrow)_{1-x}(\text{Fe}\downarrow)_x\text{Pt}$  (スピン  $\uparrow, \downarrow$  状態の原子比率  $X$ ) のようにスピン状態の不規則性として表現した。

計算は第一原理バンド計算手法の強結合線形マフィンティン軌道 (TB-LMTO) 法<sup>1)</sup> を用いて行った。また、2方向の鉄原子スピンの不規則性の計算には、コヒーレントポテンシャル近似 (CPA) を用いた。

## 結果および考察

Fig.1(a),(b) はそれぞれ FePt, CoPt における  $M$  の  $X$  依存性、 $K_u$  の  $X$  依存性のグラフである。Fig.1 から FePt, CoPt いずれの場合もスピン揺らぎ  $X$  の増大とともに  $K_u$  が単調減少する傾向を示しており、磁気異方性がスピンの空間的ゆらぎと密接に関係していることが理解される。このことは、温度上昇に伴う結晶磁気異方性定数の低下がスピン揺らぎに基づくものであることを示唆している。

また、双方の材料について  $K_u$  が  $M_s$  の  $\alpha$  乗に比例すると仮定し、二つのグラフからフィティングによって  $\alpha$  を求めたところ、FePt では  $\alpha \approx 2.2$ 、CoPt では  $\alpha \approx 1.9$  という結果が得られた。FePt に関しては、岡本ら<sup>2)</sup> による実験で、磁気異方性定数は磁気モーメントの 2.1 乗に比例するという結果が得られており、本研究の計算結果が、実験の傾向をよく再現していることが判明した。この結果は、Callen-Callen<sup>3)</sup> による現象論において磁気異方性定数は磁気モーメントの 3 乗に比例するという結果になっていることと比較して、非常によい精度であることが分かる。

## References

- 1) I. Turek, V. Drchal, J. Kudrnovský, M. Šöb, and P. Weinberger, *Electronic Structure Of Disordered Alloys, Surface and Interfaces*, Kluwer, Boston, USA, (1997).
- 2) S. Okamoto, N. Kikuchi, O. Kitakami, T. Miyazaki, and Y. Shimada, *Phys. Rev. B* **66**, 024413 (2002).
- 3) H. B. Callen and E. Callen, *J. Phys. Chem. Solids*. **27**, 1271 (1966).

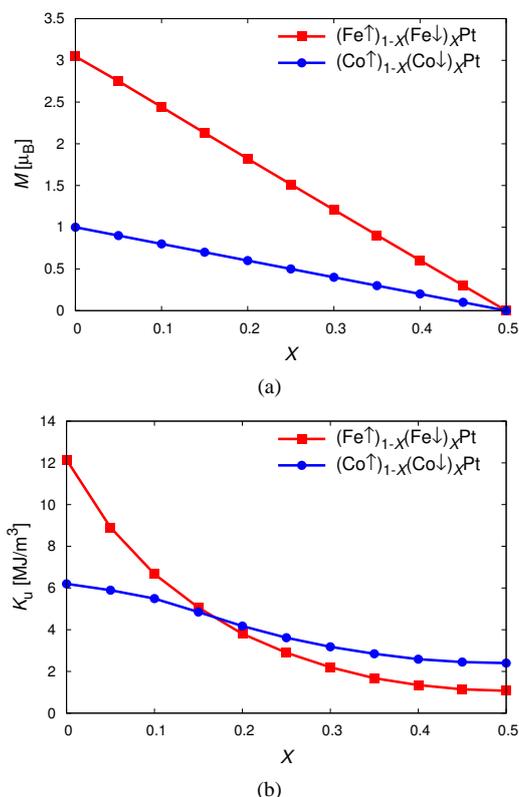


Fig. 1 Calculated magnetic moments (a) and anisotropy constants (b) of FePt and CoPt as a function of  $X$ .