

## 磁性金属超薄膜における結晶磁気異方性、交換スティフネス、 ジャロシンスキー・守谷相互作用力に対する電界効果

中村浩次、名和憲嗣、秋山亨、伊藤智徳  
(三重大工)

Electric field effect on magnetocrystalline anisotropy, exchange stiffness, and Dzyaloshinskii-Moriya interaction in magnetic metal thin films

K. Nakamura, K. Nawa, T. Akiyama, T. Ito  
(Mie Univ)

### 1. はじめに

磁性金属薄膜に対する電界効果は、結晶磁気異方性エネルギーを始め、キュリー温度、交換バイアス、磁壁移動、磁気緩和、磁気表面波など様々な磁氣的性質に対して実験的に観測されてきた。理論的観点からも、第一原理計算を中心に、金属薄膜や絶縁体界面での結晶磁気異方性エネルギーが外部電場印加により変化すること、さらに交換相互作用力やジャロシンスキー・守谷相互作用力も外部電場依存性を示すことが示されている。本発表では、遷移金属超薄膜や希土類金属超薄膜、sp 重金属超薄膜における結晶磁気異方性エネルギーの電界効果に関して、第一原理計算により系統的に調べた結果を報告する。また、交換スティフネス、ジャロシンスキー・守谷相互作用力 (DMI) の電界効果についても検討する。

### 2. 計算方法

第一原理計算には外部電場を導入した film full-potential linearized augmented plane-wave (film-FLAPW) 法<sup>1)</sup>を用いた。交換相関ポテンシャルには一般化勾配近似を、希土類金属薄膜の f 軌道にはオンサイトクーロン相互作用+U 補正を施した。結晶磁気異方性エネルギーは磁化が面内と垂直方向に仮定したときのスピン軌道相互作用を考慮した全エネルギーの差から算出し、遷移金属薄膜と sp 重金属薄膜に対してはフォース理論を用いて、希土類薄膜に対してはセルフコンシステントに求めた。交換スティフネス及び DMI の計算にはスピンスパイラル構造の形成エネルギーから見積もった。

### 3. 結果と考察

結晶磁気異方性に対する電界効果の理解を得るために、まず、フリースタンディング遷移金属単原子層に対して金属元素 (3d, 4d, 5d) を変えて系統的に調べた。なお、バルク 4d, 5d 金属は非磁性体であるが、フリースタンディング単原子層や強磁性体界面では磁化されることを確認した。計算の結果、金属元素のスピン軌道相互作用力の大きさに比例して、磁気異方性エネルギーと電界効果が大きくなることが示唆された。しかし、Fe/MgO(001) 界面にこれらの金属超薄膜を挿入した場合、例えば Pt 単原子層の場合、定性的にはフリースタンディング単原子層モデルの傾向を示したが、定量的には Fe/MgO 理想系の結果に比べて数倍程度以下の増大であった。希土類金属単原子層の場合も、結晶磁気異方性エネルギーは例えば Sm/Fe で Fe/MgO 理想系に比べ 3 倍程度も大きくなったが、電界効果はほとんどみられなかった。これらの結果から、実用に向けた大きな電界効果を得るためには、スピン軌道相互作用の大きい重金属の利用のみでなく、新しい界面材料の提案が必要であるものと考えられる。また、交換スティフネス及び DMI に対する電界効果に対して、Pt(111) 基板上的 Co 単原子層膜モデルを用いて計算した結果、結晶磁気異方性エネルギーと同様に、両者とも外部電場依存性を示すこと、しかし DMI 定数の外部電場依存性は交換スティフネス定数に比べ 1 オーダー程度小さい結果となった。発表では、遷移金属超薄膜における交換スティフネスを系統的に調べた結果も報告する。

### 参考文献

- 1) K. Nakamura et.al, PRB 67,014420 (2003); PRL 102, 187201 (2009); M. Oba et. al.,PRL **114**, 107202 (2015).