

# $L1_0$ 型 FePt の磁気異方性とキュリー温度に対する Ru 添加効果の第一原理計算

小田洋平

(福島工業高等専門学校)

First-principles calculations of Ru-doping effect on magnetic anisotropy and Curie temperature in  $L1_0$ -type FePt

Y. Kota

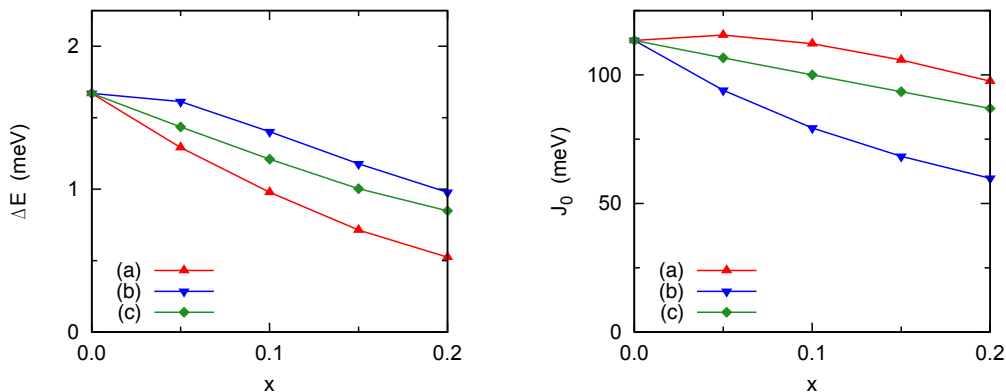
(National Institute of Technology, Fukushima College)

## 1 はじめに

強い垂直磁気異方性を示す  $L1_0$  型 FePt は高密度な磁気記録媒体におけるキーマテリアルである。記録密度のさらなる向上のための方針の一つとして熱アシスト方式の研究が盛んに行われているが、 $L1_0$  型 FePt はその高いキュリー温度 (~750 K) が故に書き込み時の加熱によるエネルギー損失や媒体の損傷が懸念されている。この問題の解決に向けて  $L1_0$  型 FePt 薄膜に対する異種元素添加に関する先行実験があり、FePt に Ru をドーピングすることで強い垂直磁気異方性を維持しつつもキュリー温度を低減できることが報告された<sup>1)</sup>。そこで本研究では FePt に対する Ru 添加効果の解析を目的に、結晶磁気異方性エネルギーと実効的交換結合定数の第一原理計算を行う<sup>2,3)</sup>。計算手法は局所スピン密度近似に基づくタイトバインディング線形マフィンティン軌道法を採用し、 $L1_0$  規則化した FePt に対して (a) Fe の一部を Ru に置換、(b) Pt の一部を Ru に置換、(c) Fe と Pt の一部を Ru に置換した3つの場合を考慮する。元素置換による不規則性はコヒーレントポテンシャル近似の枠内で扱う。

## 2 結果および考察

Figure 1 に  $(\text{Fe}_{1-x}\text{Ru}_x)\text{Pt}$ ,  $\text{Fe}(\text{Pt}_{1-x}\text{Ru}_x)$ ,  $(\text{Fe}_{1-0.5x}\text{Ru}_{0.5x})(\text{Pt}_{1-0.5x}\text{Ru}_{0.5x})$  の結晶磁気異方性エネルギー  $\Delta E$  と Fe の実効的交換結合定数  $J_0$  の Ru 置換量  $x$  依存性に関する計算結果を示す。ここで実効的交換結合定数とは Fe の周りのスピンの作る有効磁場の大きさに相当するもので平均場近似の枠内ではキュリー温度と比例関係にある。計算結果から Ru 置換によって  $L1_0$  型 FePt の  $\Delta E$  と  $J_0$  はほぼ一様に減少する傾向が確認される。また実験<sup>1)</sup>では 6 at.% の Ru 置換 (Fig. 1 では  $x = 0.12$  に相当) に対して異方性定数  $K_u$  が 34%, キュリー温度  $T_C$  が 15% 減少しているが、これは  $(\text{Fe}_{1-0.5x}\text{Ru}_{0.5x})(\text{Pt}_{1-0.5x}\text{Ru}_{0.5x})$  の計算結果とほぼ等しい。一方で高  $K_u$  かつ低  $T_C$  が実現されるのは  $\text{Fe}(\text{Pt}_{1-x}\text{Ru}_x)$  であり、Ru 置換サイトの選択が可能ならばさらなる特性の改善が見込まれる。詳細は講演にて報告する。



**Fig. 1** Calculated  $\Delta E$  per formula unit and  $J_0$  of Fe atom, where (a), (b), and (c) denote the results for  $(\text{Fe}_{1-x}\text{Ru}_x)\text{Pt}$ ,  $\text{Fe}(\text{Pt}_{1-x}\text{Ru}_x)$ , and  $(\text{Fe}_{1-0.5x}\text{Ru}_{0.5x})(\text{Pt}_{1-0.5x}\text{Ru}_{0.5x})$ , respectively.

## References

- 1) T. Ono, H. Nakata, T. Moriya, N. Kikuchi, S. Okamoto, O. Kitakami, and T. Shimatsu, *Appl. Phys. Express* **9**, 123002 (2016).
- 2) I. Turek, J. Kudrnovský, V. Drchal, and P. Bruno, *Philos. Mag.* **86**, 1713 (2006).
- 3) Y. Kota and A. Sakuma, *J. Phys. Soc. Jpn.* **81**, 084705 (2012).