

$L1_0$ 型 FePtX (X=Mn, Cu, Ru, Rh) のキュリー温度変化に関する第一原理計算

小田 洋平

(福島工業高等専門学校)

First-principles calculations of Curie temperature change in $L1_0$ -type FePtX (X = Mn, Cu, Ru, Rh)

Y. Kota

(National Institute of Technology (KOSEN), Fukushima College)

1 はじめに

大きな垂直磁気異方性を示す $L1_0$ 型 FePt は高密度磁気記録媒体においてキーとなる材料である。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が検討されているが、 $L1_0$ 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。この問題に対して FePt に Ru をドーピングすることで大きな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ており¹⁾、我々も先の講演会において Ru 添加の効果について理論的に検証した結果を報告した²⁾。今回の講演では添加元素を X = Mn, Cu, Ru, Rh とした場合について、元素の置換量とキュリー温度の関係を第一原理計算によって系統的に整理したのでその結果について報告する。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た。 $L1_0$ 規則化した FePt に対して (a) Fe の一部を X に置換、(b) Pt の一部を X に置換した2つの場合を考慮し、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った。

2 結果および考察

Figure 1 に $(\text{Fe}_{1-\sigma}\text{X}_\sigma)\text{Pt}$, $\text{Fe}(\text{Pt}_{1-\sigma}\text{X}_\sigma)$ のキュリー温度 T_C と置換量 σ 依存性の計算結果を示す。 $\sigma = 0$ のとき T_C の計算結果は 975 K となり、実験値 (750 K) を約 30% 過大評価している。この原因として平均場近似に基づく方法で T_C を評価していることが考えられるが、Staunton らが同様の手法で計算した FePt の T_C も 950 K となることを確認した³⁾。次に置換による T_C の変化の振る舞いに着目すれば、Fe を X に置換する場合 [Fig.1(a)] では添加元素の種類によらず T_C は同じ割合で一様に低くなる傾向が見られることから、磁性元素である Fe の濃度が減少することが T_C の低下につながっているものと考えられる。一方、Pt を X に置換する場合 [Fig.1(b)] では T_C の振る舞いが置換元素の種類に依存する傾向が見られ、特に Ru 置換によって T_C が最も顕著に低下している。これは Ru 置換によって隣接する Fe の強磁性が抑えられる方向に電子状態が変化するためと考えられる。講演では他にも磁化 M_S や磁気異方性定数 K_u の計算結果を示して議論する予定である。

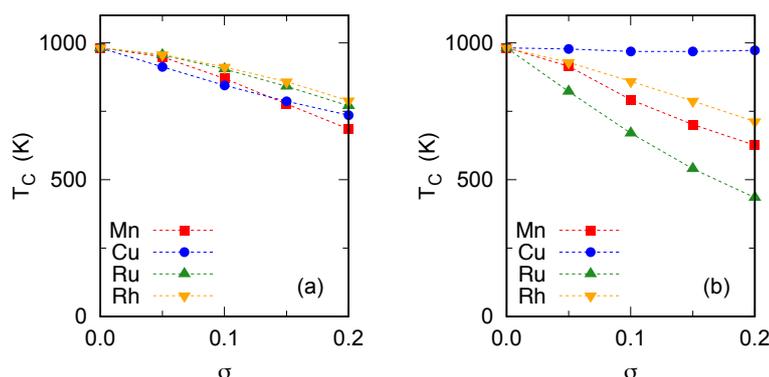


Fig. 1 Calculated T_C in (a) $(\text{Fe}_{1-\sigma}\text{X}_\sigma)\text{Pt}$ and (b) $\text{Fe}(\text{Pt}_{1-\sigma}\text{X}_\sigma)$.

References

- 1) T. Ono *et al.*, Appl. Phys. Express **9**, 123002 (2016).
- 2) 小田洋平, 第 42 回日本磁気学会学術講演会 12aPS-45 (2018).
- 3) J. B. Staunton *et al.*, Phys. Rev. Lett. **93**, 257204 (2004).