

## Force Theorem 法を用いた磁気異方性の第一原理計算

### First principles calculation of magnetic anisotropy using the Force Theorem

金沢大自然 <sup>○</sup>(M1)勝田 匠, 小幡正雄, 小田竜樹

Kanazawa Univ. <sup>○</sup>Takumi Katsuta, Masao Obata, Tatsuki Oda

E-mail: katsutatakumi@stu.kanazawa-u.ac.jp

磁気異方性は、強磁性体の自発磁化が磁性体を形成する結晶の特定の軸方向に向きたがる性質のことをいう。磁性体における基本的物性もさることながら、デバイスへの応用上重要な性質である。近年の磁気記録技術の研究開発においては、磁性の熱安定性の担保と記録密度向上のために、垂直磁気異方性(PMA)を持つ垂直磁化膜が必要とされている。一方で、垂直磁化型記録層を用いた磁気記録メディアにおける、スパイクノイズ等の課題解決のために面内磁気異方性(IMA)を持つ軟磁性体基板の重要性を示唆する研究[1]もあり、多種多様な磁性材料デザインに向けて、第一原理計算を用いた理論研究もこれまでに数多くなされてきた。

磁気異方性エネルギー(MAE)の理論計算では、スピン軌道相互作用(SOC)を起源とする結晶磁気異方性エネルギー(MCAE)と、磁性体のスピン密度形状が磁気双極子相互作用を誘起させることで磁化容易方向を与える形状磁気異方性エネルギー(SMAE)[2]の和として計算される。MCAE の理論解析では、スピン密度汎関数法に基づく自己無撞着計算で得られた電子密度を固定し、Kohn-Sham 方程式を解くことで得られた固有値から MCAE を見積もる Force Theorem(FT)法[3]が汎用的に用いられてきた。この方法を用いることで、MCAE の各原子サイトからの寄与や  $\mathbf{k}$  空間分解など多くの情報を得ることができ、磁性材料デザインのための有用な手法となる。3d 電子が主に磁性を担う、Co/Ni 多層薄膜[4]や Cr/Fe/MgO 界面の電界効果[5]における第一原理的解析で成功を収めてきた。しかしながら、白金(Pt)などを含み、大きな SOC を持つ系において、全エネルギー計算法(TE 法)との差が大きく FT 法の MCAE 計算精度が悪いことが問題点であった。原因としては、大きな SOC による電子密度変調を与える固有値の不正確性が挙げられる。

そこで本研究では、電子に働くポテンシャルを相対論が考慮された自己無撞着計算で作成し、方向による平均を取った電子ポテンシャルで MCAE を見積もる新しい計算手法を開発した。新手法を用いることで、大きな SOC を持つ系においても TE 法とほぼ同じ MCAE が得られ、FT 法の利点を活かした MAE の解析が可能となった。本講演では、5つの遷移金属(TM)強磁性合金薄膜系 TM/Fe/TM (5ML)[TM = Pt, Pd, Au, Ni, Ir] における磁気異方性の計算結果について議論する。

[1] A. Hashimoto *et al.*, Journal of Applied Physics, **99** (2006) 8

[2] T. Oda and M. Obata, Journal of the Physical Society of Japan, **87** (2018) 6

[3] X. Wang *et al.*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **159** (1996) 337

[4] I. Pardede *et al.*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **500** (2020) 166357

[5] I. Pardede *et al.*, Crystals, **10** (2020) 1118