

プログラム名：無充電で長期間使用できる究極のエコ IT 機器の実現

PM 名：佐橋 政司

プロジェクト名：交差相関電圧書込み磁気記録

委 託 研 究 開 発

実 施 状 況 報 告 書 (成 果)

平 成 2 8 年 度

研究開発課題名：

高性能電気磁気効果薄膜材料の開発

研究開発機関名：

福島工業高等専門学校

研究開発責任者

小田 洋平

I 当該年度における計画と成果

1. 当該年度の担当研究開発課題の目標と計画

平成28年度は、 Fe_2O_3 のスピンの再配列転移（モーリン転移）の機構を理論の立場から明らかにすることを目標とする。本プロジェクトの佐橋 G・壬生 G の実験研究において Fe_2O_3 薄膜に Ir を添加することでモーリン温度が上昇することが報告されたが、その機構については不明となっていた。本課題では、東北大学の佐久間昭正教授の研究グループと共同で、モーリン転移のモンテカルロシミュレーションを実行するためのプログラムコードを作成し、磁気異方性定数などを物質パラメータとして変化させた場合のモーリン転移の振る舞いについて明らかにする計画である。

2. 当該年度の担当研究開発課題の進捗状況と成果

2-1 進捗状況

モーリン転移のモンテカルロシミュレーションを実行するためのプログラムコードについては、コードの開発が完了し、 Fe_2O_3 のスタガード磁化の面直・面内成分の振る舞いからモーリン転移が再現されることを確認した。開発したプログラムコードを用いて、 Fe_2O_3 のモーリン温度の物質パラメータ依存性を評価する段階に至り、概ね順調に進捗していると言える。

2-2 成果

1. 確率的カットオフ法による計算の効率化

磁性体のスピンの再配列転移のモンテカルロシミュレーションを実行するためには、スピン間の交換相互作用のほか、面直異方性を担うシングルイオン異方性および面内異方性を担う磁気双極子相互作用を考慮する必要がある。しかし磁気双極子相互作用は長距離相互作用であるため、計算コストが系のサイズに対して急激に増大するという問題点があった。

本研究では長距離相互作用の計算を効率化するために、確率的カットオフ法を適用し、さらにグラフ彩色の手法により並列計算を可能にするプログラムコードを開発した。4 unit cell × 4 unit cell × 2 unit cell の Fe_2O_3 に対してベンチマークテストを行った結果、カットオフ・並列化なしの場合で 120 分を要する計算を 10 分に短縮することに成功した。また図 1 は Fe_2O_3 のスタガード磁化の面直・面内成分温度依存性の計算結果を示したものである。シングルイオン異方性の大きさを 0.162 meV とすると 280 K 付近でスピンの再配列転移が起こり、モーリン温度の実験値 260 K を概ね再現できることを確認した。

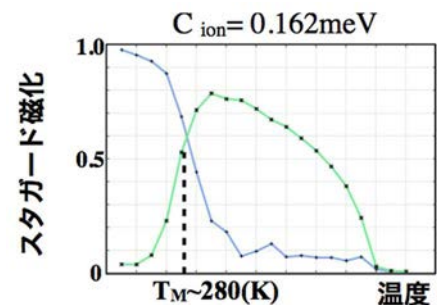


図 1 Fe_2O_3 のスタガード磁化の面直成分（青）および面内成分（緑）の温度依存性

2. Fe_2O_3 のモーリン温度に対する Ir 添加効果の検証

Fe_2O_3 に Ir を数%添加することによりモーリン温度が少なくとも 400 K 以上に上昇したという佐橋 G・壬生 G の実験結果を受けて、以下のモデルを用いた場合についてのモーリン転移に関するモンテカ

ルシミュレーションを実行した。なおモデルのサイズはいずれも 32 unit cell×32 unit cell×10 unit cell とした。

(1) Fe サイトの一部を Ir に置換し、置換したサイトのスピンを小さくする

(2) (1)の操作に加えて、置換された Ir サイトのシングルイオン異方性を強くする

図 2 (a) は(1)のモデルを用いて計算したモーリン温度 T_M の Ir 置換割合依存性である。3%程度の Ir 置換に対して T_M がおよそ 80 K 上昇することが確認できる。しかし、これは実験を定量的に再現する結果ではなく、次に Ir 置換によるシングルイオン異方性増大の効果について検討した。図 2 (b)は(2)のモデルを用いて得られた結果である。Ir のシングルイオン異方性の大きさを Fe の 4 倍と仮定し、Ir を 3% 置換すると T_M が 400 K を超えることが確認できる。すなわち Ir 置換による Fe_2O_3 のモーリン温度上昇のシナリオとして、Ir 置換により局所的にシングルイオン異方性が増大し、それが交換相互作用を介して周辺のサイトにも影響することでスピン再配列転移が抑制されると推察される。

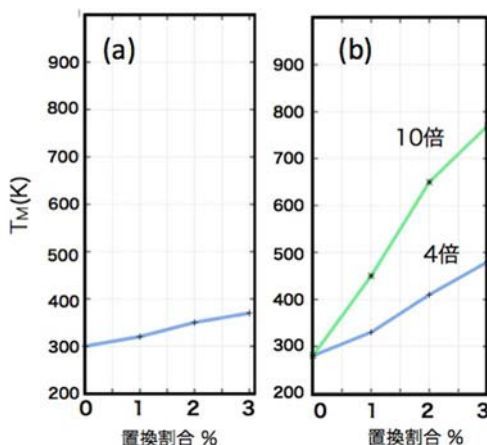


図 2 (a) モデル(1)を用いた場合、(b) モデル(2)を用いた場合のモーリン温度 T_M の Ir 置換割合依存性。なお(b)の 4 倍、10 倍は Ir サイトのシングルイオン異方性の大きさを Fe の何倍としたかを表す。

2-3 新たな課題など

(2)のモデルでは Ir 置換によりシングルイオン異方性が増大するという仮定の下でシミュレーションを実行したが、実際に Ir 置換でどの程度シングルイオン異方性が増大するかについては第一原理計算の電子論的なアプローチによって検証を行う必要がある。またサイズ依存性に関してより詳細に検討する必要がある。

3. アウトリーチ活動報告

特になし