

機関番号：11301

研究種目：若手研究 (B)

研究期間：2009～2010

課題番号：21740279

研究課題名 (和文)：確率的カットオフ法による、微小磁性体における熱揺らぎ耐性の解明

研究課題名 (英文)：Study on the Thermal Stability of Nanomagnets by the Stochastic Cutoff Method

研究代表者

佐々木 志剛 (SASAKI MUNETAKA)

東北大学・大学院工学研究科・助教

研究者番号：80400282

研究成果の概要 (和文)：

最初に、確率的カットオフ法と Wang-Landau 法を組み合わせることにより、微小磁性体における熱的安定性を短い計算時間で精度良く求める手法を開発した。次に、その手法を球状のコバルトナノ磁性粒子の問題へ適用し、その熱的安定性のサイズ依存性を明らかにした。さらに、今回開発した手法をナノ狭窄磁性体における幾何学的閉じ込め磁壁の問題へ適用し、磁壁構造の熱的安定性と磁気抵抗の熱ノイズの関係を明らかにした。

研究成果の概要 (英文)：

I invent an efficient method to estimate the thermal stability of nanomagnets by combining the stochastic cutoff method with the Wang-Landau method. By using the method, I clarify the size-dependence of the thermal stability of spherical nanomagnets which are made of cobalt. This method is also used to reveal the relation between the thermal stability and the thermal magnetoresistance noise of a magnetic wall which is geometrically confined in a magnetic nano-constriction.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	2,300,000	690,000	2,990,000
2010年度	1,200,000	360,000	1,560,000
年度			
年度			
年度			
総計	3,500,000	1,050,000	4,550,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学 数理物理・物性基礎

キーワード：微小磁性体、熱的安定性、確率的カットオフ法、幾何学的閉じ込め磁壁、モンテカルロ法、長距離相互作用系、アルゴリズム、統計力学

1. 研究開始当初の背景

近年の微細加工技術の向上に伴い、ナノサイズオーダーの磁性体の作成が可能となった。このような磁性体の微小化は、記録密度の向上に寄与する一方、磁性体の熱的安定性を弱めてしまう一面がある。熱的に不安定な磁性体では、熱揺らぎに由来するランダムな

磁化反転が起こり、その結果、記録した情報の破壊が起こってしまうため、「どの程度のサイズであれば熱的安定性を保てるのか」、あるいは「どうすれば微細化をしつつ熱的安定性を維持できるのか」といった問題を明らかにすることは、研究開始当初および現在の磁性体の研究における重要な課題となっている。

そして、微小磁性体の性質を理論的に解明する上で、コンピューター・シミュレーションは非常に有効な方法であるが、磁性体のシミュレーションを行なう際に1つネックとなるのが、長距離力である磁気双極子相互作用の存在である。一般に長距離相互作用は、まともに取り扱おうと、1ステップ当たりスピンの数 N の2乗オーダーの計算時間が必要であり、そのため大きなサイズの系の取り扱いが困難となる。この困難を克服するためのシミュレーション方法はこれまでに幾つか提案されているが、そのほとんどがある種の近似を含んだ手法である、というのが研究開始当初の状況であった。

一方、微小磁性体の熱的安定性をシミュレーションにより評価する方法としては、磁性体のダイナミクスをシミュレートし、熱揺らぎ由来の磁化反転過程を直接観測する方法が良く用いられる。しかし、実用上要求される、熱的に安定な(ランダムな磁化反転が起こらない)タイムスケールは数十年というオーダーであり、このような長いタイムスケールのシミュレーションを行うことは現在の計算機の能力では不可能である。そのため、短いタイムスケールのシミュレーション結果からの外挿により長いタイムスケールの熱的安定性を議論するということがしばしば行われる。しかし、このような外挿が適切かどうかは必ずしも自明ではなく、微小磁性体の熱的安定性を評価するための新手法の開発も、研究開始当初の課題の1つであった。

2. 研究の目的

このような状況を踏まえ、本研究では以下の課題を研究目的とした。

(1) 微小磁性体の熱的安定性評価のための新手法の開発

「研究開始当初の背景」欄において述べたように、微小磁性体の熱的安定性をシミュレーションで評価する際、

- ①長距離相互作用である磁気双極子相互作用が存在するため、計算時間がスピン数と共に急速に増大する。
- ②実用上要求される、長いタイムスケールの熱的安定性を直接的に評価する方法がない。

という2つの問題がある。本課題の第一の目的は、これらの問題を克服することにより、微小磁性体の熱的安定性評価のための新シミュレーション手法を開発することである。

(2) 微小磁性体の熱的安定性のサイズ依存性の解明

(1)で開発した手法の適用研究として、最初に、微小磁性体の熱的安定性のサイズ依存性

の解明を目的とする研究を行う。一般に、磁気異方性と磁気双極子相互作用が働く強磁性体では、小さいサイズでは磁気異方性の効果が、大きいサイズでは磁気双極子相互作用の効果が優勢となる。その結果、小さいサイズでは単磁区構造が、大きいサイズでは多磁区構造が実現される。そして、微小磁性体を記録媒体として用いる場合、磁化が単磁区構造である必要がある。そこで本研究では、微小磁性体ではどのサイズまで単磁区構造が現われるのか、また熱的安定性はサイズにどのように依存するのかを明らかにすることを目的とする。

(3) 幾何学的閉じ込め磁壁の熱的安定性の解明

(1)で開発した手法のもう1つの適用研究として、ナノサイズの幾何学的閉じ込め磁壁の熱的安定性に関する研究を行う。厚さ数ナノメートルの2つ磁性膜と、これらの膜を繋ぐナノコンタクトから成る系では、2つの磁性膜の磁化の方向が異なる時、磁壁がコンタクト部に形成される。これが幾何学的閉じ込め磁壁である。この幾何学的閉じ込め磁壁を利用した磁気デバイスでは、高い磁気抵抗比と小さな面積抵抗が実現可能なため、磁気ヘッドやマイクロ波発信素子への工学的応用が強く期待されている。しかし、コンタクトの大きさは数ナノメートルと非常に小さいため、熱揺らぎの影響を強く受ける可能性がある。そこで本研究では、幾何学的閉じ込め磁壁における熱的安定性と磁気抵抗の熱ノイズを評価し、両者の関係を明らかにすることを目的とする。

3. 研究の方法

「研究の目的」欄で述べた研究を遂行するため、以下の方法を開発もしくは使用した。

(1) 磁性体の熱的安定性評価のための新プログラム

このプログラムは「研究の目的」欄の(1)の研究として開発され、(2)と(3)の研究において使用された。以下にプログラムの概要を示す。

最初に、「研究の目的」欄の(1)②で述べた問題を解決するため、磁化反転の際に系が乗り越える自由エネルギー障壁 ΔF から熱的安定性の評価を行った。一般に、自由エネルギー障壁 ΔF を乗り越えるために必要な平均時間 τ は

$$\tau \approx \tau_0 \exp[\Delta F / k_B T] \quad (1)$$

で評価できる。ここで τ_0 は系のミクロなタイムスケールで、磁性体の場合 10^{-12} 秒オーダーである。この式からわかるように、 τ は ΔF に指数関数的に依存しているため、この方法

では、実用上要求される数十年のオーダーも含む、非常に幅広いタイムスケールの熱的安定性を評価することが可能である。

次に、「研究の目的」欄の(1)①で述べた問題を解決するため、申請者とその共同研究者が最近開発した確率的カットオフ法を用いた。この手法は、詳細釣り合いの条件を満たす、近似のないモンテカルロ法であるのにも関わらず、1ステップ当たりの磁気双極子相互作用の計算時間を N^2 オーダーから $N \log N$ オーダーへ削減することを可能とする。ここで N はスピン数。この手法に Wang-Landau 法を組み合わせることにより、自由エネルギー障壁を短い計算時間で精度良く測定することが可能となった。

(2)有限要素法による Zhang-Levy-Fert 方程式の数値解析

この手法は「研究の目的」欄における(3)の研究において、磁気抵抗の熱ノイズを評価する際に用いた。

一般に磁気抵抗は、局在スピンのスピンコンフィギュレーションが与えられると、Zhang-Levy-Fert 方程式に従って計算することが可能である。そこで本研究では、有限要素法を用いることにより Zhang-Levy-Fert 方程式を数値的に解き、磁気抵抗を計算した。そして、

- ① モンテカルロ法により、局在スピンのスピンコンフィギュレーションをボルツマン分布の確率に従って生成する。
- ② Zhang-Levy-Fert 方程式を数値的に解き、磁気抵抗を計算する。

という2つの手順を繰り返すことにより、スピンコンフィギュレーションの熱揺らぎに由来する、磁気抵抗の熱ノイズを評価した。

4. 研究成果

本研究では、「研究の目的」欄で述べた3つの研究について、以下の成果を得ることに成功した。

(1)微小磁性体の熱的安定性評価のための新手法の開発（「主な発表論文等」欄における論文2、及び学会発表2・3にて発表）

この研究では、「研究の方法」欄の(1)で述べたプログラムの開発に成功した。図1は、強磁性交換相互作用、一軸性の磁気異方性エネルギー、及び磁気双極子相互作用が働く磁性体において、磁化 m の関数として自由エネルギーを測定した結果を示している。 $m \approx \pm 0.8$ が自由エネルギーの低い状態に、 $m = 0$ が自由エネルギーの高い状態となっており、このようなデータから自由エネルギー障壁 ΔF を評価することができる。本手法の開発により、微小磁性体における非常に幅広いタイムスケールの熱的安定性を、短い計

算時間で精度良く評価することが可能となった。

また、このプログラムにおいて使用している確率的カットオフ法の改良を行った。その結果、長距離相互作用系における、熱平均エネルギーと比熱を測定するための計算時間を、 N^2 オーダーから $N \log N$ オーダーに削減することに成功した。ここで N はスピン数。さらに、確率的カットオフ法とレプリカ交換モンテカルロ法との併用についても改良を行い、その結果、レプリカ交換確率の計算時間を N^2 オーダーから $N \log N$ オーダーに削減することにも成功した。熱平均エネルギーと比熱は物理における主要な測定量であること、レプリカ交換モンテカルロ法との併用により熱平衡状態への緩和が格段に促進されること、及び本手法は長距離相互作用系全般で使える汎用性の高いものであることから、本研究の結果は極めて重要であると言える。

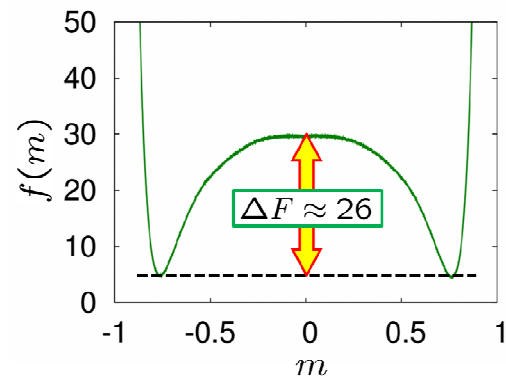


図1：磁化の関数としての自由エネルギー $f(m)$ の測定結果。このデータから自由エネルギー障壁 ΔF は約 26 と評価される。

(2)微小磁性体の熱的安定性におけるサイズ依存性の解明（「主な発表論文等」欄における学会発表8にて発表）

(1)で開発した手法の適用研究として、球状のコバルト磁性粒子における、熱的安定性のサイズ依存性を調べた。その結果を示しているのが図2である。縦軸は $\beta \Delta F$ (β は逆温度)、横軸は磁性粒子の直径 L 。温度は 300K。また、緑・青・紫のデータ点が自由エネルギー障壁の測定結果を、黒の実線が球の体積に比例した直線を示している。小さなサイズでは ΔF が球の体積に単純に比例しているが、大きなサイズでは ΔF の増加が鈍っている様子が見て取れる。また図中の2つの挿入図は、それぞれのサイズで得られた、磁化 m が 0 の状態におけるスピンコンフィギュレーションを示している。小さなサイズでは単磁区構造が観測されたのに対し、大きなサイズで

は渦構造が観測されている。これらの結果から、コバルト磁性粒子では、直径が 30nm を超えたあたりから磁気双極子相互作用の影響が現れることがわかる。

また、この自由エネルギー障壁のデータから、コバルト磁性粒子の熱的安定性を以下のように評価できる。熱的安定性として、熱揺らぎによるランダムな磁化反転が起こるまでの平均時間が 100 年以上であることを要求すると、 $\tau_0=10^{-12}$ 秒として(1)式を用いるとわかるように、 $\beta\Delta F$ はおよそ 50 以上であれば良いことがわかる。従って図 2 より、直径 L が 10nm 以上のコバルト磁性粒子は熱的に安定であることがわかる。

このように、熱的安定性の条件から決まる微細化の限界を明らかにすることは、微小磁性体を実際に応用する上で非常に重要である。また、今回の手法はコバルトのみでなく、一般の磁性体に適用可能な汎用性の高い方法であり、今後の磁性体の研究において重要な役割を果たすことが期待される。

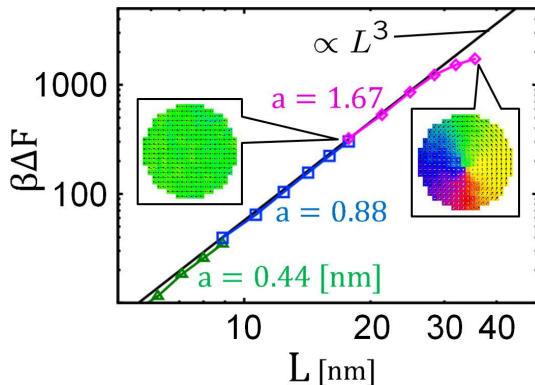


図 2 : 球状のコバルト磁性粒子における、自由エネルギー障壁のサイズ依存性。縦軸は $\beta\Delta F$ (β は逆温度)、横軸は磁性粒子の直径 L 。温度は 300K。図中の a の値は、磁性体を分割する際に用いたメッシュ長を表す。また 2 つの挿入図は、2 つのサイズにおいて得られた、磁化 m が 0 の状態におけるスピンコンフィギュレーション。挿入図における色の違いはスピンの向きの違いを表している。

(3)幾何学的閉じ込め磁壁の熱的安定性の説明 (「主な発表論文等」欄における論文 3・4・5・6、及び学会発表 1・4・5・6・7・9・10 にて発表)

この研究では、(1)で開発した手法をナノサイズの幾何学的閉じ込め磁壁の問題に適用し、その熱的安定性と磁気抵抗の熱ノイズに関する研究を行った。

最初に、本研究で調べたモデルを示しているのが図 3 である。個々の球の中心には古典ハイゼンベルクスピンが存在し、スピン間に強磁性的な交換相互作用と磁気双極子相互

作用が働いている。上下の電極部のスピンが互いに反平行である実験的状況を再現するため、上下電極部の濃い灰色の球内のスピンは互いに反平行に固定されている。薄い灰色の球内のスピンはフリーである。コンタクト部の形状は z 軸方向の厚さ L_z と最狭部における xy 方向の幅 L_{xy} により決定されるが、今回の研究では共に 4nm とした。

このモデルにおいて我々は、2 つの磁化の関数としての自由エネルギー $\beta F(M_y, M_z)$ を測定した。ここで β は逆温度、 M_y はコンタクト部から計算された磁化の Y 成分、 M_z はその Z 成分である。その結果を示したのが図 4 である。自由エネルギーの低い箇所がリング状に分布している様子が見て取れる。

次に図 4 の (a)、(b) の磁化において観測されるスピンコンフィギュレーションを図示したのが図 5 である。(a) ではブロッホ磁壁が、(b) ではネール磁壁が生成されている。また、図 4 におけるリング状の箇所でも自由エネルギーを比較したところ、自由エネルギーが緩やかに変化しており、(b) 及び (b') で極小に、

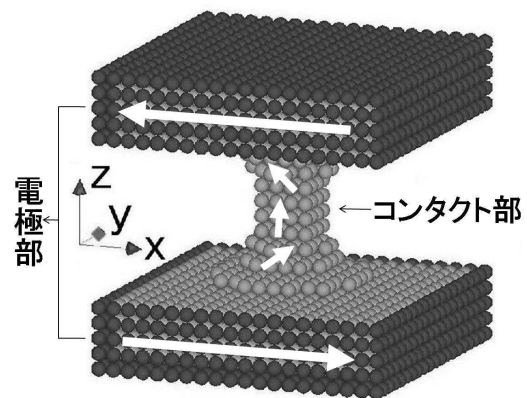


図 3 : モデルの形状。コンタクト部の矢印はネール磁壁の場合のスピン構造を表す。

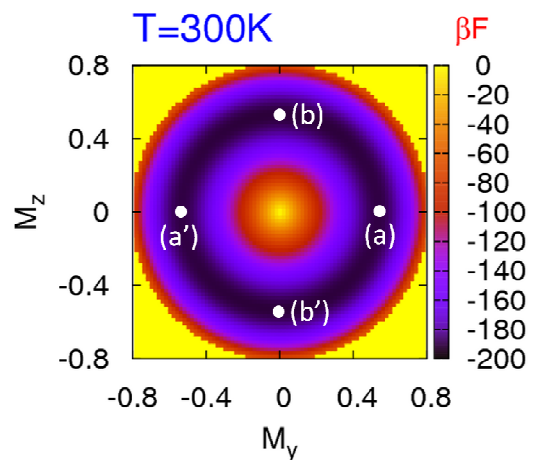


図 4 : 自由エネルギーの測定結果。縦軸は βF (β は逆温度)。温度は 300K。

(a)及び(a')で極大になっていた。しかし、両者の自由エネルギー差 $\beta\Delta F$ は小さく、約 1.19 であった。

この結果は、ナノサイズの幾何学的閉じ込め磁壁では、熱揺らぎの影響で磁壁構造が大きく揺らいでいることを示唆しており、そのため、磁気抵抗の熱ノイズが非常に大きくなる懸念される。そこで、「研究の方法」欄(2)で述べた2つの手順①、②を何度も繰り返し行い、式

$$MR = R_{AP} / R_P - 1 \quad (2)$$

で定義される磁気抵抗比の分布を測定した。ここで、 R_P は2つの電極部の磁化が平行な場合の、 R_{AP} は反平行な場合の磁気抵抗。その結果を示したのが図6である。予想に反して、磁気抵抗比の分布幅がそれほど大きくない様子が見て取れる。実際、分布の標準偏差 σ と分布の平均値 \overline{MR} の比で定義される、相対標準偏差 σ/\overline{MR} を測定した所、約 0.04 であった。また、幾何学的閉じ込め磁壁を磁気ヘッドとして応用する場合、抵抗を測定するために流す電流のジュール熱により、温度が数百ケルビン上昇するため、室温以上の温度でも同様の測定を行ったが、600Kにおいても相対標準偏差は約 0.06 であった。

このような結果が得られた原因を探るため、磁化がある特定の値の状態のみを集めて計算される、磁気抵抗比の平均値 \overline{MR} (M_y, M_z)

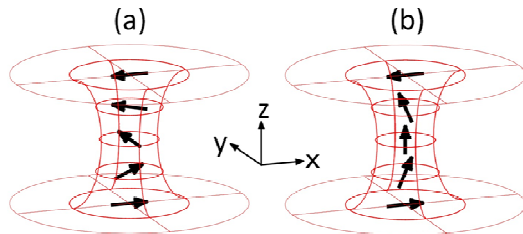


図5：図4の2つの磁化(a)、(b)において観測されるスピンコンフィギュレーション。

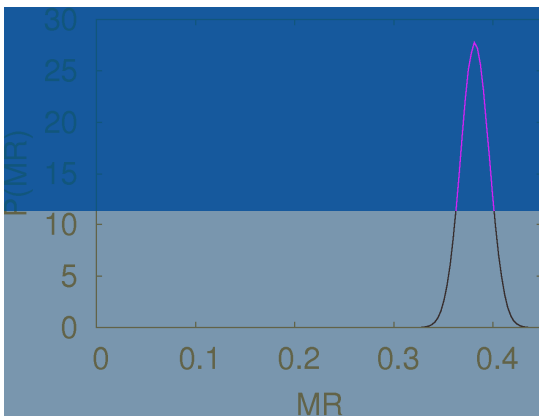


図6：(2)式で定義される MR の分布。温度は 300K。

を測定した。その結果を示したのが図7である。図4の自由エネルギーのデータと同様に、値がほぼ同心円上に分布している様子が見て取れる。この結果は、系が図4におけるリング状の低自由エネルギー領域でランダムな状態遷移を起こしても MR の値がほとんど変わらないことを意味しており、そのため MR の熱ノイズは大きくならないと考えられる。実際、実験においても MR の大きな熱ノイズは観測されておらず、今回の結果とコンシステントである。

紙面の関係に詳細な説明は省略するが、その他にも、2つの電極部の磁化の相対角度を 180° (反平行) からずらした時に、磁壁の熱的安定性及び磁気抵抗の熱ノイズがどのように変化するかを明らかにする研究も行った。また、幾何学的閉じ込め磁壁にスピン偏極電流を流すと、磁壁にスピントルクが働くため、ある閾値電流において磁壁構造が不安定化し、それより強い電流では磁壁構造が時々刻々と変化する動的相が観測されるのだが、この磁壁構造の不安定化と動的相に関する研究も行っている。

「研究の目的」欄の(3)で述べたように、幾何学的閉じ込め磁壁は、そのサイズの小ささゆえに熱揺らぎの影響を強く受ける。そのため、熱揺らぎが磁壁の安定性や磁気抵抗ノイズに与える影響を明らかにすることは、その工学的応用を考える上で非常に重要である。その意味において、本研究の持つ意義は大きいと言える。

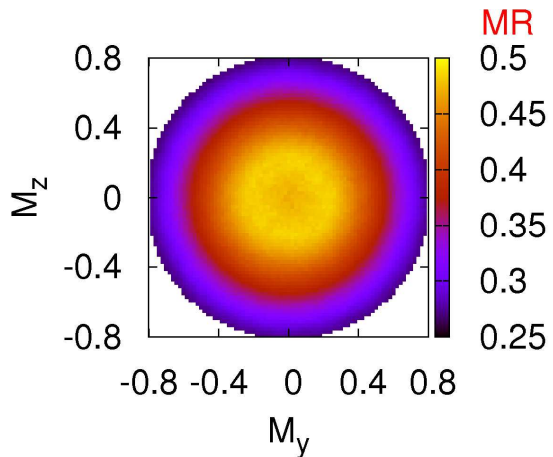


図7： $\overline{MR}(M_y, M_z)$ の測定結果。温度は 300K。

5. 主な発表論文等
(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 6 件)

1. Masafumi Nakagawa, Nobuo Suzuki, Munetaka Sasaki, and Fumitaka Matsubara, 「Domain Wall Trap in Magnetic Nanobands with Uniaxial Anisotropy」, Journal of the Physical Society of Japan, Vol. **79**, (2010), pp. 114716-1-5, 査読有
2. Munetaka Sasaki, 「Reformulation of the Stochastic Potential Switching Algorithm and a Generalized Fourtun-Kasteleyn Representation」, Physical Review E, Vol. **82**, (2010), pp. 031118-1-10, 査読有
3. Katsuyoshi Matsushita, Jun Sato, Hiroshi Imamura, and Munetaka Sasaki, 「Microwave Generation on Geometrically Constrained Magnetic Wall: Effect of Twist Angle」, Journal of the Physical Society of Japan, Vol. **79**, (2010), pp. 093801-1-4, 査読有
4. 松下勝義、佐藤純、今村裕志、佐々木志剛, 「幾何学的閉じ込め磁壁の電流誘起動的相」, Journal of the Magnetism Society of Japan, Vol. **34**, (2010), pp. 323-328, 査読有
5. Munetaka Sasaki, Katsuyoshi Matsushita, Jun Sato, and Hiroshi Imamura, 「Thermal stability of geometrically confined domain wall structures」, Journal of Physics: Conference Series, Vol. **200**, (2010), 042022-1-4, 査読有
6. Katsuyoshi Matsushita, Jun Sato, Hiroshi Imamura, and Munetaka Sasaki, 「Current-induced instability of geometrically confined magnetic wall」, Journal of Physics: Conference Series, **200**, (2010), 042016-1-4, 査読有

[学会発表] (計 10 件)

1. 佐々木志剛, 「幾何学的閉じ込め磁壁の熱的安定性 II」, 日本磁気学会第 34 回学術講演会、2010 年 9 月 7 日、つくば

2. Munetaka Sasaki, 「Stochastic Cutoff Method for Long-Range Interacting Systems」, Satellite conference of Statphys 24 “Monte Carlo Algorithm in Statistical Physics”, July 27 2010, Melbourne (Australia)
3. Kazuya Watanabe, 「An Efficient Monte-Carlo Method to Calculate Free-Energy in Long-Range Interacting Systems」, Statphys 24, July 19 2010, Cairns (Australia)
4. 松下勝義, 「電流誘起磁気構造の磁場による不安定化」, 日本物理学会第 65 回年次大会、2010 年 3 月 20 日、岡山
5. 佐々木志剛, 「幾何学的閉じ込め磁壁の熱的安定性 II」, 日本物理学会第 65 回年次大会、2010 年 3 月 20 日、岡山
6. 松下勝義, 「幾何学的閉じ込め磁壁の運動における外部磁場の効果」, 日本物理学会 2009 年秋季大会、2009 年 9 月 27 日、熊本
7. 佐々木志剛, 「幾何学的閉じ込め磁壁の熱的安定性」, 日本物理学会 2009 年秋季大会、2009 年 9 月 27 日、熊本
8. 渡部司也, 「ナノサイズ磁性体における単磁区構造の熱的安定性」, 日本磁気学会第 33 回学術講演会、2009 年 9 月 13 日、長崎
9. 松下勝義, 「幾何学的閉じ込め磁壁の電流誘起不安定性」, 日本磁気学会第 33 回学術講演会、2009 年 9 月 12 日、長崎
10. 佐々木志剛, 「幾何学的閉じ込め磁壁の熱的安定性」, 日本磁気学会第 33 回学術講演会、2009 年 9 月 12 日、長崎

6. 研究組織

(1) 研究代表者

佐々木 志剛 (SASAKI MUNETAKA)
東北大学・大学院工学研究科・助教
研究者番号：80400282

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし