

スモールデータ機械学習に基づく磁性多層膜設計： アンサンブル学習とデータ拡張法による予測精度の向上

名和憲嗣^{1,2}, 萩原克幸¹, 三浦良雄², 中村浩次¹
(¹三重大院, ²物材機構)

Magnetic multilayer design by small-data-based machine learning:
Implementation of data augmentation and ensemble learning for high prediction accuracy

K. Nawa^{1,2}, K. Hagiwara¹, Y. Miura², K. Nakamura¹
(¹Mie Univ., ²NIMS)

はじめに

機械学習を応用したマテリアルズ・インフォマティクスに関する近年の研究開発は著しく、磁性・熱電・超伝導体などの多様な材料系で応用されるなど、その適用範囲は幅広い¹⁾。このようなデータ駆動型の材料開発を効率的かつ高精度に実施するには、高い信頼度のデータを膨大に含むビッグデータの構築が必要である。一方、第一原理計算の観点からは、定量的な物理量の評価にはしばしば大きな計算コストを要するため、十分な第一原理データベース構築は重大な障壁となり得る。我々は、スモールデータに基づく機械学習による材料設計の実現を目指している。本研究では、階層型ニューラルネットワーク (NN) を用いたスモールデータの適切な学習を目的に、アンサンブル学習 (Bootstrap aggregating; Bagging) とガウスノイズによるデータ拡張法 (GDA) を導入した。さらにケーススタディとして、人工多層膜 CoFe の磁気モーメント、生成エネルギー、結晶磁気異方性エネルギー、磁気ダンピング定数の学習・予測に適用した。ここでは MgO(001)上に9原子層の Co_{9-x}Fe_xを積層し、全 512 (=2⁹) 通りの積層配列に対する各物性値を、一般化勾配近似に基づくフルポテンシャル線形化補強平面波法²⁾により算出した。NN の入力データである積層配列は 2 値のダミー変数 (0 = Fe, 1 = Co) で定義した。NN の中間層を 3 層とし、中間層と出力層の活性化関数はそれぞれ ReLU (Rectified Linear Unit) および線形関数を用いた。

結果と考察

CoFe 多層膜の全 512 配列の中からランダムに選択した 102 配列 (全体の 20%) と対応する磁気モーメント (m_{spin}) を教師データとして NN に学習させた後、残り 410 配列 (全体の 80%) の m_{spin} を予測した。続いて、第一原理計算の結果に対する予測精度を決定係数 R^2 により評価した。Table I より、GDA および Bagging アンサンブル学習を用いない場合は、 $R^2 = 0.5895$ の予測精度が得られ、NN による予測の正解率は約 6 割弱となった。次に Bagging を導入したところ $R^2 = 0.7693$ と向上が見られ、さらに GDA も導入すると $R^2 = 0.9097$ となり、9 割超の高い予測精度が得られた。以上の結果から、スモールデータ駆動型の材料設計において GDA や Bagging が機械学習の予測精度向上に有効であることが示唆される³⁾。発表では、Bagging および GDA の導入による予測精度向上の起源と、生成エネルギーや結晶磁気異方性エネルギー、磁気ダンピング定数に対する適用結果も報告する。

本研究の一部は、科研費 (JP22K14290, JP21K03444, JP21H04562, JP19K03716)、岡三加藤文化振興財団、中部電気利用基礎研究振興財団の支援により実施された。

Table I. Summary of R^2 score for conventional NN and NNs with Bagging only or both Bagging and GDA applied.

	R^2 score
Conventional NN	0.5895
NN with Bagging	0.7693
NN with Bagging & GDA	0.9097

参考文献

- 1) Y. Iwasaki, et al., *Commun. Mater.* **2**, 31 (2021); V. Stanev, et al., *npj Compu. Mater.* **4**, 29 (2018).
- 2) K. Nakamura, et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **537**, 168175 (2021); 中村浩次, 加藤夕奈, まぐね **15**, 217 (2020).
- 3) K. Nawa, K. Hagiwara, K. Nakamura, submitted.

Pt/Co/Spacer(Pt, Ir, Au)/Cr₂O₃/Pt 積層膜における垂直交換磁気異方性 に対するスペーサ層材料の影響

江川浩史, 沈佳琦, 豊木研太郎, 中谷亮一, 白土優

(大阪大学)

Influence of heavy metal spacer layer on perpendicular exchange anisotropy
in Pt/Co/Spacer(Pt, Ir, Au)/Cr₂O₃/Pt stacked films

Hirofumi Ekawa, Shen Jiaqi, Kentaro Toyoki, Ryoichi Nakatani and Yu Shiratsuchi

(Osaka Univ.)

はじめに 強磁性体と反強磁性体の界面で発生する交換バイアスは、強磁性体の磁化方向を一方向に固定する効果として、磁気ランダムアクセスメモリなどの磁気メモリ素子に活用されている。最近では、外場によって交換バイアスを等温可逆的に制御することも可能になっており、新たな磁化制御方法としても注目されている。特に、反強磁性体としてCr₂O₃を用いた交換バイアスは、電気磁気効果による等温可逆反転が可能な有望な系である。本技術の実現に向けた一つの課題は、交換バイアスと保磁力の制御にある。本研究では、我々は強磁性体Co層と反強磁性体Cr₂O₃層の界面に重金属層をスペーサ層として挿入することで、交換バイアスの制御を試みた結果について報告する。

実験方法 試料作製には、DC マグネトロンスパッタリング法を用いた。作製した試料の構成は、Pt/Co/X(Pt, Ir)/Cr₂O₃/Pt 積層膜である。基板には、α-Al₂O₃(0001)単結晶基板を用いた。スペーサ層の膜厚を、0.5 nm, 1.0 nm, 1.5 nm, 2.0 nm と変化させることで、Co-Cr₂O₃ 相関の交換結合強度を制御した。構造評価には、RHEED と X線回折法を用いた。磁気特性評価には、振動資料型磁力計と極磁気光学 Kerr 効果 (MOKE) 測定装置を用いた。MOKE 測定は、極配置で行い、入射光の波長を 405 nm とした。測定温度は、80 K から 300 K とした。

実験結果 室温での磁化曲線測定により、作製した全ての薄膜が垂直磁気異方性を示すことが分かった。Pt をスペーサ層として挿入した薄膜の交換バイアスと保磁力の温度依存性を、Fig. 1(a), (b) にそれぞれ示す。スペーサ層膜厚を 0.5 nm, 1.0 nm とした薄膜では、測定した温度範囲内で交換バイアスが観測された。80 K における交換バイアス磁場は、スペーサ層膜厚に対して指数関数的に低下する。同様の交換バイアス磁場の指数関数的低下は、スペーサ層材料を Ir, Au とした場合にも生じるが、減衰長はスペーサ層材料によって変化する。スペーサ層として Ir を用いた場合は、スペーサ層膜厚が 1.0 nm 以上で交換バイアスは低下し、Pt 層と比較して減衰長が早い。一方、スペーサ層として Au を用いた場合は、スペーサ層膜厚を 2.0 nm とした場合でも交換バイアスが保持され、減衰長が長いことが分かった。

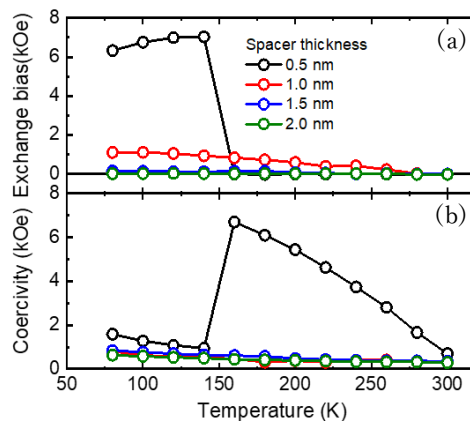


Fig. 1 Pt スペーサ層を挿入した試料に対する (a) 交換バイアス磁場と (b) 保磁力の温度依存性。

PMN-PT 基板を用いた Pt / CoFeB 二層膜系スピンドイナミクスの電界制御

一兜博人、飯森陸、大日方初良、大西紘平、山田和正、木村崇
(九大院理)

Electric field control of spin dynamics in Pt / CoFeB bilayer system using PMN - PT substrate

H. Hitotsukabuto, R. Iimori, S. Obinata, K. Ohnishi, K. Yamada and T. Kimura

(Dept. of Phys., Kyushu Univ.)

はじめに

強誘電体 / 強磁性体のマルチフェロイック界面における歪みを媒介とした電気 - 磁気結合は、超低消費電力なスピンドバイスにおける駆動機構として有望視されている^{1,2)}。本研究では、強誘電体の piezo 効果を利用した歪みの伝播または強誘電体ドメイン状態の変化等による重金属層のスピホール角の変調を捉えることを目的とし、強誘電体 / 重金属 / 強磁性体の素子構造におけるスピン流 - 電流変換の電界効果を評価した。

実験方法

薄膜作製は高真空マグネトロンスパッタ装置により行い、任意の面方位の $0.7\text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3 - 0.3\text{PbTiO}_3$ (PMN - PT) 単結晶基板上に Pt / CoFeB の 2 層膜を成膜した。その後、200 nm 程度の Cu 膜を蒸着し、piezo 電極及び検出用電極とした。得られた PMN - PT / Pt / CoFeB において、強磁性共鳴を利用した動的スピン注入を実施し、逆スピホール効果を介したスピン流 - 電流変換強度の電界依存性を評価した。

実験結果

Fig. 1 に面内電極構造における素子の模式図、Fig. 2 に動的スピン注入実験により得られたスピン流 - 電流変換強度 $I(E)/I(0)$ の電界依存性、内挿図に各電界における検出スペクトル $\Delta V/V_{\max}$ を示す。Fig. 1 の素子構造において、 $\Delta V/V_{\max}$ は CoFeB の共鳴磁場に対応したピークを示した。 $I(E)/I(0)$ は、電界印加に伴い減少し、 $E > 10 \text{ kV/cm}$ では急激な減少を示した。 $E > 10 \text{ kV/cm}$ における振る舞いは、電界に誘起された PMN - PT の構造相転移³⁾が関与していると考えられる。講演では、CoFeB の磁化及び PMN - PT の構造の電界応答等を交え、PMN - PT / Pt / CoFeB における Pt のスピホール角の電界変調や制御の可能性について議論する。

参考文献

- 1) S. Fujii, *et al.* NPG Asia Mater., **14**, 43 (2022).
- 2) Song C., *et al.* Prog. Mater. Sci., **87**, 33 (2017).
- 3) W. Zhiguang, *et al.* Phys. Rev. B **90**, 134103 (2014).

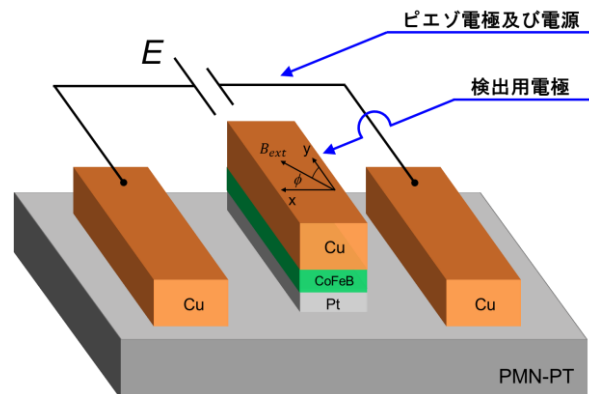


Fig. 1 面内電極構造における PMN-PT / Pt / CoFeB 素子の模式図

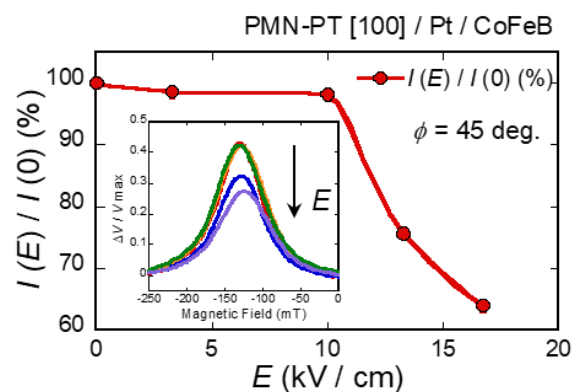


Fig. 2 磁場方向 $\phi = 45 \text{ deg.}$ における $I(E)/I(0)$ の電界依存性(内挿図は検出スペクトル)

NiFe/Pt 二層膜を伝播する表面弾性波の非相反的な減衰効果

篠崎 諒^A, 山野井 一人^A, 能崎 幸雄^{A,B}
(慶大理工^A, 慶大スピン研^B)

Nonreciprocal Attenuation of Surface Acoustic Wave Propagating in NiFe/Pt Bilayer

Ryo Shinozaki^A, Kazuto Yamnoi^A, Yukio Nozaki^{A,B}
(^ADept. of Phys. Keio Univ., ^BKeio Spintronics Center)

はじめに

スピンホール効果(SHE)などスピン軌道相互作用(SOI)を用いたスピン流の生成は、次世代スピンメモリの磁化スイッチングへの応用に向けて盛んに研究されている。一方、SHEの発現にはSOIの強い貴金属やその界面などが不可欠なため、これがデバイス応用における材料選択を限定していた。これに対し、巨視的な回転運動とミクロな電子スピンの角運動量変換理論(磁気回転効果)が松尾らによって予言されて以降[1]、物質固有のSOIに頼らないスピン流生成法が注目されている。実際、弱SOI物質のCu薄膜を伝播するレイリー型表面弾性波(SAW)の格子回転運動が交流スピン流を生成し、これによるスピン波共鳴の励起が実証されている[2]。今回、強SOI物質のPtと強磁性NiFeの二層膜にSAWを注入し、スピン波共鳴の誘引に伴うその原因の解明のために、SAWの減衰の外部磁場印加角度依存性を測定し、定量的に解析した。SAWの減衰強度を測定したところ、正負の共鳴磁場においてSAWの減衰強度が非対称になる非相反性を発見したのでこれを報告する。

実験方法

素子の模式図を図1に示す。電子ビーム蒸着を用いたリフトオフ法により、LiNbO₃圧電基板にTi(3 nm)/Au(30 nm)からなる一对のSAW生成・検出用すだれ状電極(IDT)を作製し、IDT間に300 μm角のNiFe(20 nm)/Pt(40 nm)二層膜を成膜した。Pt層を伝播するSAWが磁気回転効果によりスピン流を生成すると、これがNiFeに注入され、スピントランスファートルクによりスピン波共鳴が生じる。このときのSAW減衰強度を、ベクトルネットワークアナライザを用いて測定した。なお、SAWの励起周波数は1.33GHzに固定した。

実験結果

図2(a)および(b)は、外部磁場をSAW伝播方向および伝播方向から160°面内に回転させた方向で正から負の方向に掃引しながら測定したSAW減衰強度である。印加したSAWと周波数、波長が一致するスピン波が励起される磁場で減衰強度が大きくなることを確認した。また、正磁場と負磁場で見られるSAW減衰強度は、磁場印加角度に依存して非対称になる結果が得られた。これは、SAWにより非相反的にスピン波が誘引されることを示唆している。これまで、磁気弾性効果[3]や磁気異方性[4]を有する強磁性薄膜においてSAW誘引のスピン波が非相反的になる報告はあるが、今回の実験のようにこれらが小さなNiFe薄膜で大きな非相反性が見られた例はほとんどない。発表では、その起源について議論する。

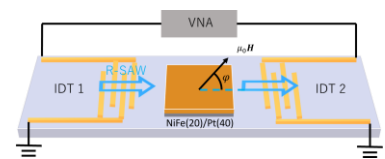


図1 SAW素子の模式図

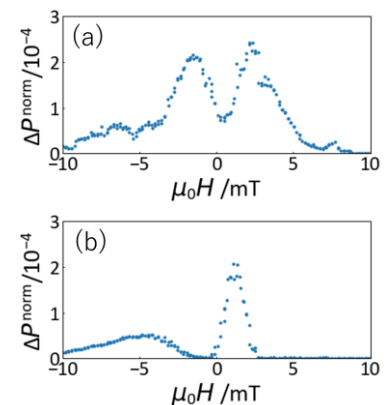


図2 SAW減衰強度の磁場依存性。磁場印加角度(a)0、(b)160°

- [1] M. Matsuo et al., Phys. Rev. B, **87**, 180402 (2013).
 [2] D. Kobayashi et al. Phys. Rev. Lett. **119**, 077202 (2017).
 [3] R. Sasaki et al., Phys. Rev. B **95**, 020407(R) (2017).
 [4] M. Xu et al., Sci. Adv. **6**, eabb1724 (2020).