

令和 3 年 6 月 8 日現在

機関番号：13301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2018～2020

課題番号：18K04923

研究課題名(和文) スピン密度磁気双極子相互作用を考慮した密度汎関数法の開発と応用

研究課題名(英文) Development and application of the density functional approach with spin density magnetic dipole interaction

研究代表者

小田 竜樹 (Oda, Tatsuki)

金沢大学・数物科学系・教授

研究者番号：30272941

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：スピン分極密度汎関数理論(SP-DFT)の枠組みで磁気双極子相互作用(MDI)エネルギーを、スピン密度とともに自己無撞着に決定する計算手法開発に成功した。自己無撞着計算に成功したことにより、外部磁場を顕わに印加した系の磁性解析を可能にした。応用では、スピントロニクス材料であるFe/MgO界面を有する強磁性ナノ薄膜やCo/Ni基強磁性ナノ多層膜において、実験結果を定性的および定量的に説明する結果を得た。これにより、これまで我々が開発した計算手法が、薄膜磁性を非経験的計算より明らかにする有用な手法であることを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

磁気双極子相互作用エネルギーをスピン密度から計算することに成功したことにより、表面・界面における原子サイズあるいはナノスケールのスピン密度変化(四重極子成分等)に由来する磁気異方性を高精度に取り込むことができる学術的重要な意義がある。これにより、これまで科学データに基づいて描かれることが少なかった原子サイズの磁力線を描くことが可能となり、それにより、マクロスケールの磁石への理解と同様に、ナノ物質磁性への理解が容易になる社会的意義がある。

研究成果の概要(英文)：In the project, we successfully developed and implemented the computational method that the magnetic dipole interaction energy is self-consistently determined with the spin density of system in the framework of spin-polarized density functional theory. This success of self-consistent calculation allowed us to analyze magnetic properties of materials under explicit external magnetic field. On the applications, in the spintronics application materials of ferromagnetic nanofilm with the Fe/MgO interface and Co/Ni-based ferromagnetic nano multilayer film, our computational results revealed that the experimental results in the recent literature can be well explained qualitatively and quantitatively. This demonstrated that the computational method we have developed is so good enough that it can clarify magnetic properties of film in non-empirical way.

研究分野：計算物質科学

キーワード：磁気異方性エネルギー スピン軌道相互作用 スピントロニクス マルチフェロイクス ノンコリニア
スピン密度汎関数理論

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

(1) 電気分極、磁気分極、構造変化など複数の秩序パラメータが同時に発現するマルチフェロイック現象や、磁気秩序相と電気分極相とが接合する界面の現象等、単一の相互作用では説明できない現象が実験的に数多く見つかっている。そこでは特に磁気と電気を結合するスピン軌道相互作用の正当な評価が必要とされるが、それだけを正しく評価しても片手落ちである。その元である電子の相対論的効果に対する総合的評価から、物性現象を記述することが必要である。しかし現実的な物質系に対して相対論的効果を十分に取り込んでいる計算方法はほとんど開発されていない。そのため、例えばフェライト磁石に代表されるような、フェリ磁性相で交換相互作用と磁気双極子相互作用が共存する系では、原子スケールの磁性の記述が不十分である。

(2) 応用の対象となるスピントロニクスやマルチフェロイックスにおいては、電子の自由度(電荷・スピン・軌道)に起因する非対角的な応答(磁界-電気分極、電界-磁化など)を示す交差相関(電気磁気効果等)が重要であり、相対論効果であるスピン軌道相互作用(SOI)を通してラシュバ効果やジャロシンスキー-守谷相互作用が導出される。一方、基本相互作用であるクーロン相互作用からは、量子効果として交換相互作用が導出される。これら相互作用は、密度汎関数理論(DFT)に基づいた第一原理的電子状態計算の中に、全て自己無撞着に取り込まれている。しかしクーロンの相対論効果として現れる磁気双極子相互作用(MDI)は、磁気材料の応用上最も重要であるが、これまで別に扱われ定量的評価が粗いままである。そのため、高精度の定量的評価を必要とするスピントロニクス等において、電子状態計算法と組み合わせ自己無撞着に決定される必要がある。

2. 研究の目的

(1) ナノサイズ系の磁気物質・材料に対して磁気特性を統一的に評価可能な計算手法「スピン分極密度汎関数法(SP-DFT)に基づく第一原理磁気異方性計算手法」の開発を成功させる。

(2) 薄膜界面系(非磁性金属層/磁性金属層/非磁性誘電体層)等へ応用しMDIとSOIの協奏や競合を解明する。手法開発のための検証には、反強磁性結合部分を含む系や、界面面直磁気モーメントと面内磁気モーメントが競合する系を用いた。

3. 研究の方法

(1) 研究代表者がこれまでに開発したノンコリニア磁気構造に対する第一原理分子動力学法計算手法に相対論的擬ポテンシャル法を導入した方法を出発点として用いた。SP-DFTの枠組みで磁気双極子相互作用(MDI)エネルギーをスピン密度とともに自己無撞着に決定する計算表式を求め、計算コードの実装を行った。異なった磁化方向に対して全エネルギーを見積もることにより、異方性エネルギーを評価し、計算手法および構築する計算コードの検証を実施した。検証には鉄(Fe)原子2次元正方格子を用いた。

(2) 応用研究として、非磁性金属層/強磁性金属層/非磁性誘電体層からなる膜厚1-2nm程度の磁性膜に適用し、系全体の磁気異方性エネルギーを高精度に見積もった。絶縁(誘電)体層側から印加する電界に対する変化分を見積もることにより磁気異方性電界効果も調べた。また系の磁界分布を第一原理計算により求めた。

4. 研究成果

(1) スピン分極密度汎関数理論(SP-DFT)の枠組みで磁気双極子相互作用(MDI)エネルギーを、スピン密度とともに自己無撞着に決定する計算手法開発を行った。2次元エwald法の表式を定式化し、計算コードの実装を行った。これらを検証するため、Fe原子2次元正方格子系において磁気異方性を見積もった[Oda et al., JPSJ, 2018]。Fe原子正方格子系は、SOIに由来する磁気異方性は、面直磁化が安定で、MDIに由来する異方性は面内が安定である。MDIエネルギーについては、面直・面内磁化とで満たすべき関係式が存在するが、こういった関係式を満たすことなどを確認し、新手法の検証を十分に行った。また本研究で新しく計算しているMDIエネルギーは、原子近似(スピン密度ではなく原子磁気モーメントから見積もる近似)で計算したものとは異なっており、その差はスピン密度の四重極子成分(図1)

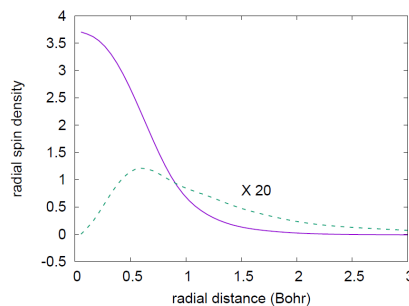


図1 スピン密度の球対称成分(実線)と四重極子成分(破線)。

から来ることが明らかになった。表 1 に示すように、スピン密度を用いて計算した異方性エネルギーは、0.055 meV/atom なのに対して、原子近似では 0.161 meV/atom である。この差は、近接原子 A と B がスピン密度の球対称成分 (sph.) と四重極子成分 (qud.) であるときの寄与とほぼ一致することが、表 1 の 5-7 段目のデータから分かる。このように四重極子成分が大きくなるような原子構造では、MDI に由来する磁気異方性が、原子近似の値から大きく変化することがあるので、異方性エネルギーの見積りに注意が必要であることが分かる。ただし、Fe 原子正方格子の場合は、SOI に由来する異方性は、面直磁化が安定で、エネルギーは、-0.7 meV/atom 程度である。近年の実験技術では、面内原子辺り 0.02 meV 程度よりも高精度で測定されていることを考慮すると、スピン密度による MDI エネルギーの見積りは不可欠と考えられる。面直磁化と面内磁化のエネルギーが、部分的にキャンセルするような場合はなおさらであろう。

	$E_{\text{MDI}}^{[001]}$	$E_{\text{MDI}}^{[100]}$	$E_{\text{MDI}}^{[001]} - E_{\text{MDI}}^{[100]}$
full ($3.23 \mu_B$)	0.037	-0.019	0.055
AMM ($m_a = 3.23 \mu_B$)			0.161
sph. ($3.03 \mu_B$)	0.095	-0.047	0.142
qud.	0.001	0.000	0.001
A(sph.), B(qud.)	-0.031	0.015	-0.046
A(qud.), B(sph.)	-0.031	0.015	-0.046
sph. + qud.	0.034	-0.017	0.052

表 1 MDI エネルギー (meV/atom)。

Structure	a (Å) (a_{Cr})	VCMA (fJ/Vm)	MCAE (SOI) (mJ/m ²)	SMAE (mJ/m ²)		MAE (MCAE+SMAE) (mJ/m ²)	
				DA	SDA	SOI + DA	SOI + SDA
Structure-I [1]	2.88	85	0.586	-1.353	-1.336	-0.763	-0.750
Structure-II [1]	2.88	89	1.280	-1.097	-1.053	0.183	0.227
Exp. [2]	2.88	~300	—	—	—	0.651	~0.500

表 2 磁気異方性エネルギー (mJ/m²)。[1]は本研究で得た結果で、[2]は Nozaki らによって得られた実験結果である。

(2) スピン分極密度汎関数理論 (SDFT) を Cr 基板上の Fe/MgO 薄膜に適用し、磁気異方性と電界効果について調べた [Pardede et al., IEEE, 2018; ibid, Crystal, 2020]。Cr を基板として用いることで、Fe/MgO 界面の磁気異方性の面直異方性が増大することが分かっていたため、その増大の起源を解明することも研究の目的であった。表 2 にその結果をまとめた。表 2 の Structure-I がナノ薄膜 Cr/Fe (4ML)/MgO の結果である。面直異方性の増大を Fe と Cr の合金効果として説明できる可能性が議論されていたので、本研究では Fe 層と Cr 層を入れ換えた系 (表 2 の Structure-II) についても計算を行った。表 2 に示すように Fe と Cr を入れ換えると SOI に由来する磁気異方性エネルギー MCAE が大きく増大していることが分かった。この MCAE の増大は、主に Fe/MgO 界面の Fe 1 原子層から来ていることが判明した (図 2 参照)。それと同時に、表 2 からは、MDI 由来の SMAE の絶対値が小さくなっていることが分かる。その結果、磁性薄膜の MAE は正となり、面直異方性を示すことが分かった。実験結果の符号と一致して、面直磁気異方性は、合金効果が起源の一つとなっていると言える。SMAE の大きさが小さくなっている理由は、合金化により Fe と Cr 界面付近の磁気モーメントが大きく減少したためであるが、このことは実験で観測されている磁性がなくなっているように見える磁気喪失層の存在と良く符号する。

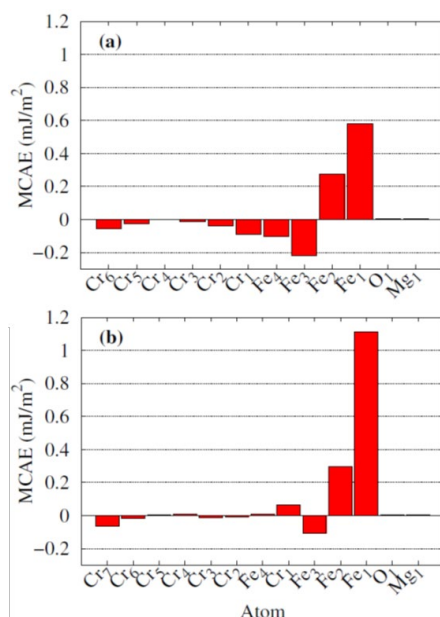


図 2 原子分解した SOI 由来の磁気異方性エネルギー MCAE。(a)合金化なし (b)合金化あり。

図 2 原子分解した SOI 由来の磁気異方性エネルギー MCAE。(a)合金化なし (b)合金化あり。

(3) (2)で採用したの系については、電界効果についても調べた。電界印加による磁気モーメントの変化はほとんどなく、MDI 由来の SAME の電界効果は、ほとんどない。Fe/MgO 界面で電子が枯渇する条件で電界を印加した場合に SOI に由来する MCAE が直線的に変化する。その変化割合を示しているのが、VCMA(表 2 参照)である。一方、Fe/MgO に対して、電子が蓄積する条件で電界を印加した場合、MCAE の変化は直線的でなく変化量は小さい。0.4V/nm 程度印加すると、電子がリークする現象が起こる。このような非線形な変化やリーク現象は、実験測定されたものとよく符号しており、磁気異方性エネルギーの電界効果の定性的性質あるいは、半定量的性質をよく再現している。表 2 にあるように、合金化により VCMA が大きく変化するとは言い難いことが分かった。実験値は、計算値の 3 倍以上であるが、実験結果との相違は他の理由があるだろう。この問題は今後の課題である。

さらに、合金化させた系について、格子歪による効果を調べた。純鉄の格子定数から決まる Fe/MgO 界面の面内格子定数を基準にとり、面内格子定数を変化させていくつかの系について、磁気異方性エネルギー MCAE と電界効果 VCMA の変化を調べた(図 3 参照)。このとき、各面内の格子定数値に対して、面直方向については、原子位置を最適化した構造で MCAE と VCMA を見積もっている。MCAE の計算では、2 種類の計算方法、すなわち、全エネルギー (TE) 計算による方法と、摂動的計算である GCFT (grand canonical force theorem) の方法を用いたが、両者の計算結果は高い計算精度で一致した。GCFT による計算手法の開発は、本研究の当初の計画には含まれていなかったが、この開発の成功により、MCAE の起源の解析結果に対する信頼性が高まったと考えて良い。そして磁性体、特に磁性薄膜に対する GCFT 法の有用性を確立することに成功した [Pardede et al., JMMM, 2020] と言い換えることができる。

このような第一原理計算による、SOI 由来の磁気異方性エネルギー MCAE の評価値は、これまで大きな計算誤差を含む可能性が常にあったが、TE 法と GCFT 法の両者を互いに計算値の検証に利用できるようになった。図 3 に示しているように、格子歪を導入した場合にも、高い信頼性をもって MCAE やその電界効果である VCMA の歪み依存性を調べることも可能となっている。計算結果からは、面内格子定数を小さくすると MCAE が、 2 mJ/m^2 に増大し、VCMA の大きさが 170 fJ/Vm まで増強することが分かる。 2 mJ/m^2 はかろうじて応用上役に立つ大きさである。VCMA については、応用上必要と考えられている 1000 fJ/Vm に比べると 5 分の 1 程度であり、さらに大きな電界効果を示す磁性材料の研究開発が望まれる。図 3 で大きな量を示すのは圧縮歪率で言うと、6-7%程度であるが、残念ながら、実際にこの程度の歪みを生む可能性のある正方晶の基盤材料の候補は、見つかっていない。

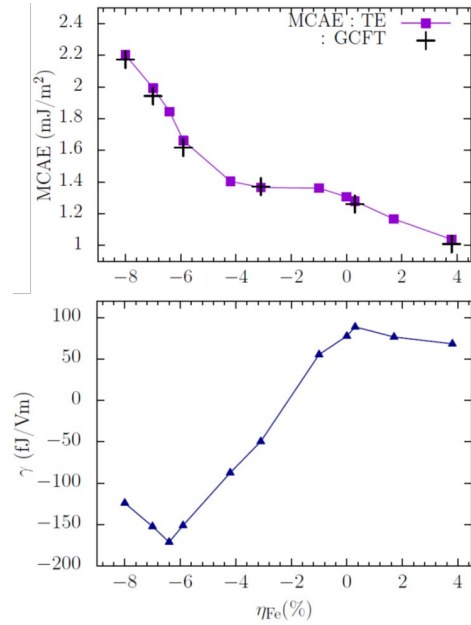


図 3 合金化させた系における SOI 由来の磁気異方性エネルギー MCAE の歪み依存性。

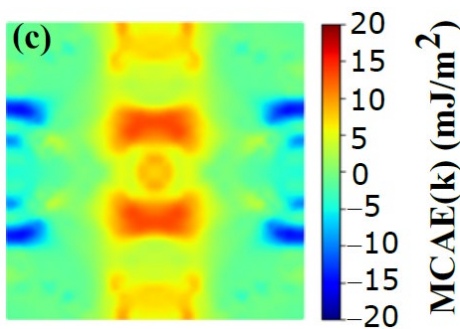


図 4 MCAE の波数空間分解図 (格子歪率 -0.31% の場合の、Fe/MgO 界面の Fe から寄与)。

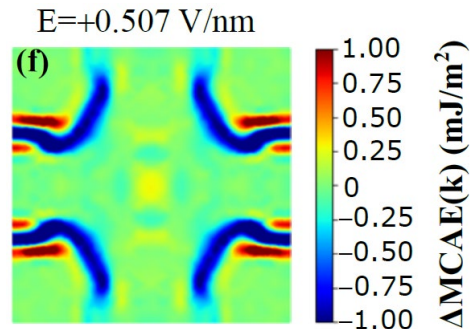


図 5 MCAE の電界効果の波数空間分解図 (格子歪率 -0.59% の場合)。MgO 内部電界 0.507 V/nm を印加した場合に誘起される Fe/MgO 界面の Fe から寄与。

(4) (3)の中でも触れたが、本研究の成果の一つとして、薄膜系で MCAE を見積もる際の、GCFT 法による計算法を確立した。GCFT 法を用いることにより、原子分解した MCAE や波数空間分解した MCAE を表示できるようになった。もちろん原子分解かつ波数空間分解を同時に行うことも可能である。これにより、MCAE の起源をより詳細に解析することが可能となった。例えば、図 2 には原子毎の MCAE を棒グラフで示している。図 4 は、MCAE への Fe/MgO 界面の Fe から寄与おける波数空間分解図(格子歪率 -0.31% の場合)を示している。図 5 は、MCAE の電界効果の波数空間分解図(格子歪率 -0.59% の場合)である。こういった原子分解した、あるいは波数空間分解した MCAE と、フェルミ面近傍の電子状態の軌道成分と対応関係を調べることで、MCAE の起源をさらに追求することができる。総合報告はすでに出版済みである[Pardede et al., JMMM, 2020; *ibid*, Crystal, 2020]。今回の成果でも、不十分と考えられる問題がある。その一つは、例えば、図 2 で示した原子分解した MCAE において、図の左端の方の Cr 原子では、MCAE に寄与する結果となっている。図 2 では左端の Cr 表面が真空となっているが、Cr 表面で MCAE が現れるかどうか検討する必要がある。実験で使われる素子では Cr 膜厚は大きく、計算では計算規模の関係で Cr 表面を導入した計算モデルを使わざるを得ないことになっている。

(5) 磁気メモリ用に使われる CoNi 基層状高スピン偏極材料について、孤立したスラブモデルを用いてスラブ全体の磁気異方性を、周期積層数 (N) に対して見積もる計算を実施し、積層数に対して比例する特性を得た。図 6 中の MAE のデータが、 N に対する線形的変化を表している。右上がりの破線は実験値 ($N=10$ の測定値) から内挿した変化割合を示している。この結果は、定量性を含め実験測定と極めて良い一致を示し、スピントロニクス材料開発に資する研究実施に成功すると同時に、密度汎関数法が薄膜磁性層の解析に極めて有効であることを示すことに成功したと言える。

磁気双極子相互作用由来の異方性エネルギー(図 6 で SDI)は、本研究で開発した手法[(1)で説明した手法]を用いてスピン密度から見積もったものである。原子近似で計算した場合は、異方性エネルギーの大きさが大きくなる。その結果、MCAE を加えた MAE は実験値からずれることになる。このことは、スピン密度から磁気双極子相互作用由来の異方性エネルギーを高精度に計算できたことを示す、一つの証左となっている。

CoNi 基層状系の磁気異方性エネルギーの計算においても、GCFT 法を用いて、MCAE の見積もりを行った。この手法を用いることで、リジッドバンド(RB)近似を用いて、電子数変化することによる MCAE の変調を予測することに成功した。MCAE は通常、経験として電子数変化に敏感であることがしばしばあるため、RB 近似が必ずしも良い近似かどうか明確ではない。しかしながら、MCAE に対する変調が予測できる場合は、磁気異方性エネルギーをデザインする要素となり得るため、電子数変化に対する MCAE の見積もりは大変有用である。今後も、電子数変化に対する MCAE 変調の計算精度の向上は、重要であろう。

(6) MDI エネルギー計算と、ノンコリニアスピン密度の自己無撞着計算が同時に実行できる手法が開発されたことにより、外部磁場印加下での電子状態計算が可能となった。密度汎関数理論に基づく計算手法としてはこれまでに実行されたことがない新しい手法であり、磁性研究の基本である磁場印加下で物性を直接的に評価できる画期的なものである。本研究期間には、具体的には計算コード実装を行い、磁場印加下で、FePt 系薄膜を用いて磁気異方性を評価する研究と反強磁性体である固体酸素下の磁化過程の研究を行った[Afrioni et al., JPSJ, 2020]。図 7 には、面直磁化を発現する Pt (5ML)/Fe (1ML)/Pt (ML) に x 軸方向に外部磁場を印加したときの磁化過程と全エネルギー変化を示した。これらの結果は、1 軸磁気異方性エネルギーとゼーマンエネルギーを含むモデルで説明できるもので、もっともらしい結果を得た。このことは、開発した新しい計算手法が有用であることを示唆している。この開発に付随して、物質内の磁場分布を第一原理計算の枠組みで計算できるようになった。

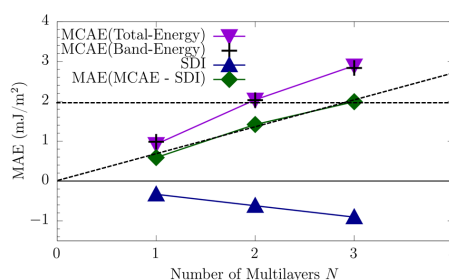


図 6 磁気異方性エネルギーの周期積層数依存性 ($N=1-3$)。Au (3MLs)/Ni (t_{Ni} MLs)/[Co (1ML)/Ni (t_{Ni} MLs)] $_N$ /Au (3MLs)、 $t_{Ni}=3$ の場合。

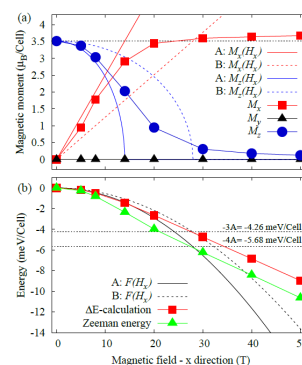


図 7 面直磁化薄膜 FePt の磁化過程と系のエネルギー変化。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計10件（うち査読付論文 10件 / うち国際共著 7件 / うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Christivana Mega, Obata Masao, Oda Tatsuki	4. 巻 88
2. 論文標題 Noncollinear Magnetic Structure with Spin-dependent van der Waals Density Functional Approach: -phase Solid Oxygen	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 104601 ~ 104601
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.104601	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Al-Mahdawi Muftah, Belmoubarik Mohamed, Obata Masao, Yoshikawa Daiki, Sato Hideyuki, Nozaki Tomohiro, Oda Tatsuki, Sahashi Masashi	4. 巻 100
2. 論文標題 Large nonvolatile control of interfacial magnetic anisotropy in CoPt by a ferroelectric ZnO-based tunneling barrier	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 54423
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.100.054423	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Pardede Indra, Yoshikawa Daiki, Kanagawa Tomosato, Ikhsan Nurul, Murata Itsuki, Obata Masao, Oda Tatsuki	4. 巻 500
2. 論文標題 Anatomy of large perpendicular magnetic anisotropy in free-standing Co/Ni (1 1 1) multilayer	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Magnetism and Magnetic Materials	6. 最初と最後の頁 166357 ~ 166357
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jmmm.2019.166357	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Rio Afrioni Roma, Pardede Indra, Gani Achmad Maulana, Christivana Mega, Obata Masao, Oda Tatsuki	4. 巻 89
2. 論文標題 Density Functional Approach under External Magnetic Field	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 035002 ~ 035002
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.035002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Tatsuki Oda and Masao Obata	4. 巻 87
2. 論文標題 Implementation of magnetic dipole interaction in the planewave-basis approach for slab systems	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 064803(8 Pages)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.87.064803	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Indra Pardede, Tomosato Kanagawa, Nurul Ikhsan, Itsuki Murata1, Daiki Yoshikawa, Masao Obata, and Tatsuki Oda	4. 巻 55
2. 論文標題 A comprehensive Study of Sign Change in Electric Field Control Perpendicular Magnetic Anisotropy Energy at Fe/MgO Interface: First Principles Calculation	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 IEEE Transactions on Magnetics	6. 最初と最後の頁 1700104(4pages)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/TMAG.2018.2860581	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Nurul Ikhsan, Tomosato Kanagawa, Indra Pardede, Daiki Yoshikawa, and Tatsuki Oda	4. 巻 62
2. 論文標題 Perpendicular and in-plane magnetic anisotropies in Cr-buffered Fe(x)/MgO interface from first-principles approach	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Science Reports of Kanazawa University	6. 最初と最後の頁 23-35
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Nurul Ikhsan, Indra Pardede, Tomosato Kanagawa, Daiki Yoshikawa, and Tatsuki Oda	4. 巻 62
2. 論文標題 Fermi level smearing effect in the perpendicular interface Fe/MgO magnetic anisotropy	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Science Reports of Kanazawa University	6. 最初と最後の頁 37-49
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Tatsuki Oda, Indra Pardede, Tomosato Kanagawa, Nurul Ikhsan, Daiki Yoshikawa, and	4. 巻 55
2. 論文標題 Shape Magnetic Anisotropy from Spin Density in Nanoscale Slab Systems	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 IEEE Transactions on Magnetics	6. 最初と最後の頁 1300104(4pages)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/TMAG.2018.2868843	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Masao Obata, Mega Christivana, and Tatsuki Oda	4. 巻 8
2. 論文標題 Investigation of magnetic dipole-dipole interaction using magnetic density on solid oxygen based on first-principles approach	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 101419(6pages)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5043062	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計11件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 8件)

1. 発表者名 小田竜樹
2. 発表標題 ノンコリニアスピン密度汎関数法の開発・実装・応用
3. 学会等名 物性研究所パソコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の新展開」(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小田竜樹, インドラ パルデデ, 吉川大輝, 金川朋賢, 北岡優也, 小幡正雄
2. 発表標題 ナノ構造スラブ系の磁気異方性計算とラシュバ効果
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masao Obata, Indra Pardede, Daiki Yoshikawa, Tatsuki Oda
2. 発表標題 First-principles magnetic dipole-dipole energy calculation, Application to magnetic chain, film, and bulk systems
3. 学会等名 The 22nd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Indra Pardede, Daiki Yoshikawa, Afrioni Roma Rio, Tomosato Kanagawa, Masao Obata Tatsuki Oda
2. 発表標題 Magnetic Anisotropy in Antiferromagnet: First Principles Calculation
3. 学会等名 The 19th International Conference on Solid Films and Surfaces (ICSFS19) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tatsuki Oda, Indra Pardede, Tomosato Kanagawa, Nurul Ikhsan, Daiki Yoshikawa, Masao Obata
2. 発表標題 Shape Magnetic Anisotropy from Spin Density in Nanoscale Slab Systems
3. 学会等名 21th International Conference on Magnetism (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masao Obata, Mega Christivana, Tatsuki Oda
2. 発表標題 Investigation of magnetic dipole-dipole interaction using magnetic density on solid oxygen based on first-principles approach
3. 学会等名 21th International Conference on Magnetism (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Indra Pardede, Tomosato Kanagawa, Nurul Ikhsan, Itsuki Murata, Daiki Yoshikawa Masao Obata, Tatsuki Oda
2. 発表標題 A comprehensive Study of Sign Change in Electric Field Control Perpendicular Magnetic Anisotropy Energy at Fe/MgO Interface: First Principles Calculation
3. 学会等名 21th International Conference on Magnetism (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masao Obata, Mega Christivana, Tatsuki Oda
2. 発表標題 Magnetic and molecular structure of solid oxygen via first-principles approach
3. 学会等名 International Workshop on Computational Science 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masao Obata, Indra Pardede, Daiki Yoshikawa, Nurul Ikhsan, Tatsuki Oda
2. 発表標題 Magnetic dipole-dipole energy evaluation on 1D, 2D, and 3D periodicities using density functional approach
3. 学会等名 The 21st Asian Workshop on First-principles Electronic Structure Calculations (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Daiki Yoshikawa, Masao Obata, Indra Pardede, Tatsuki Oda
2. 発表標題 First-principles density functional study in the magnetically and electrically polarized Pt/CoO/ZnO
3. 学会等名 The 21st Asian Workshop on First-principles Electronic Structure Calculations (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Indra Pardede, Tomosato Kanagawa, Nurul Ikhsan, Itsuki Murata, Daiki Yoshikawa, Masao Obata, Tatsuki Oda
2. 発表標題 Anatomy of Large Perpendicular Magnetic Anisotropy Energy in Co/Ni (111) Multilayer
3. 学会等名 The 66th Japan Society of Applied Physics (JSAP) Spring Meeting
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>計算ナノ科学 http://cphys.s.kanazawa-u.ac.jp/~oda-web/index.html Theoretical and Computational Nanoscience http://cphys.s.kanazawa-u.ac.jp/~oda-web/index-eng.html ホーム 計算ナノ科学 http://cphys.s.kanazawa-u.ac.jp/~oda-web/index.html</p>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
連携研究者	小幡 正雄 (Obata Masao) (10803299)	金沢大学・数物科学系・助教 (13301)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------