

スーパーコンピュータによる磁化挙動シミュレーション

上坂保太郎¹、藤本和久¹、吉原都夫²、仲谷栄伸³、林信夫³

¹日立中研、²日立システム研、³電通大情報工学科

磁気記録高密度化のキーテクノロジーとして注目を集めている磁気抵抗効果型ヘッドの開発には、サブミクロン以下の微細な磁化挙動を知る必要があるが実験的には困難であり、数値シミュレーションへの期待が大きい。我々は磁化をLandau-Lifshitz-Gilbert方程式に基づくモデルで表わし、差分法で離散化し、時間発展的に解くシミュレータを開発した。その中では、計算の主要部となる反磁界を求める部分にスペクトル法を用い、さらに、スペクトル法の中で用いる二次元高速フーリエ変換プログラムに特別の工夫を施した。この結果、直接的な行列計算を行った場合に比べ、約20倍の高速化を達成した。これを用いて、SAL (Soft Adjacent Layer) の磁化反転にともなう出力の変化が存在することを明らかにした。

Numerical simulation of magnetization reversal using super-computer

¹Yasutaro Uesaka, ¹Kazuhisa Fujimoto, ²Ikuo Yoshihara,
³Yoshinobu Nakatani, and ³Nobuo Hayashi

¹Central Research Lab. Hitachi Ltd., ²Systems Development Lab. Hitachi Ltd.,
³Univ. of Electro-communications

Magnetic structure and magnetization reversal mechanism of magneto-resistive head were analysed by using super-computer. Magnetic films were divided into rectangular cells and each magnetic moment was assumed to precess according to the Landau-Lifshitz-Gilbert equation. For the demagnetizing field calculation, which is the most time consuming process, Fast Fourier Transform was used. Then, the computation time became less than 1/20 than the time for the direct calculation method. The effect of uniform applied field on output was calculated and small peaks due to magnetization reversals of SAL (Soft Adjacent Layer) were observed.

1. 緒言

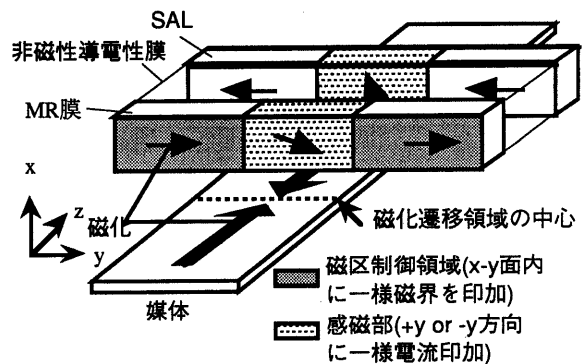
近年、磁気記録の高密度化は急速な勢いで進みつつある。磁気ディスク装置における高密度化のキーテクノロジーの一つが磁気抵抗効果型(MR)ヘッドである。磁気抵抗効果型ヘッド(MRヘッド)は、磁性体を通る電流の抵抗値が磁化の向きにより変化するという現象を利用したヘッドであり、再生出力がディスクの周速に依存しないという特徴を有している(従来用いられた誘導型ヘッドは出力が周速に比例する)。このため、磁気ディスク装置の小型化に伴い、MRヘッドは再生用ヘッドとして一部で実用化され始めており、このMRヘッドの使用は今後ますます広がることと思われる。

MRヘッドの開発には、磁性膜中の磁化状態の知識が必要不可欠である。しかしながら、MRヘッドの磁化状態の観察には、サブミクロン程度の分解能が必要であり、現在の電子線技術を用いてもなかなか困難である。従って数値シミュレーションによりMRヘッドの磁化分布を求めることが必要である。また、MRヘッドの形状や材料パラメータと出力の関係を計算により求めることができれば、開発期間を大幅に短縮できると思われる。

筆者らは、計算機シミュレーションにより、このMRヘッド(MR素子)中の磁性膜の磁化状態を求めると、および、形状や材料パラメータと再生出力の関係を求めることを目的として検討をすすめており、ある条件下での計算は可能となったので報告する。

2. MR素子のモデル

MR素子は図1に示すように、非磁性導電性膜を介して、MR膜、SAL(Soft Adjacent Layer)の2枚の磁性膜からなる(実際には、この他にMR膜、SALの外側に余分な磁界を遮断するための磁気シールド膜があるが、今回はこれを省略した)。MR膜は媒体からの磁界に対応する再生出力を与えるためのものである。SALは印加磁界に対する再生出力の



線形性を与えるためのものであり、媒体からの磁束が無い場合に、磁性体の磁化の向きが電流の向きとほぼ45°をなすようにする。また、MR膜の磁区構造はそのままでは単一磁区とはならないため、バルクハウゼン雑音(磁区構造の変化、すなわち、磁壁移動に伴う雑音)が生じる。これを防ぐために、MR膜の感磁部(2個の電極の間の部分)の外側(磁区制御領域)に反強磁性体を設けて、この反強磁性体

とMR膜間の交換相互作用により、磁区制御領域の磁化が固定されるようにしている。シミュレーションにおいては、磁区制御領域に一定の大きさの磁界を印加した。

3 基本方程式と境界条件

3.1 磁化の運動方程式

ソフトバイアス膜(SAL)型磁気抵抗効果型(MR)素子シミュレータでは、MR素子を構成する2つの磁性膜(MR膜とSAL)内の磁化分布を、磁化の運動方程式であるLandau-Lifshitz-Gilbert (LLG)方程式

$$(1+\alpha^2)\dot{\mathbf{M}}=-\gamma(\mathbf{M}\times\mathbf{H}') \quad (1)$$

$$\text{但し、}\mathbf{H}'=\mathbf{H}+\frac{\alpha}{|\mathbf{M}|}(\mathbf{M}\times\mathbf{H}) \quad (2)$$

$$\mathbf{H}=\mathbf{H}_{\text{ex}}+\mathbf{H}_{\text{k}}+\mathbf{H}_{\text{d}}+\mathbf{H}_{\text{ext}} \quad (3)$$

を基本方程式として計算する。ここで、 \mathbf{M} は磁化ベクトル、 \mathbf{H} は有効磁界、 γ はジャイロ磁気定数、 α はダンピング定数である。有効磁界 \mathbf{H} は、交換磁界(\mathbf{H}_{ex})、一軸異方性磁界(\mathbf{H}_{k})、反磁界(\mathbf{H}_{d})、外部磁界(\mathbf{H}_{ext})の和で表わされる。外部磁界は媒体からの磁界および感磁部を流れる電流による磁界からなる。電流による磁界は3層(MR膜、非磁性導電層、SAL)それぞれの抵抗に反比例した一様電流(センス電流)が+yまたは-y方向に流れていると仮定し、ビオサバルの法則により計算する。

3.2 再生出力

磁性膜内の磁化回転による比抵抗 ρ の変化は、異方性磁気抵抗効果における式

$$\rho=\rho_0+\Delta\rho_m\cos^2\theta \quad (4)$$

を用いて計算した。ここで、 θ は電流の方向と磁化の方向がなす角、 $\Delta\rho_m$ は最大比抵抗変化である。

MR膜を流れる電流密度を J 、感磁部の長さを l とすると、再生出力は次式で表わされる。

$$\Delta V=Jl\Delta\rho_m\cos^2\theta \quad (5)$$

3.3 境界条件

MR膜の周囲は自由境界条件($(\partial\mathbf{M}/\partial\mathbf{x})_n=0$)とする。ただし、反磁界計算には高速

フーリエ変換(FFT)を用いるため、周期境界条件を用いる必要があり、この場合、同じ磁性膜がx,,y方向等間隔に点在する状態を計算することになる。そこで、図2に示すように磁性膜の周りに非磁性領域(M=0)を設け、周りからの影響が小さくなるようにして計算を行った。

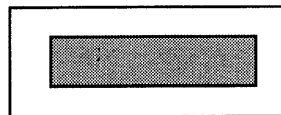


図2 FFT法による反磁界計算の場合の境界条

4 シミュレーションの方法

4.1 離散化

本シミュレータでは、図3に示すように磁性膜をx方向にNx、y方向にNy、z方向にNz（但し今回はNz=1）として、大きさがdx dy dzの1つのセル内では磁化が一樣であると仮定し、空間的には中心差分法、時間的には後退差分法を用いて式(1)のLLG方程式を離散化し、時間発展的に解いている。¹⁾

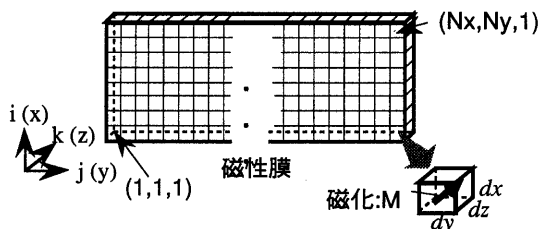


図3 シミュレーションモデル

4.2 シミュレーション手順

図4にプログラムのフローチャートを示す。プログラムでは、まず計算に必要なパラメータの設定、材料パラメータ、外部磁界等の設定を行う。次に、MR膜、SAL内の磁化分布の初期設定を行う。この設定では、プログラム内で磁化分布を設定するか、あるいは前の計算結果を取り込むかどうかを選んで計算する。

次に、MR膜、SAL内の感磁部の抵抗を計算し、分流比を求めて、各層に流れるセンス電流を計算する。次に、そのセンス電流がMR膜及びSALの感磁部に作る磁界を計算する。次に、MR膜、SAL内の反磁界を計算する。次に、LLG方程式を解き、時間 Δt 後の磁化分布を計算する。ここで、磁化に働くトルクを計算し、計算点全体のトルクの和が1以下になるまで、磁化分布の計算を繰り返す。トルクの和が1以下になったら計算が収束したとみなし、MR膜、SAL内の磁化方向を計算する。その結果から抵抗及び出力(ΔV)を計算し、実行を終わる。

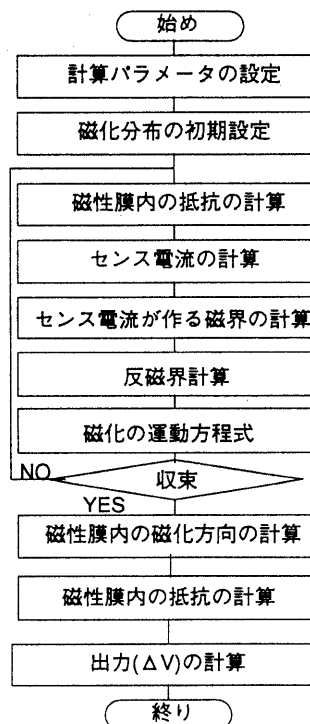


図4 フローチャート

4.3 シミュレータの構成ならびに初期条件

本シミュレーションの計算には膨大な時間を要するため、スーパーコンピュータS-820を用いる。なお、シミュレーションのプログラムはFORTRANで3900ステップであり、繰り返し演算部のほとんどがベクトル演算処理可能である。

シミュレーションでは、MR膜内の磁化をすべて+y方向に、SAL内の磁化をすべて-y方向に向けた状態を初期状態として、ある材料パラメータのもとで、外部から磁界を印加せずに磁化の安定状態(この状態でのMR膜、SAL内の感磁部での磁化の向きからバイアス角が求まる)を計算し、その状態を磁化分布の初期状態として、 Δ V-H特性等を計算した。

5 高速化の工夫

本シミュレーションで最も時間を要するのは、反磁界計算を行う部分である。この部分を中心に行った高速化について述べる。

5.1 スペクトル法

ある点P(x,y,z)における反磁界Hd(P)は、全空間にわたる磁化M(Q)の影響から求める(Q=Q(x',y',z')はP以外の点)。

$$H_d(P) = - \iiint \frac{1}{r^3} [M(Q) - 3(M(Q) \cdot r) \frac{r}{r^2}] dx' dy' dz' \quad (6)$$

ただし、 $r=P-Q$

Hdを求める積分は、各セルごとの積分の和に置き換えられる。各セル毎の積分は、距離rだけで決まるK(セル(i,j,k)の寄与を表わす係数行列)と磁化Mの積の形に整理できるので、次式を得る。

$$H_d(P) = \sum K(r) M(Q) \quad (6')$$

$$= \sum K(P-Q) M(Q) \quad (6'')$$

式(6')に基づく直接法では、KとMに関する積和演算が必要なため、計算量のオーダーは $O(N^2)$ になる。これが毎時間ステップに必要なため、計算量は膨大である。一方、式(6)は式(6'')の畳み込み(convolution)の形になることから、フーリエ変換を用いたスペクトル法で解くことが可能である。すなわち、Mにフーリエ変換を施し、その周波数分布Mfを求め、Mfから反磁界のフーリエ成分Hfを求め(これは解析的に求まる)、Hfに逆フーリエ変換を施して反磁界Hdを得る。²⁾

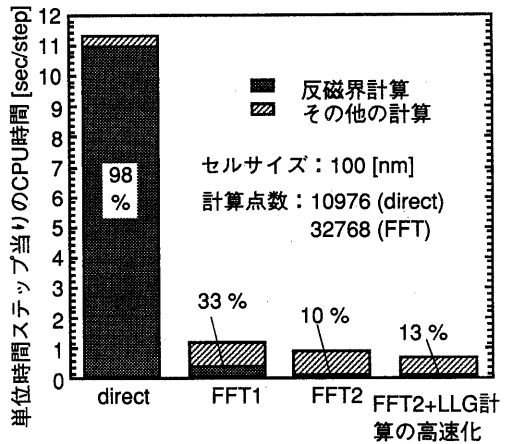


図5 計算の高速化 (S820使用)

この方法は一見問題を複雑化して計算量を増やしているように見えるが、フーリエ変換部はFFTにより極めて効率的に処理出来るため、実は計算量のオーダーが下がるのである。以下に計算量の見積りを示す。

セルは、縦横それぞれ p 個、 q 個からなるとする。 $(N=p*q, p$ も q も2のべき乗)。二次元FFTは x 方向の一次元FFT(q 行分必要)と y 方向の一次元FFT(p 行分必要)とを順次施すことにより達成される。一般にデータ長 n の一次元FFTの計算量は $O(n \log_2 n)$ であるから、計算量はおおよそ次のようになる。

$$\text{「計算量」} = q*(p \log_2 p) + p*(q \log_2 q) = O(pq(\log_2 p + \log_2 q)) = O(N \log_2 N) \quad (7)$$

逆フーリエ変換の計算も全く同じであり、 M_f から H_f を求めるのに必要な計算量は $O(N)$ であるから、計算量は $O(N \log N)$ に抑えられる。したがって直接法に比べ $N / \log_2 N$ 倍程度の高速化が図れる。

実際にどの程度早くなるか実例で示す。第3.3節で述べたように、スペクトル法の場合、解析領域の外側にダミー領域を設ける必要がある。たとえば、約一万セルの問題が充分なダミーセルを設けたため三万セルになった場合でも、図5に示すように (direct \Rightarrow FFT1)、計算時間は約1/10に減少し、反磁界計算が計算全体に占める割合は98%から33%に削減される。

5.2 二次元FFT

上記の例は普通のベクトル機向きFFTルーチンを使用した場合の話である。二次元FFTでは、 x 方向、 y 方向に全く同じパターンの処理を行うのでその演算を最内側のループに持ち込めば、ひねり演算子が共通に使える、しかもデータアクセスがインデクス順となるので、高速化が図れる。さらに、サブルーチンの呼びだし回数が減る効果もある。

ところが、このようにした場合、縦、横とも2のべき乗個のデータが並んでいるため、バンクコンフリクトの問題が生じる。これを回避するため、配列の宣言寸法をそれぞれ $p+1, q+1$ に取っておく。このようにすればほぼストライド1と同じデータアクセス時間ですむ。これにより、一次元FFTを繰り返し使う場合に比べ、4-5倍の高速化が図れることが分かった。

この二次元FFTを使った結果を図5の3番目の棒グラフ (FFT2) に示す。反磁界計算が全体に占める割合は10%にまで低減している。

以上の他、LLG方程式を解く部分など全体的見直しを行い、図5の4番目の棒グラフに示すように、直接法に比べ約20倍の高速化が達成できた。

6 MR素子感磁特性

MR素子の基本特性として、媒体磁界の代わりに一様な磁界に対する再生出力の応答を調べることが行われる。そこで、上記したシミュレータを用いて、一様磁界(H)に対する再生出力(ΔV)の変化を調べた。

図6は、一様磁界(H)を負から正に変化させた場合(○)と正から負に変化させた場合(●)の ΔV -H曲線を示している。図から、 ΔV -H曲線はH: -8.0~-1.6kA/mの範囲で小さいピークを持ち、その範囲でヒステリシスがあることがわかる。この ΔV -H曲線において小さいピークがでる磁界範囲(H=-8.0kA/m~-1.6kA/m)におけるMR膜、SAL内の磁化状態をみってみる。図7はHを負から

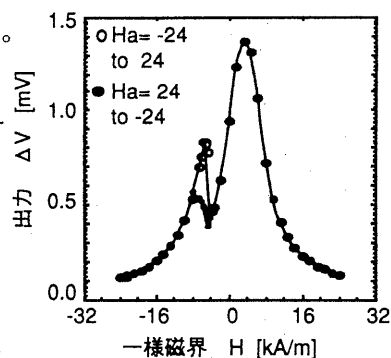


図6 ΔV -H曲線

正に変化させた場合の磁化状態の変化、図8はHを正から負に変化させた場合の磁化状態の変化を示す。これらの図より、図6におけるH: -8.0~-1.6kA/mの範囲での小さいピークは、SALの磁化の大きな変化に伴い、MR膜の磁化がそれまでの変化とは逆の方向に回転することにより生じたものであることがあきらかとなった。

7 結言

LLG方程式に基づいて、磁気抵抗効果型素子の磁化状態を計算機シミュレーションによりもとめることが可能となった。最も計算時間を要する反磁界計算にFFTを用いることにより、従来の直接法を用いた場合に比べて、計算時間を1桁以上短縮できた。また、一様磁界-出力曲線において、小さな出力ピークを見出し、この原因がSALの磁化の大きな変化に伴うMR膜の磁化変化によるものであることを明らかにした。

参考文献

1. Y. Nakatani, Y. Uesaka, N. Hayashi; Jpn. J. Appl. Phys. Vol.28, No.12, 1989, p2485
2. M. Mansuripur, R. Giles; IEEE Trans. Magn., Vol.24, No.6, 2326 (1988)
3. 吉原、船橋、河辺: ベクトル計算機に適したFFTプログラム、情報処理学会第27回全国大会概要集 4N-2 (1983)
4. 吉原、村松、田中: 多次元FFTの並列処理、情報処理学会第38回全国大会 6T-5 (平1) 1484

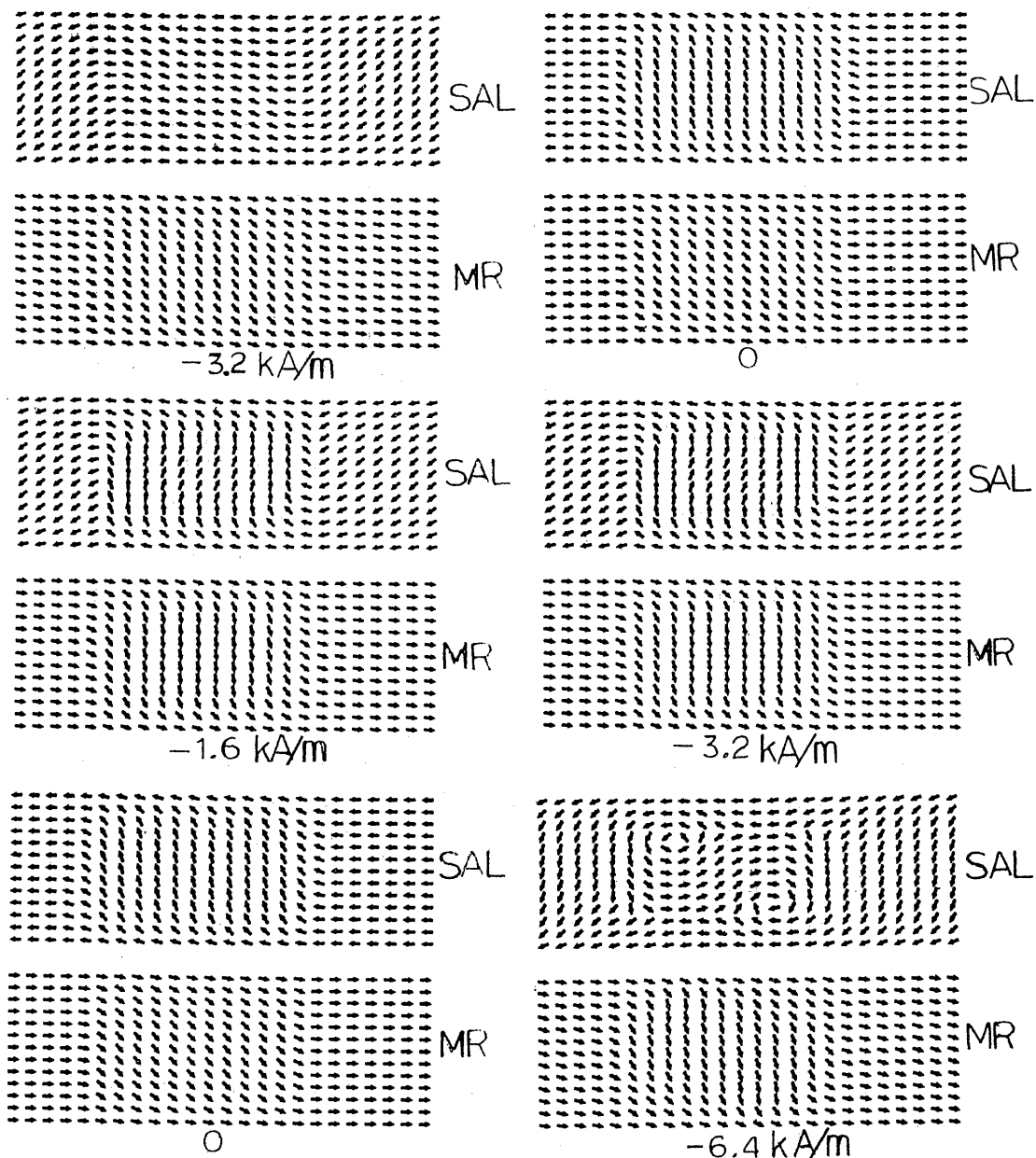


図7 一様磁界増大時の磁化状態
 -3.2 kA/m におけるMR膜の磁化が
 -1.6 kA/m でのMR膜の磁化よりも
 斜めに傾いている。

図8 一様磁界減少時の磁化状態
 -3.2 kA/m におけるMR膜の磁化が
 -6.4 kA/m での磁化よりも垂直に
 向いている。 -3.2 kA/m における
 MR膜、SALの磁化状態は磁界増大時
 と異なる。