

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2025年6月5日(05.06.2025)



(10) 国際公開番号

WO 2025/115758 A1

(51) 国際特許分類:

G11B 5/84 (2006.01)

G11B 5/64 (2006.01)

G11B 5/02 (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2024/041337

(22) 国際出願日: 2024年11月21日(21.11.2024)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:

特願 2023-200999 2023年11月28日(28.11.2023) JP

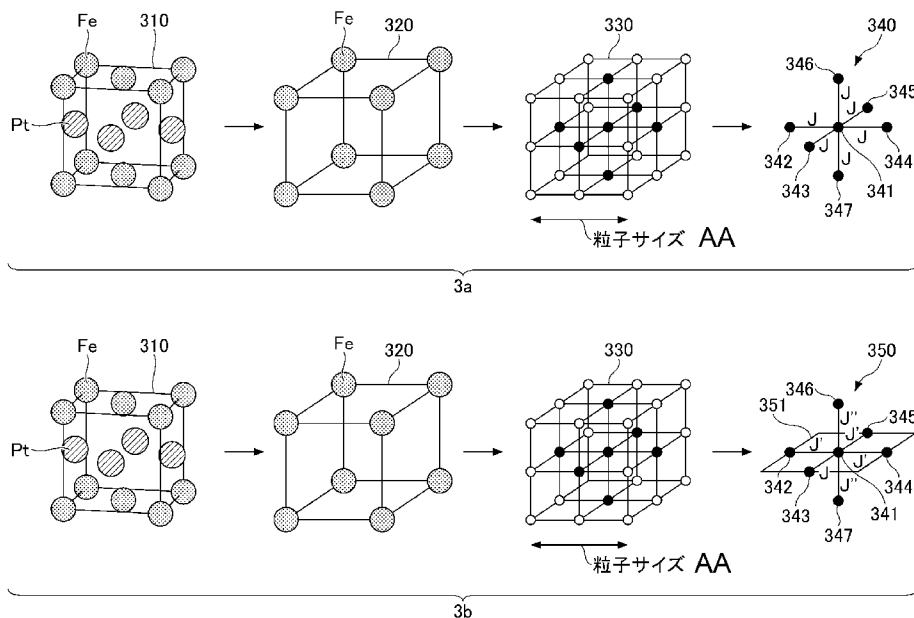
(71) 出願人: 株式会社 レゾナック (RESONAC CORPORATION) [JP/JP]; 〒1057325 東京都港区東新橋一丁目9番1号 (JP).

(72) 発明者: 落合 宏平(OCHIAI, Kohei); 〒1057325 東京都港区東新橋一丁目9番1号 株式会社レゾナック内 (JP). 津山 智之(TSUYAMA, Tomoyuki); 〒1057325 東京都港区東新橋一丁目9番1号 株式会社レゾナック内 (JP). 山中 謙亮(YAMANAKA, Kensuke); 〒2900067 千葉県市原市八幡海岸通5番地1 株式会社レゾナック・ハードディスク内 (JP). 工藤 史人(KUDO, Fumito); 〒2900067 千葉県市原市八幡海岸通5番地1 株式会社レゾナック・ハードディスク内 (JP). 張 磊(ZHANG, Lei); 〒2900067 千葉県市原市八幡海岸通5番地1 株式会社レゾナック・ハードディスク内 (JP). 渡邊 成(WATANABE, Jin); 〒1057325 東京都港区東新橋一丁目9番1号 株式会社レゾナック内 (JP).

(54) Title: INFORMATION PROCESSING DEVICE, ANALYSIS METHOD, AND ANALYSIS PROGRAM

(54) 発明の名称: 情報処理装置、解析方法及び解析プログラム

[図3]



AA Particle size

(57) Abstract: The present invention improves calculation accuracy in the calculation of the Curie temperature for each particle size. An information processing device according to the present invention comprises: a setting unit that acquires particle structure information which indicates the structure of magnetic nanoparticles, first exchange interaction which acts between adjacent atoms of the same type within the magnetic nanoparticles, and second exchange interaction which acts between atoms of the same type in a state in which atoms of different types are arranged therebetween within the



WO 2025/115758 A1

(74) 代理人: 弁理士法人 I T O H (ITOH PATENT ATTORNEY CORPORATION); 〒1000005 東京都千代田区丸の内二丁目1番1号 明治安田生命ビル16階 (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, ME, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

一 国際調査報告 (条約第21条(3))

magnetic nanoparticles and that sets a magnetic calculation model; a calculation unit that uses the set magnetic calculation model to calculate the magnetization at each temperature, so as to calculate the Curie temperature; and an output unit that associates and outputs the calculated Curie temperature and the particle size of the magnetic nanoparticles included in the particle structure information.

(57) 要約: 粒子サイズごとのキュリー温度の算出において、算出精度を向上させる。情報処理装置は、磁性ナノ粒子の構造を示す粒子構造情報と、前記磁性ナノ粒子内において隣接する同一種類の原子間に働く第1交換相互作用と、前記磁性ナノ粒子内において異なる種類の原子が間に配置された状態での同一種類の原子間に働く第2交換相互作用とを取得し、磁気計算モデルを設定する設定部と、設定された前記磁気計算モデルを用いて、各温度における磁化を算出することによって、キュリー温度を算出する算出部と、前記粒子構造情報に含まれる前記磁性ナノ粒子の粒子サイズと、算出された前記キュリー温度とを対応付けて出力する出力部とを有する。

明 細 書

発明の名称： 情報処理装置、解析方法及び解析プログラム

技術分野

[0001] 本開示は、情報処理装置、解析方法及び解析プログラムに関する。

背景技術

[0002] 熱アシスト磁気記録方式（HAMR：Heat Assisted Magnetic Recording）によってデータを記録する記録媒体においては、記録時に、記録層が、該記録層を形成する磁性ナノ粒子のキュリー温度まで加熱される。

[0003] 一般に、キュリー温度は磁性ナノ粒子の粒子サイズに応じて変動する。このため、記録層を形成する磁性ナノ粒子の粒子サイズのばらつきが大きいと、キュリー温度のばらつきも大きくなり、記録品質が低下する。

[0004] このようなことから、記録層を形成する磁性ナノ粒子の粒子サイズのばらつきを予め測定し、当該記録層を形成する磁性ナノ粒子のキュリー温度の範囲を管理しておくことは、記録品質を定量的に示すうえで重要である。

先行技術文献

非特許文献

[0005] 非特許文献1：N.T.Binh, R.W.Chantrell, et al. "Influence of finite-size effects on the Curie temperature of L10-FePt.", Physical Review B 106.5(2022):054421

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0006] ここで、磁性ナノ粒子の粒子サイズごとのキュリー温度は、磁性シミュレーション用のソフトウェアを用いて算出することができるが、従来の磁性シミュレーション用のソフトウェアは、キュリー温度の範囲を厳格に管理するのに十分な算出精度を有していなかった。

[0007] 本開示は、粒子サイズごとのキュリー温度を算出する際の算出精度を向上させる。

課題を解決するための手段

- [0008] 本開示の第1の態様に係る情報処理装置は、
磁性ナノ粒子の構造を示す粒子構造情報と、前記磁性ナノ粒子内において隣接する同一種類の原子間に働く第1交換相互作用と、前記磁性ナノ粒子内において異なる種類の原子が間に配置された状態での同一種類の原子間に働く第2交換相互作用とを取得し、磁気計算モデルを設定する設定部と、
設定された前記磁気計算モデルを用いて、各温度における磁化を算出することによって、キュリー温度を算出する算出部と、
前記粒子構造情報に含まれる前記磁性ナノ粒子の粒子サイズと、算出された前記キュリー温度とを対応付けて出力する出力部とを有する。
- [0009] 本開示の第2の態様は、第1の態様に記載の情報処理装置であって、
前記粒子構造情報には、更に、前記磁性ナノ粒子に含まれる原子の配列を示す原子配列情報が含まれる。
- [0010] 本開示の第3の態様は、第2の態様に記載の情報処理装置であって、
前記設定部は、
前記第1交換相互作用として、前記原子配列情報に基づいて配列される原子のうち、同一平面において隣接する原子との間に働く交換相互作用を取得し、
前記第2交換相互作用として、前記原子配列情報に基づいて配列される原子のうち、前記同一平面に直交する方向において同一種類の原子間に働く交換相互作用を取得する。
- [0011] 本開示の第4の態様は、第1の態様に記載の情報処理装置であって、
前記設定部によって、前記磁性ナノ粒子の粒子サイズが互いに異なる複数の前記磁気計算モデルが順次設定され、前記算出部によって、キュリー温度が順次算出された場合、前記出力部は、所定の粒子サイズの範囲に対応するキュリー温度の範囲を算出する。
- [0012] 本開示の第5の態様は、第4の態様に記載の情報処理装置であって、
前記出力部は、複数の前記磁性ナノ粒子の粒子サイズと、算出された複数

の前記キュリー温度との関係を示すグラフを出力する。

[0013] 本開示の第6の態様は、第5の態様に記載の情報処理装置であって、
前記出力部は、前記グラフに、前記粒子サイズの範囲と、前記キュリー温度の範囲とを重畳して出力する。

[0014] 本開示の第7の態様は、第4の態様に記載の情報処理装置であって、
前記粒子サイズの範囲は、粒子サイズの中央値と、分散値とに基づいて特定される。

[0015] 本開示の第8の態様は、第1乃至第7のいずれかの態様に記載の情報処理装置であって、
前記磁性ナノ粒子は、FePt磁性ナノ粒子である。

[0016] 本開示の第9の態様は、第8の態様に記載の情報処理装置であって、
前記第1交換相互作用は、Fe原子間に働く交換相互作用であり、前記第2交換相互作用は、Pt原子が間に配置された状態でのFe原子間に働く交換相互作用である。

[0017] 本開示の第10の態様は、第1乃至第9のいずれかの態様に記載の情報処理装置であって、
前記第1交換相互作用及び前記第2交換相互作用は、第一原理計算により算出される。

[0018] 本開示の第11の態様に係る解析方法は、
コンピュータが、
磁性ナノ粒子の構造を示す粒子構造情報と、前記磁性ナノ粒子内において隣接する同一種類の原子間に働く第1交換相互作用と、前記磁性ナノ粒子内において異なる種類の原子が間に配置された状態での同一種類の原子間に働く第2交換相互作用とを取得し、磁気計算モデルを設定する工程と、
設定された前記磁気計算モデルを用いて、各温度における磁化を算出することによって、キュリー温度を算出する工程と、
前記粒子構造情報に含まれる前記磁性ナノ粒子の粒子サイズと、算出された前記キュリー温度とを対応付けて出力する工程とを実行する。

[0019] 本開示の第 1 2 の態様に係る解析プログラムは、
コンピュータに、

磁性ナノ粒子の構造を示す粒子構造情報と、前記磁性ナノ粒子内において隣接する同一種類の原子間に働く第 1 交換相互作用と、前記磁性ナノ粒子内において異なる種類の原子が間に配置された状態での同一種類の原子間に働く第 2 交換相互作用とを取得し、磁気計算モデルを設定する工程と、

設定された前記磁気計算モデルを用いて、各温度における磁化を算出することによって、キュリー温度を算出する工程と、

前記粒子構造情報に含まれる前記磁性ナノ粒子の粒子サイズと、算出された前記キュリー温度とを対応付けて出力する工程とを実行させる。

発明の効果

[0020] 本開示によれば、粒子サイズごとのキュリー温度を算出する際の算出精度を向上させることができる。

図面の簡単な説明

[0021] [図1]図 1 は、解析システムのシステム構成の一例を示す第 1 の図である。

[図2A]図 2 A は、温度と磁化との関係を示す図である。

[図2B]図 2 B は、キュリー温度の算出方法の一例を示す図である。

[図3]図 3 は、磁気計算モデルの概要を説明するための図である。

[図4]図 4 は、情報処理装置のハードウェア構成の一例を示す図である。

[図5]図 5 は、情報処理装置の機能構成の一例を示す図である。

[図6]図 6 は、キュリー温度範囲算出処理の流れを示す第 1 のフローチャートである。

[図7]図 7 は、格納データの一例を示す図である。

[図8]図 8 は、粒子サイズとキュリー温度との関係を示すグラフに、粒子サイズの範囲と、キュリー温度の範囲とを重畳した様子を示す図である。

[図9A]図 9 A は、磁気計算モデルの違いに伴う算出精度の違いを示す第 1 の図である。

[図9B]図 9 B は、磁気計算モデルの違いに伴う算出精度の違いを示す第 2 の

図である。

[図10]図10は、解析システムのシステム構成の一例を示す第2の図である。

[図11]図11は、キュリー温度範囲算出処理の流れを示す第2のフローチャートである。

発明を実施するための形態

[0022] 以下、各実施形態について添付の図面を参照しながら説明する。なお、本明細書及び図面において、実質的に同一の機能構成を有する構成要素については、同一の符号を付することにより重複した説明を省略する。

[0023] [第1の実施形態]

<解析システムのシステム構成>

はじめに、第1の実施形態に係る情報処理装置を含む解析システムのシステム構成について説明する。図1は、解析システムのシステム構成の一例を示す第1の図である。図1に示すように、解析システム100によって解析される解析対象が配される対象機器は、磁気記憶装置130である。磁気記憶装置130は、熱アシスト磁気記録媒体131と、熱アシスト磁気記録媒体131を回転させるための磁気記録媒体駆動部132と、記録ヘッド133とを有する。

[0024] 符号140は、記録ヘッド133周辺の各部の位置関係を示している。符号140に示すように、記録ヘッド133は、レーザ素子141を有し、記録層143に対して近接場光142を照射する。これにより、記録層143がキュリー温度まで加熱されるため、熱アシスト磁気記録媒体131では、高い記録密度でデータを記録することが可能になる。第1の実施形態において、記録層143は、FePt磁性ナノ粒子により形成される。

[0025] 符号150は、記録層143の表面を拡大して示したものであり、白色の線で区切られた各粒子は、それぞれ、FePt磁性ナノ粒子を示している。符号150内の両矢印は、FePt磁性ナノ粒子1粒子分の粒子サイズを表している。

- [0026] 解析システム100は、磁気記憶装置130に用いられる熱アシスト磁気記録媒体131の記録層143を形成するFePt磁性ナノ粒子のキュリー温度の範囲を算出する。これにより、当該記録層143の記録品質を定量的に示すことができる。
- [0027] 具体的には、解析システム100の測定装置110が、磁気記憶装置130に用いられる熱アシスト磁気記録媒体131の記録層143を形成するFePt磁性ナノ粒子の粒子サイズを予めサンプル測定する。解析システム100の測定装置110は、サンプル測定した粒子サイズのばらつきを示す情報として、粒子サイズの中央値及び分散値を算出し、情報処理装置120に通知する。
- [0028] 解析システム100の情報処理装置120には、解析プログラムがインストールされており、当該解析プログラムが実行されることによって、情報処理装置120は、設定部121、キュリー温度算出部122、出力部123として機能する。
- [0029] 設定部121は、FePt磁性ナノ粒子1粒子分の磁気計算モデルを設定するのに必要な設定情報を取得し、磁気計算モデルを設定する。
- [0030] キュリー温度算出部122は、設定された磁気計算モデルを用いて、磁性シミュレーション処理を行い、各温度における磁気計算モデル全体の平均磁化を算出することによって、キュリー温度を算出する。
- [0031] 出力部123は、設定情報に含まれる、磁気計算モデルの粒子サイズと、算出されたキュリー温度とを対応付けて出力する。
- [0032] 具体的には、出力部123は、キュリー温度算出部122によって、粒子サイズが互いに異なる複数の磁気計算モデルそれぞれについて、キュリー温度が順次算出された場合、複数の粒子サイズと、複数のキュリー温度との関係を示すグラフを出力する。
- [0033] また、測定装置110によって、粒子サイズのばらつきを示す情報が通知されていた場合、出力部123は、粒子サイズのばらつきを示す情報に基づいて、粒子サイズの範囲を算出する。続いて、出力部123は、上記グラフ

に基づいて粒子サイズの範囲に対応するキュリー温度の範囲を算出する。これにより、出力部 1 2 3 は、粒子サイズの範囲及びキュリー温度の範囲を、上記グラフに重畳して出力することができる。

[0034] <温度と磁化との関係>

次に、磁気計算モデルを用いて算出される磁化と、温度との関係について説明する。図 2 A は、温度と磁化との関係を示す図である。図 2 A において、横軸は温度 [K] を、縦軸は平均磁化 [M] を表している。グラフ 2 1 0 は、磁気計算モデルの各温度における平均磁化を示している。

[0035] 符号 2 2 1 は、温度 = 0 [K] における磁気計算モデルの各原子の磁性を、符号 2 2 2 は、温度 = 5 0 0 [K] における磁気計算モデルの各原子の磁性を、符号 2 2 3 は、温度 6 2 0 [K] における磁気計算モデルの各原子の磁性を、それぞれ示している。なお、符号 2 2 1 ~ 符号 2 2 3 内にそれぞれ配列された球体は、1 つの原子を示しており、濃色の原子は、磁力が所定の一方方向を向いていることを表している。また、淡色の原子は、磁力が多方向を向いていることを表している。

[0036] 図 2 B は、キュリー温度の算出方法の一例を示す図である。図 2 B において、グラフ 2 3 0 は、グラフ 2 1 0 に対して、後述する数式をフィッティングした結果を示す。キュリー温度算出部 1 2 2 は、温度と平均磁化との関係をフィッティングすることによりキュリー温度を算出する。

[0037] <磁気計算モデルの概要>

次に、磁気計算モデルの概要について説明する。ここでは、まず、比較例として、キュリー温度算出部 1 2 2 によって十分な算出精度を実現することが困難な磁気計算モデルの概要について説明する。続いて、キュリー温度算出部 1 2 2 によって十分な算出精度を実現することが可能な磁気計算モデルの概要について説明する。

[0038] 図 3 は、磁気計算モデルの概要を説明するための図である。このうち、図 3 の 3 a は、比較例の磁気計算モデルを設定するまでの処理の流れを示している。

[0039] 図3の3aにおいて、符号310は、FePt磁性ナノ粒子におけるFe原子と、Pt原子の配列を示している。図3の3aにおいて、符号320は、FePt磁性ナノ粒子の磁気計算モデルを設定するにあたり、計算コストを下げるために、FePt磁性ナノ粒子内の配列を簡略化して設定した様子を示している。具体的には、図3の3aの例では、単純立方格子上にFe原子のみを配列した様子を示している。

[0040] 図3の3aにおいて、符号330は、単純立方格子上にFe原子のみが配列された、所定の粒子サイズのFePt磁性ナノ粒子1粒子分の磁気計算モデルを示している。なお、図3の3aの例では、紙面の都合上、磁気計算モデルの粒子サイズを、 $3 \times 3 \times 3$ 個の粒子サイズとしている。

[0041] 図3の3aにおいて、符号340は、設定した磁気計算モデルにおいて、隣接するFe原子間に働く交換相互作用として「J」が設定された様子を示している。ここで、従来からある磁性シミュレーション用のソフトウェアについては、例えば、ソフトウェア製作者によって下記参考文献に記載の論文が発表されている。当該論文を参照すると、FePt磁性ナノ粒子の磁気計算モデルに対しては、原子間に働く交換相互作用として、1種類の値のみが設定されることが記載されている。このため、当該論文に従えば、符号340に示すように、比較例の磁気計算モデルの場合、隣接する原子が位置する方向によらず、原子間に働く交換相互作用として、1種類の値のみが設定されることになる。

[0042] [参考文献] Binh Thanh Nguyen, Sergiu Ruta, Ondrej Hovorka, Richard F. L. Evans, Roy. W. Chantrell, "Influence of finite-size effects on the Curie temperature of L10-FePt", Phys. Rev, B106, 054421-Published 17, August 2022

<<https://doi.org/10.48550/arXiv.2207.11831>>

なお、符号340の例は、紙面の都合上、
・磁気計算モデルに含まれるFe原子のうち、符号341で示すFe原子と、符号341で示すFe原子に隣接するFe原子（符号342～符号347

)のみを示し、

- ・交換相互作用として、符号341で示すF e原子と、符号341で示すF e原子に隣接するF e原子（符号342～符号347）との間に働く交換相互作用のみを示した。

[0043] しかしながら、符号341で示すF e原子以外のF e原子についても、符号340の例と同様に、隣接するF e原子との間に働く交換相互作用として「J」が設定されるものとする。

[0044] これに対して、図3の3bは、キュリー温度算出部122によって十分な算出精度を実現することが可能な磁気計算モデルを設定するまでの流れを示している。

[0045] 図3の3bにおいて、符号310～符号330までは、図3の3aの符号310～符号330までと同じであるため、ここでは説明を省略する。

[0046] 第1の実施形態に係る情報処理装置120の設定部121の場合、原子間に働く交換相互作用として、隣接する原子が位置する方向に応じて、少なくとも2種類の異なる値を設定することができる。

[0047] 図3の3bにおいて、符号350は、磁気計算モデルにおいて、

- ・同一平面351内の隣接するF e原子（符号342～符号345）との間に働く第1交換相互作用として「J'」を設定し、
- ・同一平面351に直交する方向の隣接する位置に配列されたF e原子（符号346、符号347）との間に働く第2交換相互作用として「J''」を設定した、

様子を示している。ただし、「J'」>「J''」の関係にあるものとする。ここで、「J'」>「J''」としたのは、磁気計算モデルを設定するにあたり、簡略化のためにF e原子のみを配列する構成としたが、符号341に示すF e原子と、符号346に示すF e原子との間には、実際には、Pt原子が配置されているからである。つまり、異なる種類の原子であるPt原子が間に配置された状態でF e原子（符号346、347）との間に働く交換相互作用は、Pt原子が間に配置されていないF e原子（符号342～符号345

）との間に働く交換相互作用よりも小さくなるからである。

[0048] このように、第１の実施形態に係る情報処理装置１２０は、磁気計算モデルを設定するにあたり、

- ・単純立方格子上にＦｅ原子のみを配列することによって計算コストを削減する一方で、

- ・同一種類の原子間（Ｆｅ原子間）に働く交換相互作用を、同一平面３５１内の場合と、同一平面３５１と直交する方向の場合とで差を付けることによって、Ｐｔ原子を配列したのと同様の効果を持たせる、

構成とした。これにより、第１の実施形態に係る情報処理装置１２０によれば、キュリー温度の算出において、算出精度を向上させることが可能となった。

[0049] ＜情報処理装置のハードウェア構成＞

次に、情報処理装置１２０のハードウェア構成について説明する。図４は、情報処理装置のハードウェア構成の一例を示す図である。図４に示すように、情報処理装置１２０は、プロセッサ４０１、メモリ４０２、補助記憶装置４０３、Ｉ／Ｆ（Interface）装置４０４、通信装置４０５、ドライブ装置４０６を有する。なお、情報処理装置１２０の各ハードウェアは、バス４０７を経由することによって相互に接続される。

[0050] プロセッサ４０１は、ＣＰＵ（Central Processing Unit）、ＧＰＵ（Graphics Processing Unit）等の各種演算デバイスを有する。プロセッサ４０１は、各種プログラム（例えば、解析プログラム等）をメモリ４０２上に読み出すことによって各種プログラムを実行する。

[0051] メモリ４０２は、ＲＯＭ（Read Only Memory）、ＲＡＭ（Random Access Memory）等の主記憶デバイスを有する。プロセッサ４０１とメモリ４０２とは、いわゆるコンピュータを形成し、プロセッサ４０１が、メモリ４０２上に読み出した各種プログラムを実行することによって、当該コンピュータは各種機能を実現する。

[0052] 補助記憶装置４０３は、各種プログラムや、各種プログラムがプロセッサ

401によって実行される際に用いられる各種データを格納する。例えば、後述するデータ格納部535は、補助記憶装置403において実現される。

[0053] I/F装置404は、ユーザインタフェース装置の一例である操作装置411及び表示装置412を接続するための接続デバイスである。通信装置405は、不図示のネットワークを経由することによって外部装置と通信するための通信デバイスである。

[0054] ドライブ装置406は記録媒体413をセットするためのデバイスである。ここでいう記録媒体413には、CD-ROM、フレキシブルディスク、光磁気ディスク等のように情報を光学的、電気的あるいは磁氣的に記録する媒体が含まれる。記録媒体413には、ROM、フラッシュメモリ等のように情報を電気的に記録する半導体メモリ等が含まれていてもよい。

[0055] なお、補助記憶装置403にインストールされる各種プログラムは、例えば、配布された記録媒体413がドライブ装置406にセットされ、該記録媒体413に記録された各種プログラムがドライブ装置406により読み出されることによってインストールされる。あるいは、補助記憶装置403にインストールされる各種プログラムは、通信装置405を経由することによってネットワークからダウンロードされた場合に、インストールされてもよい。

[0056] <情報処理装置の機能構成>

次に、情報処理装置120の機能構成の詳細について説明する。図5は、情報処理装置の機能構成の一例を示す図である。

[0057] 図5に示すように、設定部121は、更に、粒子構造情報取得部511、交換相互作用情報取得部512、磁気計算モデル設定部513を有する。

[0058] 粒子構造情報取得部511及び交換相互作用情報取得部512は、磁性シミュレーション対象のFePt磁性ナノ粒子1粒子分の磁気計算モデルを特定するのに必要な設定情報を取得する。情報処理装置120が取得する設定情報には、少なくとも、原子配列情報、粒子サイズ、粒子形状、第1交換相互作用、第2交換相互作用が含まれる。

[0059] 粒子構造情報取得部 511 は、上記設定情報のうち、FePt 磁性ナノ粒子の原子配列情報、粒子サイズ、粒子形状を取得する。第 1 の実施形態に係る情報処理装置 120 は、図 3 の 3b に示した簡略化した磁気計算モデルを設定して磁性シミュレーション処理を実行する。このため、粒子構造情報取得部 511 は、例えば、

- ・原子配列情報：単純立方格子に、原子間距離 L で、Fe 原子のみを N^2 個配列

- ・粒子サイズ、粒子形状：1 辺が $(N-1) \times L$ の立方体形状を取得する。

[0060] 交換相互作用情報取得部 512 は、上記設定情報のうちの第 1 交換相互作用及び第 2 交換相互作用を取得する。図 3 の 3b において説明したとおり、第 1 の実施形態に係る情報処理装置 120 の場合、交換相互作用情報取得部 512 は、第 1 交換相互作用 = J' 、第 2 交換相互作用 = J'' （ただし、 $J' > J''$ ）を取得する。

[0061] 磁気計算モデル設定部 513 は、粒子構造情報取得部 511 及び交換相互作用情報取得部 512 が取得した各設定情報に基づいて、磁気計算モデルを特定し、キュリー温度算出部 122 に設定する。

[0062] 図 5 に示すように、キュリー温度算出部 122 は、更に、温度制御部 521、磁気計算モデル 522、平均磁化算出部 523、判定部 524 を有する。

[0063] 温度制御部 521 は、磁性シミュレーション処理中に磁気計算モデル 522 に付加する温度値を制御する。

[0064] 磁気計算モデル 522 は、磁気計算モデル設定部 513 によって設定された磁気計算モデルであり、温度制御部 521 により制御された各温度における各原子の磁性（各原子の磁気モーメントの向き、各原子の磁化の向き）を算出する。

[0065] 平均磁化算出部 523 は、磁気計算モデル 522 を用いて磁性シミュレーション処理を行うことで算出された各原子の磁化から、各温度における磁気

計算モデル全体の平均磁化、つまり、粒子全体の平均磁化を算出する。

[0066] 判定部524は、平均磁化と温度のプロットを、下式1を用いてフィッティングすることによって、キュリー温度を算出する。

[0067] [数1]

$$\text{平均磁化} = \left(1 - \frac{T}{T_C}\right)^\beta \quad \dots(\text{式1})$$

ただし、 T ：温度、 T_C ：キュリー温度、 $\beta \approx 0.34$ 。

[0068] 図5に示すように、出力部123は、更に、キュリー温度取得部531、粒子サイズ取得部532、温度範囲算出部533、グラフ化部534を有する。

[0069] キュリー温度取得部531は、キュリー温度算出部122が磁性シミュレーション処理を完了した場合に、キュリー温度算出部122からキュリー温度を取得し、データ格納部535に格納する。なお、キュリー温度取得部531は、磁性シミュレーション対象として、互いに粒子サイズの異なる複数の磁気計算モデル522について、キュリー温度を取得し、格納データとしてデータ格納部535に格納する。

[0070] 粒子サイズ取得部532は、磁気計算モデル522の粒子サイズを取得し、キュリー温度と対応付けて、格納データとしてデータ格納部535に格納する。なお、粒子サイズ取得部532は、互いに粒子サイズの異なる複数の磁気計算モデル522それぞれの粒子サイズを、磁性シミュレーション処理時に順次取得する。粒子サイズ取得部532は、キュリー温度取得部531によってキュリー温度が取得されるごとに、当該順次取得した粒子サイズを、取得されたキュリー温度と対応付けて、格納データとしてデータ格納部535に格納する。

[0071] 温度範囲算出部533は、測定装置110から通知された粒子サイズのばらつきを示す情報に基づいて、粒子サイズの範囲を算出する。具体的には、

温度範囲算出部533は、粒子サイズのばらつきを示す情報に含まれる中央値及び分散値を用いて、粒子サイズの範囲を算出する。温度範囲算出部533により算出される粒子サイズの範囲には、中央値、中央値－分散値／2、中央値＋分散値／2が含まれる。

[0072] 温度範囲算出部533は、データ格納部535に格納された、キュリー温度と粒子サイズとの複数の組み合わせに基づいて、粒子サイズの範囲に対応するキュリー温度の範囲を算出する。温度範囲算出部533により算出されるキュリー温度の範囲には、

- ・粒子サイズの中央値に対応するキュリー温度
- ・粒子サイズの中央値－分散値／2に対応するキュリー温度、
- ・粒子サイズの中央値＋分散値／2に対応するキュリー温度、

が含まれる。温度範囲算出部533は、粒子サイズの範囲と、キュリー温度の範囲とを、グラフ化部534に通知する。

[0073] グラフ化部534は、データ格納部535に格納された、キュリー温度と粒子サイズとの複数の組み合わせを読み出し、グラフを生成する。グラフ化部534は、温度範囲算出部533から通知された、粒子サイズの範囲と、キュリー温度の範囲とを、生成したグラフに重畳して出力する。

[0074] <キュリー温度範囲算出処理の流れ>

次に、解析システム100によるキュリー温度範囲算出処理の流れについて説明する。図6は、キュリー温度範囲算出処理の流れを示す第1のフローチャートである。

[0075] ステップS601において、測定装置110は、対象機器に適用されるFePt磁性ナノ粒子の粒子サイズをサンプル測定し、粒子サイズのばらつきを示す情報を算出する。情報処理装置120は、算出された粒子サイズのばらつきを示す情報を取得し、粒子サイズの範囲を算出する。

[0076] ステップS602において、情報処理装置120は、ユーザから、FePt磁性ナノ粒子の第1交換相互作用及び第2交換相互作用の入力を受け付けることによって、FePt磁性ナノ粒子の第1交換相互作用及び第2交換相

相互作用を取得する。

[0077] ステップS 6 0 3において、情報処理装置1 2 0は、ユーザから、F e P t 磁性ナノ粒子1 粒子分の磁気計算モデルの粒子構造情報として、原子配列情報、粒子サイズ、粒子形状等を取得する。

[0078] ステップS 6 0 4において、情報処理装置1 2 0は、
・ステップS 6 0 2において取得した第1 交換相互作用及び第2 交換相互作用と、
・ステップS 6 0 3において取得した粒子構造情報と、
を含む設定情報に基づいて特定されるF e P t 磁性ナノ粒子1 粒子分の磁気計算モデルを設定する。

[0079] ステップS 6 0 5において、情報処理装置1 2 0は、設定された磁気計算モデルを用いて、磁性シミュレーション処理を実行し、各温度における平均磁化を算出する。

[0080] ステップS 6 0 6において、情報処理装置1 2 0は、算出した平均磁化に基づいて、キュリー温度を算出する。

[0081] ステップS 6 0 7において、情報処理装置1 2 0は、他の粒子サイズについても磁性シミュレーション処理を実行するか否かを判定する。ステップS 6 0 7において、他の粒子サイズについても磁性シミュレーション処理を実行すると判定した場合には（ステップS 6 0 7においてY E Sの場合には）、ステップS 6 0 3に戻る。この場合、情報処理装置1 2 0は、ステップS 6 0 3において、他の粒子サイズを含む粒子構造情報を取得し、粒子サイズが互いに異なる複数の磁気計算モデルを順次設定することによって、ステップS 6 0 4～ステップS 6 0 7の処理を実行する。これにより、情報処理装置1 2 0は、各粒子サイズに対応するキュリー温度を順次算出することができる。

[0082] 一方、ステップS 6 0 7において、他の粒子サイズについて磁性シミュレーション処理を実行しないと判定した場合には（ステップS 6 0 7においてN Oの場合には）、ステップS 6 0 8に進む。

[0083] ステップS 6 0 8において、情報処理装置1 2 0は、ステップS 6 0 1において算出した粒子サイズの範囲に対応するキュリー温度の範囲を算出する。

[0084] ステップS 6 0 9において、情報処理装置1 2 0は、ステップS 6 0 3～S 6 0 7の処理を繰り返し、互いに異なる粒子サイズについて磁性シミュレーション処理を実行したことで生成された、粒子サイズとキュリー温度との組み合わせを複数取得する。情報処理装置1 2 0は、取得した粒子サイズとキュリー温度との複数の組み合わせに基づき、グラフを生成する。情報処理装置1 2 0は、生成したグラフに、ステップS 6 0 1において算出した粒子サイズの範囲と、ステップS 6 0 8において算出したキュリー温度の範囲とを重畳して出力する。

[0085] <格納データの具体例>

次に、データ格納部5 3 5に格納される格納データの具体例について説明する。図7は、格納データの一例を示す図である。

[0086] 図7に示すように、格納データ7 0 0には、情報の項目として、“粒子サイズ [nm]”と、“キュリー温度 [K]”とが含まれる。“粒子サイズ [nm]”には、粒子構造情報取得部5 1 1により順次取得された粒子構造情報に含まれる粒子サイズが格納される。“キュリー温度 [K]”には、キュリー温度算出部1 2 2により順次算出されたキュリー温度が、粒子サイズと対応付けて格納される。

[0087] <グラフの具体例>

次に、グラフ化部5 3 4により生成されるグラフの具体例について説明する。図8は、粒子サイズとキュリー温度との関係を示すグラフに、粒子サイズの範囲と、キュリー温度の範囲とを重畳した様子を示している。

[0088] 図8に示すグラフ8 0 0において、横軸は粒子サイズ [nm] を、縦軸はキュリー温度 [K] を表している。グラフ8 0 0内の符号8 0 1は、測定装置1 1 0により測定されたF e P t 磁性ナノ粒子の粒子サイズの中央値を表す。グラフ8 0 0内の符号8 0 2は、測定装置1 1 0により測定されたF e

P t 磁性ナノ粒子の粒子サイズの分散値 δD の $1/2$ を、中央値に加算または中央値から減算することによって得られた粒子サイズを表している。

[0089] グラフ 800 内の符号 811 は、粒子サイズの中央値を表す符号 801 の直線と、キュリー温度を表す曲線 820 との交点のキュリー温度を表す。グラフ 800 内の符号 812 は、粒子サイズの分散値 δD の $1/2$ を、中央値に加算または中央値から減算することによって得られた粒子サイズを表す符号 802 の直線と、キュリー温度を表す曲線 820 との交点のキュリー温度を表す。

[0090] つまり、符号 802 の直線によって囲まれた範囲は、粒子サイズの範囲を表し、符号 812 の直線によって囲まれた範囲は、キュリー温度の範囲を表す。

[0091] <算出精度の説明>

次に、設定される磁気計算モデルの違いに伴う、キュリー温度の算出精度の違いについて説明する。図 9 A は、磁気計算モデルの違いに伴う算出精度の違いを示す第 1 の図である。図 9 A に示すグラフ 900 において、横軸は粒子サイズ [nm] を、縦軸はキュリー温度 [K] を表している。

[0092] グラフ 800 内の符号 901 及び符号 902 は、

- ・単純立方格子の磁気計算モデル、
- ・粒子サイズを 12 [nm] とした場合のキュリー温度が、いずれも 750 [K] となる磁気計算モデル、

を用いて磁性シミュレーション処理を行い、各粒子サイズでのキュリー温度を算出した様子を示している。ただし、符号 901 は、図 3 の 3 a に示したように、隣接する Fe 原子間に働く交換相互作用として「J」を設定した磁気計算モデルを用いて磁性シミュレーション処理を行った場合（比較例）を示している。一方、符号 902 は、図 3 の 3 b に示したように、第 1 交換相互作用として「J'」を、第 2 交換相互作用として「J''」をそれぞれ設定した磁気計算モデルを用いて磁性シミュレーション処理を行った場合（本手法）を示している。

[0093] 符号 9 0 1 と符号 9 0 2 とを比較すると、粒子サイズが小さくなるほど、符号 9 0 2 の方が、キュリー温度の低下が大きく、符号 9 0 1 の方が、キュリー温度の低下が小さい。なお、各粒子サイズにおけるキュリー温度の実験値は、粒子サイズが小さくなった際のキュリー温度の低下が大きく、符号 9 0 2 に近い値となる。

[0094] 図 9 B は、磁気計算モデルの違いに伴う算出精度の違いを示す第 2 の図であり、

- ・ F e P t 磁性ナノ粒子を実際に加熱した際に測定された平均磁化から算出されたキュリー温度と、

- ・ 当該 F e P t 磁性ナノ粒子を再現した磁気計算モデルを用いて磁性シミュレーションを行うことにより算出された平均磁化から算出されたキュリー温度と、

を対比して示したものである。

[0095] 図 9 B の符号 9 1 0 において、“実験に用いた F e P t 磁性ナノ粒子の粒子サイズの概要”とは、実験に用いた F e P t 磁性ナノ粒子を、T E M を用いて解析し、平面方向及び断面方向の粒子サイズを集計したものである。なお、T E M とは、Transmission Electron Microscope の略称であり、透過型電子顕微鏡のことを指す。

[0096] また、図 9 B の符号 9 1 0 において、“測定データから得られたキュリー温度の概要”とは、F e P t 磁性ナノ粒子を実際に加熱した際に測定された平均磁化から算出されるキュリー温度と、キュリー温度の分散値とを指す。

[0097] 一方、図 9 B の符号 9 1 1 は、隣接する F e 原子間に働く交換相互作用として「J」を設定した磁気計算モデルを用いて磁性シミュレーション処理を行った場合（比較例）のキュリー温度の概要を示したものである。

[0098] また、図 9 B の符号 9 1 2 は、第 1 交換相互作用として「J'」を、第 2 交換相互作用として「J''」をそれぞれ設定した磁気計算モデルを用いて磁性シミュレーション処理を行った場合（本手法）のキュリー温度の概要を示したものである。

[0099] 符号 9 1 1 と符号 9 1 2 とを比較すると、符号 9 1 1 は、キュリー温度の分散値が、符号 9 1 0 のキュリー温度の分散値から外れているのに対して、符号 9 1 2 は、キュリー温度の分散値が、符号 9 1 0 のキュリー温度の分散値に含まれている。

[0100] このように、

- ・第 1 交換相互作用として「J'」が設定され、第 2 交換相互作用として「J''」が設定された磁気計算モデルを用いた場合と、
 - ・交換相互作用として「J」が設定された磁気計算モデルを用いた場合と、
- を比較すると、前者の場合の方が、キュリー温度の算出において高い算出精度を得ることができることが、図 9 A 及び図 9 B から検証された。

[0101] <まとめ>

以上の説明から明らかなように、第 1 の実施形態に係る情報処理装置 1 2 0 は、

- ・ F e P t 磁性ナノ粒子の構造を示す粒子構造情報と、F e P t 磁性ナノ粒子に含まれる F e の原子間に働く第 1 交換相互作用と、F e P t 磁性ナノ粒子内において P t が間に配置された状態での F e の原子間に働く第 2 交換相互作用とを取得する。
- ・取得した粒子構造情報と、第 1 交換相互作用と、第 2 交換相互作用とを用いて磁気計算モデルを設定する。
- ・設定した磁気計算モデルを用いて、磁性シミュレーション処理を行い、各温度における平均磁化を算出することによってキュリー温度を算出する。
- ・粒子構造情報に含まれる磁性ナノ粒子の粒子サイズと、算出されたキュリー温度との関係を示すグラフを生成し、出力する。

[0102] このように、第 1 交換相互作用と第 2 交換相互作用とが設定された磁気計算モデルを用いて磁性シミュレーション処理を行うことによって、高い算出精度のキュリー温度を算出することができる。つまり、第 1 の実施形態によれば、粒子サイズごとのキュリー温度の算出において、算出精度を向上させることができる。

[0103] [第2の実施形態]

上記第1の実施形態では、第1交換相互作用である「J'」及び第2交換相互作用である「J''」の計算方法について言及しなかったが、第1交換相互作用及び第2交換相互作用は、第一原理計算により計算されてもよい。以下、第2の実施形態について、上記第1の実施形態との相違点を中心に説明する。

[0104] <解析システムのシステム構成>

はじめに、第2の実施形態に係る情報処理装置を含む解析システムのシステム構成について説明する。図10は、解析システムのシステム構成の一例を示す第2の図である。上記第1の実施形態において図1を用いて説明したシステム構成との相違点は、解析システム1000の場合、情報処理装置1010を備える点である。

[0105] 情報処理装置1010には、第一原理計算プログラムがインストールされており、当該プログラムが実行されることによって、情報処理装置1010は、第一原理計算部1011として機能する。

[0106] 第一原理計算部1011には、FePt磁性粒子結晶に関する情報が入力される。これにより、第一原理計算部1011は、第一原理計算によって、FePt磁性ナノ粒子の第1交換相互作用及び第2交換相互作用を計算することができる。

[0107] 例えば、第一原理計算部1011は、第1交換相互作用として、 $J' = 9.54 \times 10^{-21} \text{ [J/link]}$ を、第2交換相互作用として、 $J'' = 0.90 \times 10^{-21} \text{ [J/link]}$ を計算することができる。

[0108] なお、第一原理計算部1011により計算された第1交換相互作用及び第2交換相互作用は、情報処理装置120に入力される設定情報の一部として用いられる。

[0109] <キュリー温度範囲算出処理の流れ>

次に、解析システム1000によるキュリー温度範囲算出処理の流れについて説明する。図11は、キュリー温度範囲算出処理の流れを示す第2のフ

ローチャートである。上記第1の実施形態において、図5を用いて説明したフローチャートとの相違点は、ステップS1101～S1103である。

[0110] ステップS1101において、情報処理装置1010は、FePt磁性粒子結晶に関する情報の入力を受け付ける。

[0111] ステップS1102において、情報処理装置1010は、第一原理計算によって、結晶構造を最適化する。

[0112] ステップS1103において、情報処理装置1010は、第一原理計算によって、FePt磁性ナノ粒子の第1交換相互作用及び第2交換相互作用を算出する。

[0113] <まとめ>

以上の説明から明らかなように、第2の実施形態に係る情報処理装置120は、

- ・第1の実施形態に係る情報処理装置120と同様の機能を有する。
- ・第1交換相互作用と第2交換相互作用とを取得する際、情報処理装置1010を用いて第一原理計算により計算された第1交換相互作用及び第2交換相互作用を取得する。

[0114] これにより、第2の実施形態に係る情報処理装置120によれば、粒子サイズごとのキュリー温度の算出において、算出精度を更に向上させることができる。

[0115] [その他の実施形態]

上記各実施形態では、ユーザが粒子サイズを変更するごとに、キュリー温度算出部122がキュリー温度を算出する構成とした。しかしながら、粒子サイズの設定方法はこれに限定されず、例えば、磁性シミュレーション対象となる磁気計算モデルの粒子サイズとして、複数の粒子サイズをまとめて設定するように構成してもよい。このとき、キュリー温度算出部122は、設定された複数の粒子サイズについて、順次、キュリー温度を算出するように構成してもよい。

[0116] なお、設定部121は、複数の粒子サイズそれぞれの入力を受け付けるよ

うに構成されていてもよいし、複数の粒子サイズの最大値と、最小値と、刻み幅の入力を受け付けるように構成されていてもよい。このときの粒子サイズの最大値と最小値は、例えば、粒子サイズの範囲に基づいて決定されてもよい。

[0117] また、上記各実施形態において、情報処理装置 120 は、記録層 143 の記録品質を定量的に示すことを目的として、キュリー温度の範囲を出力するものとして説明した。しかしながら、情報処理装置 120 によって出力されるキュリー温度の範囲の利用方法はこれに限定されない。

[0118] 例えば、設定情報に含まれる粒子形状を変更し、それぞれの粒子形状におけるキュリー温度の範囲を算出することによって、FePt 磁性ナノ粒子の最適な粒子形状を探索するのに用いてもよい。ここでいう粒子形状には、例えば、四角柱、円柱、六角柱などが含まれる。

[0119]あるいは、FePt 磁性ナノ粒子以外の磁性ナノ粒子を特定する設定情報を入力し、それぞれの種類の磁性ナノ粒子のキュリー温度の範囲を算出することによって、最適な磁性ナノ粒子を探索するのに用いてもよい。

[0120] また、上記第2の実施形態では、情報処理装置 1010 と情報処理装置 120 とを別体として構成したが、情報処理装置 1010 と情報処理装置 120 とは、一体として構成されてもよい。

[0121] なお、上記実施形態に挙げた構成等に、その他の要素との組み合わせ等、ここで示した構成に本発明が限定されるものではない。これらの点に関しては、本発明の趣旨を逸脱しない範囲で変更することが可能であり、その応用形態に応じて適切に定めることができる。

[0122] 本出願は、2023年11月28日に出願された日本国特許出願第2023-200999号に基づきその優先権を主張するものであり、同日本国特許出願の全内容を参照することにより本願に援用する。

符号の説明

[0123] 100 : 解析システム
110 : 測定装置

1 2 0	: 情報処理装置
1 2 1	: 設定部
1 2 2	: キュリー温度算出部
1 2 3	: 出力部
5 1 1	: 粒子構造情報取得部
5 1 2	: 交換相互作用情報取得部
5 1 3	: 磁気計算モデル設定部
5 2 1	: 温度制御部
5 2 2	: 磁気計算モデル
5 2 3	: 平均磁化算出部
5 3 1	: キュリー温度取得部
5 3 2	: 粒子サイズ取得部
5 3 3	: 温度範囲算出部
5 3 4	: グラフ化部
8 0 0	: グラフ
1 0 1 0	: 情報処理装置
1 0 1 1	: 第一原理計算部

請求の範囲

- [請求項1] 磁性ナノ粒子の構造を示す粒子構造情報と、前記磁性ナノ粒子内において隣接する同一種類の原子間に働く第1交換相互作用と、前記磁性ナノ粒子内において異なる種類の原子が間に配置された状態での同一種類の原子間に働く第2交換相互作用とを取得し、磁気計算モデルを設定する設定部と、
- 設定された前記磁気計算モデルを用いて、各温度における磁化を算出することによって、キュリー温度を算出する算出部と、
- 前記粒子構造情報に含まれる前記磁性ナノ粒子の粒子サイズと、算出された前記キュリー温度とを対応付けて出力する出力部と
- を有する情報処理装置。
- [請求項2] 前記粒子構造情報には、更に、前記磁性ナノ粒子に含まれる原子の配列を示す原子配列情報が含まれる、請求項1に記載の情報処理装置。
- [請求項3] 前記設定部は、
- 前記第1交換相互作用として、前記原子配列情報に基づいて配列される原子のうち、同一平面において隣接する原子との間に働く交換相互作用を取得し、
- 前記第2交換相互作用として、前記原子配列情報に基づいて配列される原子のうち、前記同一平面に直交する方向において同一種類の原子間に働く交換相互作用を取得する、請求項2に記載の情報処理装置。
- [請求項4] 前記設定部によって、前記磁性ナノ粒子の粒子サイズが互いに異なる複数の前記磁気計算モデルが順次設定され、前記算出部によって、キュリー温度が順次算出された場合、前記出力部は、所定の粒子サイズの範囲に対応するキュリー温度の範囲を算出する、
- 請求項1に記載の情報処理装置。
- [請求項5] 前記出力部は、複数の前記磁性ナノ粒子の粒子サイズと、算出され

た複数の前記キュリー温度との関係を示すグラフを出力する、請求項4に記載の情報処理装置。

[請求項6] 前記出力部は、前記グラフに、前記粒子サイズの範囲と、前記キュリー温度の範囲とを重畳して出力する、請求項5に記載の情報処理装置。

[請求項7] 前記粒子サイズの範囲は、粒子サイズの中央値と、分散値とに基づいて特定される、請求項4に記載の情報処理装置。

[請求項8] 前記磁性ナノ粒子は、FePt磁性ナノ粒子である、請求項1乃至7のいずれか1項に記載の情報処理装置。

[請求項9] 前記第1交換相互作用は、Fe原子間に働く交換相互作用であり、前記第2交換相互作用は、Pt原子が間に配置された状態でのFe原子間に働く交換相互作用である、請求項8に記載の情報処理装置。

[請求項10] 前記第1交換相互作用及び前記第2交換相互作用は、第一原理計算により算出される、請求項1乃至9のいずれか1項に記載の情報処理装置。

[請求項11] コンピュータが、
磁性ナノ粒子の構造を示す粒子構造情報と、前記磁性ナノ粒子内において隣接する同一種類の原子間に働く第1交換相互作用と、前記磁性ナノ粒子内において異なる種類の原子が間に配置された状態での同一種類の原子間に働く第2交換相互作用とを取得し、磁気計算モデルを設定する工程と、

設定された前記磁気計算モデルを用いて、各温度における磁化を算出することによって、キュリー温度を算出する工程と、

前記粒子構造情報に含まれる前記磁性ナノ粒子の粒子サイズと、算出された前記キュリー温度とを対応付けて出力する工程と
を実行する解析方法。

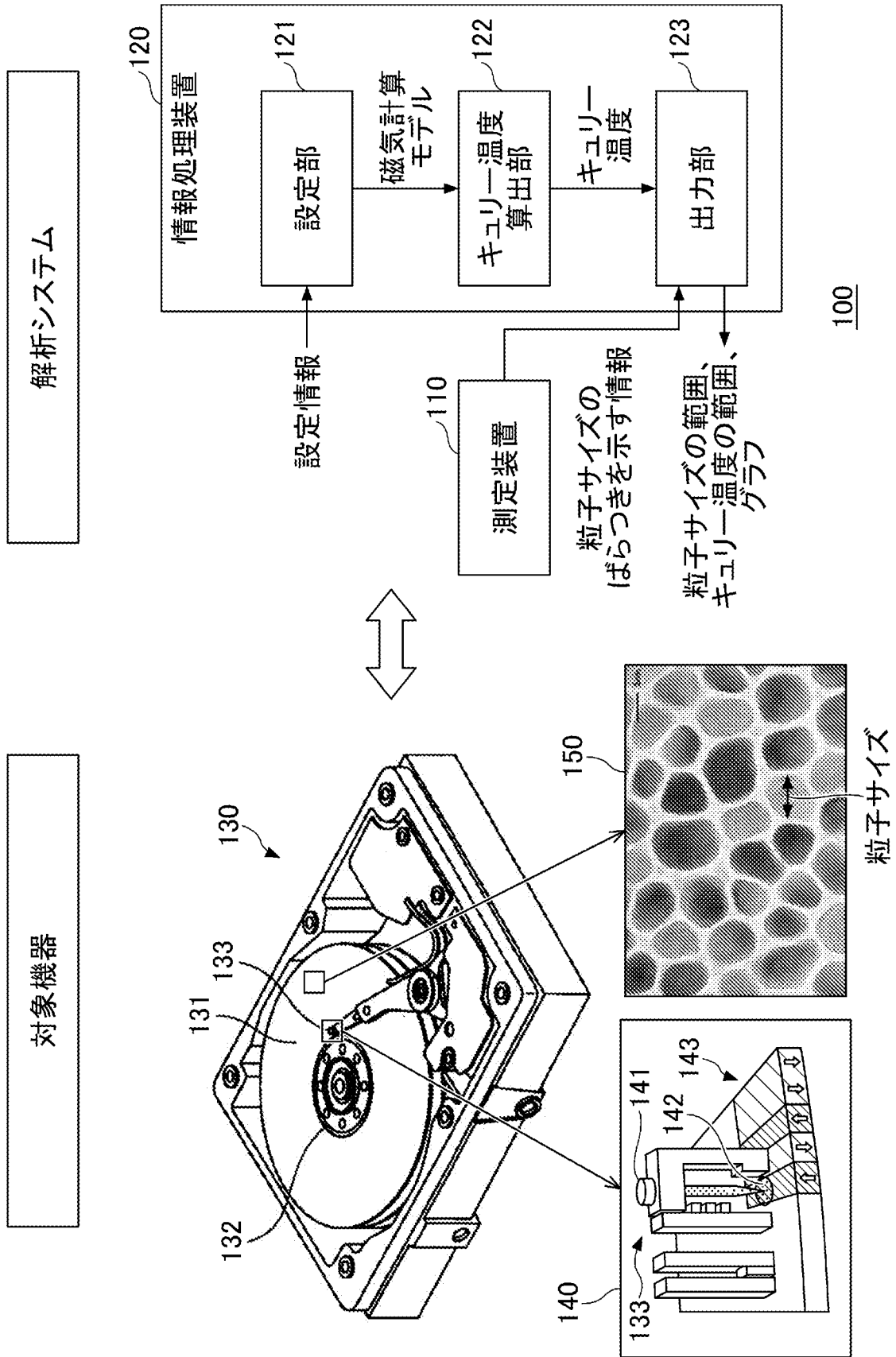
[請求項12] コンピュータに、
磁性ナノ粒子の構造を示す粒子構造情報と、前記磁性ナノ粒子内に

において隣接する同一種類の原子間に働く第1交換相互作用と、前記磁性ナノ粒子内において異なる種類の原子が間に配置された状態での同一種類の原子間に働く第2交換相互作用とを取得し、磁気計算モデルを設定する工程と、

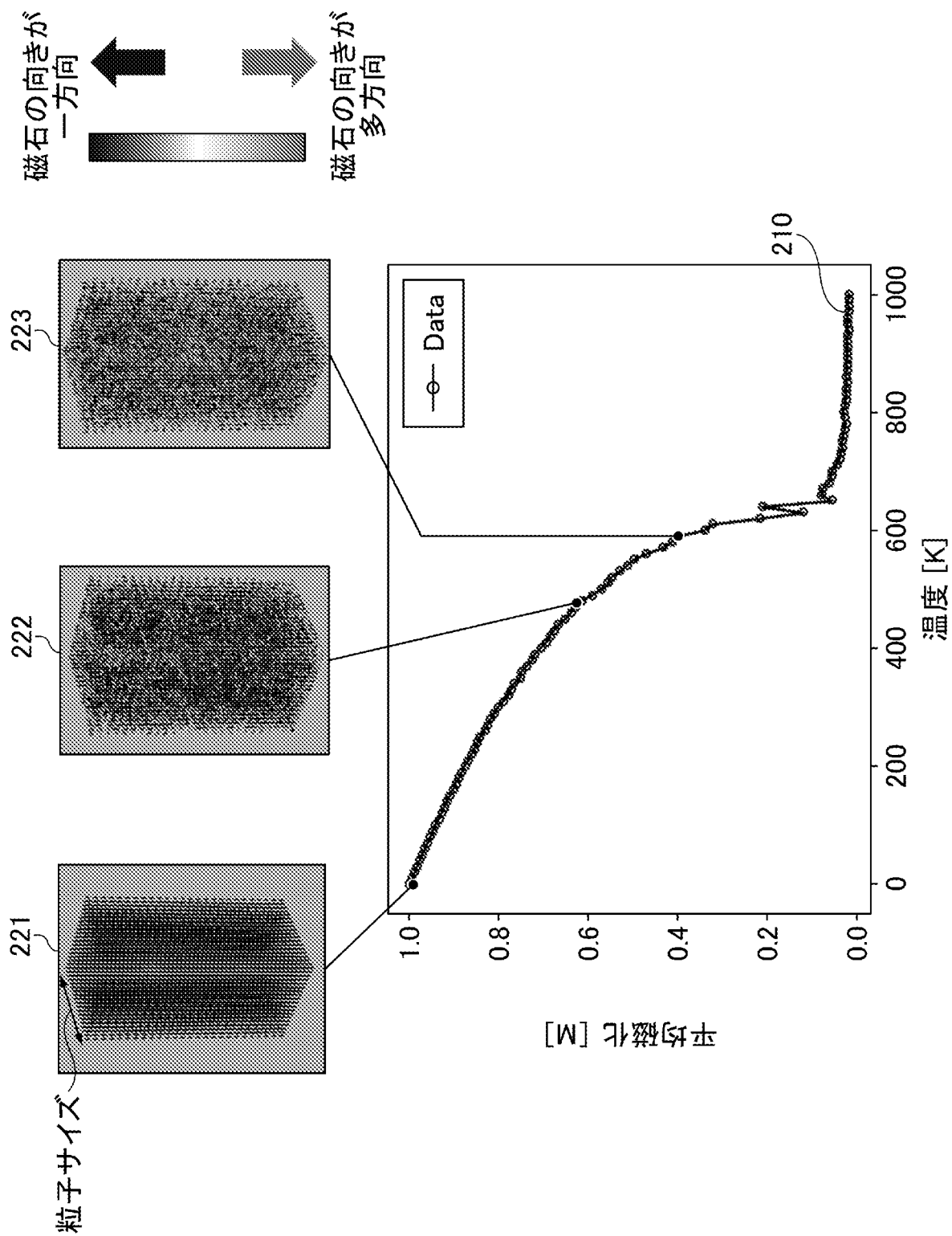
設定された前記磁気計算モデルを用いて、各温度における磁化を算出することによって、キュリー温度を算出する工程と、

前記粒子構造情報に含まれる前記磁性ナノ粒子の粒子サイズと、算出された前記キュリー温度とを対応付けて出力する工程と
を実行させる解析プログラム。

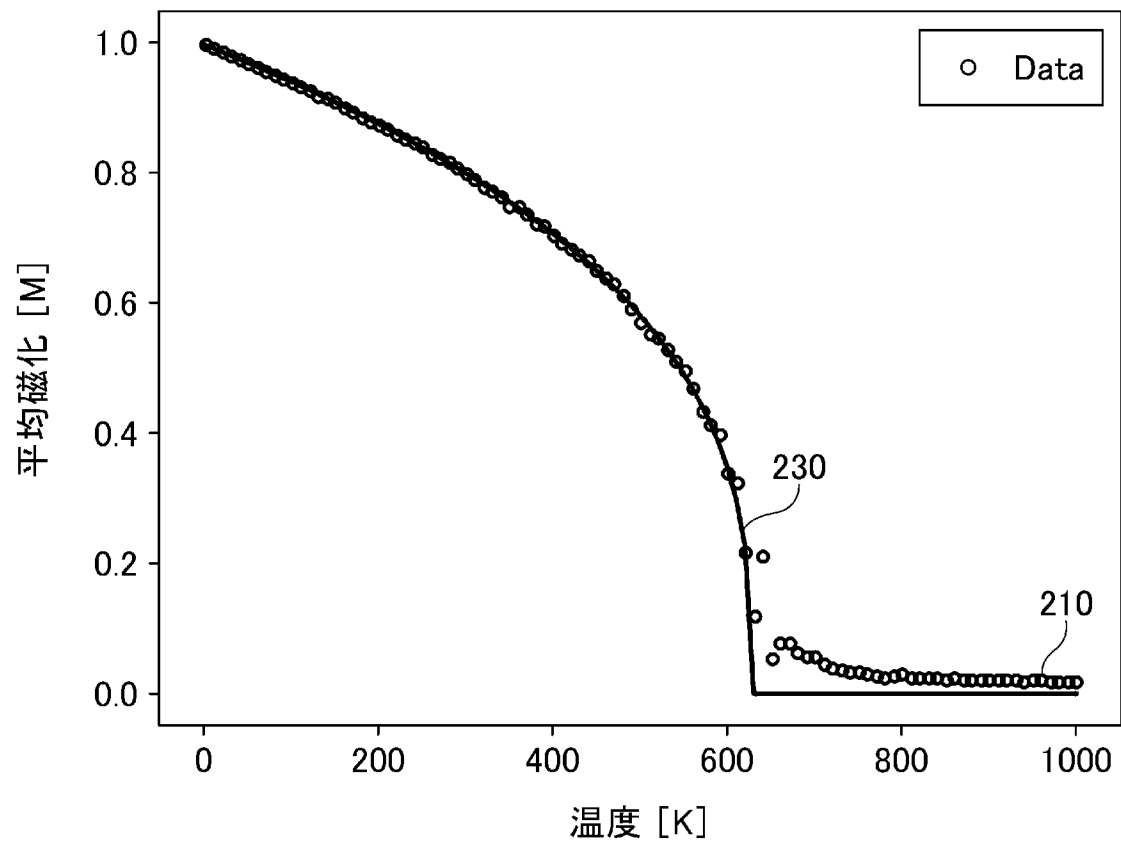
[図1]



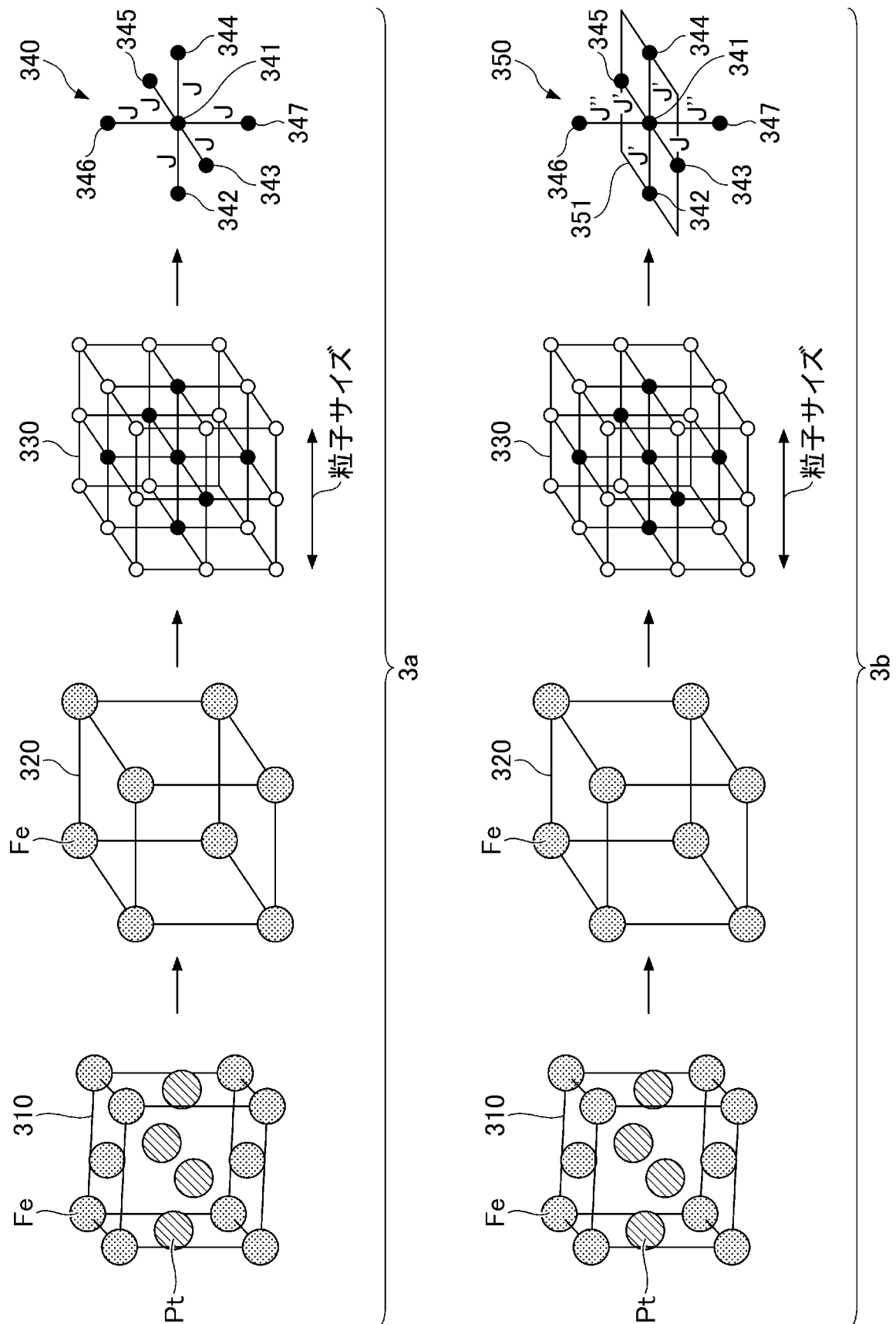
[図2A]



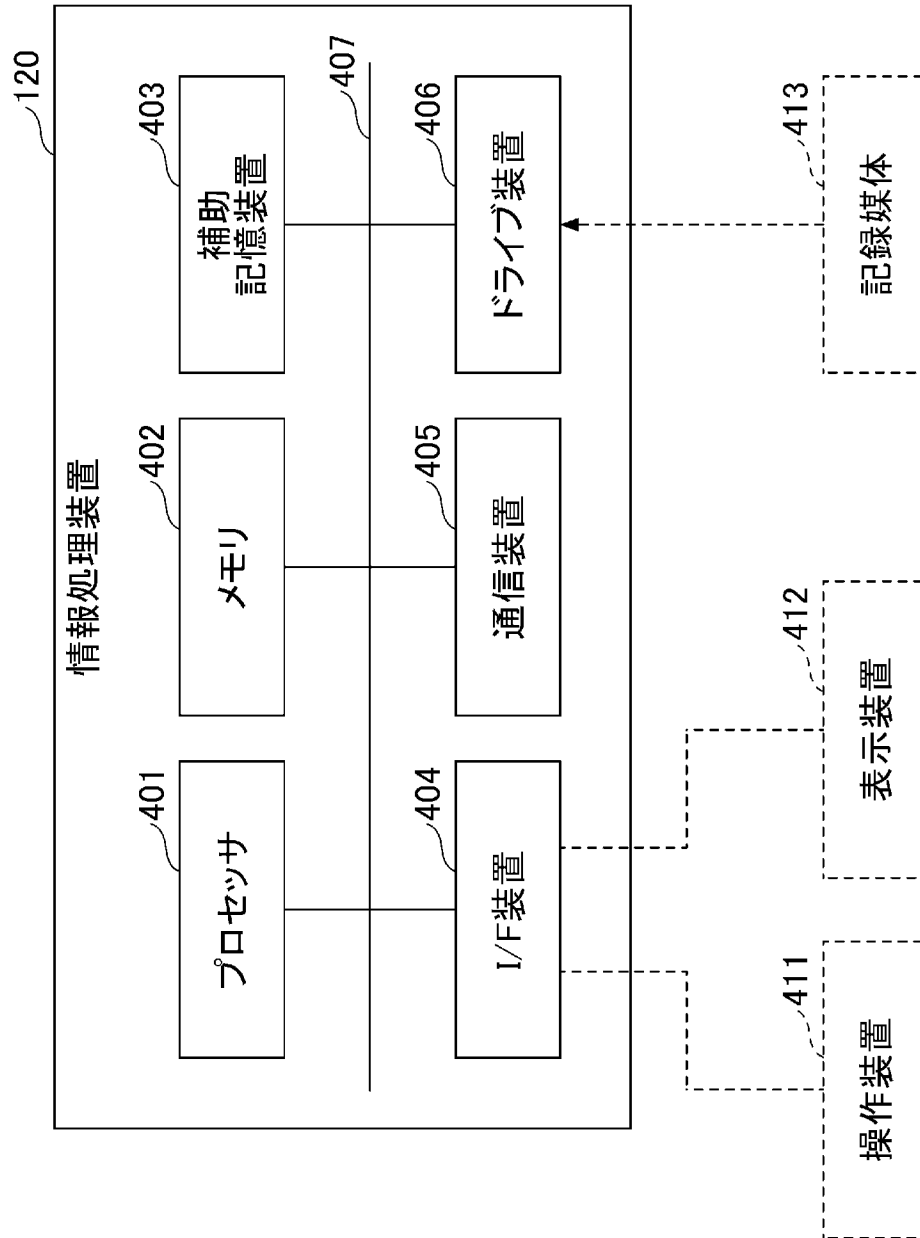
[図2B]



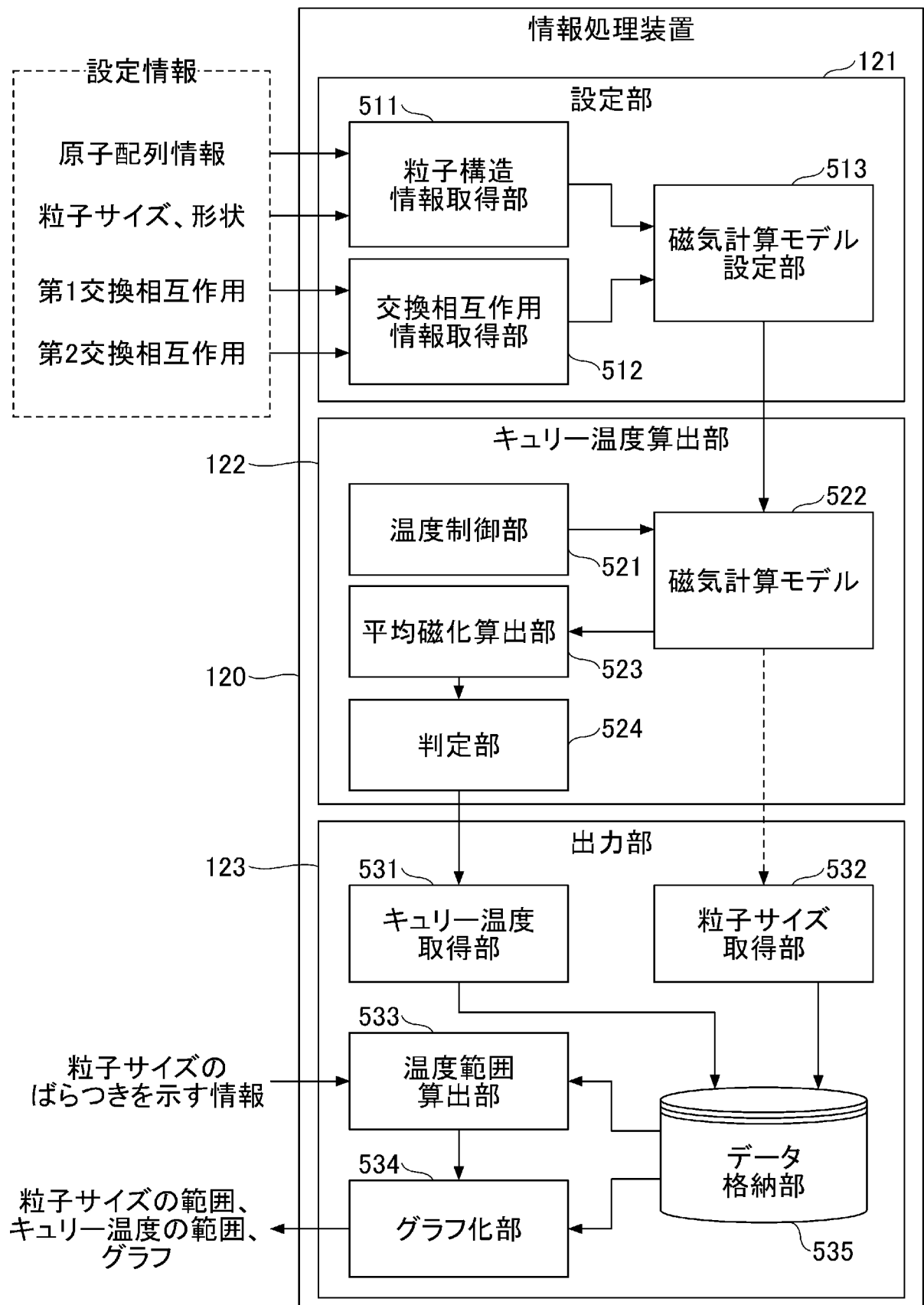
[図3]



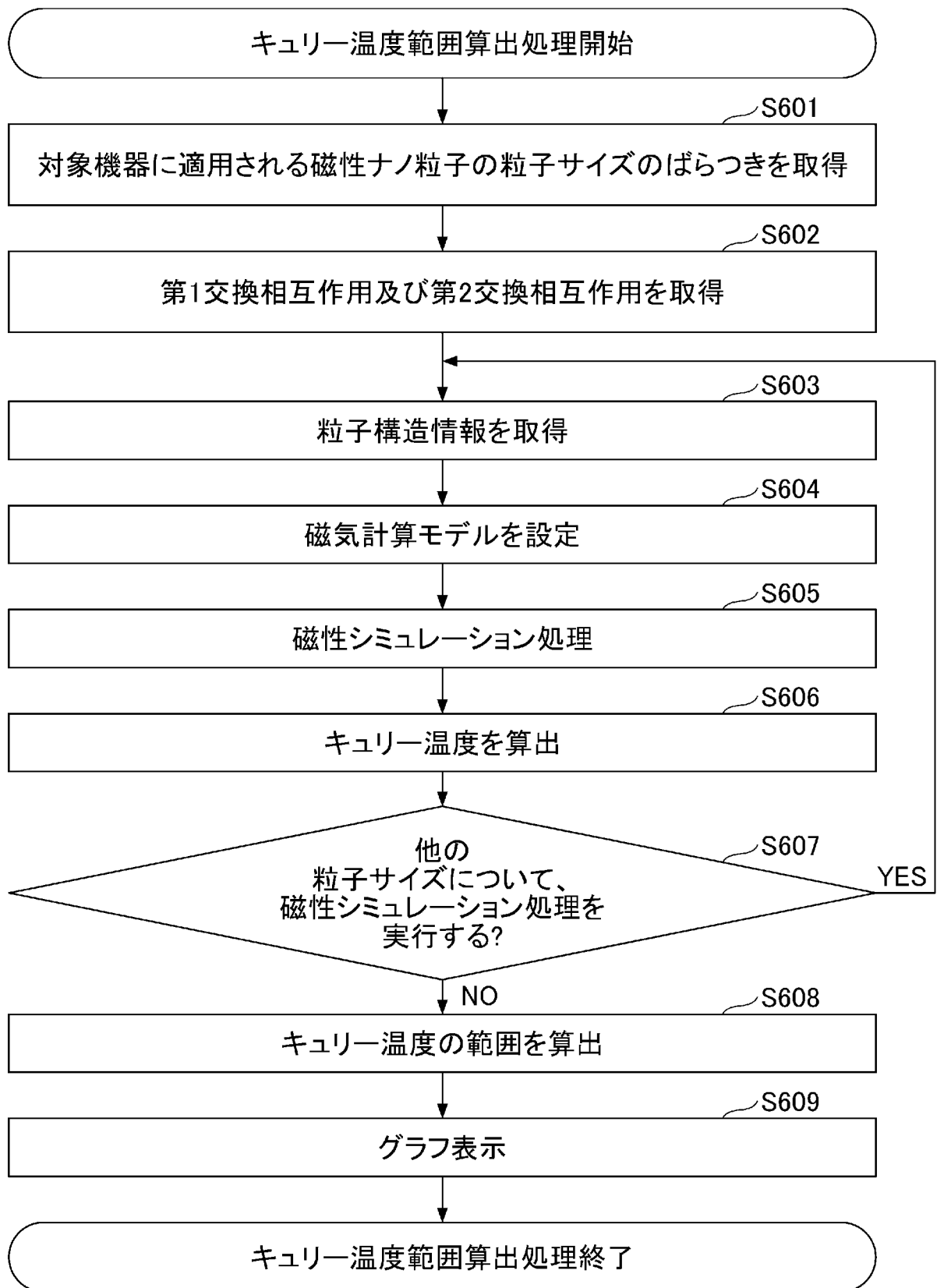
[図4]



[図5]



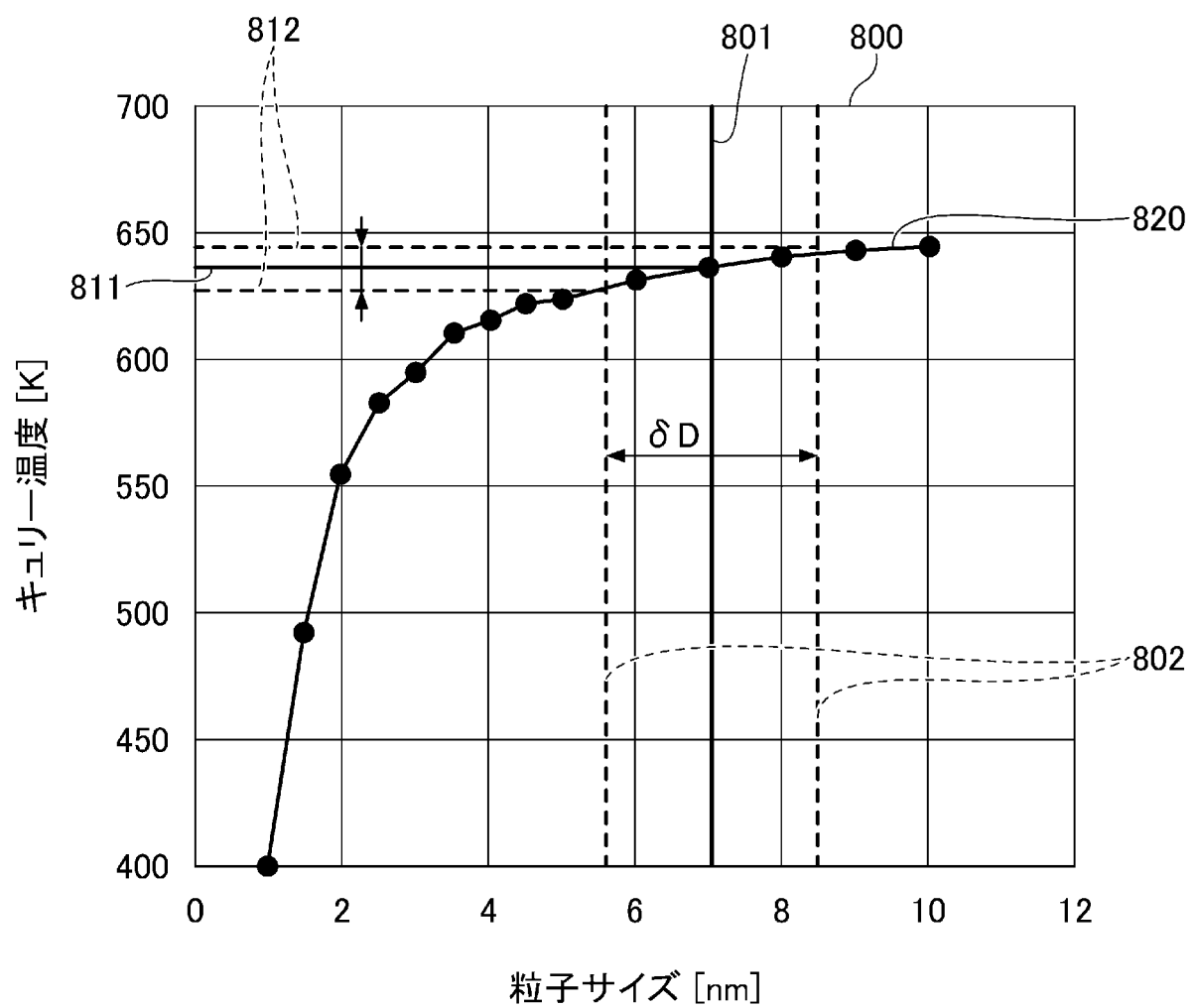
[図6]



700

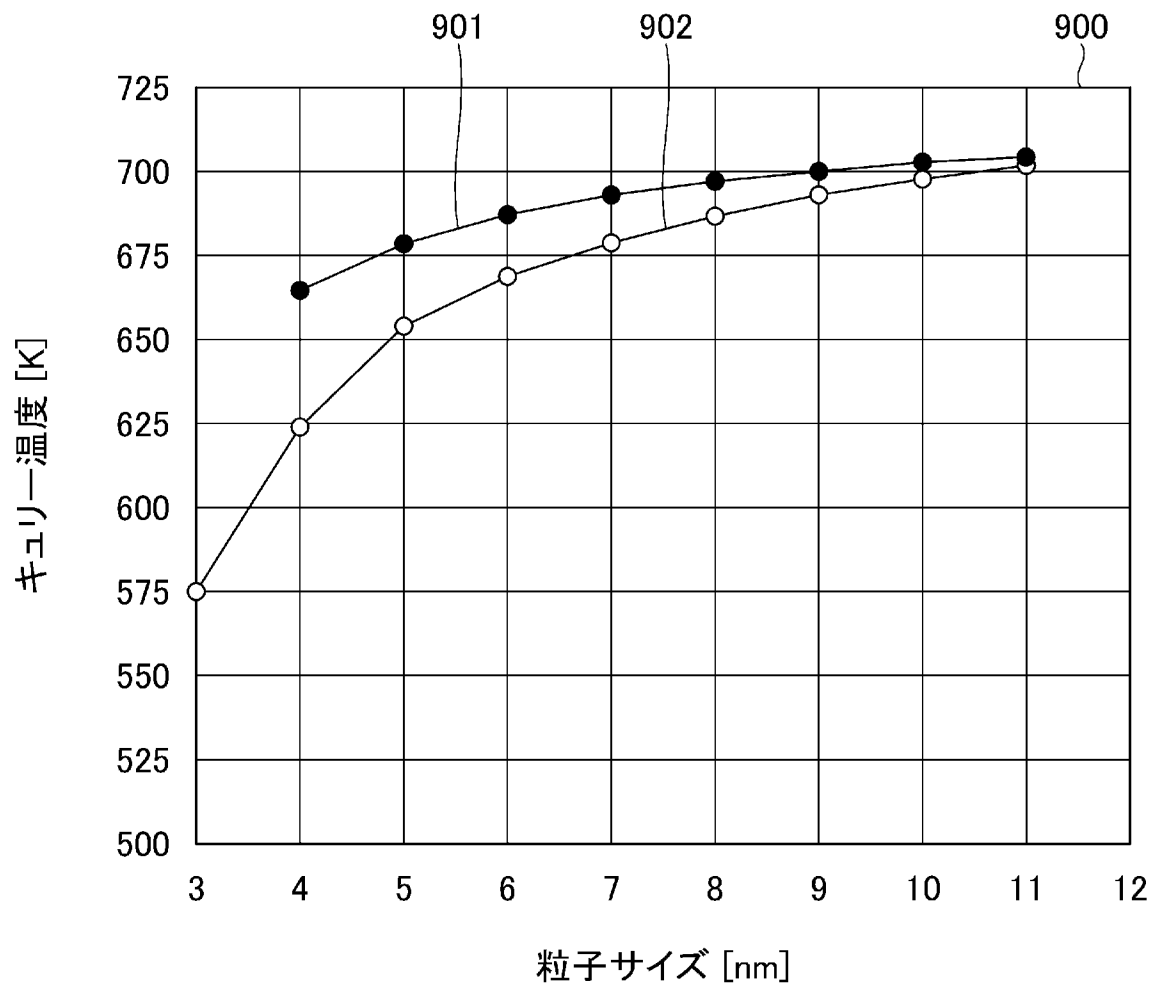
[illegible]

[図8]



δD : 粒子サイズの分散値

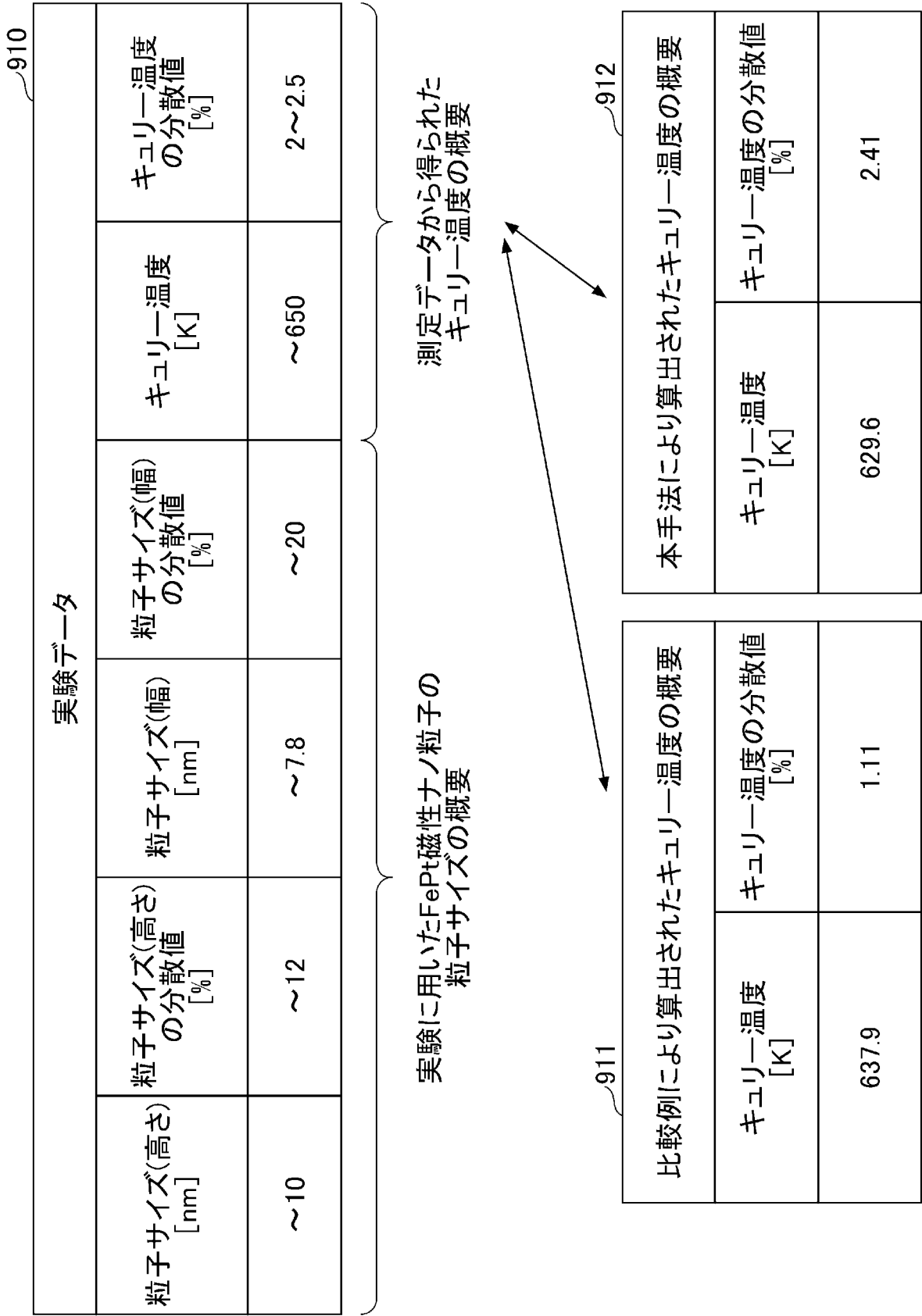
[図9A]



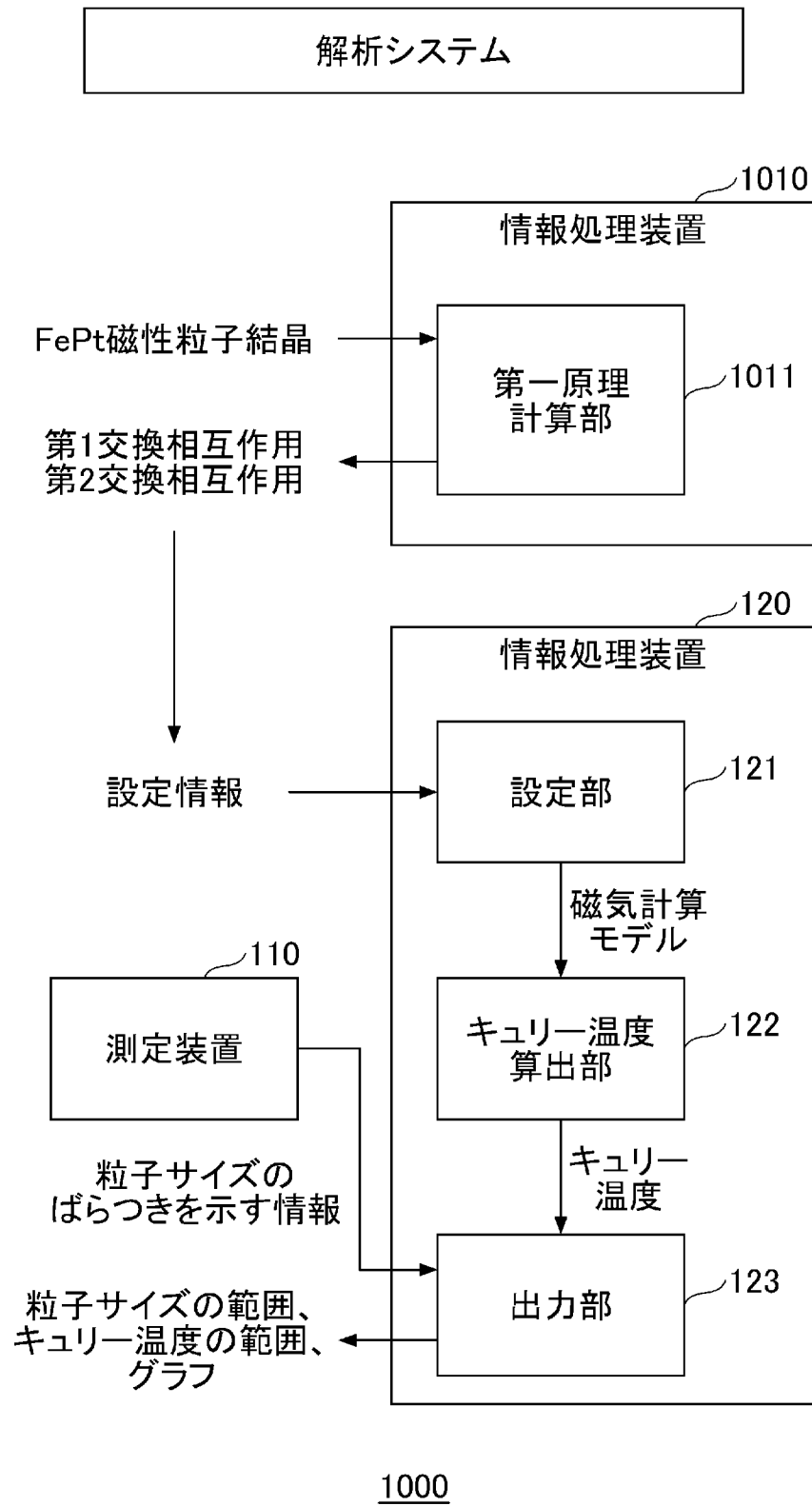
—○— 本手法

—●— 比較例

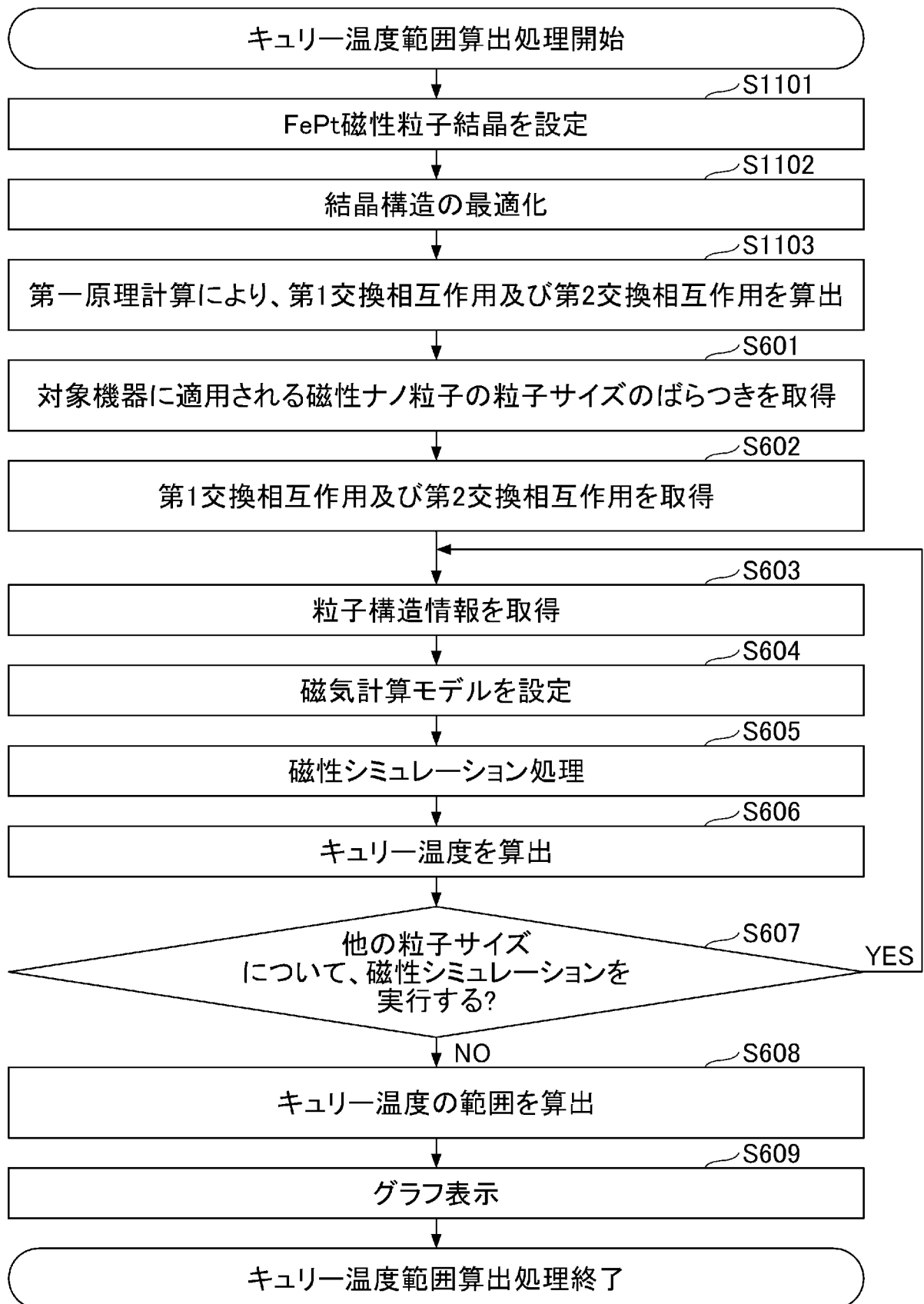
[図9B]



[図10]



[図11]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2024/041337

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER*G11B 5/84*(2006.01)i; *G11B 5/02*(2006.01)i; *G11B 5/64*(2006.01)i

FI: G11B5/84 C; G11B5/02 S; G11B5/64

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

G11B5/84; G11B5/02; G11B5/64

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996

Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2025

Registered utility model specifications of Japan 1996-2025

Published registered utility model applications of Japan 1994-2025

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	NGUYEN, Thanh Binh et al. Influence of finite-size effects on the Curie temperature of L10-FePt. ResearchGate. 24 July 2023, pp. 1, 3-4, [online], [retrieved on 08 January 2025], Retrieved from the Internet:<URL: https://www.researchgate.net/publication/362248611_Influence_of_the_Finite-size_Effects_on_the_Curie_Temperature_of_L10-FePt >, <DOI: 10.48550/arXiv.2207.11831> pp. 3-4, III. RESULTS AND DISCUSSION, fig. 3	1-12
A	US 2016/0358622 A1 (HGST NETHERLANDS B.V.) 08 December 2016 (2016-12-08) paragraphs [0055]-[0058], fig. 11-13	1-12
A	JP 2022-112850 A (SUMITOMO HEAVY INDUSTRIES, LTD.) 03 August 2022 (2022-08-03) paragraphs [0007], [0041], [0053]-[0054], fig. 7	1-12



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

“D” document cited by the applicant in the international application

“E” earlier application or patent but published on or after the international filing date

“L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

“O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

“P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

“X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

“Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

“&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

29 January 2025

Date of mailing of the international search report

10 February 2025

Name and mailing address of the ISA/JP

Japan Patent Office (ISA/JP)
3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915
Japan

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/JP2024/041337

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
US	2016/0358622	A1	08 December 2016	(Family: none)	
JP	2022-112850	A	03 August 2022	US 2022/0237346 A1 paragraphs [0004]-[0010], [0080], [0092]-[0093], fig. 7	

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC））

G11B 5/84(2006.01)i; G11B 5/02(2006.01)i; G11B 5/64(2006.01)i

FI: G11B5/84 C; G11B5/02 S; G11B5/64

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC））

G11B5/84; G11B5/02; G11B5/64

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報

1922 - 1996年

日本国公開実用新案公報

1971 - 2025年

日本国実用新案登録公報

1996 - 2025年

日本国登録実用新案公報

1994 - 2025年

国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
A	NGUYEN THANH BINH et al., Influence of finite-size effects on the Curie temperature of L10-FePt, ResearchGate, 2023.07.24, p.1, 3-4, [online], [retrieved on 2025.01.08], Retrieved from the Internet:<URL:https://www.researchgate.net/publication/362248611_Influence_of_the_Finite-size_Effects_on_the_Curie_Temperature_of_L10-FePt>, <DOI: 10.48550/arXiv.2207.11831> pages.3-4, III.RESULTS AND DISCUSSION, Fig.3	1-12
A	US 2016/0358622 A1 (HGST NETHERLANDS B.V.) 08.12.2016 (2016 - 12 - 08) paragraphs [0055]-[0058], Figs.11-13	1-12
A	JP 2022-112850 A (住友重機械工業株式会社) 03.08.2022 (2022 - 08 - 03) 段落[0007], [0041], [0053]-[0054], 図7	1-12

☐ C欄の続きにも文献が列挙されている。

☒ パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー

“A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの

“D” 国際出願で出願人が先行技術文献として記載した文献

“E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの

“L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）

“O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献

“P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献

“T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの

“X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの

“Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの

“&” 同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日

29.01.2025

国際調査報告の発送日

10.02.2025

名称及びあて先

日本国特許庁(ISA/JP)

〒100-8915

日本国

東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

権限のある職員（特許庁審査官）

川中 龍太 5C 5892

電話番号 03-3581-1101 内線 3539

様式 PCT/ISA/210（第2ページ）（2022年7月）

国際調査報告
パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2024/041337

引用文献			公表日	パテントファミリー文献	公表日
US	2016/0358622	A1	08.12.2016	(ファミリーなし)	
JP	2022-112850	A	03.08.2022	US 2022/0237346 A1 paragraphs [0004]-[0010], [0080], [0092]-[0093], Fig.7	