

	えんどうしんいち
氏名	遠藤新一
授与学位	博士(工学)
学位授与年月日	平成15年3月24日
学位授与の根拠法規	学位規則第4条第1項
研究科, 専攻の名称	東北大学大学院工学研究科(博士課程)応用物理学専攻
学位論文題目	磁気双極子相互作用と超薄膜磁性体の磁気構造
指導教官	東北大学教授 松原 史卓
論文審査委員	主査 東北大学教授 松原 史卓 東北大学教授 宮崎 照宣 東北大学教授 島田 寛 東北大学助教授 佐々木一夫 東北大学助教授 村山 明宏

論文内容要旨

近年のエピタキシャル結晶技術の進歩により、膜厚が数原子層の超薄膜磁性体の作製が可能となった。超薄膜磁性体では、膜厚を大きくすると磁化方向が膜面に垂直から平行に変わるスピン再配列転移が観測される。このスピン再配列転移は温度を上昇させたときにも観測され、スピン再配列転移点近傍では磁化が消失する擬ギャップの存在が見出されている。この擬ギャップにおいては、強磁性長距離秩序が消失する可能性と複雑な磁区構造が実現される可能性が指摘されているが、決定的な結論は得られていない。また、超薄膜磁性体においても磁区構造が観測され、膜厚や温度の変化に伴って様々な様相を示す。

スピン再配列転移は表面磁気異方性と磁気双極子相互作用の競合によって起こると理論的に予言され、スピンハミルトニアンに基づいたモンテカルロシミュレーションによってその妥当性が示されてきた。しかし、これまで行われてきた理論的研究には大きな問題点がある。それは取り扱われてきた格子が2次元系に限られていることである。実際の超薄膜磁性体は単原子層ではなく数原子層の膜厚をもち、それがスピン再配列転移や磁区構造に様々な影響を与えている。したがって、超薄膜磁性体における膜厚の効果を明らかにするためには、モデルに3次元性を取り入れることが必要不可欠である。また、実験的研究のみならず理論的研究においても、どうして擬ギャップが生じるのかは依然として明らかになっていない。

本研究は、表面磁気異方性と磁気双極子相互作用を取り入れた積層強磁性体の大規模シミュレーションを実行し、

- (1) 超薄膜磁性体の磁気秩序の膜厚・温度依存性
- (2) 超薄膜磁性体の磁区構造の特徴
- (3) 超薄膜磁性体における原子配列の乱れの効果

を明らかにすることを目的とする。

超薄膜磁性体のモデルとして、 $L \times L$ の 2 次元正方格子を L_z 層積み重なった 3 次元格子上の古典ハイゼンベルグスピン系を考える。モデルのハミルトニアンは

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_i K_i (S_i^z)^2 + D \sum_{i \neq j} \left\{ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right\} + \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\alpha \neq \beta} A_{ij}^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_j^\beta$$

で与えられる。ここで、 \vec{S}_i は大きさ 1 のハイゼンベルグスピン、 \vec{r}_{ij} は大きさ r_{ij} のサイト i, j 間の相対位置ベクトル、 $\langle ij \rangle$ は最隣接スピン対を表し、 α, β は x, y, z のいずれかをとる。

上式の第 1 項は交換相互作用、第 2 項は一軸磁気異方性を表し、表面層と界面層では $K_i = K_s$ 、内部層では $K_i = 0$ とする。第 3 項は磁気双極子相互作用、第 4 項はランダム磁気異方性を表し、 $A_{ij}^{\alpha\beta}$ は $A_{ij}^{\alpha\beta} = A_{ji}^{\beta\alpha} = A_{ji}^{\alpha\beta}$ の対称型で、 $[-A, A]$ のランダムな値をとると仮定する。本研究では、原子配列の乱れによって各スピンには不均一な磁気異方性が生じると考え、これをランダム磁気異方性として取り入れた。用いた相互作用パラメータは J を基準とした $K_s = J, D = 0.05J$ である。シミュレーションには双極子場不連続更新モンテカルロ法 (DUDMC 法) を採用した。

はじめに、超薄膜磁性体の磁気秩序および磁区構造の積層効果を調べるために、熱平衡シミュレーションを実行した。その結果、2 次元強磁性体では見られない新しい磁区構造が観測され、超薄膜磁性体の磁気秩序は膜厚に大きく依存することが分かった。膜厚が小さい場合 ($L_z = 3$) と大きい場合 ($L_z = 5$) における比熱、磁化の温度変化をそれぞれ図 1、図 2 に示す。膜厚が小さいとき、比熱には高温 T_1 で幅の広いピーク、低温 T_2 でスパイク状のピークが現れ、面内磁化は全温度領域で発生しない。このとき、図 3 に示すように、膜面に垂直な方向には磁区が形成され、温度 T_1 以下ではバブル型、温度 T_2 以下ではストライプ型になる。一方、膜厚が大きいとき、比熱において温度 T_c で鋭いピークが現れ、膜面に平行な方向に面内磁化が発生する。温度を下げると比熱は温度 T_R で肩状のピークを示し、面内磁化は飽和する。温度 T_R 以下では膜面に垂直な方向にひも状の磁区が形成される。このひも状の磁区は温度を下げるにつれ直線的になり、低温では面内磁化の方向に沿ったス

トライブ磁区になる。したがって、厚い膜における低温相はスピンの面内成分による強磁性秩序とスピンの面直成分によるストライプ秩序の共存で特徴づけられる。以上の結果から熱平衡状態における膜厚—温度相図を得た。磁区構造の形状はスピンの面内成分の秩序形態に大きく依存していることが分かった。

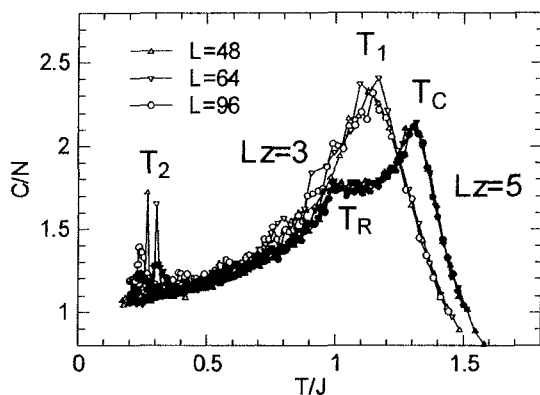


図 1 : 比熱 C の温度依存性。

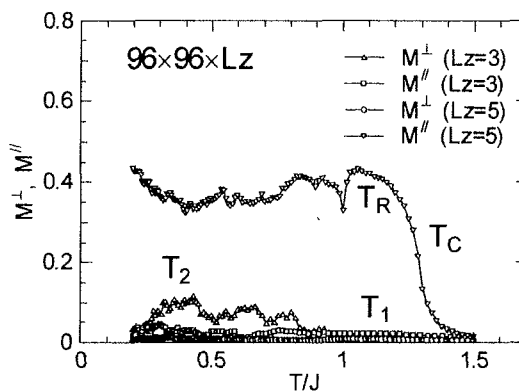


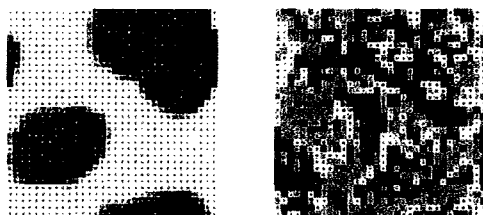
図 2 : 面直磁化 M^\perp 、面内磁化 M^\parallel の温度依存性。

膜厚 $L_z = 3$

膜厚 $L_z = 5$

(a) 温度 $T=0.73J$

(c) 温度 $T=1.09J$



(b) 温度 $T=0.30J$

(d) 温度 $T=0.62J$

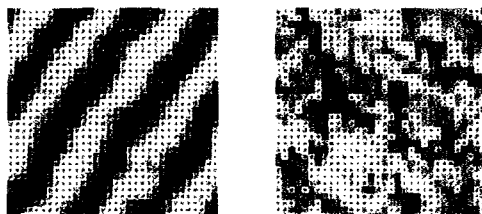
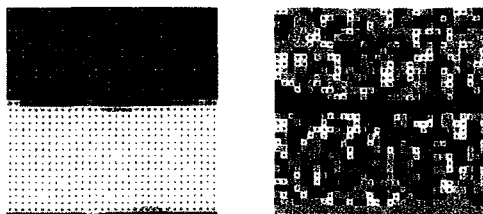


図 3 : 磁区構造のスナップショットの温度依存性。矢印は同じ膜面上の 9 スピンの平均値。図(a)~(d)における左図はスピンの面直成分を明暗で、右図はスピンの面内成分を色調と矢印で示した。平面格子サイズは $L = 96$ 。

次に、ランダム磁気異方性を取り入れたモデルについて、面直強磁性状態から温度を上げるシミュレーションを実行した。ランダム磁気異方性の効果は膜厚が大きいときに顕著に現れた。図4に示すように、ランダム磁気異方性がない場合、低温で磁化が膜面垂直方向から傾いた相が実現され、面内磁化が発生する。一方、ランダム磁気異方性がある場合、低温では面内磁化は消失し、面直方向の強磁性秩序のみが残る。温度を上げると、磁化のない状態を経た後で面内強磁性秩序が発生するスピン再配列転移が起こる。すなわち、擬ギャップの存在が見出された。また、スピン再配列転移点近傍では、図5に示すように、スピンの面直・平行成分の各々が不規則な形をした複雑な磁区構造を形成していることが分かった。これらの磁区構造の形成が擬ギャップの発生につながったと考えられる。以上の結果より、スピン再配列転移の発生機構においては、原子配列の乱れの効果が重要な可能性を担っている可能性があると考えられる。

本研究では、積層強磁性体のシミュレーションをはじめに行い、膜厚や温度による磁区構造の変化の様子を明らかにした。これにより、超薄膜磁性体の磁気的性質の理解が一步進んだと考える。

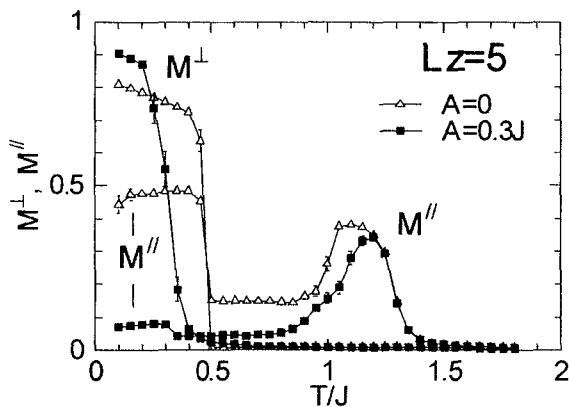
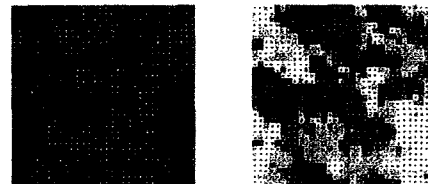
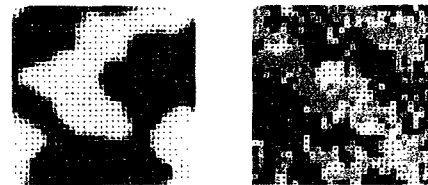


図4：面直磁化 M^\perp と面内磁化 M^\parallel の温度依存性。ランダム磁気異方性がない場合についても示す。

(a) 温度 $T=0.1J$



(b) 温度 $T=0.5J$



(c) 温度 $T=0.9J$



(d) 温度 $T=1.1J$

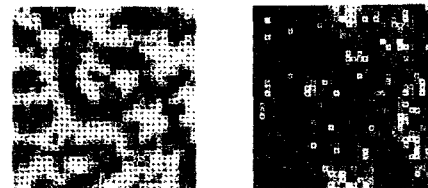


図5：膜厚 $L_z = 5$ における磁区構造のスナップショットの温度依存性。

スピンの表示法は図3と同じ。平面格子サイズは $L = 96$ 。

論文審査結果の要旨

近年の薄膜作製技術の進歩により、厚さ数原子層の超薄膜磁性体の作製が可能となった。超薄膜性体では表面効果が顕著に効くため、バルク磁性体では見られない様々な物理現象が観測されている。本研究は超薄膜磁性体に特有な磁気構造とその膜厚及び温度依存性を理論的に研究したものである。

第一章及び第二章では超薄膜磁性体の研究の概観と、研究目的が述べられている。本研究ではスピン再配列転移が超薄膜磁性体に特有な現象であることに注目し、その実験事実を詳細に分析するとともに理論的研究の到達点を整理し、研究の方向性を明らかにしている。

第三章は理論モデル及びシミュレーションアルゴリズムが与えられている。本研究では、スピン再配列転移に対する予言理論模型 - 表面磁気異方性と磁気双極子相互作用の競合模型 - が採用されている。磁気双極子相互作用系のシミュレーションにはスピン数の2乗に比例する計算時間がかかる。本研究はこの計算時間を大幅に短縮するシミュレーションプログラムを完成し、超薄膜磁性体の大規模シミュレーションを初めて可能にした。

第四章はシミュレーションの結果が述べられている。この超薄膜磁性体の磁性は膜厚に大きく依存することが明らかにされている。膜厚が小さいときには磁化方向は膜面に垂直で、膜厚が大きいときには膜面に平行になる。また、中間膜厚では温度を下げると最初に膜面内に磁化が実現し、さらに温度を下げると膜面に垂直な方向にも磁化が現れる。膜面に垂直な磁化成分は磁区を形成しその形状は面内磁化成分に大きく依存する。面内強磁性がないときはバブル型の磁区を形成し、面内強磁性があるときにはストライプ型の磁区を形成する。これらの結果は実験事実を再現した。しかし、中間膜厚で実現する低温磁気構造は膜面内強磁性と膜に垂直なストライプ磁区で、実験的に見られるスピン再配列転移は再現しない。

第五章で表面乱れの効果が調べられている。表面乱れはランダム異方性を誘起し、このランダム異方性は低温領域の膜面内強磁性を破壊する。即ち、スピン再配列転移には表面乱れが大きな役割を果たしていることが明らかにされた。

第六章は結論である。本研究の成果が総括され、今後の展望が述べられている。

以上のように本研究は磁気双極子相互作用系の強力なシミュレーションプログラムを完成し、超薄膜磁性体の大規模シミュレーションを初めて実行したもので、超薄膜磁性体の種々の性質を理論的に解明した。さらに、多層膜磁性体研究の展望を与える等、応用物理学に与える影響は大である。よって、本論文は博士(工学)の学位論文として合格と認める。