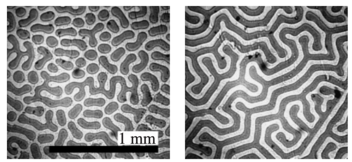
Ginzburg-Landau モデルによる強磁性薄膜上の磁区ドメインパターンの研究

磁場掃引時の磁区ドメインパターンのシミュレーション

中西 亮* (東京大学大学院 総合文化研究科 広域科学専攻)
指導教員 福島 孝治 (東京大学大学院 総合文化研究科 広域科学専攻, 先進科学研究機構)

背景と目的

薄いフィルム状の強磁性体に対してスピンが全て揃うような強い磁場をかけ、その後磁場をゼロに掃引すると、右下図のようにその**掃引速度に応じて島状、迷路状の特徴的なドメインパターンが現れる**[1]。



掃引速度 パターン	速い 島状	遅い 迷路状

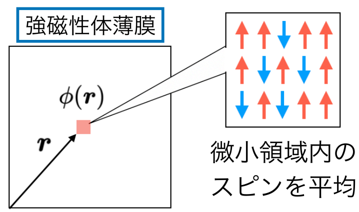
図は[1]から引用

このような現象を再現するモデルの**モデルパラメータとパターンの関係**をシミュレーションにより解析し、**定量的な関係**を得ることを目的とした。

モデル

- **時間依存のGinzburg-Landau方程式（TDGL eq.）**

系を粗視化して得られる場の変数 $\phi(\boldsymbol{r})$
(以降、 $\phi(\boldsymbol{r})$ を「スピン」と表記)



自由エネルギー汎関数 $H[\phi(\boldsymbol{r})]$

自由エネルギー汎関数の時間発展

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \int \frac{\delta H}{\delta \phi(\boldsymbol{r})} \frac{\partial \phi(\boldsymbol{r})}{\partial t} d\boldsymbol{r}$$

$\phi(\boldsymbol{r})$ の時間発展 (TDGL eq.) $\dfrac{\partial \phi(\boldsymbol{r})}{\partial t} = -L \dfrac{\delta H}{\delta \phi(\boldsymbol{r})}$ (Lは時間スケールを決める定数)

ハミルトニアンが時間を陽に含まないとき、TDGL eq.の下での自由エネルギーは単調に減少する。

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -L \int \left(\frac{\delta H}{\delta \phi(\boldsymbol{r})} \right)^2 d\boldsymbol{r} \le 0$$

[1] K. Kudo, M. Mino, and K. Nakamura, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 013002 (2007)

- **エネルギー汎関数のモデル**

今回の系ではエネルギーが4つのエネルギー項で構成されているとする。

垂直磁気異方性 $H_{\mathrm{ani}} = \alpha \int d\boldsymbol{r} \left(-\frac{\phi(\boldsymbol{r})^2}{2} + \frac{\phi(\boldsymbol{r})^4}{4} \right)$ 　$\phi(\boldsymbol{r})$ が ± 1 を取りやすい。

交換相互作用 $H_J = \beta \int d\boldsymbol{r} \frac{|\nabla \phi(\boldsymbol{r})|^2}{2}$ 　近距離でスピンが揃いやすい。

双極子相互作用 $H_{\mathrm{di}} = \gamma \int d\boldsymbol{r} d\boldsymbol{r}' \phi(\boldsymbol{r}) \phi(\boldsymbol{r}') G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ 　$G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|^{-3}$

長距離でスピンが反対を向きやすい。

外部磁場の効果 $H_{\mathrm{ex}} = -h(t) \int d\boldsymbol{r} \phi(\boldsymbol{r})$

- **時間発展の方程式** (TDGL eq.)

$$\frac{\partial \phi(\boldsymbol{r})}{\partial t} = -\frac{\delta (H_{\mathrm{ani}} + H_J + H_{\mathrm{di}} + H_{\mathrm{ex}})}{\delta \phi(\boldsymbol{r})}$$
$$= \alpha \lambda(\boldsymbol{r}) [\phi(\boldsymbol{r}) - \phi(\boldsymbol{r})^3] + \beta \nabla^2 \phi(\boldsymbol{r}) - \gamma \int d\boldsymbol{r}' \phi(\boldsymbol{r}') G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') + h(t)$$

$\lambda(\boldsymbol{r}) \sim N(\mu = 1, \sigma^2 = 0.3/8)$ 　ドメイン生成の核として磁気異方性の大きさ α にガウスノイズを乗ずる。

- **シミュレーションの設定**
  - 正方格子 (周期的境界条件)
  - 初期条件：**1 < φ(r) < 1.1**の一様分布
  - h(t = 0) = 1.5
  - **磁場の掃引速度**と**磁気異方性**のパラメーターを制御した。
    磁場の掃引速度 $v = 10^{-3}, 5 \times 10^{-3}, 10^{-2}, 5 \times 10^{-2}, 10^{-1}$
    磁気異方性の強さ $\alpha = 1.0, 1.5, 2.0, 2.5$
  - 交換相互作用 $\beta = 2$
  - 双極子相互作用 $\gamma = \frac{2}{\pi}$
  - スピン数 (= 格子点数) N = 128×128
  - 磁場がゼロになってからパターンが落ち着くまで磁場ゼロのまま時間発展させる。

$$h(t) = \begin{cases} h_{\mathrm{ini}} - vt & (0 \le t \le t_0) \\ 0 & (t_0 \le t) \end{cases}$$

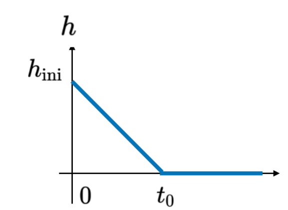


図. 磁場の時間発展

TDGL eq. の数値解法

TDGL eq. をフーリエ変換して得られるフーリエ成分についての**非線形な微分方程式**を数値積分した。

$$\frac{\partial \phi_{\boldsymbol{k}}}{\partial t} = \alpha\lambda_{\boldsymbol{k}}\left(\phi_{\boldsymbol{k}} - \phi_{\boldsymbol{k}}^3\right)\Big|_{\boldsymbol{k}} + (h_0 - vt)\,\delta(\boldsymbol{k}) - \left(\beta k^2 + \gamma G_{\boldsymbol{k}}\right)\phi_{\boldsymbol{k}}$$

$$G_k = a_0 - a_1 k, \quad a_0 = 2\pi\int_d^\infty r dr G(r), \quad a_1 = 2\pi$$

$\phi_{\boldsymbol{k}}$: 波数 $\boldsymbol{k}$ のフーリエ成分

非線形項に由来するエイリアシング誤差を避けるため、**高周波数成分を除去**した。
エイリアシング誤差は分点の数が有限であるために高周波数成分の評価の際に数値計算上発生する誤差である。

$$\left|\frac{k_x L}{2\pi}\right|, \left|\frac{k_y L}{2\pi}\right| \geq \frac{n}{4} \qquad \phi_{\boldsymbol{k}} = 0$$

L : 一辺の長さ
n : 一辺の格子点数
$\phi_{\boldsymbol{k}}$: 波数 $\boldsymbol{k}$ のフーリエ成分

数値解法として
1. Runge - Kutta法を用いた解法
2. 半陰的解法

の2つの解法を実装し、**2つの解法で同じパターン、エネルギーに収束することを確かめた。**
そして、数値精度と計算量について検討を行った結果、以降のシミュレーションでは**Runge - Kutta法を用いた解法**を採用した。

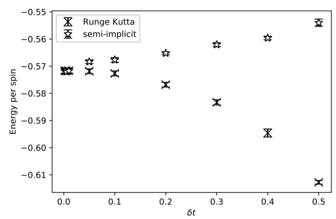
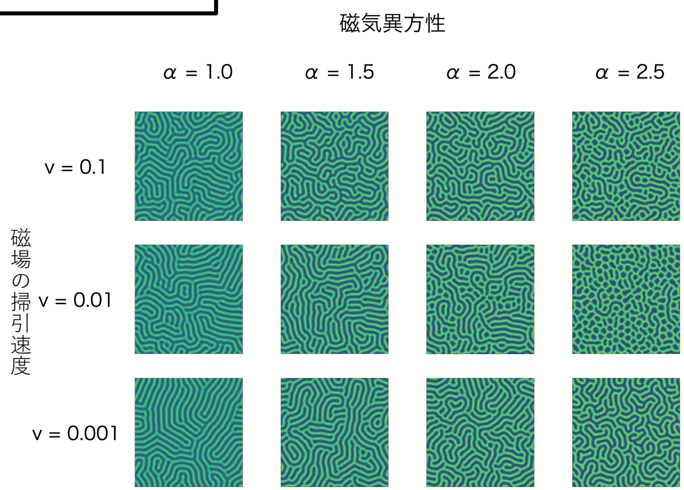


図. 2つの解法での最終時刻でのエネルギーの時間ステップ幅依存性. $\alpha = 2.5$, $v = 0.1$の系.

最終時刻のドメインパターン

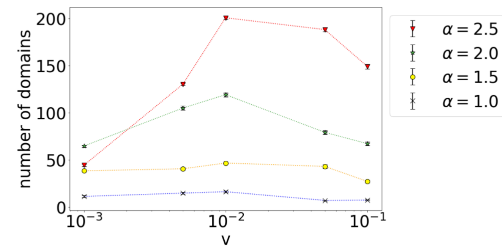
右図のような特徴的なドメインパターンが得られた。

このパターンをより定量的に捉えるために、磁区ドメインのパターン数とエネルギーについて解析を行った。

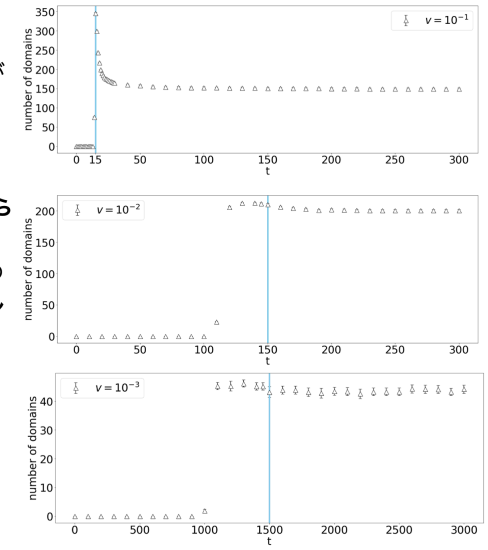


磁区ドメイン数の時間発展

- 磁区ドメイン数は掃引速度に対して**非単調**に変化していて、$v = 10^{-2}$で極大となっている。
- 磁気異方性のパラメータ**αが大きな系**で非単調さが顕著になっている。
- ドメイン数の時間発展を見ると、掃引速度の速い$v = 10^{-1}$の系では、$v = 10^{-2}, 10^{-3}$の系とは異なり、磁場が0になった後に**多数のドメインが現れてそれらが結合する**という経過を辿っている。
- このような掃引速度によるドメイン数の振る舞いの差異はスピンの反転にかかる**特徴的な時間スケール**を反映していると考えられる。



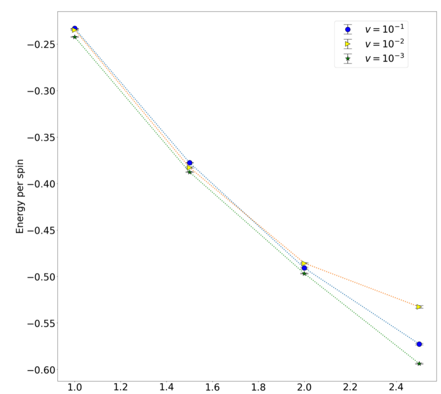
最終時刻でのドメイン数の掃引速度依存性



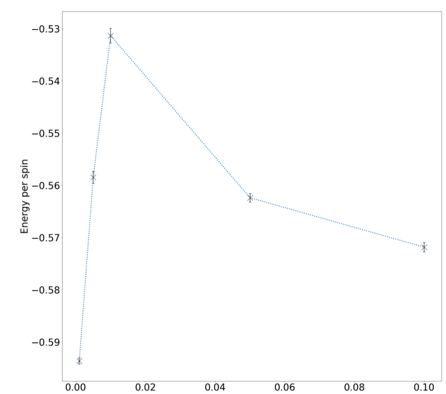
$\alpha = 2.5$の系でのドメイン数の時間依存性.
青線が磁場が0になる時刻.

エネルギーのパラメータ依存性

- 十分に時間が経過した後の1スピンあたりのエネルギーを比較すると、$\alpha = 2.0, 2.5$の系ではエネルギーが掃引速度に対して非単調になる様子が得られた。
- 特に異方性の強さが $\alpha = 2.5$ の系では掃引速度によるエネルギーの差が大きくなっている。



十分に時間が経過した時のエネルギーのα依存性



α = 2.5 でのエネルギーの掃引速度依存性

平衡状態の磁区ドメインパターンのシミュレーション

背景と目的

磁場掃引時に現れるパターンと平衡状態との関係を明らかにしたい。

非平衡		**平衡**
磁場掃引時のパターン	⟷	平衡状態のパターンは不明

統計力学的に**温度 T の平衡状態**では状態 X の出現確率は右の**ボルツマン分布**に従うことが分かっている。

$$p(X) = \exp\left(-\frac{E}{T}\right)$$

- これまで、**双極子相互作用のある2次元系での平衡状態**についての詳細な研究はスピン変数 ϕが±1をとるモデルであるイジングモデルに留まっていた。スピン変数 ϕ が連続的な値を取るモデルである**Ginzburg-Landau(GL)モデルの平衡状態は詳細には明らかになっていなかった。**
- 本研究では、マルコフ連鎖モンテカルロ法を用いてボルツマン分布からの状態のサンプリングを行うことで**GLモデルの平衡状態の性質を調べた。**

シミュレーション手法

- エネルギー汎関数 —— 磁場掃引時のシミュレーションと同じエネルギー汎関数を用いる。

$$H_{\text{ani}} = \alpha\lambda(\boldsymbol{r})\int d\boldsymbol{r}\left(-\frac{\phi(\boldsymbol{r})^2}{2} + \frac{\phi(\boldsymbol{r})^4}{4}\right) \qquad \lambda(\boldsymbol{r}) \sim N(\mu = 1, \sigma^2 = 0.3/8)$$

$$H_J = \beta\int d\boldsymbol{r}\frac{|\nabla\phi(\boldsymbol{r})|^2}{2} \qquad H_{\text{di}} = \gamma\int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\phi(\boldsymbol{r})\phi(\boldsymbol{r}')G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \qquad G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = |\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^{-3}$$

- レプリカ交換モンテカルロ法[2]により多数の温度の系でボルツマン分布からのサンプリングを行った。
- エネルギー汎関数はTDGL eq. のシミュレーションと同じものを用い、磁場は0とした。
- TDGL方程式のシミュレーション結果と比較するために波数空間は同じように制限した。
- モンテカルロ法の更新に際しては、**波数空間で更新**を行った。
  これは、実空間で更新を行うと高周波数成分が発生してしまうためである。
- スピン数 $N = 8\times8,\ 16\times16$ とした。
- 磁気異方性の強さ α = 1.0, 2.5
- 交換相互作用 $\beta = 2$
- 双極子相互作用 $\gamma = \dfrac{2}{\pi}$
- 温度範囲 $1 \le T \le 80$

[2] K. Hukushima and K. Nemoto. J. Phys. Soc. Japan Vol. 65, No. 6, pp. 1604–1608, Dec 1996.

結果

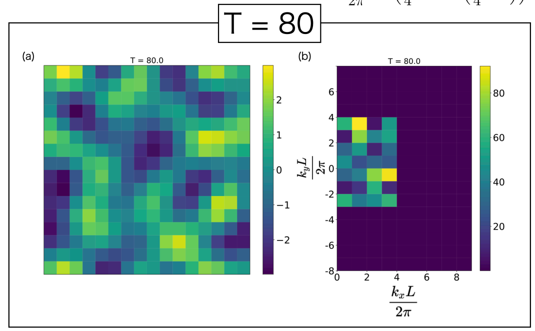
- **パターンの温度依存性**　α = 1.0, 2.5 どちらの系においても下記のような振る舞いが確認された。

低温：2方向の斜めのストライプが等確率で現れる。
　　　波数空間上では制限された波数領域の端にピークが現れる。
高温：無秩序なパターンが現れる。

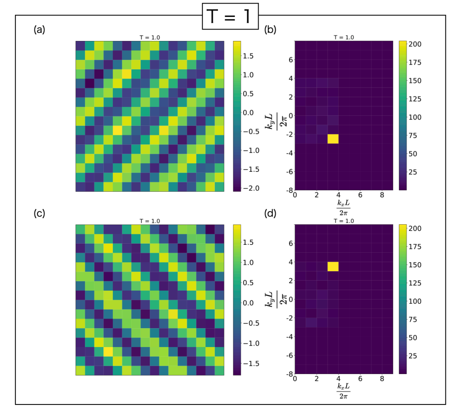
- **秩序変数の定義**　低温のパターンが波数空間でピークを持つことを反映した秩序変数O_pを下記のように定義した。

$$O_\mathrm{p} = \frac{|f[\boldsymbol{k}_1]|^2 + |f[\boldsymbol{k}_2]|^2}{\sum_k |f[\boldsymbol{k}]|^2} \qquad \frac{\boldsymbol{k}_1 L}{2\pi} = \left(\frac{n}{4}-1, \frac{n}{4}-1\right) \qquad \frac{\boldsymbol{k}_2 L}{2\pi} = \left(\frac{n}{4}-1, -\left(\frac{n}{4}-1\right)\right)$$

ただし、$f[\boldsymbol{k}]$ は波数 $\boldsymbol{k}$ のフーリエ成分。
$\boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2$ は低温での2方向のストライプに対応して波数空間でピークが現れる2つの波数ベクトル。
n は一辺あたりの格子点数。



α = 2.5, スピン数 16 × 16, T = 80 の系でのパターンとそのフーリエ成分の絶対値の分布. (a) はこの温度で 典型的に現れる実空間のドメインパターンのスナップショット. (b) は (a) のパターンのフーリエ成分の絶対値の分布である.



α = 2.5, スピン数 16 × 16, T = 1 の系でのパターンとそのフーリエ成分の絶対値の分布. (a), (c) はこの温度で典型的に現れる実空間のドメインパターンのスナップショット. (b),(d) はそれぞれ (a),(c) のパターンのフーリエ成分の絶対値の分布である.

- **秩序変数と感受率の温度依存性**

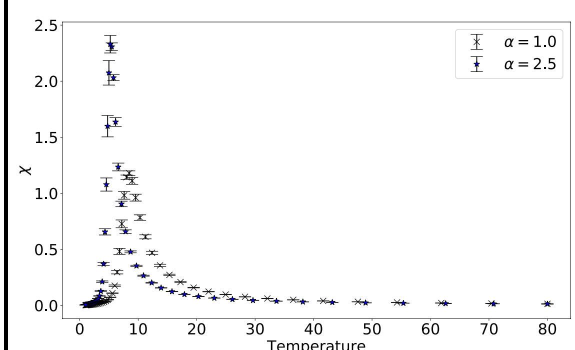
秩序変数O_pに対応した感受率χを定義し、それらの温度依存性をみた。

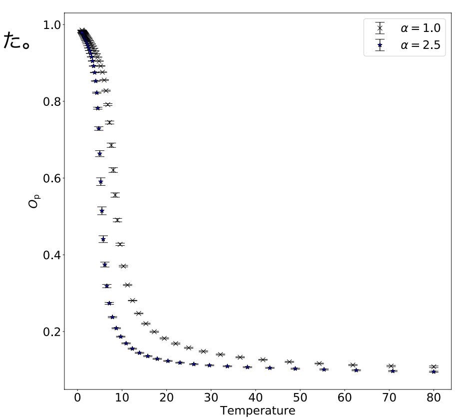
秩序変数　$$O_\mathrm{p} = \frac{|f[\boldsymbol{k}_1]|^2 + |f[\boldsymbol{k}_2]|^2}{\sum_k |f[\boldsymbol{k}]|^2}$$

感受率　$$\chi = \frac{N}{T}\left(\langle O_\mathrm{p}^2\rangle - \langle O_\mathrm{p}\rangle^2\right)$$

$\langle\cdot\rangle$: ボルツマン分布での期待値

- 低温で O_p が 1 **に収束**することを確認した。
- χ が**ピーク**を持つ振る舞いをすることを確認した。
- 系のサイズを大きくすると、ピークが高くなることを確認した。

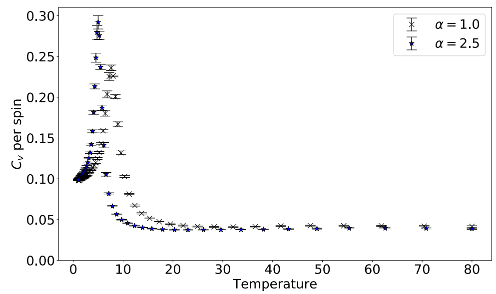


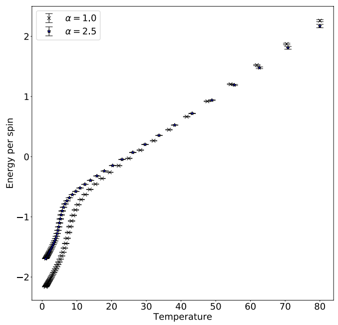


エネルギーと比熱の温度依存性

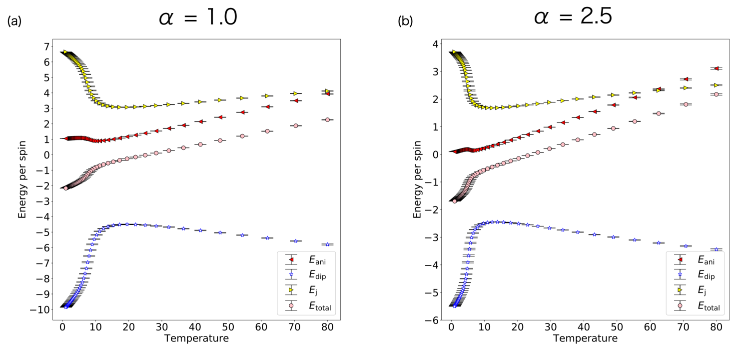
- 低温では $\alpha = 1.0$ の方が系のエネルギーが下がった。
- 低温では双極子相互作用のエネルギーが下がり、交換相互作用のエネルギーが上がっている。
- 比熱の温度依存性ではピークが現れた。
- 系のサイズを大きくするとピークが高くなることを確認した。

比熱の温度依存性





系のエネルギーの温度依存性

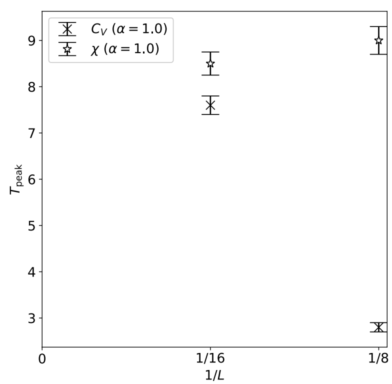


種類別のエネルギーの温度依存性

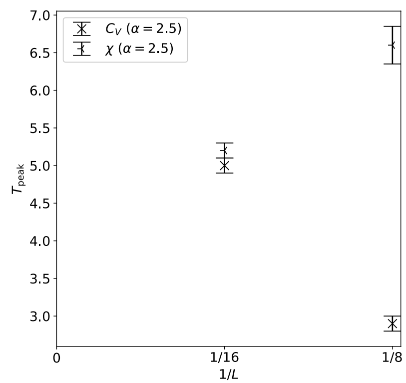
比熱と感受率のピーク温度のサイズ依存性

- $\alpha = 1.0, 2.5$ どちらの系においても、比熱と感受率のピーク温度はサイズを大きくするに従って近づくことが確認された。
- このピーク温度近傍での無秩序相と斜めのストライプの磁区パターンの相の間の相転移の存在が示唆される。

α = 1.0



α = 2.5



まとめ

前半まとめ　磁場掃引時の磁区ドメインパターンのシミュレーション

- 磁場掃引時の磁性体薄膜に現れる磁区ドメインパターンについて、時間依存のGL方程式を用いてシミュレーションを行った。
- 異方性の強さαが大きな系では、十分時間が経った後の系の**エネルギー**や**磁区ドメインの数**について**掃引速度に関して非単調な振る舞い**が見られた。
- 異方性の強さαが大きい系について、
  掃引速度が**速い**場合は、磁区ドメインが**磁場が0になった後に多数のドメインが現れてそれらが結合する**という経過を辿り、
  掃引速度が**遅い**場合での磁場掃引中にドメインが形成されてそれらは結合しないという経過とは差があることを明らかにした。

後半まとめ　平衡状態の磁区ドメインパターンのシミュレーション

- **レプリカ交換モンテカルロ法**を用いてボルツマン分布からのサンプリングを行い、GLモデルの**平衡状態の性質**について調べた。
- 低温で**斜めのストライプ** のパターンが現れることが確認された。
- 低温のパターンをフーリエ変換すると**波数空間でピーク**が現れることを反映した秩序変数とその感受率を定義し、その温度依存性を調べた。結果、**感受率の温度依存性には相転移を示唆するピーク**が現れた。
- エネルギーと比熱についても温度依存性を調べた。その結果、**比熱の温度依存性にも相転移を示唆するピーク**が、感受率のピーク温度に近い温度で現れた。
- 上記の振る舞いは異方性の強さ$\alpha = 1.0, 2.5$ のどちらの系にも共通しており、 α の大きさによって振る舞いが変わった**磁場掃引時のシミュレーションとは対照的**な結果となった。このことから、磁場掃引時の磁区ドメインパターンの性質の平衡状態の性質による説明は難しく、系の**動的な性質**を反映したものであると考えられる。