

磁区構造再構成のためのリバースモンテカルロ法の拡張

時井真紀、喜多英治、三俣千春*、小野寛太**、柳原英人、松本紳
(筑波大、*物質・材料研究機構、**高エネルギー加速器研究機構)

Expansion of Reverse Monte Carlo method for reconstruction of magnetic domain structure

M.Tokii, E.Kita, C.Mitsumata*, K.Ono**, H.Yanagihara, M.Matsumoto
(Univ. of Tsukuba, *National Institute for Materials Science,
**High Energy Accelerator Research Organization)

磁化過程の解釈には、中性子回折実験で得られた像から磁区構造を得る必要があるが、位相情報が欠落した状態からの再構成は困難である。そこで我々はリバースモンテカルロ法^{1),2)}を用いた磁区構造の可視化を試みた。N×Nサイズの実空間像としてストライプ構造や迷路構造を仮定し逆空間像を求め、リバースモンテカルロ法を用いて計算を行った結果、磁区構造にはずれなどが生じてしまう。そこでFig. 1(a)に示したようにフーリエ像を2N×2Nに拡張し計算を行った結果、位相のずれを軽減することができた。またFig. 1(b)に示すように実験から得られた磁区像では磁区幅などは比較的再現できた。さらに、磁化情報を用いるなど磁区像の初期値の工夫をすることにより、磁化の符号についても制約を与えることができ、より精度の高い再構成手法となることが期待できる。これまでは2次元の磁区構造再構成に対する結果を示したが、最終的にSANSの実験データに対してこの手法を適用することを目標としている。しかし、SANSデータ³⁾ではまず磁気散乱データと角散乱データの分離方法の検討が必要である。そのために今回は、疑似的に様々な3次元磁区構造を生成し、SANSの磁気データと構造データの特徴を系統的に示す。

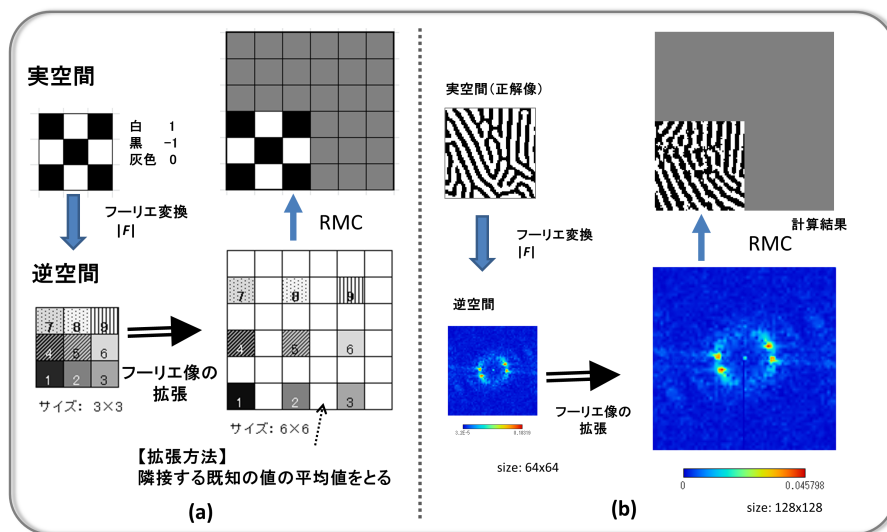


Fig. 1 (a) リバースモンテカルロ法に用いるフーリエ像の拡張方法と (b) 計算結果

謝辞

本研究は、(独) 科学技術振興機構(JST)による産学共創基礎基盤研究「革新的次世代高性能磁石」の支援を受けて行われたものである。

参考文献

- 1) K.Hagita, H.Okamoto, T. Arai, H.Kishimoto, N.Umesaki, Y.Shinohara, Y.Amemiya, AIP Conf. Proc. 368(2006).
- 2) O.Gereben, L.Pusztai and R.L.McGreevy, J. Phys.: Condens.Matter, 22, 404216(2010).
- 3) A. Michels, D. Honecker, F. D'obrlich, C. D. Dewhurst, K. Suzuki, and A. Heinemann, Phys. Rev. B 85, 184417 (2012).

オゾン酸化処理 $\text{Ca}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_3$ の磁性

川和英司、○川中浩史¹⁾、西原美一²⁾、伊賀文俊²⁾

(茨大院理工、産総研¹⁾、茨大理²⁾)

Magnetism of $\text{Ca}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_3$ oxidized by ozone

E.Kawawa, H.kawanaka¹⁾, Y.Nishihara¹⁾, H.Iga²⁾

(Grad.Sch.Sci&Eng.Ibaraki Univ., Advanced Industry Science and Technology (AIST)¹⁾,
Fac.Sci.,Ibaraki Univ.²⁾)

はじめに

鉄の異常高原子価数を有する $\text{Ca}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_3$ は高压酸素下での合成が報告されている¹⁾。母物質の CaFeO_3 は 290K 以下で Fe^{4+} が Fe^{3+} と Fe^{5+} に電荷分離し電荷秩序が起っている。一方で、 SrFeO_3 の鉄イオンは4価である。そこで、その合金である $\text{Ca}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_3$ の鉄イオンは特異な状態となっていると考えられ、その磁性は非常に興味深い。我々は出発物質として $\text{Ca}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_y$ の試料を固相反応法により作製し、オゾンによる強い酸化力を利用し、酸素無欠損状態である $\text{Ca}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_3$ の合成を試みた。今回は磁化率の温度依存性を報告する。

実験方法

固相反応法で作製した $\text{Ca}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_y$ の試料を粉末にし、オゾン濃度 3% の酸素雰囲気中で 200°C、700 時間熱処理を行い $\text{Ca}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_3$ を作製した。得られた試料の酸素量を粉末 X 線回折により確認し、磁性は SQUID 磁束計で測定した。

実験結果

Fig.1 に磁化率の温度依存性を示す。各組成で反強磁性転移を示すネール点 (T_N) が観測され、 $x=0$ から $x=0.5$ では T_N が上昇していく傾向がみられる。また、 T_N 以上の温度領域で、電荷分離秩序による電荷秩序転移点 (T_{CO}) が観測され、Sr のドーパ量の増加とともに、転移温度は下降している。磁気秩序温度領域以上において、有効磁気モーメントを求めたが、キュリーワイス則に従う局在モデルでは鉄の価数を説明できないことが分かった。Fig.2 にネール点、電荷分離秩序による磁気転移点と組成の関係を示した。 $x=0.6$ で立方晶相と斜方晶相が混合した結晶構造を有している報告がある。 T_{CO} は、Sr 置換により立方晶相と斜方晶相の境界に向かって下がり、Ca リッチ組成で電荷分離が起こっていることが分かった。

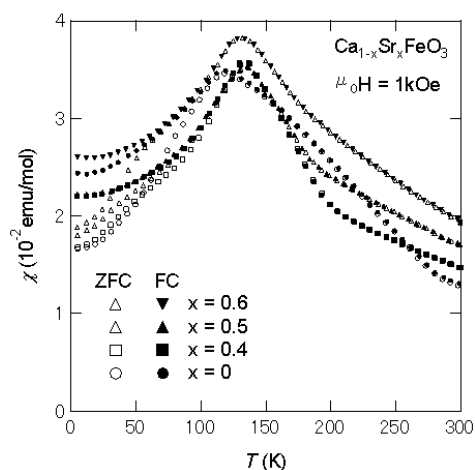


Fig.1. Magnetic susceptibility of $\text{Ca}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_3$ as a function of temperature

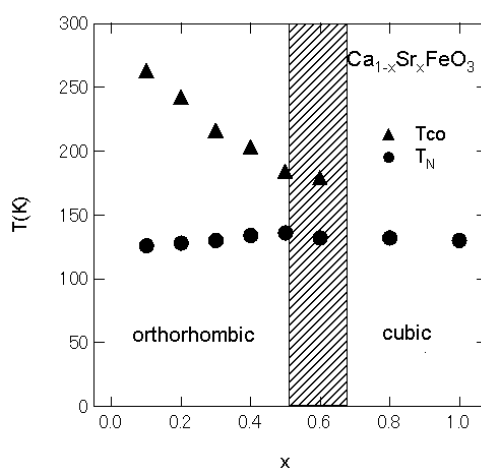


Fig.2. magnetic-phase diagram of $\text{Ca}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_3$

参考文献

- 1) T.Takeda et al./ Solid State Science 2. (2000) 673-687

エピタキシャル Fe/Au/Cr 三層膜における 量子井戸形成に起因した熱残留磁化のスローダイナミクス

和田詠史、落田佳耶、向井慶太、横山京祐、赤星大介、齊藤敏明
(東邦大)

Slow dynamics of thermoremanent magnetization due to quantum well formation
for epitaxial Fe/Au/Cr trilayers

E. Wada, K. Fukida, K. Mukai, K. Yokoyama, D. Akahoshi, T. Saito
(Toho Univ.)

はじめに

界面磁気フラストレーションの研究は、フラストレーション系や交換バイアス系における物理現象を理解する上で必要不可欠である。これまでに我々は、Fe/Cr 二層膜における数時間にもわたる熱残留磁化(M_{TRM})の緩和(スローダイナミクス)が界面磁気フラストレーションに起因することを報告してきた^{1,2}。我々は本研究で、エピタキシャル Fe/Au/Cr(001)三層膜においても、Fe と Cr の磁気的結合が離れているにも関わらず、界面磁気フラストレーションを示唆するスローダイナミクスを観測した。これは Au 量子井戸形成によりスピンド分極した Au 層と Cr 層の界面における磁気フラストレーションを示唆する。

実験方法

MgO(001)/Cr(50 Å)/Au(z Å)/Fe(40 Å)/Au(20 Å)は MBE 法で作製した。まず、MgO 基板を 600°C で 1 時間アニールした後、成長温度 400°C の条件下で Cr, Au, Fe 層を堆積させた。各層堆積の度に RHEED 観察でエピタキシャル成長を確認した。Au 中間層の膜厚 z は $z=0, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 80$ Å とし、 M_{TRM} が z に対してどのように変化するかを SQUID を用いて調べた。この際、まず 300 K で 500 Oe の磁場を印加し、その後 250 K まで 10K/min で冷却し、250K 到達直後に磁場を切り 10000sec 間磁化の時間変化を測定、という手順で行った。

実験結果

M_{TRM} は全ての z の試料において $M_{TRM}=M_0-S\ln t$ の式で表わされるような長時間にわたる緩和(スローダイナミクス)を示した。ここで、 t は時間、 M_0 は定数、 S はスローダイナミクスの程度を表す量で磁気粘性と呼ばれる。Fig.1 は飽和磁化 M_S で規格化した S と保磁力 H_C の z 依存性である。 S/M_S は z に対して周期~14.7 Å の振動的振る舞いを示した。更に、この振動は H_C の z 依存性と大変似ていることがわかった。この振動の起源として我々は、「Au 量子井戸形成によりスピンド分極した Au 層と Cr 層界面でのフラストレーションモデル」を提案する。Fe, Au, Cr の Δ_1 バンドに注目すると minority spin に対してのみ Au 量子井戸が形成され、これによって Au 中でスピンド分極が生じる³。このとき、Au/Cr 界面に原子ステップが存在すると、そのスピンド配列から、Fe/Cr 二層膜と同様に^{1,2}、界面磁気フラストレーションが生じ、それによってスローダイナミクスが起こるものと思われる。また、振動の周期は理論的に見積もった Au のスピンド分極率の振動の周期 (14.6Å) と良く一致しており、 S/M_S の振動が Au のスピンド分極の振動に起因するという我々のモデルを支持していると言える。

参考文献

- 1) M. Nomura, *et al.*, J. Phys.:Conf. Ser. **320** (2011) 12042.
- 2) T. Hashimoto, *et al.*, Program and abstracts of the 8th international symposium on Metallic Multilayers (MML2013) 186.
- 3) T. Katayama, *et al.*, J. Magn. Magn. Mater. **126** (1993) 527

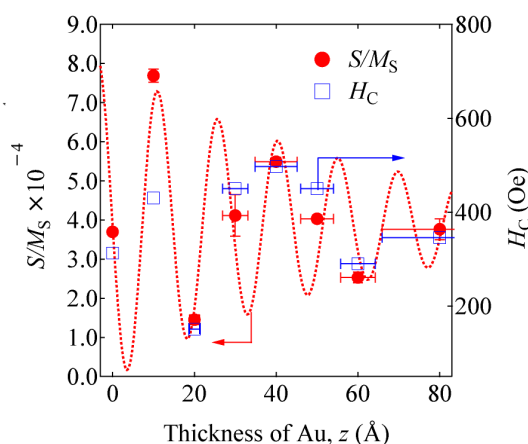


Fig.1 規格化された磁気粘性 S/M_S と保磁力 H_C の Au 膜厚 z 依存性

円柱型磁気クラスターの熱アシストモンテカルロシミュレーション

阪本直道, 寺島顕一, 山口克彦
(福島大学)

Monte Carlo Simulation for thermal assisted reversal process of cylindrical magnetic cluster

N. Sakamoto, K. Terashima, K. Yamaguchi
(Fukushima Univ.)

はじめに

近年, 熱アシストシステムを用いた高密度磁気記録について盛んに研究が行われてきた¹⁾. しかしながら, 熱アシストで磁化が反転する際の温度領域と磁場の関係についての検討は必ずしも充分ではないと思われる. そこで, 本研究では面直方向が容易軸となる円盤型磁性体の一部をくりぬいた円柱型クラスターに対して, モンテカルロ (MC) 法を用いた磁化の反転過程シミュレーションを行い, 温度領域と磁場の関係を解析した

計算手法

クラスターは円柱型で直径が 7, 長さが 39 のものであり, 格子間距離を 1 として単純立方格子状に磁気スピンを設置したものをを用いた. 計算はメトロポリスアルゴリズムによるモンテカルロシミュレーションを行った. モンテカルロシミュレーションを行う際に用いる乱数列は同一条件下では同じものをを用いた.

$$H = -\sum_{near} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + D \sum_{all} \left(\frac{\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{|\mathbf{r}_{ij}|^3} - \frac{3}{|\mathbf{r}_{ij}|^5} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{r}_{ij}) \right) + B \sum_i S_i \quad (1)$$

ハミルトニアンは式 (1) を用いた. 第一項が交換相互作用, 第二項が磁気双極子相互作用, 第三項が円柱の長さ方向にかける印加磁場によるゼーマンエネルギー項, S_i は i 番目のスピンベクトルである.

結果

Figure 1には3つの温度でのヒステリシスカーブを示した. 温度 kT が上がるにつれて, 保磁力が小さくなっていることが分かる. また, $kT=1.5$ では熱ゆらぎにより保持力が0になっていることも分かる. $kT=0.01$ で保磁力が0.7程度だったため, 加える磁場はそれよりも小さい値にすることにした.

Figure 2 に実線で示したものは無磁場状態で温度を下げていった際に, 円柱の長さ方向下向きに磁化が揃ったものである. kT が 0.6 から 0.5 という低い温度領域では 0.05 といった強い上向きの磁場をかけなければ磁化は反転しなかったが, $kT=1.3$ 付近のキュリー点付近では 0.01 ほどの弱い磁場でも反転が観測できた.

Figure 3 には各温度帯で 3 つの異なる磁場を加えた場合の磁化の反転する割合を示した. kT が 1.2 から 1.1 の間の場合, 小さい磁場でも磁化がすべて反転することが分かる. また, 各磁場に対して, ある温度を過ぎるとすべて反転することがなくなった. つまりこの温度よりも低温で磁場を加えても反転しないことが分かる. 尚, この温度より高温で磁場を加えても, 熱揺らぎにより元の状態に戻るため不必要な磁場強度であることが確認できた.

参考文献

- 1) M.H. Kryder, et.al "Heat Assisted Magnetic Recording", Proceedings of the IEEE, Volume 96, pp.1810-1835 (2008).

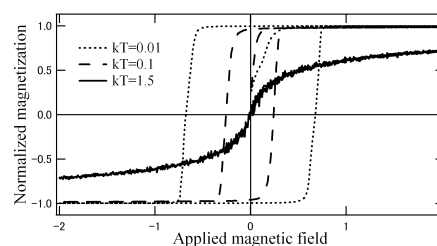


Fig.1. Hysteresis loops of cylindrical cluster.

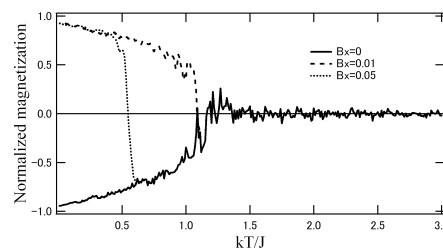


Fig.2 Temperature dependence of normalized magnetization with magnetic fields.

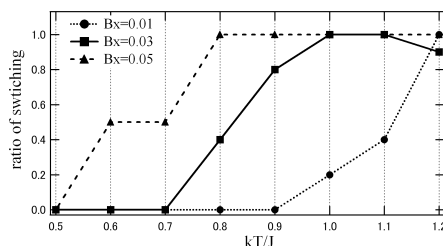


Fig.3 Temperature dependence of probability that reversing of magnetization succeeded for magnetic field.

LaFe₁₂B₆化合物の遍歴電子メタ磁性転移と カイネティックアレスト

藤枝 俊、深道和明、鈴木 茂
(東北大 多元研)

Itinerant-electron metamagnetic transition and kinetic arrest of LaFe₁₂B₆ compound

S. Fujieda, K. Fukamichi and S. Suzuki
(IMRAM, Tohoku University)

背景

SrNi₁₂B₆型構造の LaFe₁₂B₆化合物は 4.2 K で磁場誘起 1 次相転移、すなわちメタ磁性転移を示すことが報告されている^{1,2)}。しかし、これらの研究は強磁性不純物相を含む試料で行われたので、転移の詳細は明らかでない。我々は、酸化物形成に起因して欠損する La を化学量論組成よりも数%過剰に調整することにより、強磁性不純物相を含まずに LaFe₁₂B₆化合物を作製することに成功した。本研究では、LaFe₁₂B₆化合物のメタ磁性転移の温度依存性とカイネティックアレストについて議論する。

実験方法

LaFe₁₂B₆化合物は、各元素を Ar 雰囲気下でアーク溶解して得た溶解凝固試料を石英管に真空封入し、1173 K で 10 日間の均質化熱処理を施して作製した。磁化測定には SQUID 磁力計を用いた。また、Mössbauer 効果は ⁵⁷Co 線源を用いて測定した。

実験結果

LaFe₁₂B₆化合物の磁化率の温度曲線は 36 K 近傍でカuspを示し、5 K の Mössbauer スペクトルは 5.4 T 程度の内部磁場 (= 0.38μ_B/Fe) を示した。これらの結果から、本化合物はネール温度 $T_N=36$ K の遍歴系の弱い反強磁性である。各温度に無磁場中冷却して測定した磁化曲線の変極点から求めたメタ磁性転移磁場の温度依存性を Fig. 1 に示す。また、同図にはネール温度 T_N の磁場依存性も点線で示す。本化合物の特徴は、反強磁性状態からだけでなく、 T_N 以上の常磁性状態からも強磁性状態へのメタ磁性転移を示すことである。反強磁性—常磁性転移は 2 次でありエントロピー変化は小さく、臨界終点(Critical Endpoint:CEP)ではメタ磁性転移に影響を及ぼさないために温度—磁場曲線には変化がない。なお、15 K 以下の反強磁性状態では昇磁過程(B_c^{up})でのみメタ磁性転移が生じ、減磁過程(B_c^{down})において、動力学的な拘束(Kinetic Arrest)が生じるために転移は観測されなくなる。

各温度に無磁場中冷却した後、3 T の磁場を印加して測定した磁化の時間変化を Fig. 2 に示す。Fig. 1 から明らかなように印加磁場は 10 K における転移磁場より小さいが、時間の経過とともに磁化は増加する。また、同様の振る舞いは 9 K でも観測され、温度が低いほど磁場印加による磁化の増加は小さく緩慢になる。つまり、本化合物の反強磁性状態から強磁性状態へのメタ磁性転移は、温度の低下に伴い急激に遅延し、カイネティックアレストは顕著になる。

参考文献

- 1) M. Rosenberg et al.: J. Alloys Compd. **182** (1992) 145.
- 2) Q. A. Li et al.: J. Alloys Compd. **256** (1997) 82.

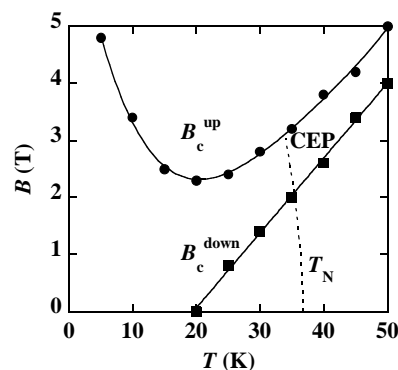


Fig. 1 Temperature dependence of the critical fields B_c^{up} and B_c^{down} of metamagnetic transition in the increasing and decreasing magnetic fields, respectively. The dashed line indicates Néel temperature T_N .

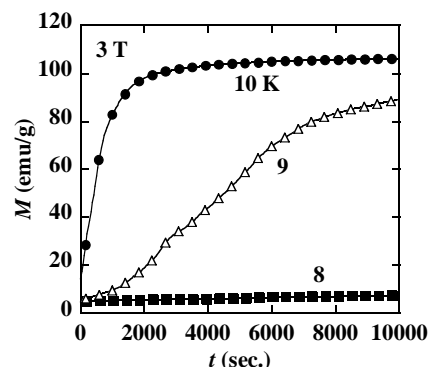


Fig. 2 Time dependence of magnetization under a magnetic field of 3 T. The magnetic field was applied after zero-field cooling.