

モンテカルロシミュレーションの磁性体研究への応用

Monte Carlo Simulation of Mesoscopic Magnetic Systems

鈴木伸夫・松原史卓* N. Suzuki and F. Matsubara*

東北文化学園大学科学技術学部 Faculty of Science Technology, Tohoku Bunka Gakuen University

仙台市青葉区国見 6-45-1 (〒981-8551) 6-45-1 Kunimi, Aoba, Sendai 981-8551

*東北大学大学院工学研究科応用物理学専攻 *Department of Applied Physics, Graduate School of Engineering, Tohoku University

仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-8 (〒980-5879) 6-6-8 Aramaki, Aoba, Sendai 980-5879

We present a Monte Carlo (MC) method for simulating mesoscopic magnetic systems. The merits of the MC method are as follows. (1) It takes into account microscopic features of the systems such as the lattice structure, composition of magnetic atoms, exchange interactions, and anisotropy of individual magnetic atoms, as well as the shapes of the samples. (2) Systems can be treated at finite temperatures. The method is applied to the following three problems: (i) the magnetic ordering of nano-scale ferromagnetic particles, (ii) the magnetization process for disk dots, and (iii) the domain structure of ultrathin magnetic films with surface anisotropy.

Key words: Monte Carlo simulation, discrete update Monte Carlo method, magnetic dipolar interaction, microscopic model, magnetic dot, magnetic ultrathin film

1. はじめに

近年の微細加工技術の発展により、一辺数十ナノメートル、厚さ数ナノメートルの磁性体の作製も可能になってきた^{1)~3)}。これらの技術で作製された強磁性細線や磁性薄膜を用いたマイクロ磁気デバイスや高密度磁気記録媒体への研究開発も盛んに行われている。これらの微小磁性体では幅数十ナノメートル以下の磁区を制御する必要があり、磁区構造の測定技術⁴⁾とともに、微小磁性体のシミュレーション法の確立が重要となってきた。従来、磁性体のシミュレーションにはLandau-Lifshitz-Gilbert (LLG) 法が使われてきた。これは磁性体を N 個の小磁石に分割し、この小磁石の安定な配位を LLG 方程式から求めるものである⁵⁾。しかしナノレベルの磁性体ではその磁性は試料形状だけでなく、表面や結晶微細組織に大きく依存すると考えられ、スピン一つ一つを扱う必要が出てくる。モンテカルロ (MC) 法はミクロなハミルトニアンから出発するシミュレーション法であり、交換相互作用、異方性定数、磁気双極子相互作用、さらには結晶構造などを直接取り入れることができる。また、MC 法は本来的に有限温度のシミュレーション法であり、LLG 法で難点だった温度効果⁶⁾を自然な形で取り扱うことができる。単一記録ビットの大

きさが数十ナノメートル以下になると、熱攪乱による磁化反転、磁化強度の減少を考慮する必要がある。この意味でも MC 法は興味深い方法と言えよう。

本稿では統計力学の分野で広く使われている MC シミュレーションについて解説し、計算の規模、問題点などについて述べる。さらに、筆者らのグループで開発した不連続更新モンテカルロ (DUDMC) 法⁷⁾とその応用例について述べる。

2. モンテカルロ法

モンテカルロ法は統計力学原理に基づいたシミュレーション法で物理学では広く用いられている⁸⁾。ここでは、この原理について簡単に述べる。

2.1 ボルツマン分布

統計力学にはボルツマン分布とギブス分布がある。前者は粒子数が保存されているときの固有状態の分布則であり、後者は粒子数も可変のときの固有状態の分布則である。ここで扱うスピン系はスピン数は不変で、各々のスピンの向き (スピン状態) を問題にするのでボルツマン分布をもとに考える。ボルツマン分布についての詳しい説明は統計力学の教科書にある⁹⁾。ここではそのポイントとモンテカルロ法に対する応用を述べよう。

いまある系 (一粒子系でも多粒子系でも構わない) が N 個の固有状態 A_i ($i=1, 2, \dots, N$) を取りうるとしよう。これらの状態のエネルギーを E_i また注目した物理量 (磁化など) の値を X_i としよう。ボルツマン分布によると、温度 T (K) においてこの系が状態 A_i にある確率 $P(i)$ は

$$P(i) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right), \quad (1)$$

$$Z = \sum_{i=1}^N \exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right) \quad (2)$$

となる。ここで k_B はボルツマン定数、また Z は分配関数と呼ばれ、系の自由エネルギー F は Z を使って $F = -k_B T \log Z$ と与えられる。 $P(i)$ が決まれば物理量 X の期待値 $\langle X \rangle$ は

$$\langle X \rangle = \sum_{i=1}^N X_i P(i) \quad (3)$$

と求められる。モンテカルロ法とは乱数を使ってさまざまな状態 A_j を確率 $P(j)$ に従うように生成し、その生成した状態をもとに物理量の近似値を以下のように求めるものである。

$$\langle X \rangle \simeq \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M X_j. \quad (4)$$

ここで、 M は生成した状態の数である。この状態 A_j を確率的に闇雲に与えることは効率的でない。なぜなら、 $P(j)$ の大きな状態 A_j が頻繁に現れてくれれば良いのだが、系は前もってどれが $P(j)$ が大きな状態か知らない。そこで、以下に述べるマルコフ連鎖と呼ばれる方法で、大きな確率を取る状態 A_j を逐次作っていくこと（重要サンプリング法）がなされている。

2.2 モンテカルロ法：1 スピン問題

簡単のために磁場 B 中の 1 イジングスピン系を考える (Fig. 1)。ここで、イジングスピンとはスピンの方向が上向き ($S^z=1$) または下向き ($S^z=-1$) の二つの自由度しかもたないスピンのことである。この系のハミルトニアンは

$$H = -mBS^z \quad (5)$$

となる。ここで $m(\equiv g\mu_B)$ はスピン磁気モーメントである。この系のスピンが上向きおよび下向きを取る確率は

$$P(S^z = \pm 1) = \frac{1}{Z} \exp\left(\pm \frac{mB}{k_B T}\right) \quad (6)$$

となる。ここで $Z = 2 \cosh(mB/k_B T)$ である。

さて、ある状態 (例えば $S^z=1$) から出発 (MC ステップ $t=0$) して、マルコフ連鎖を作ること考える。次のステップ ($t=1$) ではスピンは同じ向き ($S^z \rightarrow S^z$) か異なる向き ($S^z \rightarrow -S^z$) をもつ。これを表すために、 $S^z \rightarrow -S^z$ となる遷移確率 $W(S^z \rightarrow -S^z)$ を定義する。この遷移確率は十分 MC ステップが進んだときボルツマン分布を実現するように決まるはずである。これは次の詳細平衡の原理で実現される (Fig. 1)。

$$P(S^z)W(S^z \rightarrow -S^z) = P(-S^z)W(-S^z \rightarrow S^z). \quad (7)$$

ここで $P(S^z)$ および $P(-S^z)$ は式 (5) で与えられたボルツマン重率である。すなわち遷移確率比は

$$\frac{W(S^z \rightarrow -S^z)}{W(-S^z \rightarrow S^z)} = \frac{P(-S^z)}{P(S^z)} \quad (8)$$

となる。このことは遷移確率 $W(S^z \rightarrow -S^z)$ の選び方には任意性があることを意味している。具体的には、(A) 熱浴法と (B) メトロポリス法の二つの方法がある。

(A) 熱浴法：現在の状態には関係なく、次のステップで

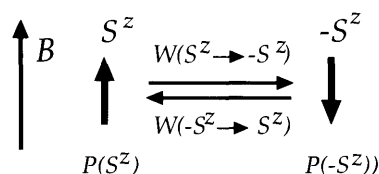


Fig. 1 Single spin in a magnetic field.

出現する状態の確率 $P(S^z)$ がボルツマン分布になる。これは

$$W(S^z \rightarrow -S^z) = \frac{1}{2} \left(1 - S^z \tanh\left(\frac{mB}{k_B T}\right) \right) \quad (9)$$

で実現される。すなわち、(0, 1) の乱数 x を引き、 x が $W(S^z \rightarrow -S^z)$ より小さい場合にはスピンの方向を反転させ、大きい場合には反転させない。

(B) メトロポリス法: $W(-S^z \rightarrow S^z) = 1$ と置くと $W(S^z \rightarrow -S^z) = P(-S^z)/P(S^z) = \exp(-\Delta E/k_B T)$ となる。ここで $\Delta E = E_{\text{final}} - E_{\text{init}}$ (E_{init} は最初のエネルギー、 E_{final} はスピンを反転させたときのエネルギー) である。すなわち、 $\Delta E \leq 0$ なら無条件でスピンを反転させ、 $\Delta E > 0$ なら確率 $\exp(-\Delta E/k_B T)$ で反転させる。具体的には乱数 x を引き、 $x \leq \exp(-\Delta E/k_B T)$ の場合にはスピンを反転させ、 $x > \exp(-\Delta E/k_B T)$ の場合には反転させない。

熱浴法は物理的にも考えやすく効率も良いが分配関数の計算が必要であり適用できる系は限られる。これに対してメトロポリス法は原理的にどのような系にも適用可能である。メトロポリス法の多自由度模型への一般化は以下のようになされる。まず現在の状態のエネルギー E_{init} を求めておく。次に乱数によりスピンの新しい方向の一つを選び、その状態のエネルギー E_{final} を計算し、 ΔE を求める。次に乱数 x を引き、 $x \leq \exp(-\Delta E/k_B T)$ の場合にはスピンを新しい方向に向け、 $x > \exp(-\Delta E/k_B T)$ の場合には現在の方向のまま変化させない。

さて、マルコフ連鎖の最初の状態 (初期状態) は適当な状態である。これが熱平衡状態の一つになるまでにはいくらかのステップが必要である。これを緩和ステップ (ステップ数 M_{relax})、また緩和させた後、平均をとるステップを測定ステップ (ステップ数 M_{obs}) と呼ぶ。 M_{relax} および M_{obs} は測定する物理量の値に影響を及ぼさないように十分大きく取る必要がある。多くの場合、これらは予備的試行によって決められている。

2.3 モンテカルロ法：多スピン系

要点は前節で尽きている。3 次元系への拡張は以下のようになされる。イジングモデルのハミルトニアンは

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z - mB \sum_i S_i^z \quad (10)$$

となる。ここで、 J は交換相互作用定数、 $\langle ij \rangle$ は最近接対を表す。多スピン系の要点は、ある瞬間、ある一つのスピン S_i^z に注目し、他のスピンはすべて凍結されたと仮定する。このとき、注目したスピンの働く有効場は

$$\tilde{B}_i^z = (J/m) \sum_{\delta} S_{i+\delta}^z + B \quad (11)$$

となる。ここで、 δ は最近接格子点ベクトルを表す。この、有効場 $\tilde{B}_i^z$ を 1 スピン系の場合の磁場 B と考えれば、1 スピン系の方法がそのまま使える。次の瞬間には、異なるスピン S_j^z ($j \neq i$) に着目して同じことを行う。これをすべての

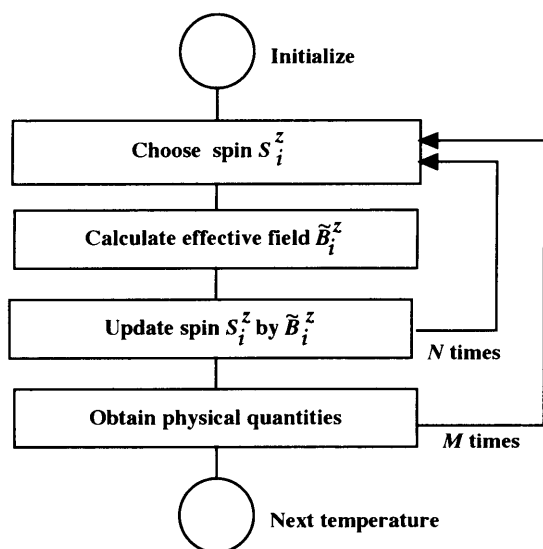


Fig. 2 Flowchart of the Monte Carlo method. Here, N is the number of spins and M is Monte Carlo step.

スピンの対して実行し終わったとき単位時間（1 MC ステップ）経過したとする。モンテカルロ法のフローチャートを示すと Fig. 2 となる。

2.4 例：3次元ハイゼンベルグモデル

3次元ハイゼンベルグモデルの磁気秩序のシミュレーションを考える。系のハミルトニアンは

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - mB \sum_i S_i^z \quad (12)$$

と与えられる。ここで $\mathbf{S}_i$ は長さ S （通常 $S=1$ と取る）の3次元ベクトルである¹²⁾。統計力学では熱力学極限（無限大の系）が問題とされるが、もちろん無限系は取り扱いえない。そこで、格子を $L \times L \times L$ とし、この格子サイズを大きくしていくことで無限系の性質を推測することになる。格子の境界条件は周期境界条件あるいは開放端境界条件とする。統計力学では周期境界が取られることが多いが、現実の物質は開放端である。シミュレーションは、多くの場合、初期状態を高温の常磁性状態として、少しずつ温度を下げながら物理量を測定していく（徐冷法）。徐冷法の最大の利点は、温度を下げるとともに低温で最も安定なスピン構造が自然に実現することである。Fig. 3 に強磁性体 ($J > 0$) のシミュレーション例を示す。高温から温度を下げてくると、 $T \sim 1.4 J/k_B$ で磁化 M が立ち上がり、比熱 C はピークを示す。格子サイズが大きくなるに従って、 M の立ち上がりは急峻になり C は鋭くなる。強磁性相転移が起こったことがわかる。統計力学では有限系の解析から無限系の性質を推測する強力な方法（有限サイズスケリング法）が開発されている。現在のコンピューターパワーでは $L \leq 100$ まで扱える。磁性体研究の面から見ると、一辺数 nm から数十 nm 程度の磁性微粒子の磁性ということになる。ただし、後に述べるように、実際の磁性微粒子という面から見

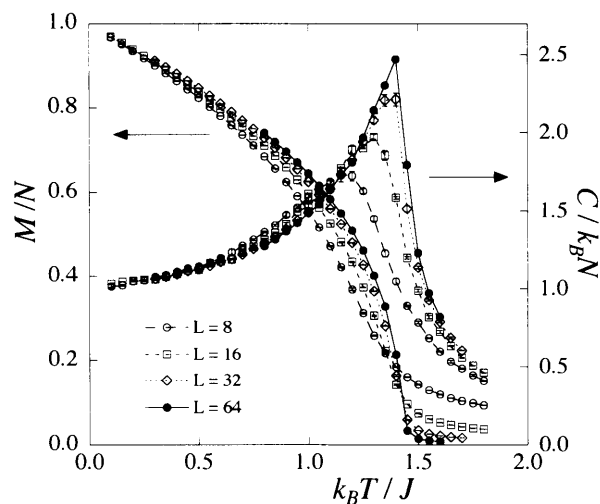


Fig. 3 Temperature dependences of the specific heat C and the magnetization M of a Heisenberg ferromagnet on $L \times L \times L$ lattices.

ると、式(12)では考慮されていない磁気モーメント ($\mu_i \equiv m\mathbf{S}_i$) 間の磁気双極子相互作用が重要となる。

2.5 スピン動力学法とモンテカルロ法のハイブリッド形式

シミュレーション法にはもう一つの大きな柱、分子動力学法 (MD) がある。これは多数の粒子からなる系の運動方程式を数値的に解き粒子の安定な状態や粒子の集団運動を見るものである。運動方程式を解くという意味で LLG 法と似ているが、LLG 法がエネルギー最小の状態（絶対零度の状態）を問題にするのに対して、有限温度の性質を問題にする。この際、温度は粒子のもつ運動エネルギーをもとに統計力学におけるエネルギーなど分配則と力学のビリアル定理を結合して決められる。

さて、スピン系ではどのようなになるか。本来スピンは量子力学の対象でありその運動はハイゼンベルグ方程式に従う。しかし、系の巨視的振舞を見るには、古典極限で考えてよくこのときはスピン $\mathbf{S}_i$ の運動は次のトルクの方程式で与えられる。

$$\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{S}_i = [\mathbf{S}_i \times m\hat{\mathbf{B}}_i]. \quad (13)$$

ここで、 $\hbar$ はプランク定数、 $\hat{\mathbf{B}}_i$ は式(11)で与えたスピン $\mathbf{S}_i$ にかかる有効場である。これを解けば、スピン系の MD（以下スピン動力学 (SD) 法と呼ぶことにする）ができるはずである。LLG 方程式との最大の相違点は LLG 方程式にある抵抗項（緩和項）がないことにある。LLG 法ではどのような状態から出発しても系は時間が経過するに従ってエネルギーを失っていき、ついにはエネルギーが減少しない状態（静止状態）に到達する。しかし、SD 法では系のエネルギーと角運動量（磁化）は保存される。つまり、いつまでも運動し安定な状態に到達できないことになる。そこで、エネルギーをコントロールし、系を徐々に冷やして

いくことができれば良いのだが、この系では粒子系の MD で成り立つ、温度とエネルギーを結びつける関係（エネルギー等分配則）が存在しない。そのため、SD 法は基底状態の近くのスピンドायナミックス（スピン波）研究など限られた問題にしか応用されていない。

SD に温度効果を取り入れるためにモンテカルロ法と組み合わせるハイブリッド法が提案された^{[10], [11]}。これは、ある温度をもった熱浴（実際には格子振動など）中でスピン系が運動していると考ええるもので、この熱浴との相互作用効果をモンテカルロ法で取り入れるものである。これは問題を複雑にしているように見えるが、緩和時間を劇的に短縮するなどモンテカルロシミュレーションの面からも有用である。

3. 微小磁性体のモンテカルロ法

微小磁性体に対するモンテカルロ法の応用を考えよう。この磁性体の磁気エネルギーはハミルトニアン

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - K \sum_i (\mathbf{S}_i^z)^2 + D \sum_{i \neq j} \left(\frac{\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\mathbf{S}_i \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{S}_j \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right) - m B \sum_i S_i^z \quad (14)$$

で与えられる。新たに加わった第2項は異方性エネルギー、第3項は磁気双極子相互作用エネルギーを表す。 K は異方性エネルギー定数であり、 $D (= (g\mu_B S)^2 / a^3)$ は磁気双極子相互作用定数である（ g, μ_B, a はそれぞれ、ランダウの g 因子、ボーア磁子、格子定数である）。モンテカルロ法は前節と同様に実行できるのであるが、有効磁場 $\vec{B}_i$ の計算が問題である。磁気双極子相互作用はすべてのスピン間に働くため $\vec{B}_i$ の計算には ' $N = (L^3)$ ' 回の積と和が出てくる。これをすべてのスピンの更新で計算しようとする、1 MC ステップあたり、' N^2 ' 回の計算が必要となる。すなわち格子の一边を2倍にすると64倍の時間がかかることになる。そこで何らかの近似が必要になってくる。

3.1 DUDMC 法

ここでは筆者らのグループで開発した効率的なシミュレーション法、不連続更新モンテカルロ (DUDMC) 法を紹介する⁷⁾。注目したのは次の2点である。(1) 個々のスピンの磁気双極子相互作用は非常に小さい。したがって、多くのスピン更新の結果の積み重ねとして、磁気双極子相互作用場の変化が生じる。(2) 個々のスピン更新は独立であり、多くのスピンの配置が同期して一度に変わることはない。(1) および (2) より、各スピンにかかる磁気双極子場を近隣のスピンからの場 $\vec{H}_i^{\text{near}}$ と遠くのスピンからの場 $\vec{H}_i^{\text{far}}$ に分け、 $\vec{H}_i^{\text{near}}$ は正確に計算し $\vec{H}_i^{\text{far}}$ の計算は m ステップごとに更新する。すなわち、遠くからの磁気双極子場を分子場的に取り扱おうというものである。この計算には高速フーリエ変換 (FFT) が利用でき、計算時間は N^2 のオーダーから $N \log_2 N$ のオーダーに短縮できる。

DUDMC 法 ($m=1$) のフローチャートを Fig. 4 示す。Table 1 に MC 法と $m=1$ の場合における DUDMC 法の 1MC ステップ当たりの計算時間を示してある。格子サイズが大きくなるとともに MC 法と DUDMC 法の差は大きくなっている。間隔 m を大きくすると、DUDMC 法の計算時間はさらに短くなる。64×64×64 の場合、 $m=2, 4, 8$ とすると計算時間は $m=1$ の場合の約 0.58, 0.36, 0.28 倍となった。DUDMC 法は、正確な MC 法の結果を再現しているであろうか。Fig. 5 に DUDMC 法をテストした結果を示す。転移点 T_c の近くで MC 法との差が現れる。これは、DUDMC 法が平均場の効果を与えることを示している。

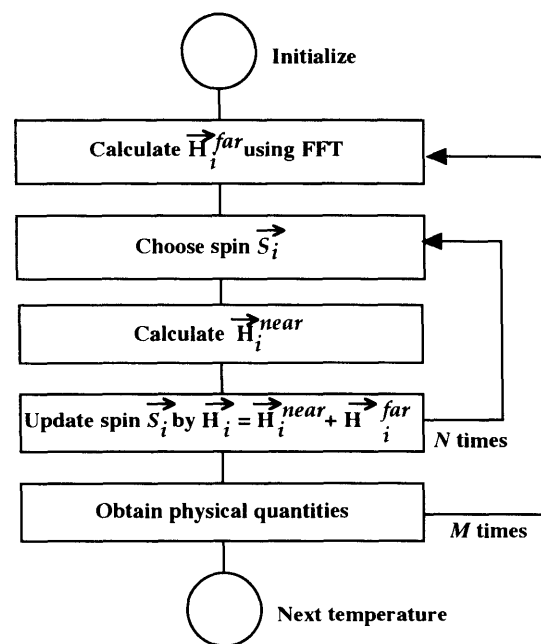


Fig. 4 Flowchart of the discrete update Monte Carlo (DUDMC) method.

Table 1 CPU times in milliseconds on a Pentium IV 2.8 GHz for one Monte Carlo sweep. The top and bottom values are the results for the DUDMC method and conventional MC method, respectively. We use a GNU g77 compiler with option -O5 and the FFTW3 library.^[13]

t	$L \times L$				
	8×8	16×16	32×32	64×64	128×128
2	0.31	1.38	6.17	30.42	141.41
	0.62	5.09	75.09	1175.8	—
4	0.61	2.97	12.73	65.62	292.64
	1.34	20.53	321.11	—	—
8	1.52	6.35	28.54	135.01	606.19
	5.61	78.63	1176.8	—	—
16	3.19	13.06	62.71	276.69	1280.2
	22.47	317.99	—	—	—
32	6.78	30.34	131.99	617.56	2756.3
	94.61	1285.1	—	—	—
64	16.18	73.95	315.57	1463.9	—
	361.9	—	—	—	—

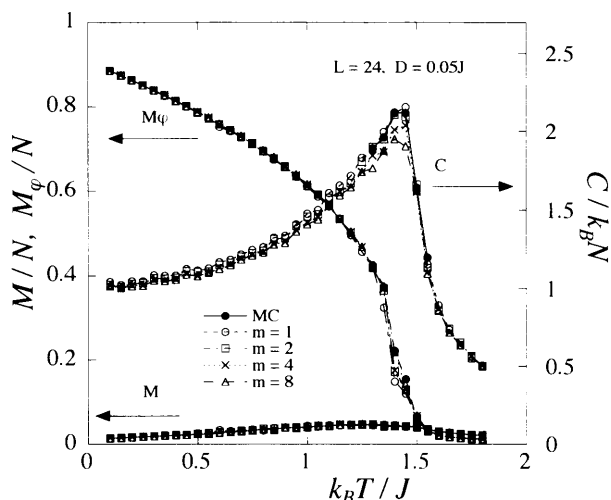


Fig. 5 m dependences of the specific heat C , the magnetization M , and the circular magnetization $M_\phi = \langle |[(1/N) \sum_i (\mathbf{S}_i \times (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_c)) / |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_c|]_z| \rangle$, where $\mathbf{r}_i$ and $\mathbf{r}_c$ are the position vectors of the i th spin and the center of the lattice, respectively.⁷⁾

る。注目すべきことは $m \sim 8$ 程度の大きな値としても MC 法の結果を定性的に再現していることである。特に、 $m \leq 2$ では定量的にもほとんど差は見られない。すなわち、定性的な性質を知りたいときには $m \sim 8$ ぐらいの大雑把な間隔で磁気双極子場を更新すればよいし、定量的にも正しい結果を知りたいときには $m \leq 2$ の間隔で更新すれば良いことになる。実際のシミュレーションでは 1 MC ステップ当たり 1 s ぐらいまでの計算時間が限度である。MC 法では格子サイズ $16 \times 16 \times 16$ ぐらいのドットのシミュレーションが限度であるが、DUDMC 法を使うと $64 \times 64 \times 32$ ぐらいのドットまで無理なく扱えることがわかる。

4. 応用例

DUDMC 法によるシミュレーションのいくつかの応用例を示そう。

4.1 微小磁性体の磁気秩序

Fig. 6 に $L \times L \times L$ の立方体の形状をもつ微小磁性体の DUDMC 法による磁気秩序のシミュレーション結果を示す。ここでは磁気双極子相互作用定数を $D = 0.01 J$ 、異方性および印加磁場はないものとしている ($K = 0, B = 0$)。比熱 C は Fig. 3 と同様に T_c ($\sim 1.4 J/k_B$) で鋭いピークを示し相転移が起こったことを示している。注目すべきは磁化 M の格子サイズ依存性である。小さい結晶 ($L \leq 16$) では、 M が T_c 以下の温度で出現し強磁性秩序が生じていることがわかる。しかし、結晶サイズが大きくなると、 $T < T_c$ でも M は現れない。何らかの磁区構造が実現していることを示唆している（実際には渦構造が実現している）。

4.2 デスクドットの磁化曲線

デスクドットでは渦構造が現れる¹⁴⁾。これは LLG 法に

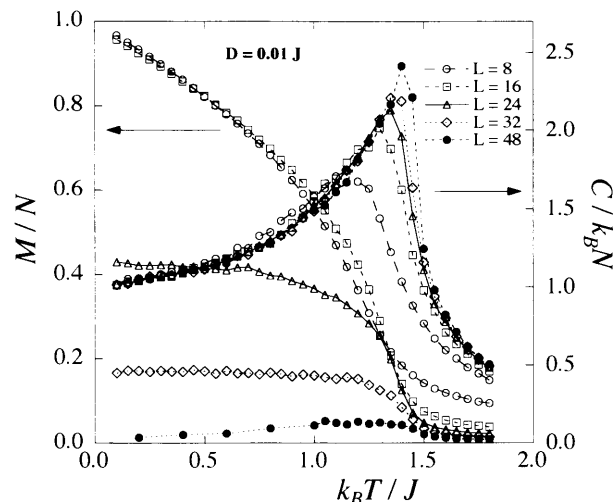


Fig. 6 Temperature dependences of the specific heat C and the magnetization M of a Heisenberg ferromagnet on $L \times L \times L$ lattices.

よるシミュレーションでもすでに研究されている。第二の応用例としてさまざまな大きさの円形デスクドットの磁化曲線を考える。デスクの直径を L とし厚さを t とする (Fig. 7)。磁気異方性はないとし ($K = 0$)、磁気双極子相互作用定数を $D = 0.05 J$ と取る。外部磁場はデスク面に平行に印加する。Fig. 8 に低温領域 ($T/T_c \sim 0.3$) におけるさまざまなサイズのドットの磁化曲線を示す。ここで T_c はバルクでの強磁性転移温度である。膜厚が小さいとき ($t = 2$) は単磁区構造に典型的な磁化曲線が、膜厚が大きくなると渦構造に典型的な磁化曲線が見られる。このシミュレーション結果は実験的に観測された磁化曲線を定性的に再現している²⁾。Fig. 9 に温度依存性を示す。温度を上げるとともに飽和磁場が減少していることがわかる。また、厚い試料 ($L = 48, t = 6$) で、極低温 ($T/T_c = 0.1$) の磁化が 2 段階消磁している。これは単磁区構造から渦構造に移る過程でドット外に中心をもつ渦構造が現れることに対応している。しかし、温度がある程度高いと渦の中心はすぐにドット内に入り一段階の不連続しか現れない。

ここで考えた磁気双極子相互作用定数 D は現実の磁性体の場合に比べて 1 桁大きく、また扱った系は実験的に研究されたドットのサイズに比べて 1 桁小さい。にもかかわらず類似の磁化曲線を再現する。これは、磁気双極子相互

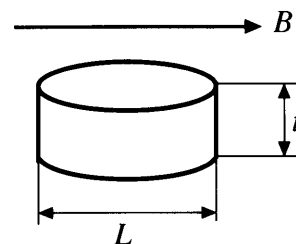


Fig. 7 Shape of dots.

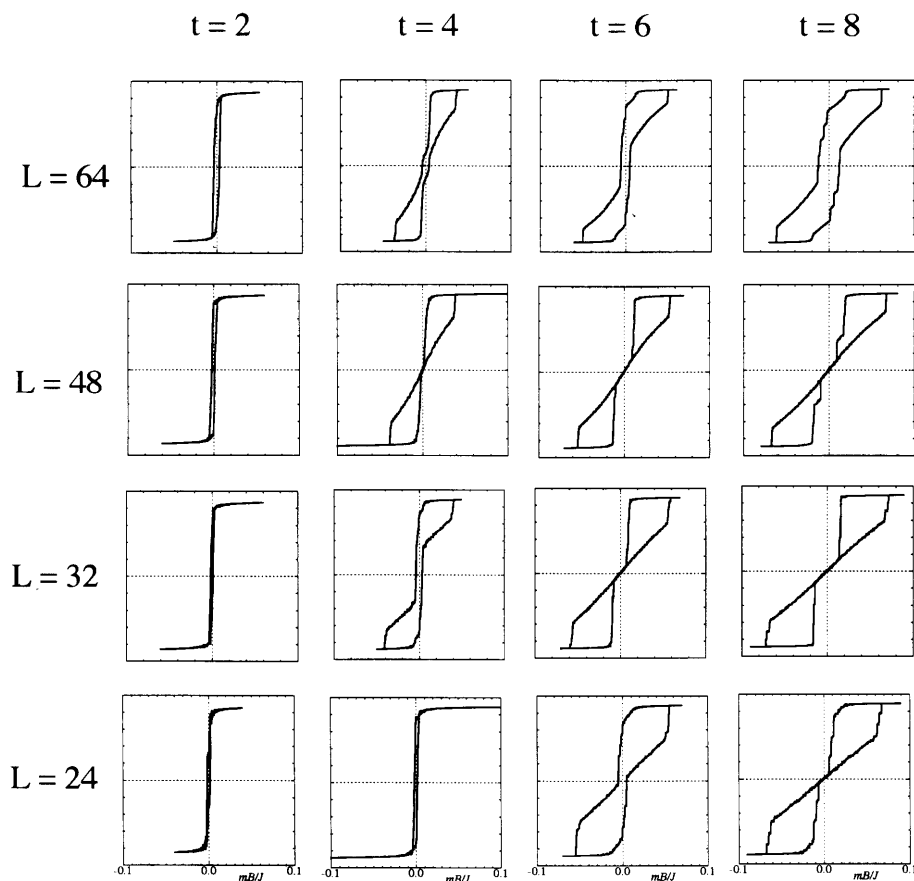


Fig. 8 Size dependences of the magnetization curves of the ferromagnetic dots at temperature $T/T_c=0.3$.

作用の効果が系のサイズの増大とともに大きくなることに
対応している。将来、コンピュータパワーの増大でより大
きな格子のシミュレーションが可能になると、より現実的
な大きさの磁気双極子相互作用の導入で同様な磁化曲線が
得られるであろう。

4.3 超薄膜磁性体の磁区構造

最近のエピタキシャル結晶成長技術により数原子層から
なる薄膜磁性体の作製が可能になった。それらの超薄膜磁
性体では、そのスピン構造が原子層数や温度に敏感に依存
する¹⁵⁾。この原因は表面磁気異方性と磁気双極子相互作用
の競合によると考えられているが、これを確認するシミュ
レーション例はない。この問題を式(14)をもとに
DUDMC法で考える¹⁶⁾。結晶サイズを $63 \times 63 \times t$ ($t=1, 2,$
 $\dots$) とし、磁気異方性 K は結晶の上下2表面層のスピン
のみに存在すると仮定する。ここでは $D=0.05J$, $K=J$ とす
る。

Fig. 10 にさまざまな原子層数におけるスピン構造のプロ
ファイルを示す。いずれの場合もスピンの膜面に垂直な
成分 S_i^z による磁区構造が見られる。原子層が小さいとき
は直線型の磁区構造になり、原子層数が大きくなるに従っ
て円形に歪んできてさらに大きくなると同心円上の磁区構
造になる。磁区境界ではスピンは境界に沿って回転しブ
ロッド型磁壁を形成する。Fig. 11 に $t=7$ の比較的厚い膜

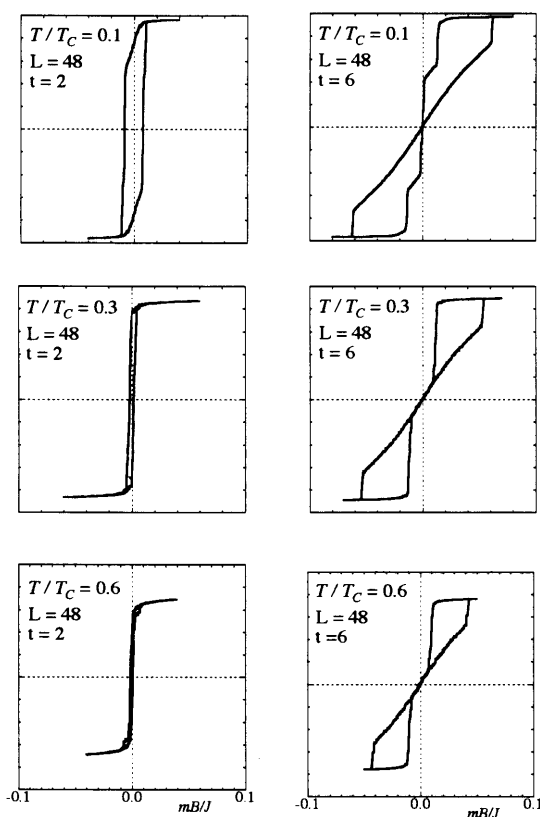


Fig. 9 Magnetization curves of the ferromagnetic dots at temperatures $T/T_c=0.1, 0.3$, and 0.6 .

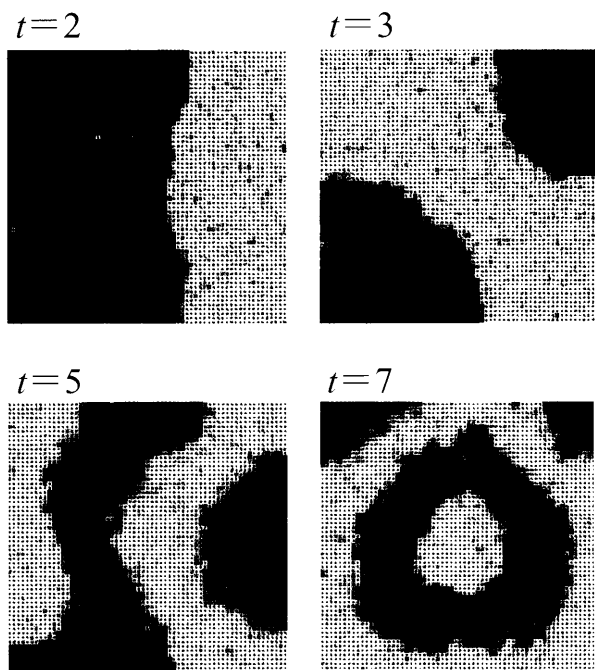


Fig. 10 Snapshots of the spin structure at $T/T_c=0.4$ for $L \times L \times t$ lattices. Here, T_c is the transition temperature of a bulk ferromagnet.

のスピンの温度依存性を示す。温度を下げてくるとまず膜面に平行な成分 S_i^x が渦状に配列し、さらに温度を下げると膜に垂直な成分 S_i^z が同心円状の磁区構造を示す。すなわち、 S_i^z 成分の磁区構造は S_i^x 成分の渦秩序によってもたらされていることがわかる。

ここで強調したいことは層厚 t は現実の超薄膜を模倣していることである。これは微視的モデル、式(14)によって初めて可能になった。

5. ま と め

本稿ではモンテカルロ法について述べ、筆者らのグループで開発した DUDMC 法とその応用例を示した。モンテカルロ法ではミクロなスピンハミルトニアンから出発する。このため微視的な相互作用と磁気特性、および磁性体の温度依存性を容易に解析することができる。しかし現実の物質のシミュレーションに適用するには膨大なメモリサイズと莫大な計算時間がかかる。このためモンテカルロシミュレーションはほとんどなされてこなかった。デバイスの微小化とコンピューターメモリの飛躍的集積化は実験とシミュレーションのサイズギャップを埋めつつある。さらに DUDMC 法により計算時間も実行可能なレベルになってきた。DUDMC 法による強磁性ドットの磁化過程のシミュレーションは実験結果を定性的に再現した。さらに、超薄膜磁性体の磁気構造のシミュレーション結果から、温度変化により多彩な磁気秩序パターンが現れることを示した。モンテカルロ法はスピン一つ一つの振舞をシミュレートする方法であり、結晶構造の特徴を取り入れた解析や異

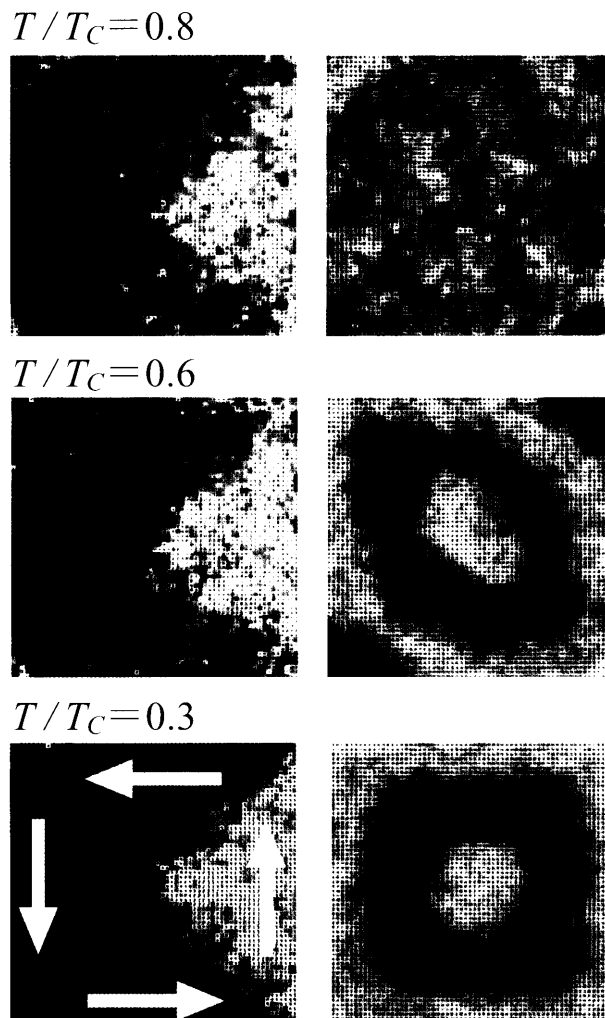


Fig. 11 Temperature dependence of the spin structure for a $63 \times 63 \times 7$ lattice. Left and right panels are the in-plane and the out-of-plane components, respectively. Here, T_c is the transition temperature of a bulk ferromagnet.

種磁性原子がある場合の解析も直接行うことができる。今後さらなるデバイスの集積化が進み、微視的モデルに基づいたシミュレーションのニーズが増えていくであろう。モンテカルロ法が材料設計、開発の強力な武器になることを期待したい。

謝 辞 この研究は阿部喜三男氏が在学中に筆者らと共同研究したものである。ここに深く感謝したい。

References

- 1) For example, S. Y. Chou: *Proc. IEEE*, **85**, 652 (1997).
- 2) R. P. Cowburn, D. K. Koltsof, A. O. Adeyeye, M. E. Welland, and D. M. Tricker: *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 1042 (1999).
- 3) For example, D. Mauri *et al.*: *Appl. Phys. A*, **49**, 437 (1988).
- 4) S. Ishio, J. Bai, H. Takahosi, and H. Saito: *J. Magn. Soc. Jpn.*, **28**, 834 (2004).
- 5) For example, Y. D. Yan, and M. Jursich: *IEEE Trans.*

- Magn.*, **25**, 3458 (1989).
- 6) H. Fukushima, Y. Uesaka, Y. Nakatani, and N. Hayashi: *J. Magn. Soc. Jpn.*, **28**, 957 (2004).
 - 7) J. Sasaki and F. Matsubara: *J. Phys. Soc. Jpn.*, **66**, 2138 (1997).
 - 8) For example, K. Binder and D. W. Heermann: Monte Carlo Simulation in Statistical Physics, Springer Ser., *Solid-State Sci.*, **80** (Springer, Berlin, Heidelberg, 1988).
 - 9) For example, L. D. Landau and E. M. Lifshitz: *Statistical Physics* (Pergamon, Oxford, 1958); C. Kittel and H. Kroemer: *Thermal Physics* (D. H. Freeman and Company, San Francisco and London, 1980).
 - 10) F. Matsubara, T. Iyota, and S. Inawashiro: *J. Phys. Soc. Jpn.*, **60**, 41 (1991).
 - 11) F. Matsubara and T. Iyota: *Progr. Theor. Phys.*, **90**, 471 (1993).
 - 12) In the Heisenberg model, the spin direction in the Metropolis method is given as $S^z = 2x_1 - 1$, $S^x = \sqrt{1 - (S^z)^2} \cos(2\pi x_2)$ and $S^y = \sqrt{1 - (S^z)^2} \sin(2\pi x_2)$ with x_1, x_2 being random numbers of (0, 1).
 - 13) <http://www.fftw.org/>
 - 14) T. Shinjo, T. Okuno, R. Hassdorf, K. Shigeto, and T. Ono: *Science*, **289**, 930 (2000).
 - 15) For example, R. Allenspach: *J. Magn. Magn. Mat.*, **129**, 160 (1994).
 - 16) F. Matsubara, S. Endo, and T. Sasaki: *J. Phys. Soc. Jpn.*, **72**, 1326 (2003).

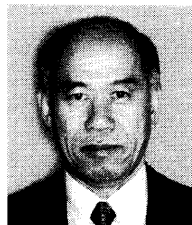
(2005年3月13日受理)



鈴木伸夫 すずき のぶお

平 10 東北大学大学院工学研究科応用物理学専攻博士課程修了, 同年 同助手, 平 12 東北文化学園大学科学技術学部応用情報工学科助手, 平 16 同講師, 現在に至る。

専門 計算機物理学, 物性理論 (工博)



松原史卓 まつばら ふみたか

昭 48 東北大学大学院理学研究科物理学専攻博士課程修了, 昭 51 東北大学工学部一般工学教室助手, 昭 61 同応用物理学科助教授, 平 6 同教授, 現在に至る。

専門 物性理論, 計算物理学 (理博)