

氏 名 (本籍)	李	昇	珍	(韓 国)
学 位 の 種 類	博	士	(工 学)	
学 位 記 番 号	博	甲	第 6023 号	
学位授与年月日	平成 24 年 3 月 23 日			
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当			
審 査 研 究 科	数理物質科学研究科			
学 位 論 文 題 目	ランダム磁気異方性を持つナノ結晶強磁性材料の磁気特性数値シミュレーション			
主	査	筑波大学教授	工学博士	喜 多 英 治
副	査	筑波大学教授	博士 (工学)	末 益 崇
副	査	筑波大学准教授	博士 (工学)	柳 原 英 人
副	査	筑波大学名誉教授	理学博士	大 嶋 建 一
副	査	東北大学客員教授	博士 (工学)	三 俣 千 春

論 文 の 内 容 の 要 旨

ナノ結晶材料は典型的なナノテクノロジーの例の一つとして広く研究されており、その中で磁性材料は優れた軟磁性が得られる材料として実用化に至っている。その磁気特性発現のメカニズムについても様々なモデルが提案されている。この材料では磁気異方性を有するナノ結晶粒子がランダムに配向しており、これらのナノ粒子が交換相互作用によって結合することで、異なる容易方向をもつ磁気異方性の効果が平均化されて、合成された磁気異方性が小さくなり軟磁性を発現する。これらの中で、合成される磁気異方性の範囲が交換結合長によって特徴づけられるとしたモデルは、ランダム磁気異方性モデルと呼ばれ、軟磁性化するナノ結晶材料の保磁力 H_c が結晶粒径 D に対して $H \propto D^6$ になるとの関係が Herzer によって示されていて、保磁力の発現機構を解釈する上で重要である。しかし、 D^6 則に対しては試料の形状や応力等の分布によって異なるとの報告もあり、その成立について他の手法による解析が必要である。

磁気異方性の合成効果に関しては、Herzer の解析モデルでは統計的手法によって計算を行うため、粒子径が非常に小さくても D^6 則を保ったまま保磁力が 0 になるという問題点が指摘されている。この問題を回避する方法として結晶微細化による欠陥や応力の影響が現れるとした解析も報告されている。しかし、応力の影響については D^6 則との関係が不明確な部分を多く残していることや、磁歪が異なる材料系についても D^6 則の成立範囲と保磁力最小値が類似していることを考慮すると、粒型の効果のみで保磁力の変化を説明可能なモデルの提案が重要と考えられる。

このような背景の下、数値モデルを用いてランダム異方性モデルを解析する試みも数少ないが成されている。有限要素法を用いた保磁力機構についての計算では、粒径の増加による保磁力の増大と、更なる粒径の粗大化による保磁力の低下を再現した。しかし、このモデルは保磁力の依存性が D^6 則から著しく異なっていることなど軟磁性ナノ結晶材料の数値モデルとしては不十分であった。

本研究では、ランダム異方性モデルの解析において、粒径の効果のみを考慮した解析モデルを構築することを目的とし、ナノ粒子間に働く交換結合磁場の定式化およびこれを用いた数値解析を行った。最初に系全体の交換相互作用を考え、一粒子の中では磁化の方向が一様というシングルスピン近似を適用する。この結果、

粒子内の相互作用は一定となり、粒子間磁気相互作用のみを考えることになる。i 番目の磁化に働く有効磁場を求める際に、相互作用は $1/D$ と粒径に反比例する関係を取り込んだ。 $N \times N \times N$ の格子点にランダムな磁気異方性を配置して格子点上の磁化の運動方程式を Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) 方程式によって扱い、微小時間経過後の磁化を離散的に計算するプログラムを開発した。周期境界条件を当てはめ、暫定的に得られる磁気分布から有効磁場を導出して安定解に到達するまで逐次計算を行った。可視化には 3 次元グラフソフト PovRay を利用し、色分けした矢印で磁化の方向を表した。

シミュレーション結果から、 $N=10$ では $D^{5/3}$ が得られ、ランダム磁気異方性モデルを数値計算で再現できることを示した。しかしながら計算サイズ N を増加させるにつれて、べき数にはわずかに減少する傾向が見られた。そこで N を 40 まで増加させて結果の違いを考察した。この際に収束判定において N に依る計算量の増加に対応する必要があることを見つけ、残差二乗和の平方根 Δ に対し、通常考えられる収束判定 $\Delta < N^3$ では精度が保てず、 N^2 の重みを採用することで計算精度を維持する経験法則を見いだした。 $N = 40$ まで変化させると試行間のばらつきは小さくなるものの $D^{4/3}$ まで変化することが分かった。得られた結果の可視化と共に、周期境界条件の影響を調べるために磁気モーメント間の相関を内積で評価した。その結果、交換結合長が成長すると共に、周期境界条件適用の影響が明らかに現れる事を見いだした。

審 査 の 結 果 の 要 旨

この研究は、ランダムな磁気異方性を持つナノ粒子集合体の磁化過程を動的に数値評価する事に成功したものである。ナノ粒子集合体の数値解析はほとんど例がなく、静的なエネルギー最小の配置を考える研究が行われてきた。しかしランダム系のように多くのエネルギー極小がある系では、磁化過程は動的な挙動を解析する方が、より現実に近いと考えられる。この研究の特徴は LLG 方程式を用いることで動的に磁気曲線を数値計算することと考えられる。また粒子間相互作用を $1/D$ で取り込む手法を提案したが、計算サイズ N を変化させても結果が変わらないところからも、正当性のある考え方と判断できる。シングルスピン近似という単純なモデルを適用した研究ではあるが、多くの知見と成果を最初に得たもので、この分野の研究の広がり予期させる研究と判断する。

平成 24 年 2 月 10 日、数理物質科学研究科学学位論文審査委員会において審査委員の全員出席のもと、著者に論文について説明を求め、関連事項につき質疑応答を行った。その結果、審査委員全員によって、合格と判定された。

上記の論文審査ならびに最終試験の結果に基づき、著者は博士（工学）の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。