

連続分布擬転位モデルの磁区構造論への応用

(昭和54年5月31日 原稿受付)

物理学教室 近 浦 吉 則

Application of Quasi-Dislocation Theory
to the Ferromagnetic Domain Theory

by Yoshinori CHIKAUURA

Abstract

In the course of X-ray topographic study of domain wall contrast of 90° walls in iron whisker, the previous domain theory has been found of some defects on the stable orientation of walls. The previous theory has taken only the wall energy into account but not the effect of magnetostriction. As is well known, ferromagnetic crystals have their own magnetostriction, and therefore in order to keep the lattice coherency at the wall the adjacent domain must be distorted. The distortion, which generates elastic energy and magnetoelastic energy in the crystal, depends on the wall orientation.

Accordingly the wall orientation should be determined by the condition that the sum of the wall, elastic and magnetoelastic energies is minimum. Quasi-dislocation theories developed by Kröner and Mura has been applied to investigate the lattice coherency at the domain wall. The theoretical wall orientations have coincided well with the experimental results by X-ray topography.

§1. はじめに——従来の磁区構造論の整理

1.1. 問題の端緒

磁区概念は Weiss¹⁾の提唱に始まり Barkhausen²⁾ Bitter³⁾ Neel⁴⁾ Williams⁵⁾および Stewart⁶⁾らによって1950年頃までに確立し、バルク結晶の表面磁区構造はほぼ把握されるようになった。以降、磁区の形態と挙動の研究は、強磁性体の性質を理解するうえで有意義な知識をもたらしている⁷⁾。しかしなお今日、結晶内部の磁区の形状や磁壁の安定方位に関して曖昧な議論がなされている。例えば鉄の90°磁壁はその表面磁区図形から結晶内部において{110}面にあることが推測されるけれども、理論的にはこの方位はエネルギー的に不安定であるという矛盾を次の様に理解している⁸⁾。すなわち{110}面の90°磁壁はエネルギー的に安定と考えられる{111}面の磁壁から構成され、ジグザグ状の形をとっているものと考えられる。しかし著者ら⁹⁾は、X線トポグラフィによる鉄ウイス

カーの観察過程で結晶内部の90°磁壁は表面の磁区の大きさによって磁壁の方位が変化することに気づいた。これは従来の詭弁的な考え方をもちしても説明できないものである。そこで本論文において従来の磁区構造論を再検討し、磁区のあるべき姿を正しく記述する磁区構造の考え方を示す試みを行なう。この問題の解決のために磁壁を擬転位の連続分布モデルに置換することを試み、磁壁方位に依存するエネルギー因子の定量化を行なった。まず§1において磁区構造を決めるエネルギー因子の整理を行い疑問点を明らかにする。§2において、磁壁方位に依存するエネルギーを解析的に求める方法を提案する。

1.2. 磁区構造に寄与するエネルギー因子

磁区構造は結晶のもつヘルムホルツの自由エネルギーが極小になるように形成される。この自由エネルギーに寄与するエネルギーとして従来の磁区構造論においては(i)~(iv)で述べる4種のエネルギーがある。以下そ

これらのエネルギー因子の磁区構造に及ぼす効果を整理する。

(i) 交換エネルギー

強磁性体の隣接スピン間には Heisenberg の交換力* γ_{ij}

$$\gamma_{ij} = -2JS^2 \cos \theta_{ij} \quad (1)$$

j : 交換積分定数
 S : 原子の全スピン量子数
 θ_{ij} : 隣接スピンのなす角度

が働く。強磁性体の場合には交換積分 J は常に正の値をとり、種々の原子について定量化されている。

例えば鉄では

$$J = 2.16 \times 10^{-14} \text{ [erg]}$$

である。 $J > 0$ のときには $\theta_{ij} = 0$ のときに γ_{ij} は極小になる。従って結晶格子のすべての磁気モーメントが平行にそろって自発磁化がつけられる。もし自発磁化を有するある領域に、それとは異なる方向をもつ自発磁化の領域が接触することがある場合 (1-3節参照)、その境界において磁気モーメントは交換エネルギーの存在によって徐々に変化する領域 (磁壁) が生ずる。この磁壁によって結晶全体につくられるものが磁区構造であるから、この交換エネルギーは磁壁のエネルギーを介して磁区構造に関与してくる。磁壁のエネルギーを計算するときは、単位体積の交換エネルギー

$$E_{ex} = \sum_{i,j} \gamma_{ij}$$

を、 $\theta_{ij} \ll 1$ として展開し、2次の近似を用いる。すなわち

$$E_{ex} = JS^2 \sum \theta_{ij}^2 + C \quad (2)$$

C : 定数

(ii) 磁気異方性エネルギー

強磁性体の3d電子のスピン軌道相互作用の結果、結晶の内部エネルギーがスピン方向 (自発磁化の方向) に依存する部分を磁気異方性エネルギーという。¹¹⁾鉄やニッケルのような立方晶系結晶では、このエネルギーの体積密度 E_{an} は、座標軸を結晶軸に一致させると、

* 厳密にはすべてのスピン相互に作用するが、この作用は近距離作用力であるので隣接スピン間の力だけ考えれば磁区構造論においてはさしつかえない。

$$E_{an} = K_1(a_1^2 a_2^2 + a_2^2 a_3^2 + a_3^2 a_1^2) + K_2 a_1^2 a_2^2 a_3^2 \quad (3)$$

K_1, K_2 : 異方性定数

a_1, a_2, a_3 : 磁気モーメントの方向余弦

と近似的に表わすことができる。室温では

鉄の場合 : $K_1 \approx 4.2 \times 10^5 \text{ [erg/cm}^3\text{]}$

$K_2 \approx 1.5 \times 10^5 \text{ [erg/cm}^3\text{]}$

ニッケルの場合 : $K_1 \approx -5.1 \times 10^4 \text{ [erg/cm}^3\text{]}$

$K_2 \approx 0$

である。 $K_1 > 0$ の鉄の場合には式(3)の第1項の極小は $\langle 100 \rangle$ の3つの方向に現われ、 $K_1 < 0$ のニッケルの場合には $\langle 111 \rangle$ の4つの方向がエネルギー極小の方向となる。これらの方向がそれぞれの結晶の磁化容易軸となる。従って磁気異方性エネルギーは、磁化容易方向に磁化した結晶の内部エネルギーと他の任意の方向に磁化したそれとの差分のエネルギーである。これは磁壁のエネルギー等に直接関与してくる。

(iii) 静磁気エネルギー

静磁気エネルギーは、外部磁場に対して結晶のもつポテンシャルエネルギー E_{exm} と反磁場エネルギー E_{dem} の和である。前者は、外部磁場を H 、結晶の磁化を I とすると

$$E_{exm} = -I \cdot H \quad (4)$$

で与えられる。

後者の反磁場エネルギーは結晶表面上に現われる自由磁極間のクーロン相互作用エネルギーである。これらの自由磁極は反磁場 H_d をつくる。一様に磁化しているときは、 H_d と I は同じ方向をもつから、

$$H_d = -NI/\mu_0 \quad (5)$$

N : 反磁場定数

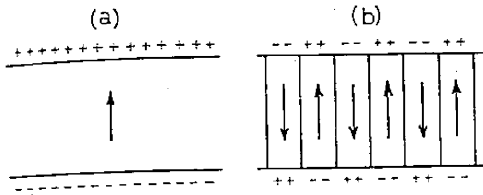
μ_0 : 真空中の透磁率

の関係がある。故に

$$\begin{aligned} E_{dem} &= -\frac{1}{2} \iiint (I \cdot H_d) dv \\ &= -\frac{1}{2} I^2 N / \mu_0 \end{aligned} \quad (6)$$

で与えられる。

ここで図-1(a)に示すように磁化容易軸が1つ存在し、その軸に垂直な広がりをもつ結晶について考える。全体が一様な磁化をもつ単分極では $N = -1$ だから、式(6)よ



図一 静磁気エネルギーの効果。(a)単一磁区、
(b)多磁区

り反磁場エネルギーは

$$E_{dem} = I^2/2\mu_0 \quad (7)$$

また外部磁場はないから、ポテンシャルエネルギーは

$$E_{ext} = 0 \quad (8)$$

となる。鉄、ニッケルの様な強磁性体の場合には、 E_{dem} は 1×10^7 [erg/cm³] の程度となり、異方性エネルギー E_{an} より 1~2 桁以上も大きい値となる。従って、表面上の自由磁極の総量が減少するような磁区構造、例えば還流磁区構造、表面近傍での磁化ベクトルの傾斜 (μ^* 効果) が生じたり、あるいは図-1(b)のように磁極の総量は不変であるが、近接する逆符号の磁極が相殺する磁区構造に変化することになる。図-1(b)の反磁場エネルギーは

$$E_{dem} = (2I^2 D / \pi^3 \mu_0) \sum_{odd} 2/n^3 \\ = 1.08 \times 10^4 I^2 D \quad (9)$$

D : 磁区間隔

例えば $D \approx 10^{-2}$ [cm] のとき、 $E_{dem} \approx 10^3$ [eng/cm³] となり、図-1(a)の構造より 10^{-4} 倍もエネルギーは減少する。

以上から強磁性体が磁区構造をとる主な原因が静磁気エネルギーの存在であることがわかる。異方性エネルギーが極端に大きい場合や 1 軸性の結晶を除くと一般に結晶表面およびその内部に自由磁極はほとんど生じない磁区構造が可能である。この様なときは、静磁気エネルギーの考慮は必要でなくなる。次節で述べる磁壁の方向に関する理論もこの場合である。

(iv) 磁気弾性エネルギーおよび弾性エネルギー

スピン間の相互作用エネルギーはスピン対の間隔と方向に依存するため、磁性体は磁化するともに磁歪を生ずる。この相互作用エネルギーの格子歪に依存する部分

(磁気弾性エネルギー) E_{me} は歪のない状態を基準にして計算することができて、

$$E_{me} = B_1 \sum_i e_{ii} a_i^2 + B_2 \sum_{i,j} e_{ij} a_i a_j + B_3 \sum_j e_{jj} \quad (10)$$

B_1, B_2 : 磁気弾性結合定数

一方、磁歪による弾性エネルギー E_{el} は弾性論によれば

$$E_{el} = \frac{1}{2} C_{11} \sum_i e_{ii}^2 + C_{12} \sum_{i,j} e_{ii} e_{jj} + \frac{1}{2} C_{44} \sum_{i,j} e_{ij}^2 \quad (11)$$

C_{11}, C_{12}, C_{44} : 弾性定数

である。

定数 B_1, B_2 と磁歪の関係は(9)と(10)の和

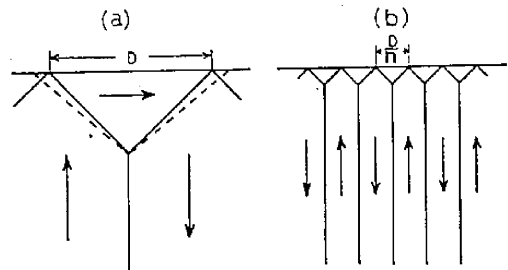
$$E = E_{me} + E_{el} \quad (12)$$

の e_{ij} についての極小条件から

$$\left. \begin{aligned} B_1 &= -\frac{3}{2} \lambda_{100} (C_{11} - C_{12}) \\ B_2 &= -3 \lambda_{111} C_{44} \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

ただし $\lambda_{100}, \lambda_{111}$ は自発磁化が $\langle 100 \rangle, \langle 111 \rangle$ 方向の時の伸び歪である。

外部磁場のかかっていない結晶では、その磁区構造の違いにかかわらず、その自発磁化は一定の磁化容易軸をとるから、磁化容易方向の磁歪による E_{me} と E_{el} は一定となる。この限りにおいて、両者は磁区構造に寄与しないわけであるが、しかし大きな磁区 (Matrix domain) の中に磁歪の方向の異なる小さな磁区 (Minor domain) があると、小さな磁区内部に余分の磁歪が生じる。この歪によって E_{me} と E_{el} が生じる。このエネルギーは、小さな磁区を更に小さくすることによって減少することが可能な場合もある。例えば鉄(100)面の端にしばしばみられる還流磁区図-2(a)および(b)をみてもみる。



図二 磁歪の効果、点線は磁歪が正のとき格子変位の傾向を示す

三角形磁区内部におおよそ λ_{100} の歪が生じるから、
単位体積あたり

$$E_{el} = \frac{1}{2} C_{11} \lambda_{100}^2 \quad (14)$$

の弾性エネルギーが存在する。故に図-2(a)では結晶全体に貯えられる弾性エネルギー E_{el} は

$$E_{el} = E_{el} \times \left(\frac{D^2}{4} \right) \quad (15)$$

一方、図-2(b)の場合には

$$E_{el} = E_{el} \times \left(\frac{D^2}{4} \right) \times \frac{1}{n} \quad (16)$$

となる。磁気弾性エネルギー E_{me} も E_{el} とほぼ同程度であるから、 E_{me} と E_{el} は(15)、(16)の比較から小さな磁区の分割に寄与することがわかる。しかしながら、磁歪定数そのものは磁壁の方位には依存しないので、上記の E_{me} 、 E_{el} はいずれも磁壁方位には何ら影響を与えない。第3章以降で述べるように、磁歪定数以外の余分の磁歪が発生するようなことがおこれば、(16)および(15)は結晶内部の磁壁の位置と方位に関与してくることになるであろう。

1.3. 磁区構造との一般的関連と磁壁エネルギー

結晶内の磁化ベクトルの分布は(i)~(iv)の各エネルギーの総和(結晶のもつヘルムホルツの自由エネルギー)の極小条件から定まる。この磁化ベクトルの分布に及ぼす各エネルギー項の効果は、以下のようになる。交換エネルギーはスピンの方向をそろえ、結晶に自発磁化を与える作用を、磁気異方性エネルギーは、そのそろった磁化ベクトルを磁化容易方向へ向ける働きをする。一方、静磁エネルギーによって、(a)内部とは異なる磁化ベクトル方向をもつ磁区や、(b)交互に正負の磁化ベクトルをもつ磁区が生じる。また通常磁歪によって生じる磁気弾性エネルギー及び弾性エネルギーは磁区の分割に寄与する。隣り合う磁区の境界には、交換エネルギーの存在によって磁化ベクトルが、自由磁極が生じないように(Néel則¹⁾)、徐々に回転した遷移層すなわち磁壁が生じる。この磁化ベクトルの磁化容易方向からの回転は、磁気異方性エネルギーの増加をもたらす。他のエネルギーはほとんど関与しないから、磁壁には

$$E = E_{ex} + E_{an} \quad (17)$$

を極小にするような磁化ベクトルの分布が生ずる。バルク結晶におけるこの磁壁(Bloch磁壁¹²⁾)の場合には(17)

の極小条件より、単位面積当り

$$\Phi_w = 2\sqrt{A} \sin^2 \varphi \int_{\theta_1}^{\theta_2} E_{an}(\varphi, \theta) d\theta \quad (18)$$

のエネルギーをもつ。

ここで、

- φ ; 磁壁と磁化ベクトルとのなす角
- θ ; 磁壁内の磁化ベクトルの相対的方位角

$$A = \begin{cases} 2JS^2/a; & \text{体心立方格子} \\ 4JS^2/a; & \text{面心立方格子} \end{cases}$$

a ; 格子定数

例えば90°磁壁では $\theta_1 = 0$ 、 $\theta_2 = \frac{\pi}{2}$ で、 φ は変化できる。すなわち、磁壁エネルギー Φ_w は磁壁の方位に依存する。式(18)の Φ_w は磁壁が Néel 則をみたす方位の関数として、数値計算によって求められている。¹³⁾ Néel 則によって2つの自由度が限定された磁壁方位の残り1つの自由度は Φ_w の φ 依存によって決る。任意の与えられた結晶において磁壁方位は磁壁エネルギー密度 Φ_w とその面積(幾何学因子)の積の極小条件より求められている。しかしこの考え方からえられる磁壁方位は、180°磁壁の場合には観察結果とよく一致しているが、それ以外の磁壁(例90°、109°、71°磁壁等)の場合には著者の実験結果¹⁴⁾と大きく異なっている。それはとりもなおさず Φ_w のみを考慮した磁区構造論の不備を示すものである。

§2. 磁壁方位に依存する磁気弾性相互作用

2.1. 磁壁の擬転位モデル

従来の磁区構造論において認識されなかったことは、磁壁の方位に依存する格子歪の存在である。具体的に鉄90°磁壁を例にとってみる。図-3の(a)および(b)は90°磁壁がそれぞれ110 $\bar{1}$ 面および100 $\bar{1}$ 面にあるときの格子変位の模型である。(a)では両磁区の全体的回転によって90°磁壁面で格子は整合し得る。ところが(b)の100 $\bar{1}$ 磁壁の場合には、界面位置での変位の一価連続性を保つために格子は点線のように変位し格子歪が発生する。ニッケルの71°、109°磁壁等においても事情は同じである。この節での問題は、この格子歪を磁壁方位の解析的関数として求めることである。これが得られると式(18)、(17)から磁気弾性および弾性エネルギーは容易に求めることができる。Kröner¹⁵⁾によると歪(U_{ij})は応力を生じる弾性歪 β_{ij} と応力の生じない塑性歪 β_{ij}^p とに分けることができる(図-

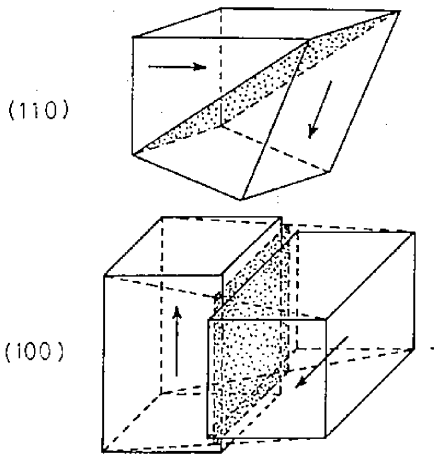


図-3 磁壁の方位に依存する格子歪の発生を示す。(a)磁壁が(110)面にあるとき、両磁区の格子は単に相対的に回転するだけである。(b)磁壁が(100)面にあるときは変位の1価連続性を保つため点線で示すような格子変位が発生する。

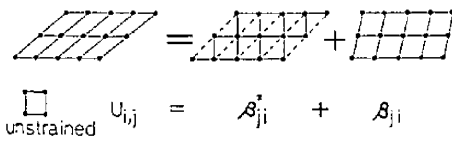
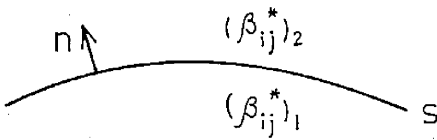


図-4 変形物体におけるディストーション、 β_{ij}^* : 塑性歪, β_{ij} : 弾性歪



$$[\beta_{ij}^*] = (\beta_{ij}^*)_2 - (\beta_{ij}^*)_1$$

図-5 2つの分域における塑性歪と界面の定義

4)。磁歪は本来それがあることによってエネルギー的に安定化するものであるから、塑性歪の一種であるとみなすことができる。塑性歪は連続分布擬転位の転位密度テンソルと次の関係がある¹¹⁾

$$a_{nj} = -\sum_i \sum_l \epsilon_{nli} (\partial \beta_{li}^* / \partial x_l) \tag{19}$$

ϵ_{nli} ; 順列記号 1, 2, 3 の右回りで 1, 左回りで -1, その他は 0 の値をもつ

転位密度テンソル a_{nj} は x_n 軸に垂直な単位面積を垂直に貫通している転位のバーガスベクトルの総和の x_j 成分を意味する。式(19)は塑性歪の変化している場合に擬転位が連続分布することを示すものである。塑性歪 β_{li}^* が変化しているところが面状であれば(図-5), その面の法線ベクトルを n として式(19)は

$$a_{nj} = -\sum_l \sum_i \epsilon_{nli} (\beta_{li}^*)_i \tag{20}$$

$$(\beta_{li}^*)_i = (\beta_{li}^*)_n - (\beta_{li}^*)_l \tag{21}$$

と書きなおすことができる。ここに $[\beta_{li}^*]$ は面両側の塑性歪 $(\beta_{li}^*)_n, (\beta_{li}^*)_l$ の差である。磁壁は磁歪という塑性歪がある厚さにわたって変化している界面層であると考えたと磁壁は式(19)によって擬転位の連続分布に置換することができる。ここで簡単のため磁壁の厚さを無視すると、計算は式(20)および(21)に従うことができる。磁壁の厚さは強磁性金属では数百 Å の程度であるから磁壁内部に貯えられる磁気弾性および弾性エネルギーは磁壁エネルギーの $10^{-3} \sim 10^{-1}$ 倍となって、この仮定は以下の議論には充分よい近似である。不連続的に分布する 1 本の転位の応力場 σ_{ij} と歪場 e_{ij} はすでに求められているから、磁壁と等価な擬転位分布による応力場 σ_{ij} と歪場 e_{ij} はそれぞれ

$$\sigma_{ij} = \iiint_V \delta_{ij}^* a_{nj} dx_1 dx_2 dx_3 \tag{22}$$

$$e_{ij} = \iiint_V \tilde{e}_{ij}^* a_{nj} dx_1 dx_2 dx_3 \tag{23}$$

となる。従ってこの e_{ij} によって生じる弾性エネルギー Φ_{el} は単位体積当り

$$\begin{aligned} \Phi_{el} &= \frac{1}{2V} \iiint_V \sum_j \sum_l \sigma_{ij} e_{ij} dx_1 dx_2 dx_3 \\ &= -\frac{1}{2V} \iiint_V \sum_j \sum_l \sigma_{ij} (\beta_{li}^*)_i dx_1 dx_2 dx_3 \end{aligned} \tag{24}$$

与えられる。

一方歪場 e_{ij} が生じる磁気弾性エネルギー Φ_{me} は、式(10)から容易に求められる。

2.2. 磁壁の実効エネルギー

前面で導いた Φ_{el} および Φ_{me} の存在と磁区構造との

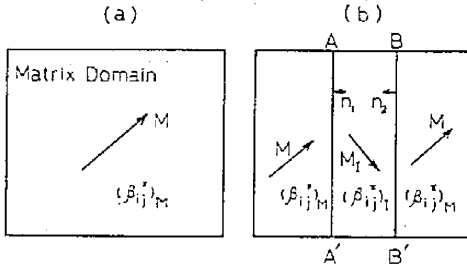


図-6 マトリックス磁区(M)の中の小さな磁区(M_I)の形成, AA': +磁壁, BB': -磁壁, n: 磁壁面単位ベクトル

関連を知るために図-6(a), (b)の模型を考える。図-6(b)のように一定の磁化ベクトル M をもつ大きな磁区 (matrix domain) の中に, M と異なる磁化ベクトル M_I をもつ小さな磁区 (minor domain) I が導入され, 2枚の磁壁 $\overline{AA'}$ および $\overline{BB'}$ が形成されたとする。両磁壁 $\overline{AA'}$, $\overline{BB'}$ の座標を共通にとると, 両磁壁の $[\beta_{ij}]$ 及び法線ベクトル n_1, n_2 は

$$[\beta_{ij}]_{\overline{AA'}} = [\beta_{ij}]_{\overline{BB'}} = (\beta_{ij})_I - (\beta_{ij})_M \quad (25)$$

$$n_1 = -n_2 \quad (26)$$

となって式(26)より

$$(a_{ij})_{\overline{AA'}} = (a_{ij})_{\overline{BB'}} \quad (27)$$

が成り立つ。

これは磁壁 $\overline{AA'}$ および $\overline{BB'}$ は同質異符号の擬転位分布に置換されることを意味する。1枚の磁壁の場合は $\overline{AA'}$ と $\overline{BB'}$ の距離を ∞ にすればよい。領域 I に式(25)の歪性歪 $[\beta_{ij}]$ を与えると, その応力場と歪場は式(22), (23)より領域 I にのみ存在する。すなわち Φ_{el} および Φ_{me} は磁区 I の中に貯えられる。そこで両者の和

$$\Phi_d = \Phi_{el} + \Phi_{me} \quad (28)$$

に磁区エネルギー (domain energy) という名称を与える。従って図-6(b)の2枚の磁壁の存在によるエネルギー増加は, 次式で与えられる。

$$2\Phi_{eff} = 2\Phi_w + \Phi_d \quad (29)$$

ここで Φ_{eff} は1枚の磁壁が寄与するエネルギー増加であって磁壁の実効エネルギーと呼ぶことにする。

以上のことから磁壁の方位は単に磁壁エネルギー Φ_w のみではなく, 本論文で導入した磁区エネルギー Φ_d と Φ_w の和である実効エネルギー Φ_{eff} の極小条件から決まるものであることが結論される。

§3. 結 び

従来の磁区構造論では磁壁の方位は磁壁エネルギーの極小条件から決まるものとする。しかし鉄ウィスカーのX線トポグラフ観察の過程で, 結晶内部の90°磁壁の方位が従来磁区構造論では説明できないことに気づいた。この問題を解決するために磁壁を擬転位モデルに置きかえ, 磁壁の方位に依存する磁気弾性相互作用を評価した。ここで展開した考え方によれば磁壁方位は磁区内部に磁壁方位に依存する“磁区エネルギー” Φ_d と磁壁エネルギーの和 (実効エネルギー Φ_{eff}) の極小条件から決まるべきものであることが結論された。本理論の健全性は, 実在する磁壁に適用し観察結果との比較によって実証されるであろう。

参 考 文 献

- 1) P. Weiss: J. de Phys. 6 (1907) 661.
- 2) H. Barkhausen: Z. Phys. 20 (1919) 401.
- 3) F. Bitter: Phys. Rev. 38 (1931) 1903.
- 4) L. Néel: Cahiers Phys. 25 (1944) 1.
- 5) H. J. Williams et. al.: Phys. Rev. 75 (1949) 155.
- 6) K. H. Stewart: Ferromagnetic Domains. (Cambridge Univ. Press, London, 1954).
- 7) H. Trauble: Moderne Probleme der Metallphysik, Vol. 2. (Springer-Verlag, Berlin, 1966).
- 8) S. Nagakura and Y. Chikaura: J Phys. Soc. Japan 30 (1971) 495.
Y. Chikaura and S. Nagakura: Acta Cryst. A28 (1972) 235.
- 9) Y. Chikazumi et. al.; J. Phys. Soc. Japan 10 (1955) 523.
- 10) W. Heisenberg; Z. Phys. 49 (1928) 619.
- 11) J. H. Van Vleck; Phys. Rev. 52 (1937) 1178.
- 12) L. Spacek; Ann. Phys. 7 (1960) 217.
- 13) E. Kröner; Theory of Crystal Defects. (Academic Press, 1966).
- 14) T. Mura; Advances in Materials Science, Vol. 3. (John-Wiley and Sons, 1968).