

トポロジカルナノ磁気構造の  
発現・安定性機構の理論研究

**Theoretical study of emergence and  
stabilization of topological nano magnetic  
structures**

田中 康平  
**Kohei TANAKA**

2021年2月

トポロジカルナノ磁気構造の  
発現・安定性機構の理論研究

Theoretical study of emergence and  
stabilization of topological nano magnetic  
structures

田中 康平

Kohei TANAKA

早稲田大学大学院 先進理工学研究科  
ナノ理工学専攻 ナノキラル科学研究

2021年2月



# 目次

<b>第 1 章</b>	<b>背景</b>	<b>1</b>
1.1	非共線磁気構造について	1
1.1.1	直接交換相互作用-ポテンシャル交換	1
1.1.2	直接交換相互作用-運動交換	3
1.1.3	超交換相互作用	4
1.1.4	ジャロシンスキー・守谷相互作用	6
1.1.5	磁壁	9
1.1.6	トポロジカル不変量と一次元キンク解	11
1.1.7	二次元渦	14
1.1.8	二次元スキルミオン	15
1.2	磁気スキルミオン	21
1.2.1	歴史	21
1.2.2	実験による観測	21
1.2.3	スキルミオンの特徴的ふるまい	29
1.2.4	応用の試み	30
1.2.5	磁気スキルミオンの相図	32
1.2.6	安定領域の拡大	32
1.2.7	スキルミオンのモンテカルロシミュレーション	35
1.3	磁壁と非整合ブロッホライン	36
1.4	本研究の目的・意義と概要	41
<b>第 2 章</b>	<b>計算方法</b>	<b>42</b>
2.1	Landau-Lifshitz-Gilbert 方程式 (磁化の時間発展方程式)	42
2.2	古典スピン系のモンテカルロ法	44
2.3	引っ張り歪み由来の DM 相互作用の変調を考慮したモデルハミルトニアン	48
<b>第 3 章</b>	<b>一軸引っ張り歪み由来の異方性ジャロシンスキー守谷相互作用によるスキルミオンの安定化</b>	<b>51</b>
3.1	計算結果	51
3.2	考察	61
<b>第 4 章</b>	<b>非整合ブロッホラインの形成</b>	<b>63</b>
4.1	計算結果	63
4.2	考察	66
<b>第 5 章</b>	<b>総括</b>	<b>68</b>



# 第1章 背景

## 1.1 非共線磁気構造について

### 1.1.1 直接交換相互作用-ポテンシャル交換

ここからは、芳田奎著「磁性」[1]および川村光著「スピンと磁性」[2]を参考に、磁性原子中のスピン<sup>1</sup>間に働く基本的な相互作用についてまとめる。強磁性、反強磁性などの長距離磁気秩序の発現では、量子力学的効果に基づく相互作用が重要になる。低温でスピンを互いに平行または反平行に向ける相互作用として、

$$-JS_1 \cdot S_2 \quad (1.1)$$

のように、二つのスピン  $S_1, S_2$  の内積の形で書ける交換相互作用がある。 $J > 0$  の場合スピンを同じ方向に向けたがり、強磁性的である。逆に  $J < 0$  の場合反強磁性的である。交換相互作用にはいくつかのタイプがある。隣り合うイオン間で交換相互作用が直接働く場合を直接交換相互作用という。直接交換相互作用はさらにポテンシャル交換と運動交換に分類される。

ポテンシャル交換は、定性的には Pauli 原理による Coulomb 相互作用の利得で理解される。 $d$  電子同士の Coulomb 相互作用を考え、 $d$  電子の波動関数を  $\phi(\mathbf{r})$  とおく。この時 Coulomb 相互作用の期待値は、第二量子化の表示で

$$\frac{1}{2} \sum_{nms_1s_2} \langle n_1m_1, n_2m_2 | \frac{e^2}{r_{12}} | n_3m_3, n_4m_4 \rangle a_{n_1m_1s_1}^\dagger a_{n_2m_2s_2}^\dagger a_{n_3m_3s_2} a_{n_4m_4s_1} \quad (1.2)$$

と表せる。 $a^\dagger, a$  はフェルミオンの反交換関係を満たす生成、消滅演算子、添字  $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$  は格子点上のサイトの指標、 $m$  は角運動量の成分、 $s$  はスピン、 $e$  は電気素量で、本論文では  $e > 0$  である。 $r_{12}$  は二つの電子の距離を表す。このもとで、各磁性イオンに1つの電子が局在しているとして、基底状態でのエネルギー期待値を考える。物理的概念の把握が容易になる考え方の1つとして、ここでは  $\phi_n(\mathbf{r})$  は互いに直交する関数である Wannier 関数 (Bloch 関数の線形結合) として

<sup>1</sup>スピン由来の磁気モーメントとスピンそのものは多くの場合その大きさが比例関係にあり、向きは互いに逆向きになる。

仮定している<sup>2</sup>。また  $d$  軌道に縮退がないとすると、有限の寄与を与える項は

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \sum_{nms_1s_2} \langle n_1m_1, n_2m_2 | \frac{e^2}{r_{12}} | n_3m_3, n_4m_4 \rangle a_{n_1m_1s_1}^\dagger a_{n_2m_2s_2}^\dagger a_{n_3m_3s_2} a_{n_4m_4s_1} \\
& \simeq \int |\phi_n(r_1)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} |\phi_n(r_2)|^2 d\tau_1 d\tau_2 \\
& + \langle n_1n_2 | \frac{e^2}{r_{12}} | n_2n_1 \rangle \sum_{s_1s_2} a_{n_1s_1}^\dagger a_{n_1s_1} a_{n_2s_2}^\dagger a_{n_2s_2} \\
& - \langle n_1n_2 | \frac{e^2}{r_{12}} | n_1n_2 \rangle \sum_{s_1s_2} a_{n_1s_1}^\dagger a_{n_1s_2} a_{n_2s_2}^\dagger a_{n_2s_1}
\end{aligned} \tag{1.3}$$

である。一つ目の項は  $n_1 = n_2 = n_3 = n_4$  の寄与で、同じ格子点に属する、互いに逆向きのスピンを持つ二つの電子間の相互作用である。 $\tau$  は軌道部分の積分とスピンの対する和をまとめて書いたものである。二つ目の項は  $n_1 = n_4$  かつ  $n_2 = n_3$  の寄与で、格子点  $n_1, n_2$  に局在する2つの電子の間の通常の Coulomb 相互作用である。積分  $\langle n_1n_2 | \frac{e^2}{r_{12}} | n_2n_1 \rangle$  は Coulomb 積分といい  $K_{n_1n_2}$  と表す。三つ目の項は  $n_1 = n_3$

かつ  $n_2 = n_4$  の寄与で、量子効果由来の交換項である。積分  $\langle n_1n_2 | \frac{e^2}{r_{12}} | n_1n_2 \rangle$  は交換積分といい  $J_{n_1n_2}$  と表す。二つ目および三つ目の項の符号がそれぞれプラス、マイナスであるのは場の演算子を二回および一回それぞれ置換した際に、フェルミオンの反交換関係

$$\{a_{n_1s_1}^\dagger, a_{n_2s_2}\} \equiv a_{n_1s_1}^\dagger a_{n_2s_2} + a_{n_2s_2} a_{n_1s_1}^\dagger = \delta_{n_1, n_2} \delta_{s_1, s_2} \tag{1.4}$$

$$\{a_{n_1s_1}^\dagger, a_{n_2s_2}^\dagger\} = \{a_{n_1s_1}, a_{n_2s_2}\} = 0 \tag{1.5}$$

を考慮したことによる。スピン演算子の  $z$  成分

$$s_z = \frac{1}{2} (a_{n\uparrow}^\dagger a_{n\uparrow} - a_{n\downarrow}^\dagger a_{n\downarrow}) \tag{1.6}$$

および  $x, y$  成分

$$s_{n+} = s_{nx} + i s_{ny} = a_{n\uparrow}^\dagger a_{n\downarrow} \tag{1.7}$$

$$s_{n-} = s_{nx} - i s_{ny} = a_{n\downarrow}^\dagger a_{n\uparrow} \tag{1.8}$$

<sup>2</sup>これと異なる方法である Heitler-London の方法では、互いに直交しない自由原子の原子軌道を計算に用いる。

を用いて交換項を変形する。交換項の第二量子化の演算子の一番目と四番目、二番目と三番目と同じスピン状態をもつことに注意すると

$$\begin{aligned}
& - \langle \mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2 | \frac{e^2}{r_{12}} | \mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2 \rangle \sum_{s_1 s_2} a_{\mathbf{n}_1 s_1}^\dagger a_{\mathbf{n}_1 s_2} a_{\mathbf{n}_2 s_2}^\dagger a_{\mathbf{n}_2 s_1} \\
& = -J_{\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2} \left\{ \frac{1}{2} (a_{\mathbf{n}_1 \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{n}_1 \uparrow} + a_{\mathbf{n}_1 \downarrow}^\dagger a_{\mathbf{n}_1 \downarrow}) (a_{\mathbf{n}_2 \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{n}_2 \uparrow} + a_{\mathbf{n}_2 \downarrow}^\dagger a_{\mathbf{n}_2 \downarrow}) \right. \\
& \quad + \frac{1}{2} (a_{\mathbf{n}_1 \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{n}_1 \uparrow} - a_{\mathbf{n}_1 \downarrow}^\dagger a_{\mathbf{n}_1 \downarrow}) (a_{\mathbf{n}_2 \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{n}_2 \uparrow} - a_{\mathbf{n}_2 \downarrow}^\dagger a_{\mathbf{n}_2 \downarrow}) \\
& \quad \left. + a_{\mathbf{n}_1 \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{n}_1 \downarrow} a_{\mathbf{n}_2 \downarrow}^\dagger a_{\mathbf{n}_2 \uparrow} + a_{\mathbf{n}_1 \downarrow}^\dagger a_{\mathbf{n}_1 \uparrow} a_{\mathbf{n}_2 \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{n}_2 \downarrow} \right\} \\
& = -J_{\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cdot 4(s_{\mathbf{n}_1 z} s_{\mathbf{n}_2 z}) + 2(s_{\mathbf{n}_1 x} s_{\mathbf{n}_2 x} + s_{\mathbf{n}_1 y} s_{\mathbf{n}_2 y}) \right\}
\end{aligned} \tag{1.9}$$

となる。よって式 (1.3) の三つの項のうち、異なる格子点に属する二つの電子間の相互作用部分である第二項、第三項を表し直すと、

$$K_{\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2} - J_{\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2} \left( \frac{1}{2} + 2\mathbf{s}_{\mathbf{n}_1} \cdot \mathbf{s}_{\mathbf{n}_2} \right) \tag{1.10}$$

となる。このうちの第三項が **Heisenberg** によって導入された直接交換相互作用で、 $J_{\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2}$  が一般に正なので<sup>3</sup> スピンが互いに平行になる時がエネルギーが下がる。これは定性的には、スピンを揃えた方が同じ場所に来ることによる **Coulomb** 反発のエネルギー損を避けられるということと理解される。ただし、**Heisenberg** が導入したこのタイプの直接交換相互作用で強磁性が発生する物質の例は少ないことが知られている。

### 1.1.2 直接交換相互作用-運動交換

ポテンシャル交換は各磁性イオンに電子が局在している時の基底状態における **Coulomb** 相互作用として理解されるが、運動交換は二つの原子軌道の重なりが 0 でなく、一方の原子軌道から他方の原子軌道へ電子がホップする寄与として理解される。**Pauli** 原理により、スピンの同じ二つの電子は同じ場所を占めることができないため、ここでは移動先の格子点に存在する電子のスピンと異なるスピンを持つ電子がホップすると考える。確率  $|b_{\mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_1}|$  で格子点  $\mathbf{n}_1$  からもう片方の格子点  $\mathbf{n}_2$  へ電子がホップして **Coulomb** 相互作用  $U$  分損をし、次に  $\mathbf{n}_2$  にある二つの電子

<sup>3</sup>  $J_{\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2}$  が正であることは、 $\frac{1}{r}$  を Fourier 展開することで示される [1]。

のうち片方が格子点  $n_1$  に移るという過程の二次摂動のエネルギーは

$$\begin{aligned}
& - \sum_{n_1 n_2 s_1 s_2} \frac{|b_{n_2-n_1}|^2}{U} a_{n_1 s_2}^\dagger a_{n_2 s_2} a_{n_2 s_1}^\dagger a_{n_1 s_1} \\
&= - \sum_{n_1 n_2} \frac{|b_{n_2-n_1}|^2}{U} (a_{n_1 \uparrow}^\dagger a_{n_2 \uparrow} + a_{n_1 \downarrow}^\dagger a_{n_2 \downarrow}) (a_{n_2 \uparrow}^\dagger a_{n_1 \uparrow} + a_{n_2 \downarrow}^\dagger a_{n_1 \downarrow}) \\
&= - \sum_{n_1 n_2} \frac{|b_{n_2-n_1}|^2}{U} \left\{ (a_{n_1 \uparrow}^\dagger a_{n_1 \uparrow} + a_{n_1 \downarrow}^\dagger a_{n_1 \downarrow}) - \frac{1}{2} (a_{n_1 \uparrow}^\dagger a_{n_1 \uparrow} + a_{n_1 \downarrow}^\dagger a_{n_1 \downarrow}) (a_{n_2 \uparrow}^\dagger a_{n_2 \uparrow} + a_{n_2 \downarrow}^\dagger a_{n_2 \downarrow}) \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{2} (a_{n_1 \uparrow}^\dagger a_{n_1 \uparrow} - a_{n_1 \downarrow}^\dagger a_{n_1 \downarrow}) (a_{n_2 \uparrow}^\dagger a_{n_2 \uparrow} - a_{n_2 \downarrow}^\dagger a_{n_2 \downarrow}) - a_{n_1 \uparrow}^\dagger a_{n_1 \downarrow} a_{n_2 \downarrow}^\dagger a_{n_2 \uparrow} - a_{n_1 \downarrow}^\dagger a_{n_1 \uparrow} a_{n_2 \uparrow}^\dagger a_{n_2 \downarrow} \right\} \\
&= - \sum_{n_1 n_2} \frac{|b_{n_2-n_1}|^2}{U} \left( \frac{1}{2} - 2s_{n_1} \cdot s_{n_2} \right)
\end{aligned} \tag{1.11}$$

となる。 $s_{n_1} = s_{n_2}$  の場合この寄与は0で、これはすなわち Pauli 原理によりスピンの同じ向きの場合はこの過程が起こらないので、スピンの互いに逆向きの方がこのエネルギー分得するということである。すなわちこの運動交換によるスピン間相互作用は反強磁性的である。

### 1.1.3 超交換相互作用

磁性イオンと磁性イオンの間には、通常酸素イオンやハロゲンイオンなどの陰イオンが存在する。この陰イオンの波動関数が磁性イオンの波動関数と重なりを持つ時には、陰イオンとの間の電子移動を介して磁性イオン間に相互作用が働く。このような超交換相互作用は絶縁体の磁性で主要な寄与を与える。例として立方対称な結晶場を考える時、球対称な場合に5重縮退していた磁性イオンの  $d$  軌道は、 $t_{2g}$  軌道と呼ばれる3重縮退した基底状態、 $e_g$  軌道と呼ばれる2重縮退した励起状態にわかれる。陰イオンの方は  $p$  軌道に電子が詰まって閉殻を形成している。ここでは磁性イオンの方向に伸びた  $p_x$  と磁性イオンの軌道との間の電子の移動を考える。対称性により基底状態である  $t_{2g}$  軌道と  $p_x$  軌道の重なりはゼロであるため、この間の電子の飛び移りは起こらない。他方で励起状態である  $e_g$  軌道と  $p_x$  軌道の重なりはゼロでないため、電子は  $t_{2g}$  軌道と  $e_g$  軌道との励起エネルギー  $\Delta\epsilon$  の損をしつつ、 $p_x$  軌道から  $e_g$  に移動する。この過程を摂動論で扱おうと

$$-2 \sum_{a, b} \frac{\langle 0 | \mathcal{H}' | a \rangle \langle a | \mathcal{H}' | b \rangle \langle b | \mathcal{H}' | 0 \rangle}{(\Delta\epsilon)^2} \tag{1.12}$$

となる。この過程は図 1.1 のようになっている。

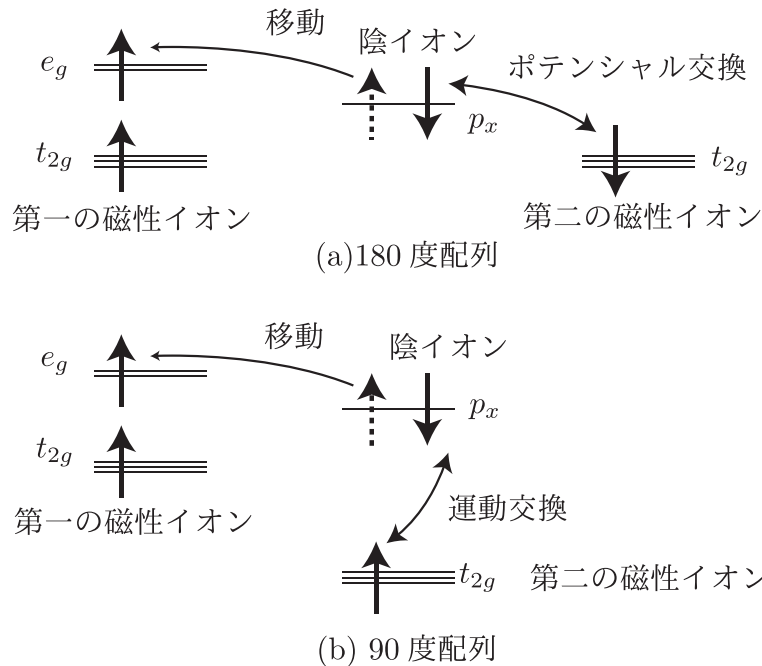


図 1.1: 超交換相互作用。(a) 第一の磁性イオン, 陰イオン, 第二の磁性イオンが空間的に  $180$  度に配列している時は, 陰イオンのスピンの第二の磁性イオンのスピンのポテンシャル交換タイプの交換相互作用が働き, これらは強磁性的になる。第一の磁性イオンと陰イオンに残ったスピンは互いに逆を向くため, 第一の磁性イオンと第二の磁性イオンのスピン間の相互作用は反強磁性的になる。(b) 第一の磁性イオン, 陰イオン, 第二の磁性イオンが空間的に  $90$  度に配列している時は, 陰イオンのスピンの第二の磁性イオンのスピンの運動交換タイプの交換相互作用が働き, これらは反強磁性的になる。これにより第一の磁性イオンと第二の磁性イオンのスピン間の相互作用は強磁性的になる。

まず陰イオンの  $p_x$  軌道から一つ目の磁性イオンの  $e_g$  軌道に電子が移動する。この時 Hund 則により, 移動の結果生じた  $e_g$  軌道のスピンの, もともとある  $t_{2g}$  軌道のスピンは互いに同じ向きである。よってもともと  $t_{2g}$  軌道にあった電子スピンの上向きであれば, この移動する電子スピンは上向きである。これにより, もともと陰イオンは閉殻で正味スピンのゼロであったが, 電子の移動の結果陰イオンに下向きスピンが実効的に残る。この残った下向きスピンの, 第二の磁性イオンのスピンと相互作用する。この際, 磁性イオン - 陰イオン - 磁性イオンの配置が空間的に  $180$  度配列なのか,  $90$  度配列なのかで, この第二の磁性イオンにあるスピンと陰イオンに残ったスピンの直接交換相互作用が変わる。 $180$  度配列の場合は, 陰イオンの  $p_x$  軌道と第二の磁性イオンの  $t_{2g}$  軌道間の重なりがやはり対称性から  $0$  であるため, ここでの相互作用はポテンシャル交換となる。つまり陰イオンのスピンと第二の磁性イオンのスピンは互いに平行に向きたがるため, 第一の磁性イオンと第二の磁性イオンのスピンは互いに逆向きに向きたがり, 反強磁性的となる。他方,  $90$  度配列の場合は陰イオンの  $p_x$  軌道と第二の磁性イオンの  $t_{2g}$

軌道間の重なりは0でないため、運動交換によりこれらの軌道に属するスピンの互いに反平行になる結果、二つの磁性イオンのスピンは強磁性的になる。これを金森–Goodenough 則という。 $\langle a|\mathcal{H}'|0\rangle = \langle b|\mathcal{H}'|0\rangle = t$ ,  $\langle a|\mathcal{H}'|b\rangle = -2J_d\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$  と表すと、この超交換相互作用は

$$2\frac{2J_d|t|^2}{(\Delta\epsilon)^2}\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \equiv -2J_{\text{eff}}\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (1.13)$$

のように表せる。

ここで述べた摂動項の他、系によっては最近接の格子点を巡回してもとに戻る寄与としての四次摂動項なども生じる場合がある。

#### 1.1.4 ジャロシンスキー・守谷相互作用

電子が原子核から受ける相互作用として原子核からのポテンシャルを考え、ベクトルポテンシャルを0とおくと、相対論を考慮した電子の運動方程式は

$$\left[ \frac{p^2}{2m} + e\phi - \frac{p^4}{8m^3c^2} - \frac{e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{p})}{4m^2c^2} - \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla \cdot \mathbf{E} \right] \Psi = E^{(\text{NR})}\Psi \quad (1.14)$$

のように表される [3]。 $\mathbf{p}$ ,  $e$ ,  $m$  はそれぞれ電子の運動量, 電荷 ( $e > 0$ ), 質量,  $c$ ,  $\hbar$  は光速およびプランク定数,  $\boldsymbol{\sigma}$  は Pauli 行列,  $\mathbf{E}$  が電場,  $E^{(\text{NR})}$  は  $mc^2$  から測った非相対論的エネルギーである。原子核から受けるポテンシャル

$$V = -\frac{Ze^2}{r} \quad (1.15)$$

が中心力型ポテンシャル  $V(\mathbf{r}) = V(r)$  であることを考慮すると、電場に対して

$$e\mathbf{E} = -\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{r} \quad (1.16)$$

が成り立つので、この第四項は

$$-\frac{e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{p})}{4m^2c^2} = \frac{\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{s} \cdot \mathbf{l} \quad (1.17)$$

のように表される。ここでの  $\mathbf{s}$  と  $\mathbf{l}$  は  $\hbar\mathbf{s}$ ,  $\hbar\mathbf{l}$  がそれぞれスピン角運動量, 軌道角運動量を表すような値である。ここでボーア磁子  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$  および  $g$  値  $g = 2$  を用いてこの相互作用を書き直すと、

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{s} \cdot \mathbf{l} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left( -\frac{Ze^2}{r} \right) \mathbf{s} \cdot \mathbf{l} \\ &= g\mu_B^2 \frac{Z}{r^3} \mathbf{s} \cdot \mathbf{l} \end{aligned} \quad (1.18)$$



となる。これはスピン自由度  $\mathbf{s}$  と軌道自由度  $\mathbf{l}$  が相対論補正のもとで結合することを表し、スピン軌道相互作用という。この相互作用について全電子に対する和をとると、

$$g\mu_B^2 Z \sum_i \frac{1}{r_i^3} (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{l}_i) \quad (1.19)$$

となる。ここで注目する電子以外の電子による遮蔽を考慮して、原子核の電荷  $Z$  を有効電荷  $Z_{\text{eff}}$  で置き換え、また  $\sum_i \frac{1}{r_i^3} (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{l}_i)$  については電子の広がりについての平均で考えると、

$$\lambda(\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}) \equiv \begin{cases} g\mu_B^2 Z_{\text{eff}} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \frac{1}{2S} (\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}) & (\text{不完全殻を占める電子数が } 2l+1 \text{ より小さい場合}) \\ -g\mu_B^2 Z_{\text{eff}} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \frac{1}{2S} (\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}) & (\text{不完全殻を占める電子数が } 2l+1 \text{ より大きい場合}) \end{cases} \quad (1.20)$$

となる。 $\mathbf{L}$ ,  $\mathbf{S}$  はそれぞれ全軌道角運動量, 全スピン角運動量である。この相互作用を  $LS$  結合という。 $LS$  結合と交換相互作用  $V_{\text{ex}}$  による二次の摂動として、基底状態  $|g\rangle$  にある電子が交換相互作用によって励起されて状態  $|n\rangle$  になり、 $LS$  結合の影響を受けた後基底状態に戻るプロセスおよびその逆を考慮すると

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{DM}} = & -\lambda \left[ \sum_{n_1} \frac{\langle g_1 | \mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{S}_1 | n_1 \rangle \langle n_1 g_2 | V_{\text{ex}} | g_1 g_2 \rangle}{E_{n_1} - E_{g_1}} \right. \\ & \left. + \sum_{n_1} \frac{\langle g_1 g_2 | V_{\text{ex}} | n_1 g_2 \rangle \langle n_1 | \mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{S}_1 | g_1 \rangle}{E_{n_1} - E_{g_1}} + 1 \text{ と } 2 \text{ を交換した項} \right] \\ = & 2\lambda \sum_{\alpha} \left\{ \sum_{n_1} \frac{J(n_1 g_2, g_1 g_2) \langle g_1 | L_{1\alpha} | n_1 \rangle [S_{1\alpha}, (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)]}{E_{n_1} - E_{g_1}} \right. \\ & \left. + \sum_{n_2} \frac{J(g_1 n_2, g_1 g_2) \langle g_2 | L_{2\alpha} | n_2 \rangle [S_{2\alpha}, (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)]}{E_{n_2} - E_{g_2}} \right\} \end{aligned} \quad (1.21)$$

となる。 $\alpha = x, y, z$  である。スピン演算子に対する関係  $[S_{1\alpha}, (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)] = -i\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2$  より、

$$\mathcal{H}_{\text{DM}} = \mathbf{D} \cdot [\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2] \quad (1.22)$$

$$\mathbf{D} \equiv -2i\lambda \left[ \sum_{n_1} \frac{\langle g_1 | \mathbf{L}_1 | n_1 \rangle}{E_{n_1} - E_{g_1}} J(n_1 g_2, g_1 g_2) - \sum_{n_2} \frac{\langle g_2 | \mathbf{L}_2 | n_2 \rangle}{E_{n_2} - E_{g_2}} J(g_1 n_2, g_1 g_2) \right] \quad (1.23)$$

のように、中心対称性のない系で生じる相互作用の表式が得られる [1]。この相互作用は Dzyaloshinskii–Moriya (DM) 相互作用と呼ばれる [4, 5]。

スピンは空間反転では不変に保たれ、時間反転に対しては符号が変わる。空間回転では通常のベクトルの変換規則に従う。さらに図 1.2 のように、鏡映操作についてはスピンの鏡映面に平行な成分が反転する。

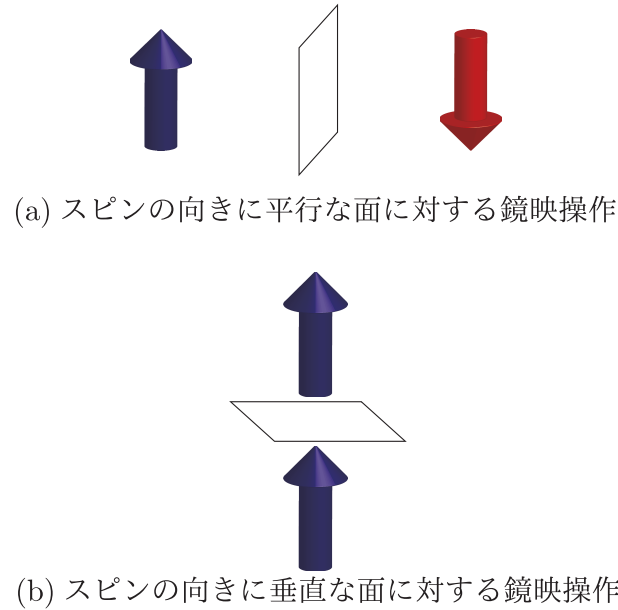


図 1.2: スピンの鏡映操作による反転。鏡映面に平行な成分のみが反転する。

結晶の対称操作では，操作後の磁性イオン，陰イオンの結晶構造は操作前の結晶構造と同一になると考える。このような操作では相互作用も操作前後で不変になる。このもとで，**DM** ベクトル  $\mathbf{D}$  の向きおよび **DM** 相互作用がゼロになるかならないかについて，制約がかかる。まず 2 つのスピンの位置するサイトの midpoint が結晶の反転中心になっている場合，この midpoint に関する空間反転操作のもとで，前述のようにスピンは不変である。一方，サイトのラベルは結晶の空間反転に伴い入れ替わり，空間反転のもとで **DM** 相互作用が不変であるという関係を，

$$\mathbf{D} \cdot \mathbf{S}_2 \times \mathbf{S}_1 = -\mathbf{D} \cdot \mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2 = \mathbf{D} \cdot \mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2 \quad (1.24)$$

のように表せる。このもとで  $\mathbf{D} = \mathbf{0}$  である。よって注目するスピンが位置するサイトの midpoint が結晶の反転中心になっている場合は **DM** 相互作用が  $\mathbf{0}$  になる。

この他，前述の鏡映操作に関するスピンの反転などを考慮すると，同様の議論から次のように結晶の対称性に対応する **DM** ベクトルの制約が得られる。ただしここでは， $x$  軸上で原点から等距離離れたサイト二つに存在するスピンについて考えている。

結晶の対称性	<b>DM</b> ベクトルの方向
$yz$ 面が結晶の鏡映面になっている場合	$yz$ 面内
$xy$ 面が結晶の対称面になっている場合	$z$ 方向
$x$ 軸が 2 回回転軸になっている場合	$x$ 方向
$y$ 軸が 2 回回転軸になっている場合	$x$ 方向

このように結晶の対称性を考慮すると、DM ベクトルの方向およびゼロかノンゼロかについては絞れる。一方、DM 相互作用の強さなどを定量的に考察する上では第一原理計算などに基づく微視的な考察が必要で、そのような研究も行われている [6, 7]。

### 1.1.5 磁壁

ここからは多々良源著「スピントロニクス of 物理場の理論の立場から」[8]に従って非共線磁気構造についてまとめる。磁気異方性と強磁性交換相互作用のみからなる系の基底状態について考える。 $z$  軸方向を容易軸に持つ系におけるハミルトニアンは、連続体モデルのもとで

$$H = \int \frac{d^3r}{a^3} \left[ \frac{J}{2} (\nabla S)^2 - \frac{K}{2} (S_z)^2 \right] \quad (1.25)$$

である。スピンの大きさ  $S$  が一定という条件のもと、このハミルトニアンを極座標により表すと

$$H = \int \frac{d^3r}{a^3} \left[ \frac{JS^2}{2} [(\nabla\theta)^2 + \sin^2\theta(\nabla\phi)^2] - \frac{KS^2}{2} \cos^2\theta \right] \quad (1.26)$$

$\theta$  による変分が 0 より

$$\begin{aligned} & \frac{\delta H}{\delta\theta} \\ &= \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \frac{JS^2}{2} [(\nabla\theta)^2 + \sin^2\theta(\nabla\phi)^2] - \frac{KS^2}{2} \cos^2\theta \right) \\ & \quad - \nabla \cdot \frac{\partial}{\partial(\nabla\theta)} \left( \frac{JS^2}{2} [(\nabla\theta)^2 + \sin^2\theta(\nabla\phi)^2] - \frac{KS^2}{2} \cos^2\theta \right) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (1.27)$$

$$\lambda_w^2 \nabla^2\theta - \sin\theta \cos\theta (1 + \lambda_w^2 (\nabla\phi)^2) = 0, \quad \lambda_w \equiv \sqrt{\frac{J}{K}} \quad (1.28)$$

$\phi$  による変分が 0 より

$$\begin{aligned} & \frac{\delta H}{\delta\phi} \\ &= \frac{\partial}{\partial\phi} \left( \frac{JS^2}{2} [(\nabla\theta)^2 + \sin^2\theta(\nabla\phi)^2] - \frac{KS^2}{2} \cos^2\theta \right) \\ & \quad - \nabla \cdot \frac{\partial}{\partial(\nabla\phi)} \left( \frac{JS^2}{2} [(\nabla\theta)^2 + \sin^2\theta(\nabla\phi)^2] - \frac{KS^2}{2} \cos^2\theta \right) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (1.29)$$

$$\nabla(\sin^2\theta\nabla\phi) = 0 \quad (1.30)$$

スピンの一次元方向で変化する方向を  $x$  軸にとり (つまり  $\partial_y\theta = \partial_z\theta = 0$ ), また  $\phi =$  一定とする。このもとで

$$\lambda_w^2 \frac{d^2\theta}{dx^2} = \sin\theta \cos\theta \quad (1.31)$$

この両辺に  $\frac{d\theta}{dx}$  をかけて  $x$  で積分すると,

$$\lambda_w^2 \frac{d\theta}{dx} \frac{d^2\theta}{dx^2} = \sin\theta \cos\theta \frac{d\theta}{dx} \quad (1.32)$$

$$\lambda_w^2 \frac{1}{2} \frac{d}{dx} \left( \frac{d\theta}{dx} \right) = \sin\theta \cos\theta \frac{d\theta}{dx} \quad (1.33)$$

$$\int dx \lambda_w^2 \frac{1}{2} \frac{d}{dx} \left( \frac{d\theta}{dx} \right) = \int dx \sin\theta \cos\theta \frac{d\theta}{dx} \quad (1.34)$$

$$\lambda_w^2 \left( \frac{d\theta}{dx} \right)^2 = \sin^2\theta + C \quad (1.35)$$

この方程式の解として, 自明な解である一様強磁性状態  $\theta = n\pi$ , ( $n \in \mathbb{Z}$ ) ではない方の解を求める。 $\theta = 0$  の方向でスピンの空間的に変化しないとすると  $C = 0$  で, この方程式は

$$\lambda_w \frac{d\theta}{dx} = \pm \sin\theta \quad (1.36)$$

この微分方程式の解は,  $X$  を任意定数 (これは磁壁の中心位置に対応する) として

$$\tan \frac{\theta}{2} = \exp \left\{ \pm \frac{x-X}{\lambda_w} \right\} \quad (1.37)$$

$$\cos\theta = \pm \tanh \frac{x-X}{\lambda_w}, \quad \sin\theta = \frac{1}{\cosh \frac{x-X}{\lambda_w}} \quad (1.38)$$

となる。スピンの方向が

$$(\sin\theta \cos\phi, \sin\theta \sin\phi, \cos\theta) \quad (1.39)$$

で与えられることを考慮すると, 任意定数  $\phi$  が 0 の時は常にスピンの  $y$  成分が 0 となり, スピンが磁壁面に対して垂直に回転する Neel 磁壁となる (図 1.3 (a))。一方,  $\phi = \frac{\pi}{2}$  の時は常に  $x$  成分が 0 となり, スピンが磁壁面に平行に回転する Bloch 磁壁となる (図 1.3 (b))。

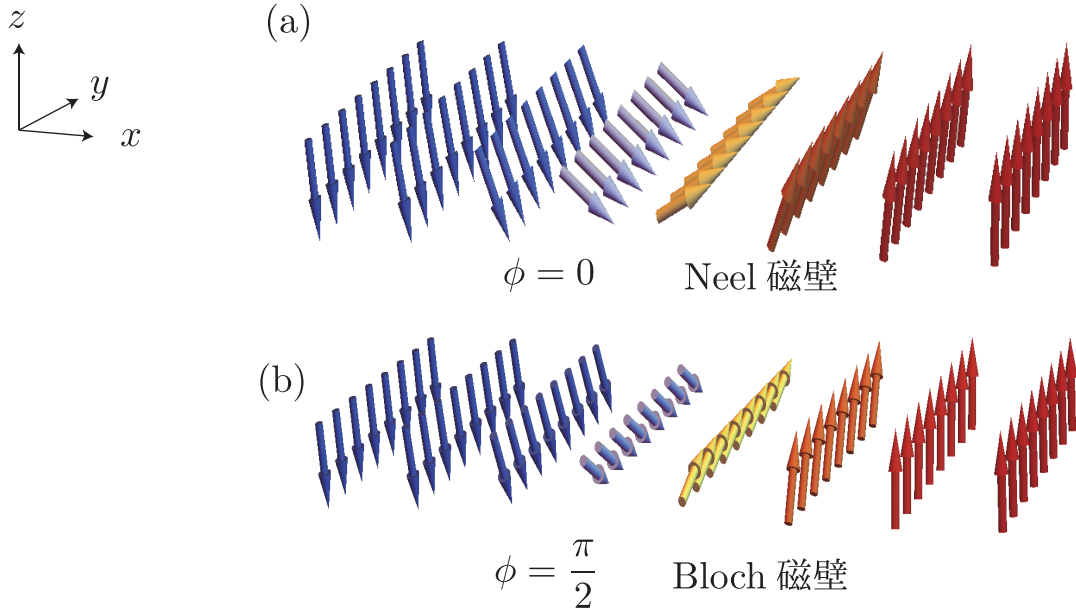


図 1.3: 磁壁の磁化配置。(a) が  $\phi = 0$  の場合に対応して Neel 磁壁と呼ばれる。スピンの  $y$  成分が常に 0 であり、磁壁面に対して垂直な面内でスピンのねじれが起きる。(b) は  $\phi = \frac{\pi}{2}$  の場合に対応して Bloch 磁壁と呼ばれる。スピンの  $x$  成分が常に 0 であり、磁壁面に対して平行な面内でスピンのねじれが起きる。

### 1.1.6 トポロジカル不変量と一次元キルク解

ここからは、Jung Hoon Han 著「Skyrmions in Condensed Matter」[9]に従って、トポロジカルに非自明な構造についてまとめる。二次元直交回転 ( $O(2)$  回転) で不変なラグランジアンの一例として、時間  $t$  と一次元空間  $x$  の二成分からなる場の変数  $\mathbf{n} = (n_1, n_2)$  の一階微分およびノルムの項からなるラグランジアン

$$L = \frac{1}{2} \int dx [(\partial_t \mathbf{n})^2 - (\partial_x \mathbf{n})^2 - m^2 \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}] \quad (1.40)$$

を考える。このラグランジアンを用いて非線形の場の理論を構築する一つの手段として、場の変数に対する制約

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = 1 \quad (1.41)$$

を仮定する。この条件のもとで場の変数は

$$n_1 = \cos \theta, \quad n_2 = \sin \theta \quad (1.42)$$

のように一変数  $\theta$  で表せる。定数は運動方程式に影響を与えないので、この場合ラグランジアンとしては、

$$L = \frac{1}{2} \int dx [(\partial_t \theta)^2 - (\partial_x \theta)^2] \quad (1.43)$$

を考えれば良い。通常保存則としては、このラグランジアンに対して時間および空間に対する対称性から得られるものを考える。一方 Skyrme は対称性に注目するのではなく、新しい形の保存則に注目した。 $t, x$  の二成分の流れ

$$J_\alpha = \frac{1}{2\pi} \varepsilon_{\alpha\beta} \varepsilon_{ab} n_a \partial_\beta n_b \quad (1.44)$$

を考える。 $\varepsilon_{\alpha\beta}$  と  $\varepsilon_{ab}$  はそれぞれ  $(t, x)$  および場の添字  $(1, 2)$  に対する二成分の完全反対称テンソルである。 $n_1 = \cos\theta, n_2 = \sin\theta$  に対して具体的に表すと

$$J_t = \frac{1}{2\pi} \partial_x \theta, \quad J_x = -\frac{1}{2\pi} \partial_t \theta \quad (1.45)$$

であり、連続の方程式

$$\partial_t J_t + \partial_x J_x = 0 \quad (1.46)$$

を満たす。

$$\partial_\mu J_\mu = \frac{1}{2\pi} \varepsilon_{\mu\nu} \varepsilon_{ab} \partial_\mu n_a \partial_\nu n_b \quad (1.47)$$

がヤコビアン  $\partial[n_1, n_2]/\partial[t, x]$  を用いて

$$\frac{1}{\pi} \frac{\partial[n_1, n_2]}{\partial[t, x]} \quad (1.48)$$

と表せること、ヤコビアンが座標変換に伴う微小面積要素の変換に関わり、今の場合場の変数  $n_1, n_2$  が単位円上で束縛されているために面積要素が 0 であることを考慮すると、この流れ  $\partial_\mu J_\mu$  が 0 となることがわかる<sup>4</sup>。

$\mu$  として  $t$  を選択すると  $\partial_t J_t = \partial_t \left[ \frac{1}{2\pi} \partial_x \theta \right]$  である。この  $J_t$  をチャージの密度のように考えると、その空間に対する積分は

$$Q(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \partial_x \theta(x, t) dx = \frac{1}{2\pi} [\theta(\infty, t) - \theta(-\infty, t)] \quad (1.49)$$

である。ここで周期的境界条件  $n(\infty, t) = n(-\infty, t)$  のもとで、

$$\theta(\infty, t) = \theta(-\infty, t) + 2\pi N, \quad N \in \mathbb{Z} \quad (1.50)$$

であるから、 $Q(t) = N$  となる。このようにチャージ  $Q(t)$  が整数という離散化された値をとることが、一種の粒子的ふるまいを特徴づける。 $J_\alpha$  の導入から始まって、この  $Q$  という量を導出する過程では、ラグランジアン、ハミルトニアンや対称性が一切関与していない。その導出は物理的考察によるというよりは数学的な考察による。連続変形で不変な量を追求する学問を数学ではトポロジーといい、この  $Q$  も整数であることから、連続変形のもとである値から別の値に移ることはできない。この  $Q$  のような量をトポロジカル不変量という。Skyrme はこのようなト

<sup>4</sup>ここでの  $\mu$  は  $t, x$  に対して和をとっている。

ポロジカル不変量を量子数と絡め、対称性による議論とは全く異なる原子物理の一分野を開拓した [9]。

今考えているような一次元の空間に対してトポロジカル数が  $\pm 1$  となるベクトル場の例は、キंक解

$$\theta(x) = 4 \tan^{-1}\{\exp(mx)\} \quad (1.51)$$

がある (図 1.4)。

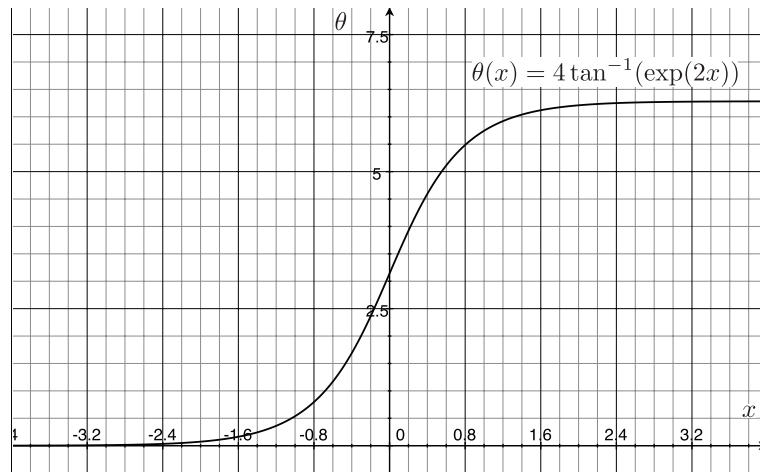


図 1.4:  $m > 0$  の時のキंक解。図は  $m = 2$  の場合に対応する。

これは先ほどの非線形モデルのラグランジアンでノルムの項の代わりに場の 4 次の項を考えた時に得られる運動方程式 (サイン-ゴルドン方程式) の近似解であり、実際にトポロジカル不変量を計算すると、

$$\frac{1}{2\pi} \int dx \partial_x \theta(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int dx \partial_x 4 \tan^{-1}\{\exp(mx)\} = \pm 1 \quad (1.52)$$

となる。ただし 1 の前の符号は定数  $m$  の正負によって決まり、解の前についた因子 4 は単にトポロジカル不変量を分数ではなく整数にするためにつけている。

ここで考えた一次元空間  $x$  を、端と端がつながったもの、例としては円のようなものとして捉えることにする。この  $x$  の上を「歩いてみる」と、立ち止まったところの各点が  $\theta = \theta(x)$  により別の単位円上の一点と結びついている。すなわち、この  $\theta = \theta(x)$  を単位円  $S^1$  から単位円  $S^1$  への写像

$$\theta : S^1 \rightarrow S^1 \quad (1.53)$$

としてとらえることができる。この「歩く対称」のもとの円をベース空間、ベース空間を歩き回ることによって埋めつくされる空間をターゲット空間という。もとの円を歩き回ると、それと対応する別の円も 1 回または複数回埋め尽くされる。この

関係を数学の言葉では

$$\pi_1(S^1) = \mathbb{Z} \quad (1.54)$$

と表現する。

### 1.1.7 二次元渦

次に、空間として二次元の変数に対する場  $\mathbf{n}(x, y)$  について議論する。ベース空間として2次元空間上の円  $x^2 + y^2 = R^2$  を考える。このベース空間を一周歩き回る間に、場  $\mathbf{n}(x, y)$  が何回回転するかを数え、得られる回転数(巻数)がゼロでない配置を渦(ボルテックス)という。巻数  $N$  の場合、渦のベクトル場は

$$\mathbf{n}(x, y) = (\cos[N\varphi], \sin[N\varphi]) \quad (1.55)$$

で与えられる。 $N = 1$  の場合を図 1.5 (a) に示した。この図を見ると明らかなように、原点まわりにある半径の円を描くように一周すると、ベクトル場がちょうど一回回転していることがわかる。 $N < 0$  の場合の配置をアンチボルテックスという。 $N = -1$  の場合を図 1.5 (b) に示す。この場合の巻数  $N$  はトポロジカル数の一種である。やはりトポロジカル数の異なる構造に移るには、一度構造を壊さなければならぬ。これをトポロジカルに保護された状態と表現する。

ここでは時空の変数として、空間のみからなる二成分  $x, y$  を考えているので、対応する流れの量としては

$$J_x = \frac{1}{2\pi} \partial_y [N\varphi] = \frac{N}{2\pi} \frac{x}{r^2} \quad (1.56)$$

$$J_y = -\frac{1}{2\pi} \partial_x [N\varphi] = \frac{N}{2\pi} \frac{y}{r^2} \quad (1.57)$$

この流れの発散を  $x, y$  空間全体で積分すると、ストークスの定理より

$$\int dx dy \nabla \cdot \mathbf{J} = \oint (J_x dy - J_y dx) = \frac{1}{2\pi} \oint d\theta = N \quad (1.58)$$

で、 $t, x$  の二成分を考えた時と同様に整数値が得られる。



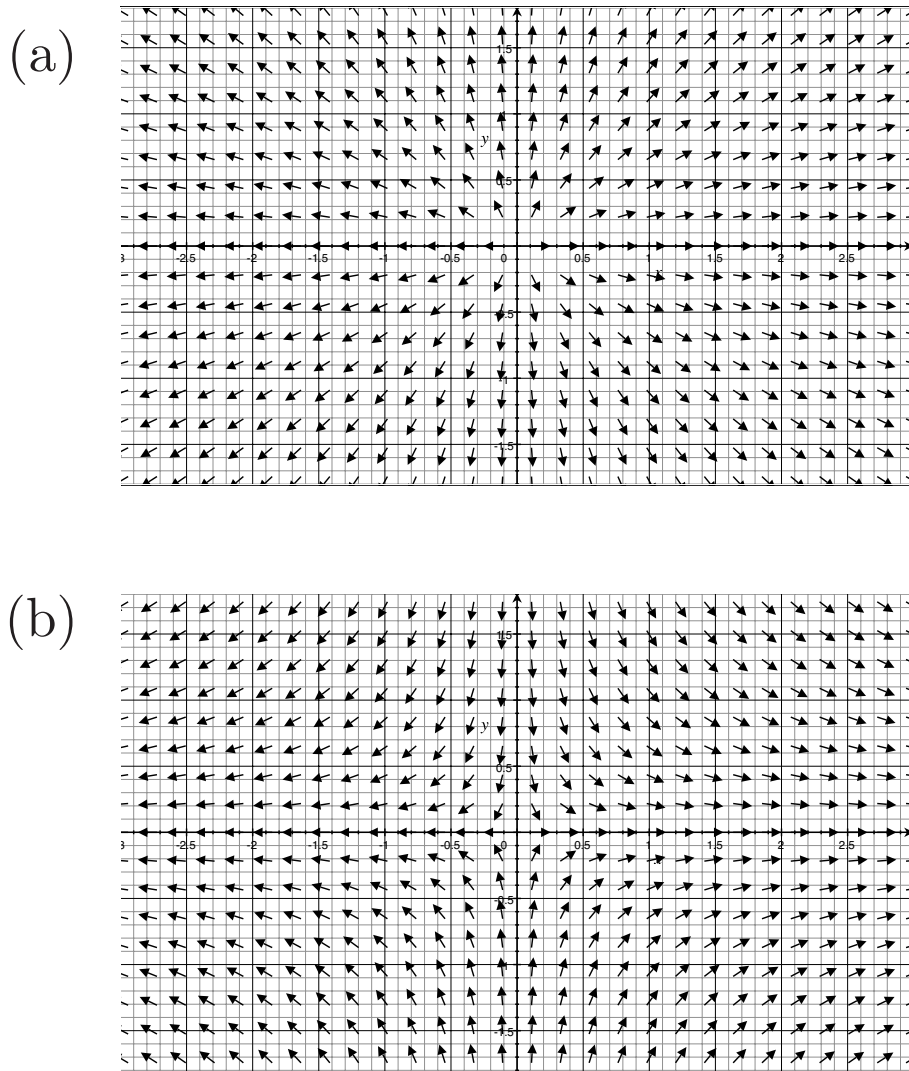


図 1.5: (a) ポルテクスおよび (b) アンチポルテクスの磁化配置。原点まわりに反時計回りに回ってみると、ベクトル場が一回回転する。(a) が  $N = 1$ , (b) が  $N = -1$  の場合に対応する。

### 1.1.8 二次元スキルミオン

スキルミオンは、もともと原子核物理の分野で局在した粒子を説明するモデルとして T. Skyrme が提案したものである [10]。空間 2 次元，時間 1 次元の (2+1) 次元時空に対するトポロジカル流密度

$$J_\alpha = \frac{1}{8\pi} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \varepsilon_{abc} n_a \partial_\beta n_b \partial_\gamma n_c \quad (1.59)$$

に対して、 $\partial_\alpha J_\alpha$  がヤコビアンで

$$\partial_\alpha J_\alpha \propto \frac{\partial[n_1, n_2, n_3]}{\partial[t, x, y]} \quad (1.60)$$

のように表されること、ベクトル場  $\mathbf{n}$  が単位球上を動くという制約  $\mathbf{n}^2 = 1$  から右辺のヤコビアンはゼロとなり、連続の方程式が得られる。特に  $\alpha = t$  とすると、

$$\mathbf{J}_t = \frac{1}{8\pi} \varepsilon_{abc} n_a (\partial_x n_b \partial_y n_c - \partial_y n_b \partial_x n_c) = \frac{1}{4\pi} \mathbf{n} \cdot \left( \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial x} \times \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial y} \right) \quad (1.61)$$

この  $\mathbf{J}_t$  を  $xy$  の全空間で積分した量がこの場合のトポロジカル数で、

$$\int dx dy \mathbf{J}_t(x, y, t) = \int dx dy \frac{1}{4\pi} \mathbf{n} \cdot \left( \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial x} \times \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial y} \right) \equiv Q \quad (1.62)$$

をスキルミオン数という。スキルミオン数は、ベース空間である  $xy$  平面を埋め尽くす間に、ベクトル場  $\mathbf{n}(x, y)$  がターゲット空間を何度埋め尽くすかを表している。次の節から詳細に述べるように、物性物理の分野で近年このスキルミオン構造が磁化の配置として確認され、注目を集めている。有限のトポロジカル数を持つことが、らせん磁性やコニカル磁性のようなキラル磁性体中で生じる他の磁気構造と異なるスキルミオンの一つの特徴である。この特徴により、スキルミオンは興味深い創発的電磁場の応答を示すことが知られている。

三次元極座標を用いて単位球上のベクトル場  $\mathbf{n}$  を表すと、

$$\mathbf{n} = (\sin \beta \cos \alpha, \sin \beta \sin \alpha, \cos \beta) \quad (1.63)$$

のようになる。これを用いて、先ほどのトポロジカルチャージを表し直すと

$$\mathbf{J}_t = \frac{1}{4\pi} \sin \beta \left( \frac{\partial \beta}{\partial x} \frac{\partial \alpha}{\partial y} - \frac{\partial \beta}{\partial y} \frac{\partial \alpha}{\partial x} \right) = \frac{1}{4\pi} \frac{\partial[\alpha, \cos \beta]}{\partial[x, y]} \quad (1.64)$$

のように、やはりヤコビアンを使って表せる。(1+1)次元時空で周期的境界条件のもと、空間として1次元の座標軸を円に対応させたのと同様に、ここでも空間として2次元の  $xy$  平面を球に対応させることを考える。すなわち

$$\mathbf{n}(r \rightarrow \infty, t) = \mathbf{n}_\infty \quad (r = \sqrt{x^2 + y^2}) \quad (1.65)$$

のように、平面上で無限に遠い点がある一点に集約するようにする。このために、まず  $xy$  平面上の一点を単位球上の一点に対応させる写像

$$(x, y) \rightarrow \hat{\mathbf{r}} \in S^2 \quad (1.66)$$

を得たあとに、巻数1のベクトル場の表式を得るために恒等写像  $\mathbf{n}(\hat{\mathbf{r}}) = \hat{\mathbf{r}}$  を適用する。まず2次元  $xy$  平面から単位球に対する変換規則を得る方法について、その一つの方法は幾何学投影と呼ばれる方法である。平面上の一点を表す上で2次元極座標

を用いて  $r(\cos \varphi, \sin \varphi)$  と表し、球上の一点を球座標で  $\frac{R}{2}(\sin \beta \cos \alpha, \sin \beta \sin \alpha, \cos \beta)$  と表す (図 1.6) と、その対応規則は図 1.7 を参考に、

$$\cos \varphi = \cos \alpha = \frac{x}{r}, \quad \sin \varphi = \sin \alpha = \frac{y}{r}, \quad (1.67)$$

$$\begin{aligned} \frac{r}{2R} &= \tan \left( \frac{\pi}{2} - \frac{\beta}{2} \right) \\ &= \frac{1}{\tan \frac{\beta}{2}} \end{aligned} \quad (1.68)$$

$$\cos \frac{\beta}{2} = \frac{r}{\sqrt{r^2 + 4R^2}}, \quad \sin \frac{\beta}{2} = \frac{2R}{\sqrt{r^2 + 4R^2}} \quad (1.69)$$

$$\cos \beta = \frac{r^2 - 4R^2}{r^2 + 4R^2}, \quad \sin \beta = \frac{4rR}{r^2 + 4R^2} \quad (1.70)$$

である。よって、球上の一点の求める表式は

$$\begin{aligned} &R(\sin \beta \cos \alpha, \sin \beta \sin \alpha, \cos \beta) \\ &= R \left( \frac{4Rx}{r^2 + 4R^2}, \frac{4Ry}{r^2 + 4R^2}, \frac{r^2 - 4R^2}{r^2 + 4R^2} \right) \end{aligned} \quad (1.71)$$

となる。単位球では  $R = 1$  とおき、 $r \rightarrow \infty$  の極限をとると、この一点は  $(0, 0, 1)$  に収束し、これは式 (1.65) を満たす。

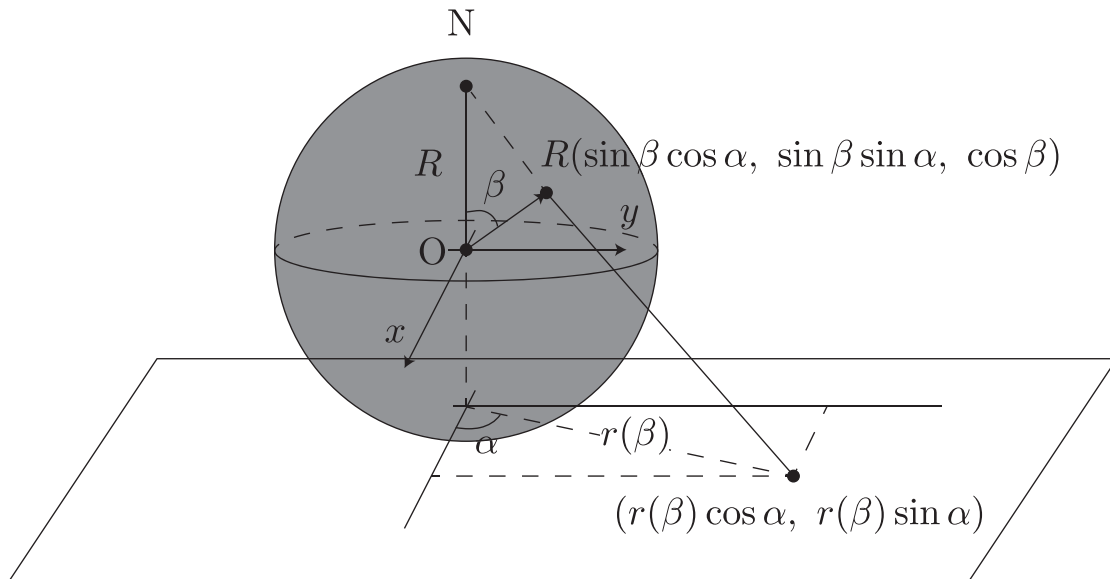


図 1.6: 幾何学投影の対応関係。半径  $R$  の球上の一点と平面内の一点が対応する。

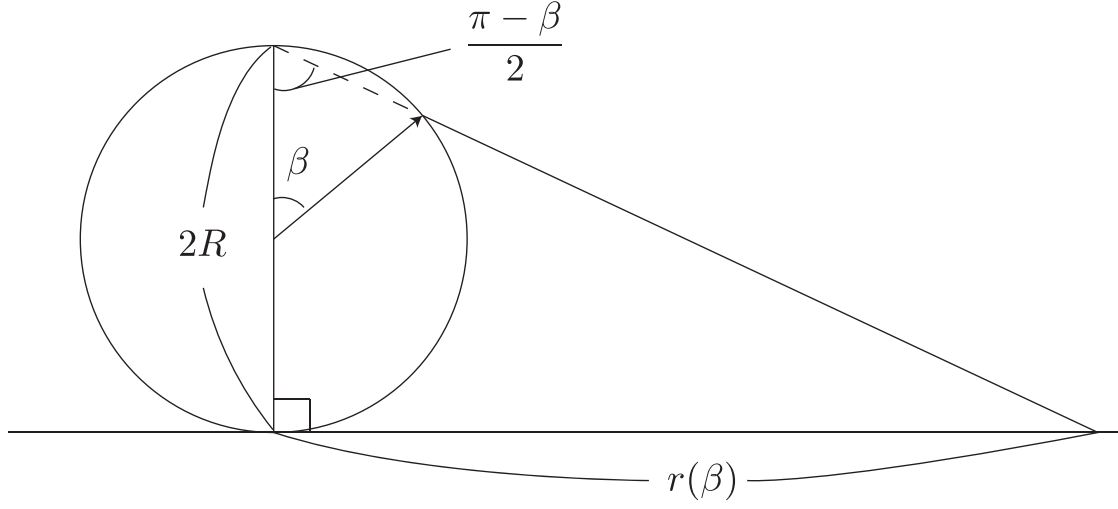


図 1.7: 幾何学投影の対応関係の断面。

巻数 1 のスキルミオンの構造を得るには、ベース空間とターゲット空間が恒等写像で結びついていけばよい。よって巻数 1 のスキルミオンのベクトル場の一例は

$$\mathbf{n}(x, y) = \left( \frac{4Rx}{r^2 + 4R^2}, \frac{4Ry}{r^2 + 4R^2}, \frac{r^2 - 4R^2}{r^2 + 4R^2} \right) \quad (1.72)$$

のように与えられる。より一般に、この他の巻数 1 の構造や、巻数  $N$  の構造を含めたスキルミオンのベクトル場の配置は

$$\mathbf{n}_s = (\sin[f(r)]\cos[N\phi], \sin[f(r)]\sin[N\phi], \cos[f(r)]) \quad (1.73)$$

のように表せる。対応するトポロジカル数は

$$Q = \frac{1}{4\pi} \int dr n_s \cdot (\partial_x n_s \times \partial_y n_s) = \frac{N}{2} \int_0^\infty dr f'(r) \sin[f(r)] = N \cdot \frac{n_z(0) - n_z(\infty)}{2} \quad (1.74)$$

となる。 $n_z$  は  $\mathbf{n}_s$  の  $z$  成分である。 $n_z(0) = 1$  かつ  $n_z(\infty) = -1$ 、もしくは  $n_z(0) = -1$  かつ  $n_z(\infty) = 1$  に対応して、この値は  $\pm N$  の値をとる。 $Q = 1$  かつ  $f(r) = \frac{\pi}{2}$  の例が幾何学的投影で得られたベクトル場に対応する。また、 $f(r)$  の他の例に対する  $Q = 1$  および  $Q = -1$  の構造の例を図 1.8 に示す。 $Q$  の符号は文献により定義が異なりうるが、ここでは  $Q = 1$  のものをスキルミオン、 $Q = -1$  のものをアンチスキルミオンという。幾何学投影を考えた際  $r \rightarrow \infty$  のもとで単位球上の一点を表すベクトル場が  $(0, 0, 1)$  に収束することは、二次元平面上のスキルミオンで、中心からある程度離れたところのベクトル場が全て上を向いていることに対応している。

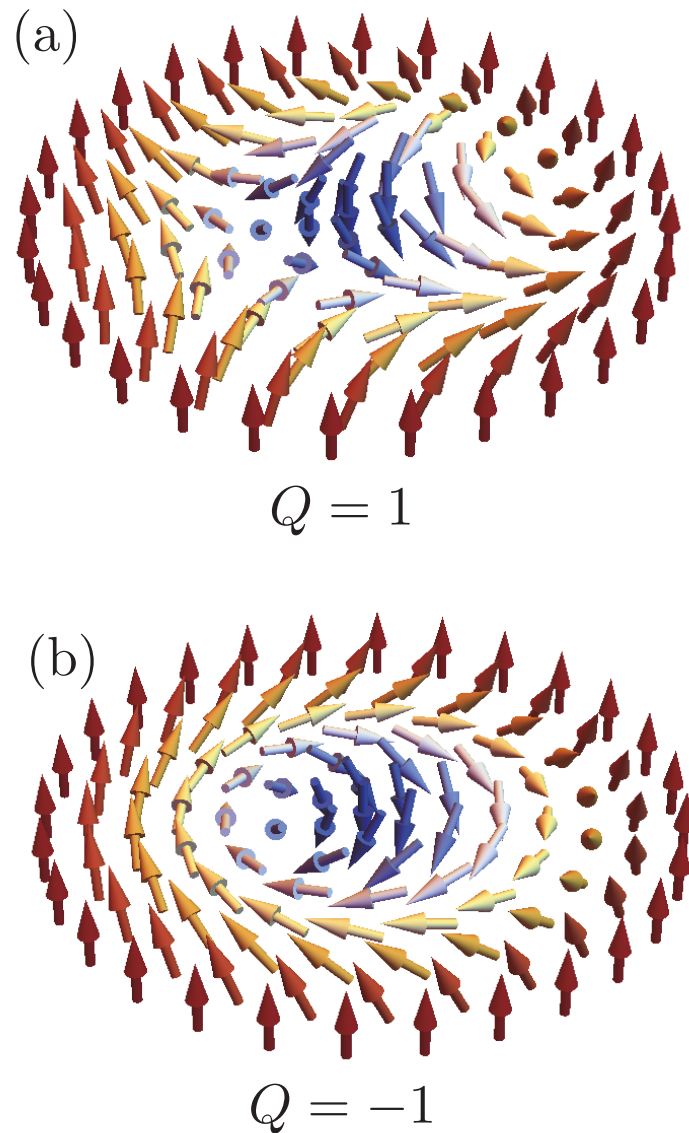


図 1.8: (a) スキルミオンおよび (b) アンチスキルミオンのベクトル場。 $Q$  の符号の定義は本文で述べたようなものになっている。矢印の色はベクトルの面直成分を示す。

スキルミオン数はベクトルの張る立体角の総和と対応しており、スキルミオン数が2となった場合立体角の和が $8\pi$ となる。本研究で考えているのは交換相互作用、DM相互作用、ゼーマン相互作用からなるハミルトニアンをもとにした計算で、スキルミオン数1のスキルミオンが安定に存在するというものである。他方で、トポロジカル数としてはより大きなトポロジカル数のスキルミオンも考えられる。トポロジカル数が大きいスキルミオンは、隣り合うスピン同士の相対的な角度が大きくなり、通常交換相互作用が主要な寄与を与える系の場合不安定である。しかし、高いスキルミオン数を持つスキルミオンを実現できれば、例えば伝

導電子に対する仮想的電磁場が大きくなったり，スキルミオンを情報担体として用いる際のデジタル信号のバリエーションが増えるなどの利点がある。先行研究で，スキルミオンが二つ結合した状態である **biskyrmion** の存在および **biskyrmion** を電流で駆動できることの実験的確認 [11]，スキルミオン数 2 のスキルミオンが近藤格子模型を考えた際のゼロ磁場状態で発現することの理論 [12] などが報告されている。

## 1.2 磁気スキルミオン

### 1.2.1 歴史

磁気スキルミオンが最初に実験で観測される約 30 年前、まず 1976 年に中心対称性の破れた金属強磁性体である MnSi で、Ishikawa ら [13, 14] による中性子散乱実験の結果が報告された。この実験で MnSi 中におけるらせん磁性の存在が確認された。また同じ  $P2_13$  型の結晶構造を持つ FeGe でも同じような磁気構造が存在することが報告された。次いで 1980 年代における Bak, Jensen によるギンツブルグ–ランダウ (Ginzburg-Landau) 理論で、このらせん構造の発現には DM 相互作用が重要であることが示された [15]。

その後、Bak, Jensen の GL モデルに外部磁場との Zeeman 相互作用を含めて鞍点解を探すと、渦状の構造が得られることが Bogdanov, Röblier らにより報告された [16, 17, 18, 19, 20, 21, 22]。

このような研究を背景として、磁気スキルミオンが実験で初めて観測されたのは 2000 年代のはじめである。当時 MnSi の温度磁場相図において、磁気転移温度直下の非常に狭い温度、磁場範囲に A 相と呼ばれる特殊な相が存在することが抵抗や帯磁率の実験により既にわかっていた。2009 年に Mühlbauer らはこの A 相が磁気スキルミオン結晶によるものであることを小角中性子散乱の実験により特定した [23]。

また、Lee らは MnSi における異常ホール効果の実験を行い [24]、さらに Do らが二次元キラル磁性体モデルにおけるモンテカルロ計算で、ある磁場領域にてスキルミオンが生じることを示した [25]。その後 Yu らは、薄膜  $Fe_{0.5}Co_{0.5}Si$  において磁気スキルミオンが最低温度付近まで安定化すること、および二次元モンテカルロ計算でこの結果をよく再現できることを報告した [26]。さらに、MnSi および  $Fe_{1-x}Co_xSi$  と同じ空間群  $P2_13$  を持つ結晶である FeGe [27] や絶縁体  $Cu_2OSeO_3$  [28] など、様々な他の磁性体においても、スキルミオンの発現が確認された。この FeGe 薄膜では、室温付近までスキルミオンが安定化することがわかっている。

その後、スキルミオンは電子に対して仮想的な磁場発生源として働き、電子の軌道を曲げるトポロジカルホール効果を示すこと [29]、ある周波数のマイクロ波照射により特有の共鳴モードが励起されること [30]、温度勾配による回転を生じること [31]、電流により駆動でき、その際の閾値電流密度は従来の磁壁に比べて 5, 6 桁小さいこと [32, 33, 34] など、非常に興味深い性質が次々に示され、応用例も数多く提案されている。以下、磁気スキルミオンについて詳しく述べる。

### 1.2.2 実験による観測

磁気スキルミオンは磁性体中で三角格子状の配列を形成するが、この格子状態を初めて実験的に観測したのは S. Mühlbauer らで、2009 年のことである [23]。

Mühlbauer らは、中心対称性の破れた合金である MnSi に対して行なった中性子散乱の結果から、磁気転移温度直下の限られた温度、磁場領域に存在する A 相と呼ばれていた相の磁気構造が、六回対称性を持つ構造であることを確かめた。通常大気圧、磁場なしの状態では、MnSi 中でらせん構造が安定である。MnSi 中における各相互作用の強さの階層構造は交換相互作用 > DM 相互作用 > 異方性の順である。特に交換相互作用と DM 相互作用の競合により、らせん周期 190 Å 程度のらせん構造が生じる。ここで、Bak, Jensen が提案した MnSi の Ginzburg-Landau 理論に従い、らせんの周期について述べる [15, 9]。主要な寄与である交換相互作用、DM 相互作用を考慮したモデルの自由エネルギー

$$F = \frac{J}{2} \sum_{\mu} (\partial_{\mu} \mathbf{S})^2 + \frac{u}{2} (S^2 - s^2)^2 + D \mathbf{S} \cdot (\nabla \times \mathbf{S}) \quad (1.75)$$

で、スピンの Fourier 係数を

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{S}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \mathbf{S}_{-\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}), \quad \mathbf{S}_{-\mathbf{k}} = \mathbf{S}_{\mathbf{k}}^* \quad (1.76)$$

として定義すると、自由エネルギーは

$$\frac{J}{2} \mathbf{k}^2 \mathbf{S}_{-\mathbf{k}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{k}} + iD \mathbf{S}_{-\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{S}_{\mathbf{k}}) + \frac{u}{4} (\mathbf{S}_{-\mathbf{k}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{k}} - s^2)^2 + \frac{u}{8} (\mathbf{S}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{k}}) (\mathbf{S}_{-\mathbf{k}} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{k}}) \quad (1.77)$$

$\mathbf{S}_{-\mathbf{k}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{k}} = s^2$ ,  $\mathbf{S}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{k}} = 0$  のもとで第三、第四項が 0 となる。さらに  $\mathbf{S}_{\mathbf{k}} = \mathbf{a}_{\mathbf{k}} + i\mathbf{b}_{\mathbf{k}}$  のように実ベクトル  $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$ ,  $\mathbf{b}_{\mathbf{k}}$  で表すと、交換相互作用部分が

$$\begin{aligned} J \mathbf{k}^2 \mathbf{S}_{-\mathbf{k}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{k}} &= J |\mathbf{k}|^2 (\mathbf{a}_{\mathbf{k}} - i\mathbf{b}_{\mathbf{k}}) \cdot (\mathbf{a}_{\mathbf{k}} + i\mathbf{b}_{\mathbf{k}}) \\ &= J |\mathbf{k}|^2 (|\mathbf{a}_{\mathbf{k}}|^2 + |\mathbf{b}_{\mathbf{k}}|^2) \end{aligned} \quad (1.78)$$

DM 相互作用部分が

$$\begin{aligned} iD \mathbf{S}_{-\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{S}_{\mathbf{k}}) &= iD \mathbf{k} \cdot (\mathbf{S}_{\mathbf{k}} \times \mathbf{S}_{-\mathbf{k}}) \\ &= iD \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_{\mathbf{k}} + i\mathbf{b}_{\mathbf{k}}) \times (\mathbf{a}_{\mathbf{k}} - i\mathbf{b}_{\mathbf{k}}) \\ &= 2D \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_{\mathbf{k}} \times \mathbf{b}_{\mathbf{k}}) \end{aligned} \quad (1.79)$$

ここで、スピンの大きさ  $|\mathbf{S}_{\mathbf{k}}|^2 = \mathbf{a}_{\mathbf{k}}^2 + \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^2$  が  $s^2$  で固定されているので、 $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$  と  $\mathbf{b}_{\mathbf{k}}$  の相対的な大きさ、角度を調整して DM 相互作用の利得を最大化する上では、 $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$ ,  $\mathbf{b}_{\mathbf{k}}$ ,  $\mathbf{k}$  が互いに直交して、 $|\mathbf{a}_{\mathbf{k}}| = |\mathbf{b}_{\mathbf{k}}|$  である必要がある。  $D > 0$  である時、DM 相互作用が負になるには  $\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_{\mathbf{k}} \times \mathbf{b}_{\mathbf{k}}) < 0$  であることを考慮すると、結局自由エネルギーを最小化するには

$$J \left( |\mathbf{k}|^2 - 2 \frac{D}{J} |\mathbf{k}| \right) |\mathbf{a}_{\mathbf{k}}| \quad (1.80)$$

を考えれば良い。この際実現する磁気構造はらせん (ヘリカル) 磁性と呼ばれ、図 1.9 のように伝播ベクトル  $\mathbf{Q}$  の方向に進むごとに、 $\mathbf{Q}$  に垂直な面内で磁気モーメ



ントを示すベクトルが回転する構造である。

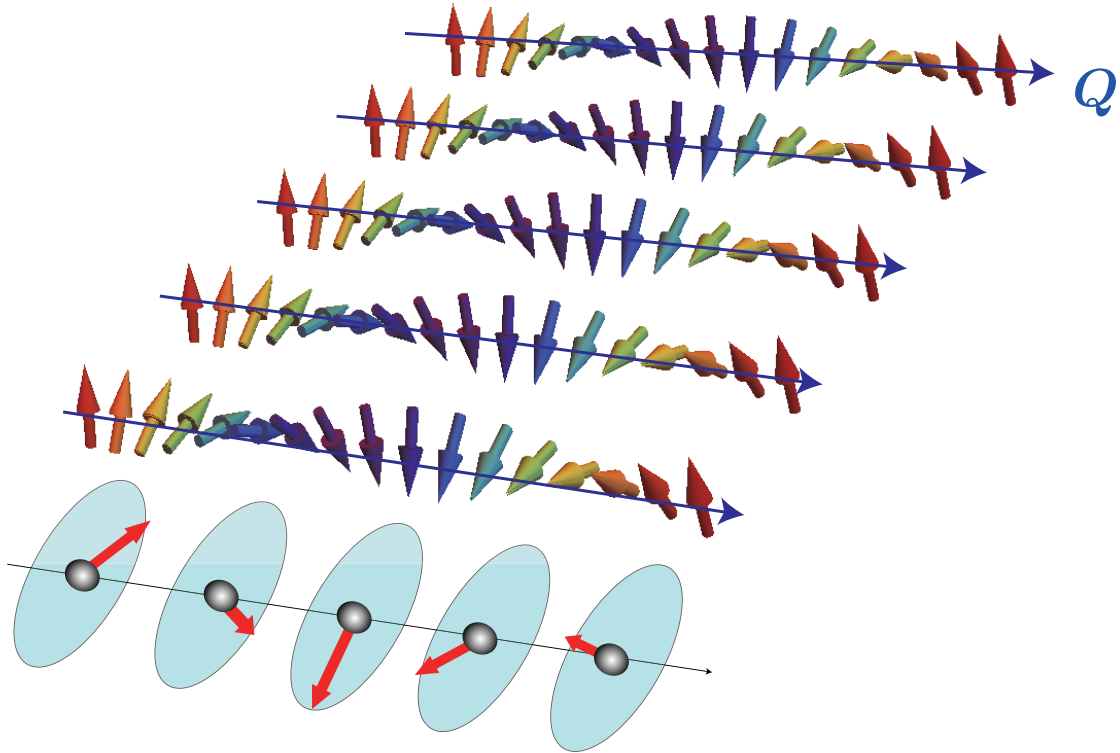


図 1.9: らせん磁性の磁化配置。伝播ベクトル  $Q$  の方向に進むごとに、 $Q$  に垂直な面内で磁気モーメントを示すベクトルが回転する。

らせんの変調周期は  $|\mathbf{k}| = D/J$  の逆数  $J/D$  に比例することになる。

**MnSi** では DM 相互作用が強磁性交換相互作用に比べて弱いため、このらせん周期が格子定数  $4.6 \text{ \AA}$  に比べると非常に長い。らせんの長さは強磁性相互作用と DM 相互作用の競合で決まるが、伝播の方向はこの二つの相互作用のみでは決まらない。この伝播方向の縮退は結晶の異方性により解かれ、**MnSi** の場合通常  $[111]$  方向にらせんの伝播ベクトルがピン留めされている。この状態に磁場をかけると、らせん構造の  $[111]$  方向に対するピン留めが外れ、伝播ベクトル  $Q$  が磁場と平行になり、磁化が磁場方向に少し傾いた構造が生じる。これをコニカル磁性という (図 1.10)。

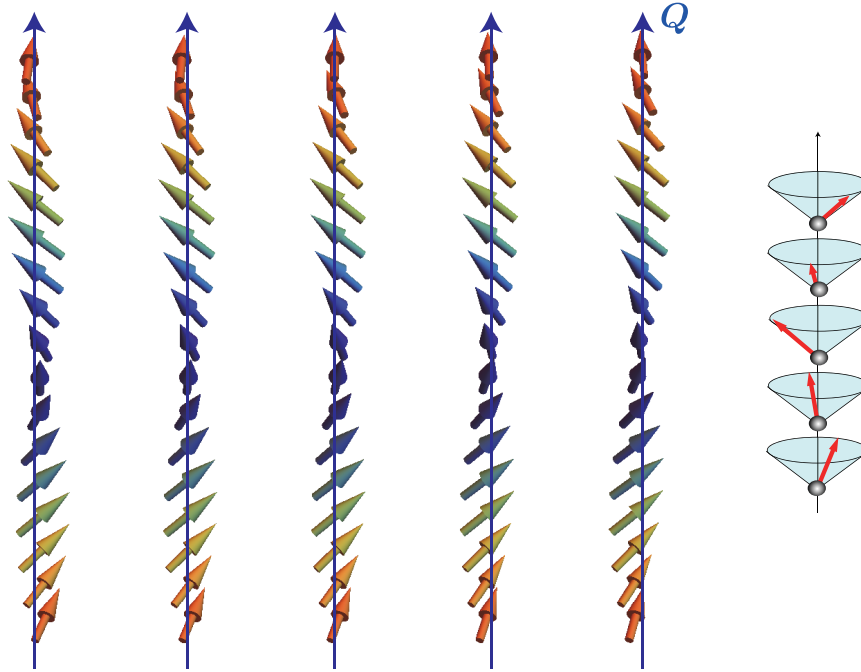


図 1.10: コニカル磁性の磁化配置。らせん磁性の時と比べると、磁化が少し磁場方向に傾いている (スピンは磁場と反対方向に傾く)。

さらに強い磁場をかけると一様強磁性状態へと移行する。一方、磁気転移温度直下の狭い温度 - 磁場領域において、A相と呼ばれる特殊な相が存在することが、当時抵抗や帯磁率の実験によりすでにわかっていた。Mühlbauerらの報告ではこのA相において、六回対称なBraggピークが観測されることが示された。特に重要な結果は、結晶格子の方向に対する磁場の方向に関係なく、磁場と垂直な面で六つのBraggピークが得られることである。Mühlbauerらは、平均場近似を用いたGinzburg-Landau理論で、温度揺らぎを考慮してこの六回対称性を説明した。まず転移温度直下で平均場近似を考慮したエネルギーの汎関数は

$$F[M] = \int d^3r [r_0 M^2 + J(\nabla M)^2 + 2DM \cdot (\nabla \times M) + UM^4 - B \cdot M] \quad (1.81)$$

のように与えられる。自由エネルギーを

$$e^{-G} = \int dM e^{-F[M]} \quad (1.82)$$

で与えた時に、平均場近似のもとで $G(B)$ は $F$ の最小値に対応する。Mühlbauerらは、通常の液体から固体が形成される過程で密度波の三次の寄与

$$\sum_{q_1, q_2, q_3} \rho_{q_1} \rho_{q_2} \rho_{q_3} \delta(\rho_{q_1} + \rho_{q_2} + \rho_{q_3}) \quad (1.83)$$

が重要な役割を果たすことのアナロジーとエネルギー汎関数の4次の項を考慮して、有限の磁化の成分  $M_f$  がある時のエネルギー項

$$\sum_{q_1, q_2, q_3} (M_f \cdot m_{q_1})(m_{q_2} \cdot m_{q_3}) \delta(q_1 + q_2 + q_3) \quad (1.84)$$

を考慮した。 $m_q$  は  $M(r)$  の Fourier 変換である。このエネルギーの利得の上では、三つの伝播ベクトルが足し合わせると  $0$  になる必要があり、三つの  $Q$  ベクトルは互いに  $120$  度をなして、ある法線ベクトル  $n$  で決まる平面をなす。対称性からこの寄与によるエネルギーは  $M_f \cdot n$  の形をとるが、これは  $M_f$  と  $n$  が互いに平行か反平行な時に最安定化する。有限の磁化  $M_f$  は外部磁場の方向に向いていると考えられるので、三つの  $Q$  が張る平面は外部磁場と垂直な平面となる。また  $Q$  と  $-Q$  はどちらも Bragg 反射を与えることから、Bragg スポットは六回対称になる。これにより Mühlbauer らは、A 相の磁気構造が

$$M(r) \simeq M_f + \sum_{i=1}^3 A[n_{i1} \cos(Q_i \cdot r + \Delta r_i) + n_{i2} \sin(Q_i \cdot r + \Delta r_i)] \quad (1.85)$$

のように、三つのらせん磁気構造が重ね合わさった構造であると説明した。また通常平均場近似では、 $Q$  ベクトルが外部磁場の方向を向いたコニカル磁性が安定化する。これに対して Mühlbauer らは、A 相とコニカル磁性の自由エネルギーが磁気転移温度付近で本来近く、

$$G \simeq F[M_0] + \frac{1}{2} \log \det \left( \frac{\delta^2 F}{\delta M \delta M} \right) |_{M_0} \quad (1.86)$$

のような Gauss 型の熱揺らぎの項 (第二項) を平均場解 (第一項) に加えると、A 相がコニカル相よりも安定になることを示した。これらの結果および、計算で得られた A 相の実空間における渦状の磁化配置が有限のトポロジカル数を持つことから、Mühlbauer らはこの A 相の磁気構造が図 1.11 に示すようなスキルミオンの三角格子構造であることを結論づけた。

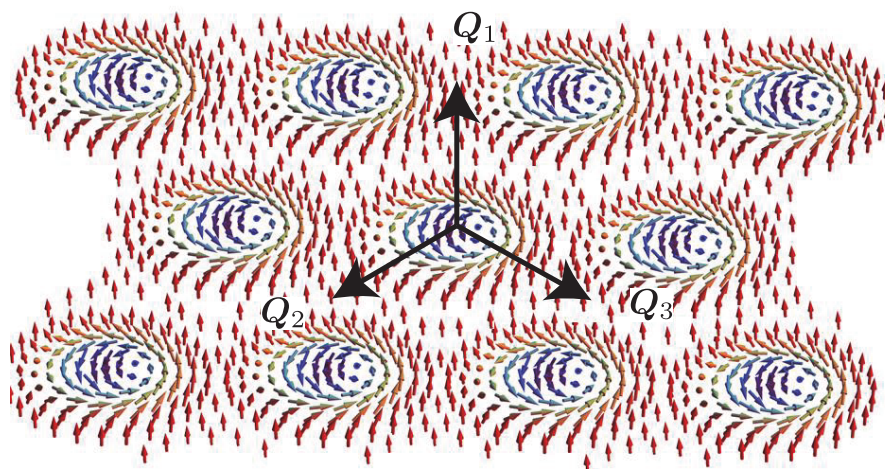


図 1.11: スキルミオン格子の磁化配置。三本の  $Q$  ベクトルが磁場と垂直な面内に倒れた状態になっており、この三本のらせんの重ね合わせとしてスキルミオン格子をとらえることができる。

なお、個々のスキルミオンがどちらの向きに巻くかは **DM** 相互作用の符号を反映している。バルク中ではさらに、このようなスキルミオン格子が磁場の方向に三次元に連なったチューブ構造 (図 1.12) をとることができる。理論、実験の両面で知られている。

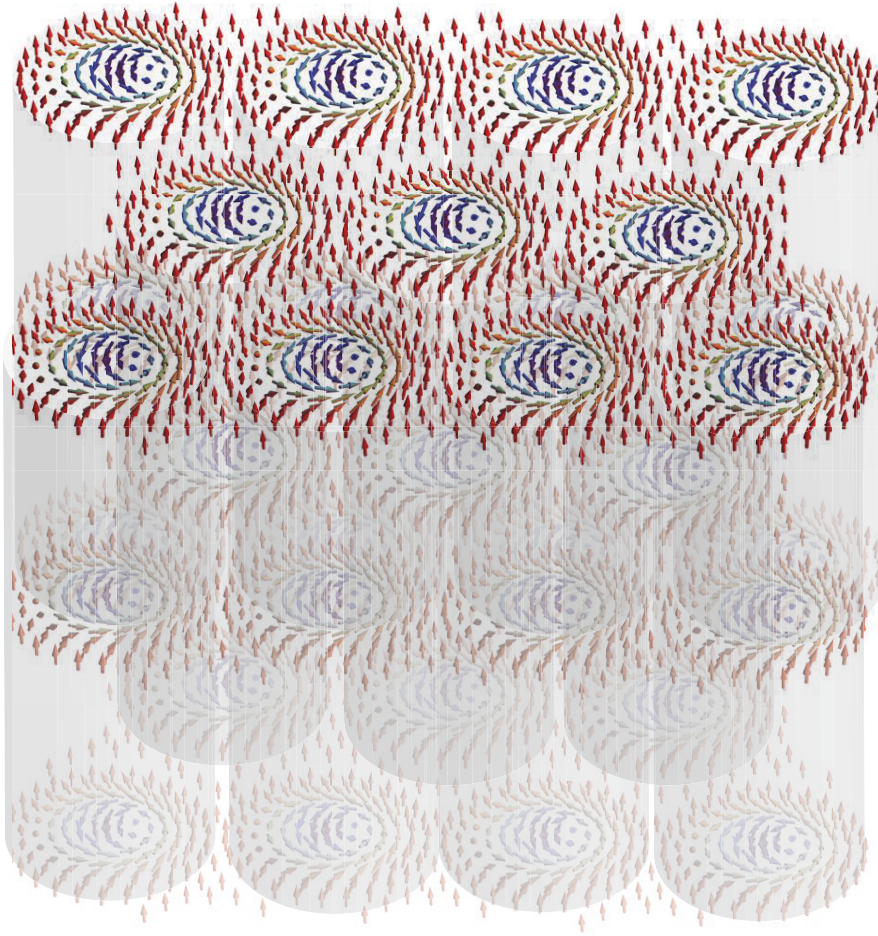


図 1.12: スキルミオンチューブの磁化配置。磁場方向にスキルミオン格子の面が積層した構造になっている。

$\text{MnSi}$  の例のように、中性子散乱実験は運動量空間でのスピンの情報を与える。一方で Yu らは 2010 年、Lorentz 透過型電子顕微鏡を用いた実験により、実空間で  $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$  薄膜中でのスキルミオン格子を確認した [26]。この実空間における顕微鏡画像を Fourier 変換したものが、中性子散乱実験における Bragg ピークのスポットに対応する。 $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$  も B20 型の結晶構造を持つキラリ結晶である。Yu らの示したこの実験結果では、後述のようにスキルミオンが最低温度付近まで安定化する。その原因としては薄膜における実験であることが大きい。らせんの変調周期 ( $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$  では 90 nm 程度)<sup>5</sup>よりも薄膜の厚さ (Yu らの実験では 20 nm 程度)の方が小さいために、面直方向に磁化が巻くことによる DM 相互作用の利得が小さくなり、伝播ベクトル  $Q$  が面内に倒れやすくなる。これにより、磁場を薄膜に垂直に加えた際に伝播ベクトルが磁場方向を向くコニカル磁性が相対的に不

<sup>5</sup>なお、スキルミオンの格子の周期はらせん磁性の変調周期と同じ程度の長さとなる。



安定化することが、スキルミオンを相対的に安定化させる。またこの Yu らの報告では二次元モンテカルロシミュレーションの結果も示されているが、計算の結果得られた相図は薄膜での実験結果とよく合致している。

さらに 2012 年には, Seki らが絶縁体  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$  におけるスキルミオンの発現を Lorentz 電子顕微鏡, 磁化率測定で確認した [28]。  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$  は  $\text{MnSi}$  や  $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$  と同じ空間群  $\text{P}2_13$  に属する絶縁体で,  $\text{Cu}^{2+}$  が四角錐, 三方両錐形の二つの形の酸素に囲まれた配列 (四角錐, 三方両錐形の存在比は 3 対 1) をしている。四角錐の部分でスピナップ, 三方両錐形の部分でスピндаウンのフェリ磁性が実現している。Seki らのこの報告では, スキルミオンが磁氣的に電気分極を誘発するマルチフェロイック的なふるまいをすることが示されており, 外部電場でスキルミオンを操作できる可能性が示唆されている。

$\text{MnSi}$  などここで挙げた例では, 図 1.13 (a) のような Bloch 型のスキルミオンが発現する。外周部分の磁気モーメントは Zeeman 相互作用を得るように外部磁場と同じ方向を向く。中心部分が磁場と反対方向を向き, 中心部分から外周部分に向けて DM 相互作用によりねじれた構造をとっている。Bloch 型と呼ばれるのは, この際のねじれ方向が Bloch 磁壁におけるねじれ方と同じであるためである。一方, 空間群が  $\text{P}2_13$  でない,  $C_{nv}$  の対称性の結晶構造である非キラルな絶縁磁性体  $\text{GaV}_4\text{S}_8$  では, 図 1.13 (b) のような Neel 型のスキルミオンも確認されている [35]。Neel 型スキルミオンも同様に, Neel 型磁壁と同じ磁化のねじれ型をしている。

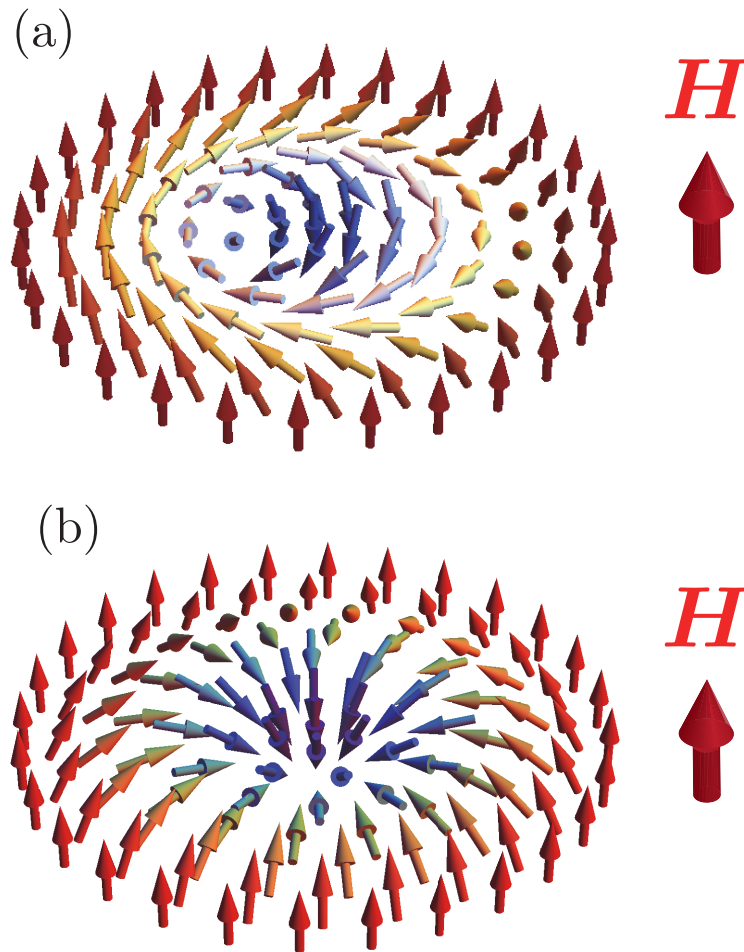


図 1.13: (a) Bloch 型および (b) Neel 型スキルミオンの磁化配置。中心が磁場 (図中  $H$ ) と反対方向、外周が磁場と同じ方向を向く。

この他にも  $P2_13$  でない  $\text{CoZnMn}$ [45] でのスキルミオンの存在も報告されている。

### 1.2.3 スキルミオンの特徴的ふるまい

スキルミオンは有限のトポロジカル数を持つことで、他の磁気構造とは異なるユニークなふるまいをする。ここではその代表例をいくつか挙げる。まずスキルミオンは、スキルミオン上を通過する伝導電子に対してあたかも磁場発生源のように働き、電子の軌道を曲げるトポロジカルホール効果という現象を引き起こす[29]。スキルミオンが存在する状態でホール抵抗を観測すると、正常ホール効果、異常ホール効果に加えてこのトポロジカルホール効果の寄与が生じる。トポロジカルホール効果は、伝導電子が伝わる過程で電子状態が変わらない(バンド間遷移が起こらない)状況では、ベリー位相すなわちパラメータ空間上で波動関数が変化する際、波動関数が獲得する時間発展以外の位相を用いて説明される。

次に、スキルミオンは共鳴周波数のマイクロ波を照射すると、周波数によっては回転モードと呼ばれるその場でスキルミオンが時計回りもしくは反時計回りに回転する振動を行い、また別の振動数ではその場でスキルミオンの大きさが大きくなったり小さくなったりする呼吸モードと呼ばれる振動を行う [30]。この共鳴モードを利用した研究も多数報告されており、最近では傾斜磁場存在下におけるスキルミオンのスピン波モードおよびマイクロ波照射によるスキルミオンの並進運動に関する報告 [37] や、二次元磁性体中のスキルミオン格子に傾斜した定常磁場を印加した状態で、マイクロ波を照射してスピン波モードを励起すると、大きな直流成分を含むスピン起電力が生じること [38] などがある。スキルミオンはまた、温度勾配が存在する状況では一方向の回転を行う [31]。これは Lorentz 電子顕微鏡でスキルミオンを観測した際に確認された現象である。Lorentz 電子顕微鏡の電子ビームで同心円状の温度勾配が生じ、高温側から低温側にマグノンが流れる際のマグノンとの相互作用により、スキルミオンが駆動される。この他、スキルミオンは電流で駆動できる [32, 33, 34]。これは電子からスピン移行トルクと呼ばれるトルクを受けることでスキルミオンのスピンの変化することによる。この際の電流密度は、同じスピン移行トルクで磁壁を駆動させる時よりも 5~6 桁小さく、デバイス応用の際の省電力性につながる。

#### 1.2.4 応用の試み

現在の情報メモリの一つの欠点として揮発性<sup>6</sup>がある。この揮発性のために、電源を入れてコンピュータが使えるようになるまでにかなりの時間がかかる。また古典電磁気的情報書き込み、読み出しの方法では、通常サイズを小さくするにつれて信号が弱くなり、読み出しが困難になる。一方で磁性体を用いる素子では、スピンあるいは磁化の配列が相互作用および温度などの環境で決まり固定されることが多いため、電源を切っても情報が失われない不揮発性を利用したメモリデバイスの製造が可能になる。また磁性は本質的に量子効果に基づくため、サイズを小さくしても信号を強く保つことができ、高密度の情報素子の実現につながる [39]。これに加えてスキルミオンは (i) トポロジカルに非自明な構造であるために、外部からの擾乱に対して安定であること、(ii) そのサイズがナノメートルオーダーで極小であるために、高密度の情報を有しうること、(iii) 駆動に要する閾値電流密度が非常に小さいことといった特徴を有しており、従来の素子を改良することでは到達できない高機能性を有した素子を実現しうる [40]。その一例としてはスキルミオントレインメモリ (図 1.14) がある。これはもともと磁壁を電流駆動させ、磁壁の存在部分に情報を持たせるレーストラックメモリを元にしたデバイスである。スキルミオントレインメモリは磁壁の代わりにスキルミオンを使い、スキルミオンを電流で駆動し、スキルミオンがある部分を 1、ない部分を 0 としてバイナリ

<sup>6</sup>電源を切り、電流が流れなくなると情報が失われてしまう性質。



データの書き込み，読み出しを実現する。

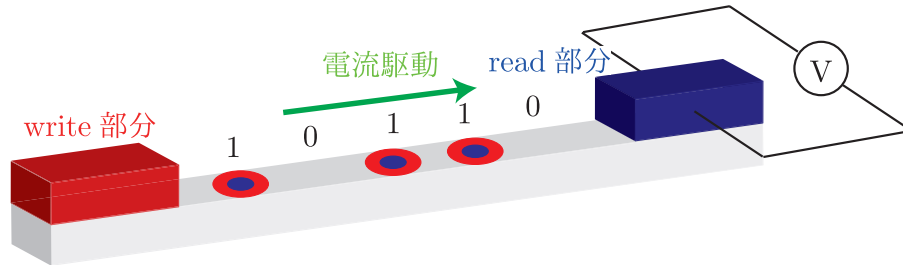
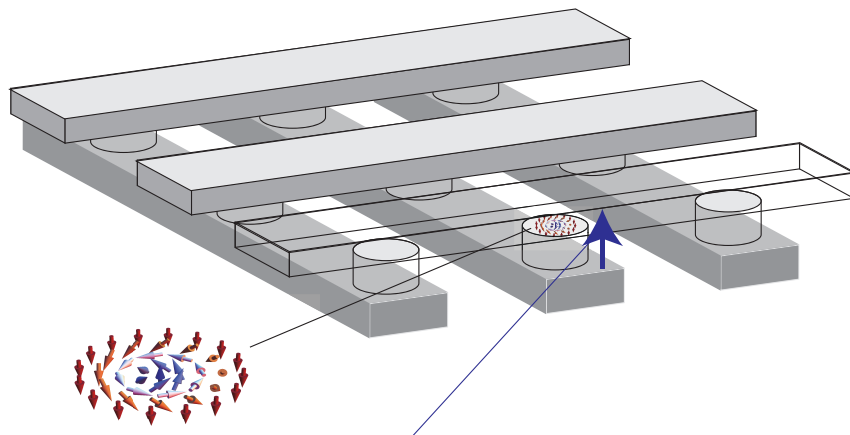


図 1.14: スキルミオントレインメモリ。スキルミオンを電流により駆動し，スキルミオンがあるとところを 1，ないところを 0 として読み出し部分で読み取り，バイナリデータとして扱う。

スキルミオン MRAM (magnetic random access memory もしくは magnetoresistive random access memory) も上記の三つの特性を活かした素子の一例である。MRAM はもともと，トンネル磁気抵抗 (TMR) 素子<sup>7</sup>などの素子を多数配列した高密度な不揮発メモリである。スキルミオン MRAM は，TMR 素子のフリー層にスキルミオンを書き込むものである (図 1.15)。



電流を流した時の抵抗がスキルミオン存在・非存在に対応して変わる

図 1.15: スキルミオン MRAM。各素子のところでスキルミオンを生じさせ，スキルミオン存在下で電流を流した時の抵抗が，スキルミオンがない時と比べて変化することを利用してメモリとして利用する。

また近年では，上記の 3 つの特徴に限らずスキルミオンのその他の特性に注目したデバイスの提案も行われている。その例としてはスキルミオンリザーバコン

<sup>7</sup>強磁性層で中間の絶縁層を挟んだ三層構造の素子。フリー層と呼ばれる金属層中における磁化の向きに依存して，素子にトンネル電流を流した時の抵抗が変わることを利用して情報の読み出しを行う。書き込みはコイルで発生させた磁場などを用いる。

ピューティングがある [41]。リザーバ・コンピューティングは機械学習のモデルの一つである。通常のニューラルネットワークと呼ばれる機械学習のモデルでは、教師データを再現するような出力を得るように、入力、中間層、出力層のニューロンを結ぶ重みと呼ばれるパラメータを調整する (このプロセスを学習という)。一方、リザーバ・コンピューティングでは中間層における重みの学習を行うことなく、系がもともと持つ非線形性を利用する。特に近年注目されている物理的リザーバ・コンピューティングと呼ばれる手法では、中間層に対して機械学習専用の素子の代わりに非線形性を有した物理系を導入する。この物理系がもともと持つ非線形性を利用することで、学習コストをおさえた機械学習デバイスを実現する。その他、スキルミオンは上述のように三次元方向でチューブ構造をとりうるが、このチューブを導波路としてスピン波 (一様強磁性状態からのスピンの揺らぎ、励起) を伝播させ、情報伝播をさせるという試みも行われている [42, 43]。

### 1.2.5 磁気スキルミオンの相図

このように多くの応用例が考案されているスキルミオンに対して、実用に向けての大きな期待が持たれているが、実用に際して重要な課題がある。スキルミオンの発現機構は異なるものの、合金  $\text{MnSi}$  や絶縁体  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$  などにおける磁場-温度相図は似通っており、特にスキルミオンの安定領域は非常に狭い温度、磁場領域にしかない。スキルミオンの応用を行う上では、この安定領域を拡大することが非常に重要な課題となる。

### 1.2.6 安定領域の拡大

現在では様々なメカニズムによるスキルミオンの形成が報告されており、具体的には磁気双極子相互作用、DM 相互作用、フラストレート交換相互作用、四スピン交換相互作用などである [45]。中でも DM 相互作用により形成されるスキルミオンは、そのサイズが 150 nm 未満と小さく、また巻きの方向が DM 相互作用の符号に依存して固定されている [45]。特に本論文に関わる内容として注目すべきは、このように形成のメカニズムが異なる中、スキルミオンが生じる際の温度-磁場相図はどれも似通っており、スキルミオンが安定して存在する領域は、ヘリカル転移温度直下の非常に狭い領域であるということである。

Yu らは、ヘリカル変調周期よりも小さい厚さの薄膜サンプル中でスキルミオン相の安定性が劇的に増大することを示した [26]。この結果については二次元系におけるモンテカルロ計算による理論的解釈も得られた。また薄膜を用いた実験では同様に室温付近までスキルミオンが安定化する例も報告された [27] が、薄膜を利用する方法では応用の際、サンプルの形状が制限されてしまうという課題がある。

その他の興味深い報告として、磁場中での冷却により超冷却スキルミオンを作るという方法も報告されている。この場合もスキルミオンが最低温度付近まで存在しうるが、この超冷却スキルミオンは熱的平衡状態ではなく、時間が経つと消えてしまう [44]。

2015 年には Nii らにより、MnSi に一軸圧縮歪みを与えた時におけるスキルミオンの安定性の変化についての動的帯磁率測定、小角中性子散乱の実験結果が報告された [46]。スキルミオン相では磁化を増大させていった時平行帯磁率が減少し、垂直帯磁率が増大する振る舞いが観測されるため、スキルミオンの安定領域を確認できる。この報告では、200 MPa 程度 (カンチレバーで十分到達できる程度の強さ) の一軸圧縮歪みを加えた際、スキルミオンの安定領域が変わることが報告されている。一軸圧縮歪みを磁場と垂直に加えた際はスキルミオンの安定領域が拡大し、磁場と平行に一軸圧縮歪みを加えた場合は逆に、スキルミオンの安定領域が縮小する。特に磁場と一軸圧縮歪みを MnSi の磁気困難軸である [111] 方向に加えた際は、スキルミオンの安定領域が完全に消失することが報告された。またこの報告では、磁場と垂直に一軸圧縮歪みを加えた際、ヘリカル磁性相も引っ張り歪みの存在で影響を受け、もともと [111] 方向を向いていた伝播ベクトルが引っ張り歪みの方向を向くことも報告された。この安定性の変化については、磁気弾性効果による自由エネルギーの変調を考慮した Ginzburg-Landau 理論を用いてされている。なお、Nii らはこの報告内で一軸圧縮歪みにより DM 相互作用が変調することの影響にも触れている。Nii らが得た SANS の結果では、磁気スキルミオンの変調周期がほとんど変化しないため、少なくとも MnSi においては歪みによる DM 相互作用の変調の効果は、異方性の変調の効果に比べて小さいという見解を示している。

また同じく 2015 年に、Chacon らにより MnSi で一軸圧縮歪みを加えた際、圧力が磁場と垂直な際にはスキルミオンが安定化するという、小角中性子散乱の実験結果が報告された。この報告では結晶方位の方向に関係なく、一軸圧縮歪みの方向にらせん構造の変調方向が向き、特に磁場と一軸圧縮歪みが垂直な場合、らせんとスキルミオン結晶相が安定化することが報告された [47]。しかし、これらの MnSi での圧縮歪みによる磁気スキルミオンの安定化は、温度でいうと数 K 程度である。一方、Seki らは絶縁体  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$  に引っ張り歪みを加えると、磁気スキルミオンが最低温度付近まで安定化することを実験で確認した [48]。Seki らは  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$  に一軸方向の引っ張り歪みを加えた。上述のように、磁気スキルミオンは、二つの回転モード (CW モードと CCW モード)、一つの呼吸モードを持つことが知られている。Seki らは、そのような磁性体内部に生じる磁気構造特有の共鳴モードを利用して、マイクロ波の磁気共鳴により引っ張り歪み由来の相の変化を調べた。この際引っ張り歪みが磁場と垂直な場合は、磁気スキルミオンの相が最低温度付近まで拡大する。他方で、引っ張り歪みが磁場と平行な場合は、磁気スキルミオンの相は完全に消失し、コニカル磁性が全温度領域で安定化する。Seki

らはまた、磁場と張力との相対角度を徐々に変化させた場合の実験を行った。Sekiらは、引っ張り歪みにより磁気異方性およびDM相互作用の値が変調を受けることを考慮して、この結果に考察を与えている。 $z$ 軸方向に結晶を伸長させた場合、自由エネルギーに磁気異方性の変調

$$\Delta_K = -K_z m_z^2 \quad (1.87)$$

およびDM相互作用の変調

$$\Delta_{DM} = -d_z \left( m_y \frac{\partial m_x}{\partial z} - m_x \frac{\partial m_y}{\partial z} \right) \quad (1.88)$$

の寄与が生じる。 $q$ ベクトルが歪み $\sigma$ の方向にピン留めされることを考慮すると、 $K_z$ および $d_z$ の符号はそれぞれ負と正になる。スキルミオン、コニカルのそれぞれの磁気構造に対して、 $\Delta_K$ および $\Delta_{DM}$ の全空間での平均 $\langle \Delta_K \rangle = \int d\mathbf{r} \Delta_K / \int d\mathbf{r}$ 、 $\langle \Delta_{DM} \rangle = \int d\mathbf{r} \Delta_{DM} / \int d\mathbf{r}$ を計算した結果が、磁場と張力の方向の相対角度が60度以上でスキルミオン相が安定化するという実験結果を正しく説明することをSekiらは示した。

### 1.2.7 スキルミオンのモンテカルロシミュレーション

二次元でのモンテカルロ計算については [25] および [26] で報告されており、スキルミオン格子が安定的に得られている。このモンテカルロ計算では強磁性交換相互作用, DM 相互作用, Zeeman 相互作用の三つの項を考慮したモデルの計算が行われている。結果得られた相図は, 実験における  $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$  薄膜での相図とよく整合している。この二次元モンテカルロ計算の報告の後 **Buhrandt** と **Fritz** は, バルクの実験で確認されているスキルミオンの相図およびスキルミオンチューブを三次元のモンテカルロ計算で再現することに成功している [49]。Mühlbauer らはスキルミオンを実験的に観測した報告で, 上述のように自由エネルギーに対して熱揺らぎを考慮することでスキルミオンの発現を説明している。**Buhrandt** らはこの報告をふまえ, 古典モンテカルロ法によって温度の影響を取り入れたシミュレーションにより, スキルミオンの相を再現できるかを調べた。らせんの伝播周期が格子の長さに比べて非常に長く, スピンの空間に対する変化が十分緩やかであるため, スピンを粗視化したモデルによる計算が許される。**Buhrandt** らは, 強磁性交換相互作用, DM 相互作用, Zeeman 相互作用を考慮した古典モンテカルロ計算により磁場 – 温度相図を得た。この計算結果は上述のような, **MnSi** などの合金のバルクで見られる相図をよく再現している。この計算により, 熱揺らぎがスキルミオンの安定化で重要であることを裏付ける結果が得られた。また第二章で述べるように, **Buhrandt** らは三次近接の相互作用を考慮しなければ, 粗視化による人為的な異方性が生じてしまうことを示した。

### 1.3 磁壁と非整合ブロッホライン

薄膜面内で磁化が互いに 180 度異なる向きを向く二種類の Bloch 磁壁が生じるようにすると、二つの Bloch 磁壁の境目でねじれが生じる。このねじれは (垂直) Bloch ラインと呼ばれる (図 1.16)。Bloch ラインは、円柱型磁区構造を利用する磁気バブルメモリの直径の 10 分の 1 程度の幅を持つ。これにより Bloch ラインは、磁気バブルよりも高密度の記憶素子を実現しうるものと期待され、Bloch ラインを利用したメモリーを提案した Konishi らを中心に、日本でも精力的に研究されてきた [50, 51]。

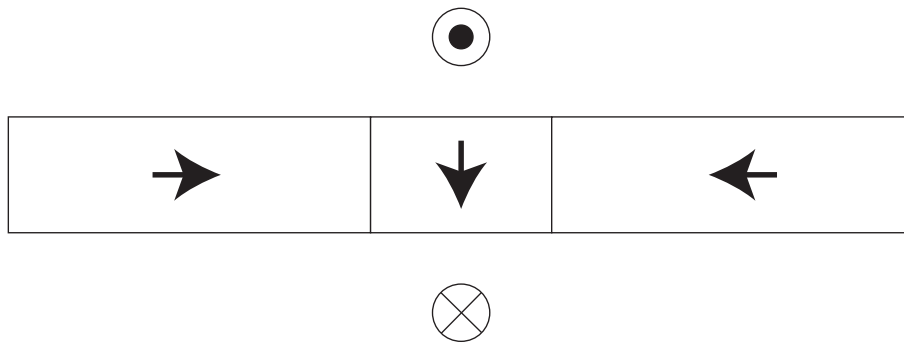


図 1.16: Bloch ラインの磁化配置。図中紙面裏から表向きと表から裏向きの磁化が生じている領域の間にある、右向きあるいは左向きを向いた磁化の部分 (実際には連続的に磁化がねじれている) が磁壁である。向きの異なる二つの磁壁が隣接している時、その境界でも図中下向きの矢印のように、磁化のねじれが生じる。これが Bloch ラインと呼ばれる。

強磁性体内では、磁区と呼ばれる磁化が一定領域内で一定の方向を向いた構造が生じる。磁区の向きが異なる隣接する磁区の境界では、磁化が徐々に向きを変える構造である磁壁が生じる。上述のように、磁壁には磁壁面内で磁化の向きを変える Bloch 磁壁と呼ばれる構造と、磁壁に垂直な面内で磁化の向きを変える Neel 磁壁と呼ばれる構造とがある。Bloch 磁壁中でさらに Neel 磁壁が生じている場合が Bloch ラインである。

Bloch ラインメモリ提案以前に提案された磁気バブルメモリなどの磁気記録媒体では、磁区の微小化により情報の高密度化を図る。しかしこの方法では、微小化に伴い読み出し時の信号が弱くなるというデメリットがある。そこで通常磁気バブルメモリを利用する場合は、読み出し時に磁気バブルを拡大する後処理をした後に、信号を検出する。Bloch ラインを利用したメモリでは、この磁気バブルメモリよりも 10 倍以上の高密度な情報素子の開発が期待されている。

六方晶 M 型バリウムフェライト  $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$  は、飽和磁化が大きく ( $M_s=70 \text{ emu/g}$ )、c 軸方向に大きな一軸異方性を有するため、永久磁石に適した磁性体である。同じ六方晶でも Y 型と呼ばれる  $\text{Ba}_2\text{Me}_2\text{Fe}_{12}\text{O}_{22}$ 、Z 型と呼ばれる  $\text{Ba}_3\text{Me}_2\text{Fe}_{24}\text{O}_{41}$  はソフト磁性材料への応用が期待される中、M 型は上記の点から通常ハード磁性

材料への応用が期待されている [52]。本研究で注目する系は Sc 置換の M 型ヘキサフェライト  $\text{BaFe}_{12-x-0.05}\text{Sc}_x\text{Mg}_{0.05}\text{O}_{19}$  で、長手方向のコニカル磁性を持つことによる磁気電気効果を示す [36] という興味深い特徴を持つ。また、Sc 置換の M 型ヘキサフェライトでは磁気バブルが特異な振る舞いを示し、転移温度付近で磁気バブルのヘリシティが反転する。このヘリシティ反転は Bloch ラインを介して行われていると考えられている。ヘキサフェライト中では Bloch ラインが互いに向き合う head-to-head および tail-to-tail 構造をとるが、これらの構造は不安定である。このような微細構造を観測するのは通常、解像度の観点から従来難しかった。しかし近年の微分位相コントラストスキュン法を用いた電子顕微鏡 (differential-phase contrast scanning transmission electron microscopy, DPC-STEM) の機能改善により、高解像度で Bloch ラインの構造を実験的に観察することが可能になった。

Kurushima らは、この DPC-STEM を用いて  $x = 1.6$  の  $\text{BaFe}_{12-x-0.05}\text{Sc}_x\text{Mg}_{0.05}\text{O}_{19}$  における Bloch ラインを観測した [53]。DPC-STEM では図 1.17 (a) のような実験装置を用いる。観測物質の磁気構造により生じている磁場から、電子が Lorentz 力を受けて屈折するのを利用して磁気構造を観測する。 $x$  軸および  $y$  軸方向の屈折角がそれぞれ、5 番目のセグメントの強度  $I_5$  と 7 番目のセグメントの強度  $I_7$  の差、および 6 番目のセグメントの強度  $I_6$  と 8 番目の強度  $I_8$  の差に比例する。この屈折角は Lorentz 力の  $x$ ,  $y$  成分に比例する。これにより  $F_x \propto I_5 - I_7$  および  $F_y \propto I_6 - I_8$  である。さらに、Lorentz 力と磁場の関係は  $\mathbf{F} = -e\mathbf{v} \times \mathbf{B}$  のように与えられる。電子の速度の  $x$ ,  $y$  成分が  $z$  成分に対して非常に小さい場合、 $B_x \propto F_y$  および  $B_y \propto -F_x$  のように対応する。これを用いて 5 から 8 番目のセグメント強度、磁場の  $x$ ,  $y$  成分、磁場の強さの面内成分で決まる  $\sqrt{B_x^2 + B_y^2}$ 、磁気構造のカラーマップは図 1.17 のようになる。

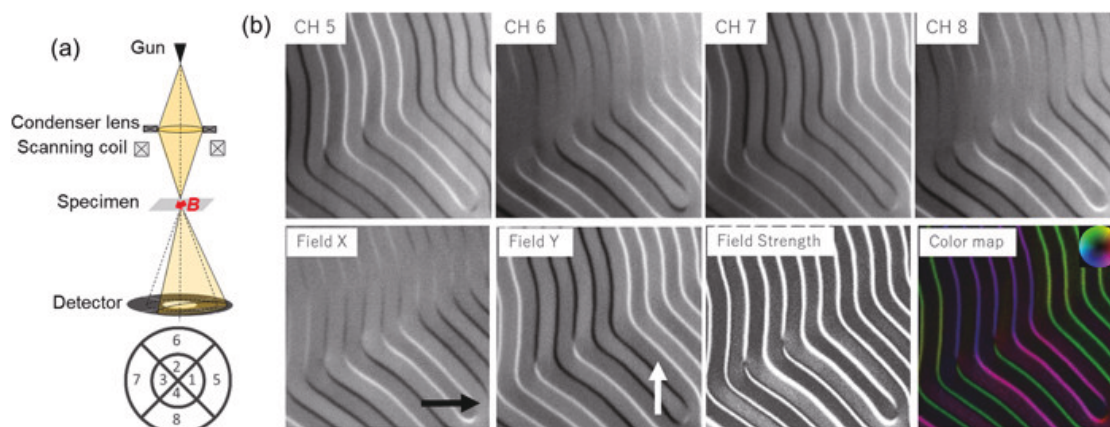


図 1.17: (a) 装置の概略図。Detector 部分で 1~8 のそれぞれの番号がついた箇所がそれぞれのチャンネルを表す。対応するチャンネルで観測された強度および磁場の強さが図 (b) に示されている。Kurushima ら (筆者が共著者) の論文より転載 [53] (K. Kurushima, K. Tanaka, H. Nakajima, M. Mochizuki, and S. Mori. Microscopic magnetization distribution of Bloch lines in a uniaxial magnet. *Journal of Applied Physics*, 125(5), 053902, 2019)。

次に、室温でのヘキサフェライトの磁場の強さおよび磁気構造は図 1.18 のようになる。図 1.18(b) のうち黒い部分は、面内成分が 0 であることを示す。面内成分がカラーで示されている細い構造が磁壁に対応する。図 1.18(b) の白い矢印の部分を見ると、磁壁構造が途中途切れている部分がある。この部分が本研究で注目する非整合な Bloch ラインに対応する。



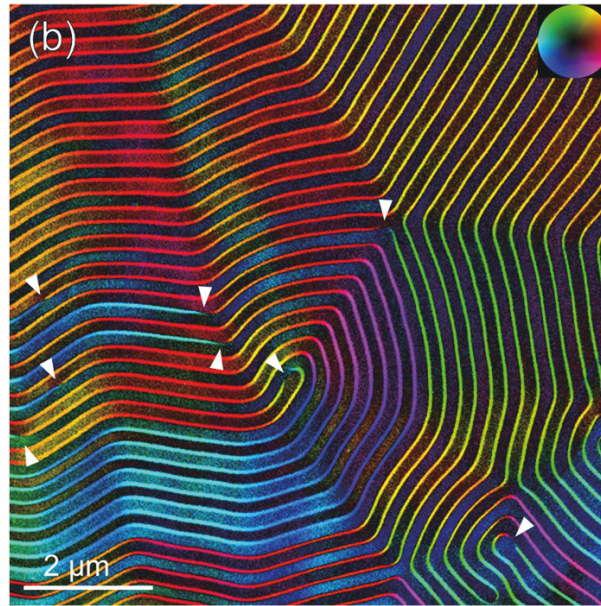


図 1.18: (b) 磁気構造の顕微鏡画像。磁化の面内成分がカラーマップで示されている。白い矢印で示された部分が非整合ブロッホラインである。Kurushima ら (筆者が共著者) の論文より転載 [53] (K. Kurushima, K. Tanaka, H. Nakajima, M. Mochizuki, and S. Mori. Microscopic magnetization distribution of Bloch lines in a uniaxial magnet. *Journal of Applied Physics*, 125(5), 053902, 2019)。

次に、この Bloch ラインをより高解像度で観測したものが図 1.19 のようになっている。この観測結果では Bloch 磁壁の厚みが 50 nm 程度である。通常の M 型ヘキサフェライトに対して Sc 置換を施したことにより磁気異方性が抑えられており、結果通常のヘキサフェライトの Bloch 磁壁の厚み 30 ~ 40 nm に比べて少し厚い Bloch 磁壁が観測されている。Bloch 磁壁はバルクの静磁場のエネルギーを小さくするように生じる。1.19 (a) を見ると、通常モデルとして考えられているような直線状に並んだ Bloch ラインではなく、Bloch 磁壁の先頭が互いに入れ違ったような非整合の tail-to-tail 構造 (磁化ベクトルの始点同士が向き合う構造) をとっていることがわかる。また 1.19 (b) を見ると、head-to-head の構造 (磁化ベクトルの終点同士が向き合う構造) としてより互いに入れ違った非整合な Bloch ラインが形成されていることがわかる。このような非整合な構造では磁気モーメントが互いに入れ違った構造をしており、磁気双極子相互作用のエネルギーを得するように配列していることが予測される。なお、ヘキサフェライトは六回対称性の構造を有しており、これを反映して磁壁構造が互いに 120 度の角度をなすような形になっている。

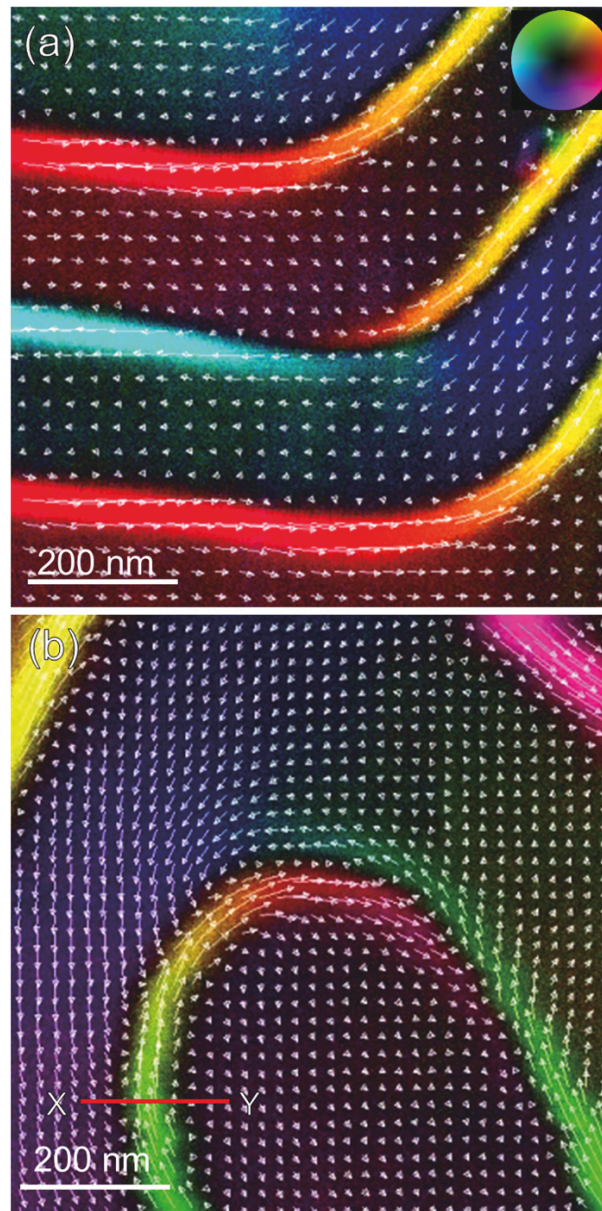


図 1.19: 磁気構造の高解像度画像。磁化ベクトルの始点同士が向き合う tail-to-tail の構造 (a) および磁化ベクトルの終点同士が向き合う head-to-head の構造 (b) が確認されている。Kurushima ら (筆者が共著者) の論文より転載 [53] (K. Kurushima, K. Tanaka, H. Nakajima, M. Mochizuki, and S. Mori. Microscopic magnetization distribution of Bloch lines in a uniaxial magnet. *Journal of Applied Physics*, 125(5), 053902, 2019)。

## 1.4 本研究の目的・意義と概要

本研究の目的は大きく分けて二つあり、

- 引っ張り歪みによるスキルミオン相の安定性変化について、DM 相互作用が主要因になることの数値計算による裏付けをとる。
- 実験で観測された非整合 Bloch ラインの生じる原因について、数値計算を利用して考察する。

である。一つ目の引っ張り歪みによるスキルミオン相の安定性変化については、歪みが本来テンソル量で、その非対角成分も存在し、磁性体の伸び縮みだけでなく「ずれ」や「ねじれ」といった変形がありうるが、本研究では最も簡単な形として一軸方向に引っ張り歪みが生じ、結果立方晶から正方晶への変形が起きる場合を考えた。ただし、上記の変形のうち、特に「ねじれ」については本論文執筆中に他の研究グループにより、磁性体にねじれを加えた場合の DM 相互作用の誘起の可能性が報告されたため、この点については第三章の考察で触れる。引っ張り歪みによるスキルミオン相の安定性変化に関する研究の立ち位置、意義の一つとして、半導体の分野で既に注目されている「strain engineering」[54, 55, 56]と呼ばれる分野に対応するものを考えることができる。「strain engineering」は、サンプルに歪みなどの力学的刺激を加えることによる物性の変化を研究する学問である。本論文の研究や、上述の圧縮歪み、引っ張り歪みに伴うスキルミオンの発現、磁性体にねじれを加えた場合の DM 相互作用の変調などは、ここ数年で注目され始めた磁性体の新たな分野として捉えることができる。本研究はその理論的な一面を明らかにした研究という位置づけができる。

本論文は五章から構成されている。第一章では本研究の背景として、非共線磁気構造について述べた。第二章では本研究で使用した計算手法として、LLG 方程式とモンテカルロ計算の計算原理について述べる。第三章では計算結果として、引っ張り歪み由来の DM 相互作用の変調を考慮した際の磁気スキルミオンの安定性変化について述べる。引っ張り歪みの効果として DM 相互作用の変調のみを考慮し、その他のパラメータを変えないで計算すると、張力と磁場の相対角度に依存したスキルミオンの安定性変化がよく説明されることを示す。第四章では、LLG 方程式で磁気双極子相互作用と六回対称な磁気異方性を考慮すると、非整合な Bloch ラインが計算で得られることを示す。第五章では本論文の総括として、本研究で得られた計算結果から考察できることを示す。

## 第2章 計算方法

### 2.1 Landau-Lifshitz-Gilbert 方程式 (磁化の時間発展方程式)

スピン  $\mathbf{S}$  の時間発展を記述する運動方程式を導出する上で、Heisenberg 方程式

$$\frac{\hbar d\mathbf{S}}{i dt} = [\mathcal{H}, \mathbf{S}] \equiv \mathcal{H}\mathbf{S} - \mathbf{S}\mathcal{H} \quad (2.1)$$

例えば  $x$  成分では

$$\begin{aligned} \frac{\hbar dS_x}{i dt} &= [\mathcal{H}, S_x] \\ &= \gamma(B_x S_x S_x + B_y S_y S_x + B_z S_z S_x) - \gamma(B_x S_x S_x + B_y S_x S_y + B_z S_x S_z) \\ &= \gamma(S_y S_x - S_x S_y) B_y + \gamma(S_z S_x - S_x S_z) B_z \\ &= i\hbar\gamma(S_y B_z - S_z B_y) \\ &= i\hbar\gamma(\mathbf{S} \times \mathbf{B})_x \end{aligned} \quad (2.2)$$

ここで  $\gamma = \frac{g\mu_B}{\hbar}$  は磁気回転比で、スピン演算子が角運動量の交換関係

$$[S_i, S_j] = \varepsilon_{ijk} i\hbar S_k \quad (2.3)$$

を満たすことを考慮した。同様に  $y, z$  成分についても考慮して

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt} = -\gamma \mathbf{S} \times \mathbf{B}, \quad \mathbf{B} \equiv \frac{1}{\gamma} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}} \quad (2.4)$$

という巨視的なスピンの運動方程式である Landau-Lifshitz (LL) 方程式が得られる。なおこの LL 方程式は、スピンのラグランジアンが

$$\mathcal{L} = \hbar S \frac{\partial \phi}{\partial t} \cos \theta - \mathcal{H}(\theta, \phi) \quad (2.5)$$

であることを考慮すれば、Lagrange 形式でも導出できる [8]。LL 方程式では、スピンの磁場の反対方向  $-\mathbf{B}$  の周りを永遠に周り続けるが、実際の磁性体ではスピンの徐々に緩和して  $-\mathbf{B}$  の方向に向く。これを表す緩和項として摩擦項を取り入れた

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt} = -\gamma \mathbf{B} \times \mathbf{S} - \alpha \frac{\gamma}{S} [\mathbf{S} \times \mathbf{S} \times \mathbf{B}] \quad (2.6)$$

という方程式を Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) 方程式という (図 2.1)。

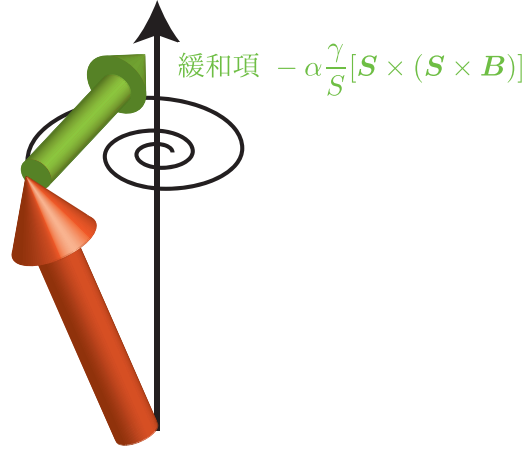


図 2.1: LLG 方程式に従うスピンの歳差運動の模式図。オレンジの矢印がスピンの向き，緑の矢印が緩和項の向きをそれぞれ表す。

これを各サイト  $i$  における磁化  $\mathbf{M}_i = -\gamma \mathbf{S}_i$  を使って表し直すと，

$$\frac{d\mathbf{M}_i}{dt} = -\gamma \mathbf{M}_i \times \left( -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{M}_i} \right) + \frac{\alpha}{M} \mathbf{M}_i \times \frac{d\mathbf{M}_i}{dt} \quad (2.7)$$

となる。数値計算では，無次元化された量

$$\mathbf{m}_i \equiv \frac{\mathbf{M}_i}{\gamma \hbar}, \quad \tilde{\mathcal{H}} \equiv \frac{\mathcal{H}}{J}, \quad \tau \equiv \frac{J}{\hbar} t \quad (2.8)$$

を用いて書き直した方程式

$$\frac{d\mathbf{m}_i}{d\tau} = -\mathbf{m}_i \times \left( -\frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial \mathbf{m}_i} \right) + \frac{\alpha}{m} \mathbf{m}_i \times \frac{d\mathbf{m}_i}{d\tau} \quad (2.9)$$

をさらに線形化 (右辺そのものを右辺の微分項に代入する) した

$$\frac{d\mathbf{m}_i}{d\tau} = \frac{1}{1+\alpha^2} \left[ -\mathbf{m}_i \times \left( -\frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial \mathbf{m}_i} \right) - \frac{\alpha}{m} \mathbf{m}_i \times \left\{ \mathbf{m}_i \times \left( -\frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial \mathbf{m}_i} \right) \right\} \right] \quad (2.10)$$

の形の式が用いられる。

## 2.2 古典スピン系のモンテカルロ法

ここでは宮下精二著「熱・統計力学」[57]に従って、熱平衡状態での物理量を得る数値計算で用いるモンテカルロ法についてまとめる。ハミルトニアン  $\mathcal{H}$  で記述される系が、温度  $T$  の熱平衡状態にあるときの物理量  $A$  の平均値は分配関数  $Z = \text{Tr}e^{-\beta\mathcal{H}}$  を用いて

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr}Ae^{-\beta\mathcal{H}}}{Z} \quad (2.11)$$

で与えられる。状対数が非常に多く、全状態での和をとるのが困難なときは和をランダムサンプリング、つまりランダムに発生させた状態 ( $i$ ) の集合でとって、

$$\langle A \rangle_{\text{sample}} \equiv \frac{\sum_{\text{sample}} Ae^{-\beta\mathcal{H}}}{\sum_{\text{sample}} e^{-\beta\mathcal{H}}} \quad (2.12)$$

を計算する。まったく一様に状態を発生させる単純サンプリングの方法では、原理的には十分大きなサンプリングのもとで  $\langle A \rangle_{\text{sample}}$  が  $\langle A \rangle$  に収束する。しかし、系の存在確率が熱平衡状態近傍に集中することを考慮すると、単純サンプリングの方法ではサンプリングしたほとんどの状態が熱力学的性質に寄与せず無駄になる。

そこで、熱力学的性質に対する寄与が大きい状態、つまり熱平衡状態近傍の状態を効率的にサンプリングする方法を考え、これは重みつけサンプリングと呼ばれる。この場合サンプリング対象の状態  $i$  を確率  $P_{\text{eq}}(i)$  でサンプリングするようにして、物理量  $A$  の平均値を

$$\langle A \rangle_{\text{重みつき}} \equiv \frac{\sum_i P_{\text{eq}}(i)A(i)}{\sum_i P_{\text{eq}}(i)} \quad (2.13)$$

で計算する。各状態のステップ  $t$  における存在確率  $P(i, t)$  をまとめてベクトルで  $\mathbf{P}(t)$  と表すと、マルコフ過程を考える時状態  $i$  から状態  $j$  への存在確率  $T_{ij}$  を成分に持つ行列  $T$  によって

$$\mathbf{P}(t+1) = T\mathbf{P}(t) \quad (2.14)$$

のように書ける。適当な数  $k$  に対して  $T^k$  の行列要素が全て正の時は、十分大きな遷移回数  $n$  の後に、任意の初期分布が一意的な定常分布  $\mathbf{P}_0$  へ収束し、

$$T^n \mathbf{P}(0) \rightarrow \mathbf{P}_0 \quad (2.15)$$

と表せる。ここで考えている重みつきサンプリングでは、定常状態における状態  $i$  の存在確率  $P_{\text{eq}}(i)$  で各状態が出現するようにしたいので、 $\mathbf{P}_0$  が  $\mathbf{P}_{\text{eq}}$  となるように  $T$  の行列要素を選べば良い。 $\mathbf{P}_{\text{eq}}$  が定常分布の場合、遷移行列をかけても状態は変化しないから

$$T\mathbf{P}_{\text{eq}} = \mathbf{P}_{\text{eq}} \quad (2.16)$$

要素を具体的に書くと

$$\sum_j T_{ij} P_{\text{eq}}(j) = P_{\text{eq}}(i) \quad (2.17)$$

$$\sum_{j \neq i} w_{j \rightarrow i} P_{\text{eq}}(j) + \left(1 - \sum_{i \neq j} w_{i \rightarrow j}\right) P_{\text{eq}}(i) = P_{\text{eq}}(i) \quad (2.18)$$

となる。 $w_{j \rightarrow i}$  は単位時間あたりの状態  $j$  から  $i$  への遷移確率である。よって

$$\sum_{j \neq i} w_{j \rightarrow i} P_{\text{eq}}(j) = \sum_{i \neq j} P_{\text{eq}}(i) \quad (2.19)$$

もしくは

$$\sum_{i \neq j} (w_{j \rightarrow i} P_{\text{eq}}(j) - w_{i \rightarrow j} P_{\text{eq}}(i)) = 0 \quad (2.20)$$

であれば、 $P_{\text{eq}}$  が定常分布を与える。これを満たすには

$$w_{j \rightarrow i} P_{\text{eq}}(j) = w_{i \rightarrow j} P_{\text{eq}}(i) \quad (2.21)$$

を満たせば十分。この条件を詳細つりあいの条件といい、状態間の遷移が打ち消すことを意味している。

全ての状態がハミルトニアン固有状態からなる古典系でのモンテカルロ法では、詳細つりあいの条件を

$$w_{j \rightarrow i} e^{-\beta E(j)} = w_{i \rightarrow j} e^{-\beta E(i)} \quad (2.22)$$

のように表せる。各スピンの状態を上向きと下向きのみで考える Ising 模型を例にとると、ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - g \mu_B H \sum_i \sigma_i \quad (2.23)$$

と表せる。この時詳細つりあいの条件は

$$\frac{w_{i \rightarrow j}}{w_{j \rightarrow i}} = e^{-\beta \{E(j) - E(i)\}} \quad (2.24)$$

のように  $w$  の比の条件となる。この比の条件だけでは  $w_{j \rightarrow i}$  が一意には決まらず、 $w_{j \rightarrow i}$  の決め方がいくつか存在する。状態  $i$  から状態  $j$  に移る上で、一ステップに向きを変更するスピンは全サイトの中の一つ  $\sigma_k$  のみとし、他は変化させないシングルスピントリフを行うとする。この場合遷移確率の比の条件は

$$\frac{w(\sigma_k \rightarrow -\sigma_k)}{w(-\sigma_k \rightarrow \sigma_k)} = e^{-\beta \{\mathcal{H}(-\sigma_k) - \mathcal{H}(\sigma_k)\}} \quad (2.25)$$



となる。これを満たす  $w$  の決め方のうち、

$$w(\sigma_k \rightarrow -\sigma_k) = \begin{cases} 1 & \mathcal{H}(\sigma_k) > \mathcal{H}(-\sigma_k) \\ e^{\beta\{\mathcal{H}(\sigma_k) - \mathcal{H}(-\sigma_k)\}} & \mathcal{H}(\sigma_k) < \mathcal{H}(-\sigma_k) \end{cases} \quad (2.26)$$

とする方法をメトロポリス法という。このように  $w$  を決めれば、 $\mathcal{H}(\sigma_k) > \mathcal{H}(-\sigma_k)$  の時  $w(\sigma_k \rightarrow -\sigma_k) = 1$  かつ  $w(-\sigma_k \rightarrow \sigma_k) = e^{\beta\{\mathcal{H}(-\sigma_k) - \mathcal{H}(\sigma_k)\}}$ 、 $\mathcal{H}(\sigma_k) < \mathcal{H}(-\sigma_k)$  の時  $w(\sigma_k \rightarrow -\sigma_k) = e^{\beta\{\mathcal{H}(\sigma_k) - \mathcal{H}(-\sigma_k)\}}$  かつ  $w(-\sigma_k \rightarrow \sigma_k) = 1$  となるので、式 (2.25) が満たされることになる。本研究では Ising 模型ではなくスピンの連続変数となる Heisenberg 模型を考えるので、この場合はスピンのフリップを上向き  $\leftrightarrow$  下向きではなく、ランダムな方向に向けるようにする (図 2.2)。このようにスピンを順に仮にフリップさせてはその前後のエネルギーを比較して、エネルギーが低くなる場合はフリップ、エネルギーが高くなる場合はフリップ前後のエネルギーの差で決まる確率でフリップという操作を全サイトに対して行い、これを 1 モンテカルロステップと数える。

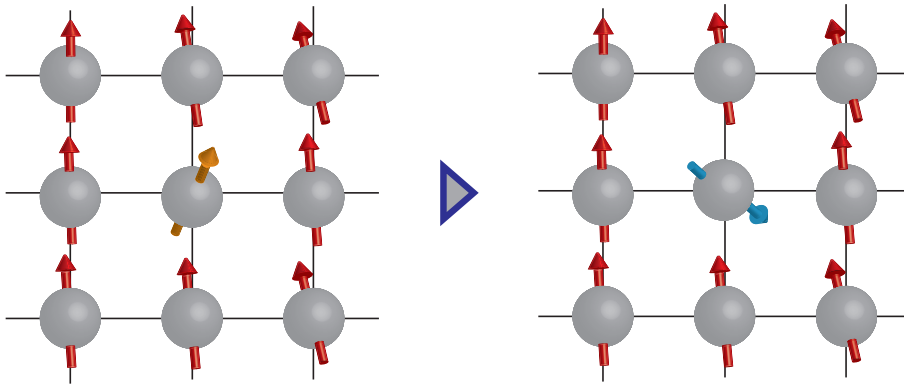


図 2.2: メトロポリス法。ある一サイトのスピンを仮にランダムフリップした前後のエネルギーを比較する。フリップ前のスピン  $\sigma_k$  の時に比べてフリップ後のスピン  $\sigma'_k$  の状態の方がエネルギーが下がる  $\mathcal{H}(\sigma_k) > \mathcal{H}(\sigma'_k)$  の時は実際にそのスピンをフリップする。エネルギーが高くなる場合は、フリップ前後のエネルギーの差で決まる確率  $e^{\beta\{\mathcal{H}(\sigma_k) - \mathcal{H}(\sigma'_k)\}}$  でフリップする。

また本研究では、解が最低エネルギーではない極小値にトラップされてしまうのを防ぐために、レプリカ交換法と呼ばれる方法を用いた [58, 59]。これは図 2.3 のように温度の異なるレプリカ系をいくつか用意して同時に計算を走らせ、異なる温度間で状態を交換する物である。これにより、図 2.3 のようにサンプルが局所解に集中してしまうのを避け、効率的にサンプルを得ることができる。



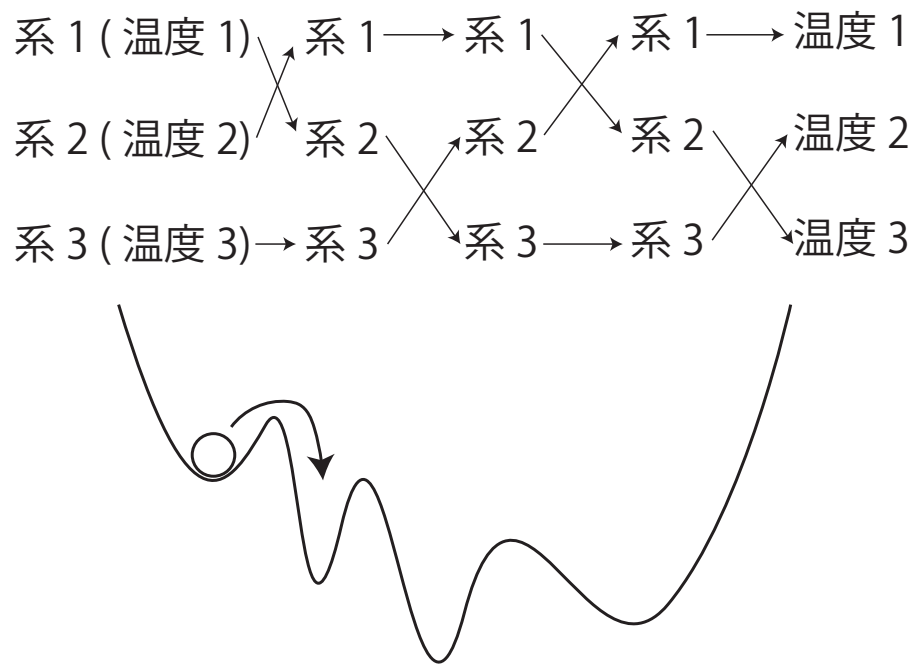


図 2.3: レプリカ交換法の概念図。異なる温度のレプリカ系の計算を同時に走らせ、それぞれの温度を交換することでサンプルが局所解に集中しないように、局所解から抜け出せるようにする。

### 2.3 引っ張り歪み由来のDM相互作用の変調を考慮したモデルハミルトニアン

本研究では古典 Heisenberg モデルを考える。S. Buhrandt らが指摘しているように、古典 Heisenberg モデルによる計算を行う際、空間の離散化で artificial な異方性が生じてしまうことがわかっている [49]。この異方性を打ち消す上では三次近接まで相互作用を考える必要がある。以下詳細を述べる。まず、交換相互作用、DM 相互作用、Zeeman 相互作用を考慮した連続体モデルのハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \int d^2r \frac{J}{2a} (\nabla M)^2 + \frac{D}{a^2} M \cdot (\nabla \times M) - \frac{1}{a^3} H \cdot M \quad (2.28)$$

である。ここで  $a$  は格子定数である。この連続体モデルに対してまず空間を離散化すると

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J \sum_i \mathbf{m}_i \cdot (\mathbf{m}_{i+\hat{x}} + \mathbf{m}_{i+\hat{y}} + \mathbf{m}_{i+\hat{z}}) \\ & - D_\gamma \sum_i \mathbf{m}_i \times (\mathbf{m}_{i+x} \cdot \hat{x} + \mathbf{m}_{i+y} \cdot \hat{y} + \mathbf{m}_{i+z} \cdot \hat{z}) \\ & - H \cdot \sum_i \mathbf{m}_i \end{aligned} \quad (2.29)$$

となる。ここでの  $\mathbf{m}_i$  は、上の連続体モデルにおける  $a^3$  の体積内の磁気モーメントの平均となっている。次に離散空間を粗視化して、 $(na)^3$  の体積内の磁気モーメントを一つの磁気モーメントで代表させるようにする。このもとでエネルギーを不変に保つには、相互作用のパラメータをそれぞれ  $(J, D, H_z) \rightarrow (nJ, n^2D, n^3H_z)$  のように調整する必要がある。これにより DM 相互作用などを粗視化の前に比べて大きく見積もらなければならない。このように粗視化によるパラメータの調整を行った  $(nJ, n^2D, n^3H_z)$  を改めて  $(J, D, H_z)$  と表すことにより、粗視化後の古典 Heisenberg モデルのハミルトニアンを

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 = & -J \sum_{i,\hat{\gamma}} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_{i+\hat{\gamma}} - \sum_{i,\hat{\gamma}} D_\gamma (\mathbf{m}_i \times \mathbf{m}_{i+\hat{\gamma}} \cdot \hat{\gamma}) \\ & - H \cdot \sum_i \mathbf{m}_i \end{aligned} \quad (2.30)$$

とする。 $\hat{\gamma}$  は  $x, y, z$  方向の単位ベクトル  $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$  (サイト間距離を単位としている) をまとめたものである。DM 相互作用の強さを表す定数  $D_\gamma$  は、 $x, y, z$  それぞれの成分を持ち、本計算では引っ張りが生じた方向の成分を大きくすることで、DM 相互作用の変調を表現する。交換相互作用および DM 相互作用の項をそれぞれ

れ Fourier 変換すると

$$\mathcal{H}_{\text{FM}} = \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} \mathbf{m}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{m}_{-\mathbf{k}}, \quad (2.31)$$

$$\mathcal{H}_{\text{DM}} = \sum_{\mathbf{k}} \beta_{\gamma \mathbf{k}} (\mathbf{m}_{\mathbf{k}} \times \mathbf{m}_{-\mathbf{k}}) \cdot \hat{\gamma}, \quad (2.32)$$

ここで Fourier 係数は Taylor 展開のもとで、

$$\begin{aligned} \alpha_{\mathbf{k}} &= -J (\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)) \\ &= -3J + \frac{a^2 J}{2} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - \frac{a^4 J}{24} (k_x^4 + k_y^4 + k_z^4) \\ &\quad + \mathcal{O}(k^6), \end{aligned} \quad (2.33)$$

$$\begin{aligned} \beta_{\gamma \mathbf{k}} &= -D_{\gamma} \sin(k_{\gamma} a) \\ &= -a D_{\gamma} k_{\gamma} + \frac{a^3 D_{\gamma}}{6} k_{\gamma}^3 + \mathcal{O}(k^5) \end{aligned} \quad (2.34)$$

のように表せる。ここで項  $-\frac{a^4 J}{24} (k_x^4 + k_y^4 + k_z^4)$  および  $+\frac{a^3 D_{\gamma}}{6} k_{\gamma}^3$  は空間の離散化により生じた artificial な異方性で、連続体モデルでは現れないような本質的でない項である。通常の Heisenberg モデルであれば個々の磁気モーメント間の距離  $a$  が小さいためにこのような項の影響を考えずに済むが、本研究のように磁気モーメントが原子間隔に対して非常に緩やかに変化する系で、多数の磁気モーメントを一つの磁気モーメントとして粗視化する場合には、 $a$  が大きくなりこれらの artificial な項の影響を考えなければならない。この項を打ち消すために、三次近接相互作用

$$\mathcal{H}_2 = J' \sum_{i, \hat{\gamma}} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_{i+2\hat{\gamma}} + \sum_{i, \hat{\gamma}} D'_{\gamma} (\mathbf{m}_i \times \mathbf{m}_{i+2\hat{\gamma}}) \cdot \hat{\gamma}. \quad (2.35)$$

を同様に Fourier 変換して、最近接、三次近接の相互作用を合わせると

$$\begin{aligned} \alpha_{\mathbf{k}} &= -3(J - J') + \frac{a^2}{2} (J - 4J') (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\ &\quad - \frac{a^4}{24} (J - 16J') (k_x^4 + k_y^4 + k_z^4) + \mathcal{O}(k^6) \end{aligned} \quad (2.36)$$

$$\begin{aligned} \beta_{\gamma \mathbf{k}} &= -a(D_{\gamma} - 2D'_{\gamma}) k_{\gamma} + \frac{a^3}{6} (D_{\gamma} - 8D'_{\gamma}) k_{\gamma}^3 \\ &\quad + \mathcal{O}(k^5) \end{aligned} \quad (2.37)$$

となる。三次近接相互作用のパラメータを

$$J' = \frac{1}{16} J, \quad D'_{\gamma} = \frac{1}{8} D_{\gamma}, \quad (2.38)$$

のように設定すれば，上述の **artificial** な異方性を打ち消せる。これらの議論をもとにして，本研究で考えるハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} = & -J \sum_{i,\hat{\gamma}} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_{i+\hat{\gamma}} + J' \sum_{i,\hat{\gamma}} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_{i+2\hat{\gamma}} \\
& - \sum_{i,\hat{\gamma}} D_\gamma (\mathbf{m}_i \times \mathbf{m}_{i+\hat{\gamma}} \cdot \hat{\gamma}) \\
& + \sum_{i,\hat{\gamma}} D'_\gamma (\mathbf{m}_i \times \mathbf{m}_{i+2\hat{\gamma}} \cdot 2\hat{\gamma}) - H \sum_i m_{iz}
\end{aligned} \tag{2.39}$$

となる。

本研究では，最近接交換相互作用を  $J = 1$  として，他の相互作用のエネルギーはこれに対する比で表している。ヘリカル磁性の周期は **DM** 相互作用と交換相互作用の比で決まるが，本研究では 10 サイトで一回の周期になるように **DM** 相互作用のパラメータを選択し，引っ張り歪みなしの時最近接の **DM** 相互作用の大きさを  $D_x = D_y = D_z = 0.727$  とした。三次近接の相互作用については上記のように **artificial** な異方性を打ち消す必要があるため， $J' = \frac{1}{16}J$ ， $D'_\gamma = \frac{1}{8}D_\gamma$  となるように決定した。格子サイズは  $30 \times 30 \times 30$ ，周期的境界条件である。本研究では外部磁場の方向は  $z$  軸方向としている。最低温度  $T = 0$  の状態における基底状態を調べる上では，モンテカルロ計算により低温の磁化配置を得たあと，**LLG** 方程式による時間発展により緩和させて最低エネルギー状態の磁化配置を得た。他方で，有限温度の磁化配置を調べる上では，メトロポリス法およびレプリカ交換法に基づくモンテカルロ計算を行った。

## 第3章 一軸引っ張り歪み由来の異方性ジャロシンスキー守谷相互作用によるスキルミオンの安定化

### 3.1 計算結果

図3.1(d)~(f)に、計算の結果得られた  $T=0$  における磁場-エネルギー相図, (g)~(i)に磁場-磁化相図を示す。ここでの「磁化」はある面内の磁気モーメントのサイト数平均を表す。Case Aが引っ張り歪みなしで  $D_x = D_y = D_z = 0.727$ , Case Bが引っ張り歪みを磁場と垂直に加えた時で  $D_x = 0.8, D_y = 0.727, D_z = 0.727$ , Case Cが引っ張り歪みと磁場を平行に加えた時で  $D_z = 0.8, D_x = 0.727, D_y = 0.727$ の結果を示す。磁気構造をもとにそれぞれの相の判別を行っている。それぞれの相の磁気構造については、計算で得られた各サイトにおけるスピンの成分をプロットすることで、熱平衡状態の磁化配置を確認した。計算の結果得られた磁化構造としては伝播方向の異なるヘリカル磁性2種類(それぞれをヘリカルA, ヘリカルBとここでは表現する), スキルミオン格子, コニカル磁性, 強磁性状態の5種類が確認された。計算では、各磁気構造の初期状態を用意し、LLG方程式の数値シミュレーションで緩和させた後、それぞれの磁気状態の鞍点解(準安定状態の磁化構造)を求めた。引っ張り歪みなしの状態では立方格子の対称性を持った対称性の高い系であるため、ヘリカル磁性Aとヘリカル磁性Bのエネルギーには通常差が生じないはずであるが、ヘリカル磁性Aとヘリカル磁性Bでは少しのエネルギーの差が見られる(図3.1(d)緑の線二本)。これについては、ヘリカル磁性がその変調周期を、現在考えている立方格子のサイト間距離に合わせようとすることで生じる artifact であると考えている。図中の磁化構造は(j)ヘリカル磁性A, (k)ヘリカル磁性B, (l)スキルミオン格子, (m)コニカル磁性を表す。引っ張り歪みなしの(d)の図では、青線で示されたコニカル磁性と、赤線で示されたスキルミオン格子のエネルギーが非常に近いことがわかる。このことから、コニカル磁性は引っ張り歪みなしで基底状態ではあるが、少しの刺激でスキルミオン格子が基底状態として取って代わりうる可能性が示唆される。次に引っ張り歪みを磁場と垂直に加えた(e)の相図を見ると、ある磁場領域でスキルミオン格子が最低エネルギー状態をとっている。他方で、引っ張り歪みを磁場と平行に加えた(f)の図では、全ての磁場領域でコニカル磁性状態が最低エネルギー状態をとっており、スキルミオン格子の相が消失していることがわかる。このふるまいは MnSi で圧縮方向の歪み

を加えたもの、および  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$  で引っ張り歪みを加えた際の実験結果と整合している。

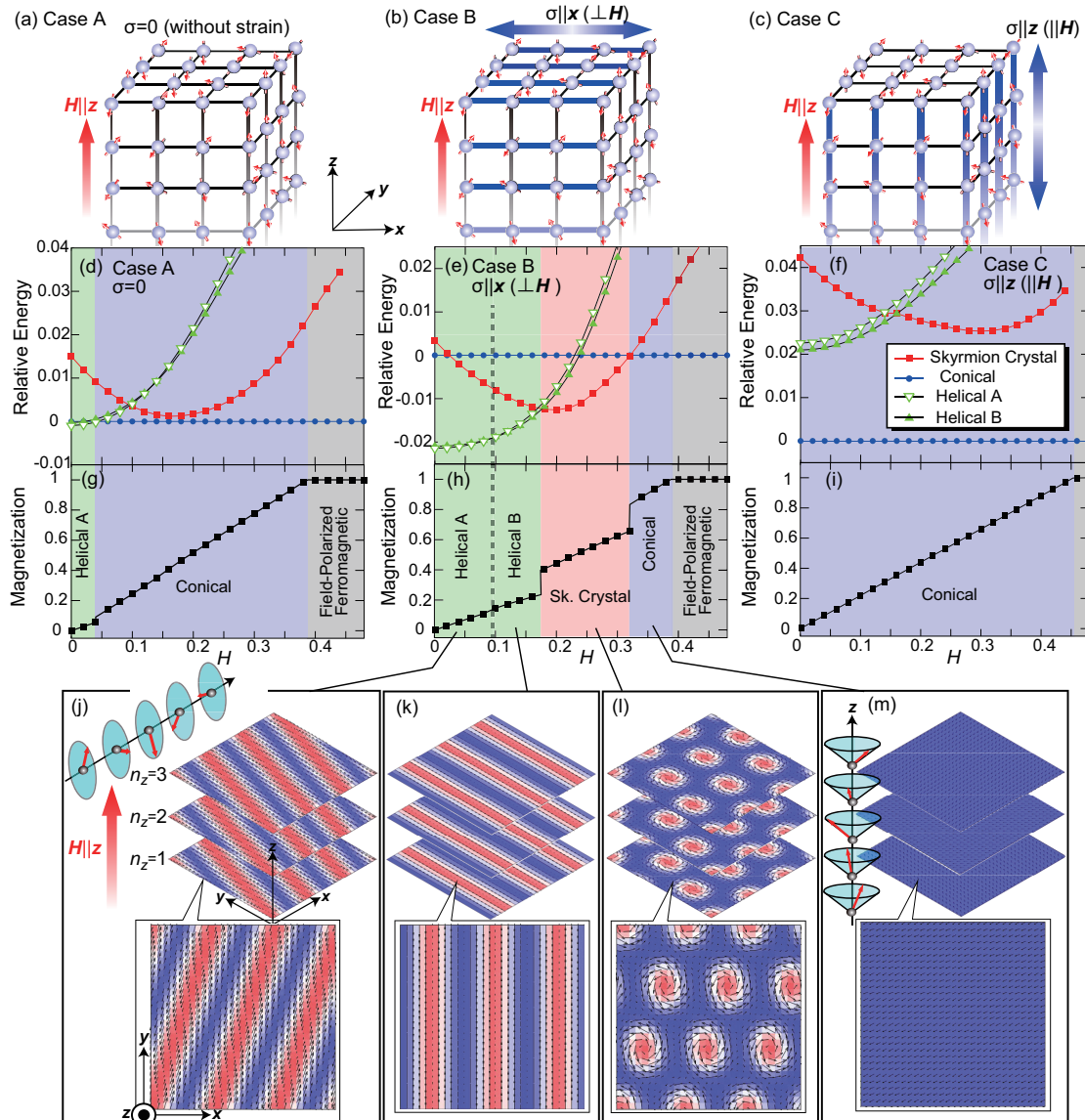


図 3.1: (a) 引っ張り歪みなし, (b) 磁場 ( $z$  軸方向) と垂直な方向 ( $x$  軸方向) に引っ張り歪みを加えた場合, (c) 磁場と平行な方向 ( $z$  軸方向) に引っ張り歪みを加えた場合のイメージ図。 (d) 引っ張り歪みなし, (e) 磁場と垂直な方向に引っ張り歪みを加えた場合, (f) 磁場と平行な方向に引っ張り歪みを加えた場合の相対エネルギー (縦軸。コニカル磁性のエネルギーを原点にとっている。) と磁場  $H$  (横軸) の関係。引っ張り歪みを加えていない時はスキルミオンのエネルギーとコニカル磁性のエネルギーが近い値をとっている。磁場と垂直に引っ張り歪みを加えた場合はある磁場領域でスキルミオンの方がコニカル磁性よりも低いエネルギーをとる。 (g) 引っ張り歪みなし, (h) 磁場と垂直な方向に引っ張り歪みを加えた場合, (i) 磁場と平行な方向に引っ張り歪みを加えた場合の磁化 (縦軸) と磁場  $H$  (横軸) の関係。相転移点で不連続になっている。 (j) Helical A, (k) Helical B, (l) スキルミオン格子 (Sk. Crystal), (m) コニカル磁性の計算の結果得られた磁化配置。これらの構造が本計算では準安定状態として得られた。筆者らの論文より転載 [61] (K. Tanaka, R. Sugawara, and M. Mochizuki. Theoretical study on stabilization and destabilization of magnetic skyrmions by uniaxial-strain-induced anisotropic Dzyaloshinskii-Moriya interactions. *Physical Review Materials*, 4(3), 034404, 2020)。

なお、三次近接の交換相互作用および DM 相互作用を加えていない時 (つまり artificial な異方性が生じている状態) の計算結果としては、図 3.2 (a) に示すようにスキルミオンのチューブが確認されず、三次近接の相互作用を入れたことでスキルミオンのチューブ構造が確認された (図 3.2 (b))。

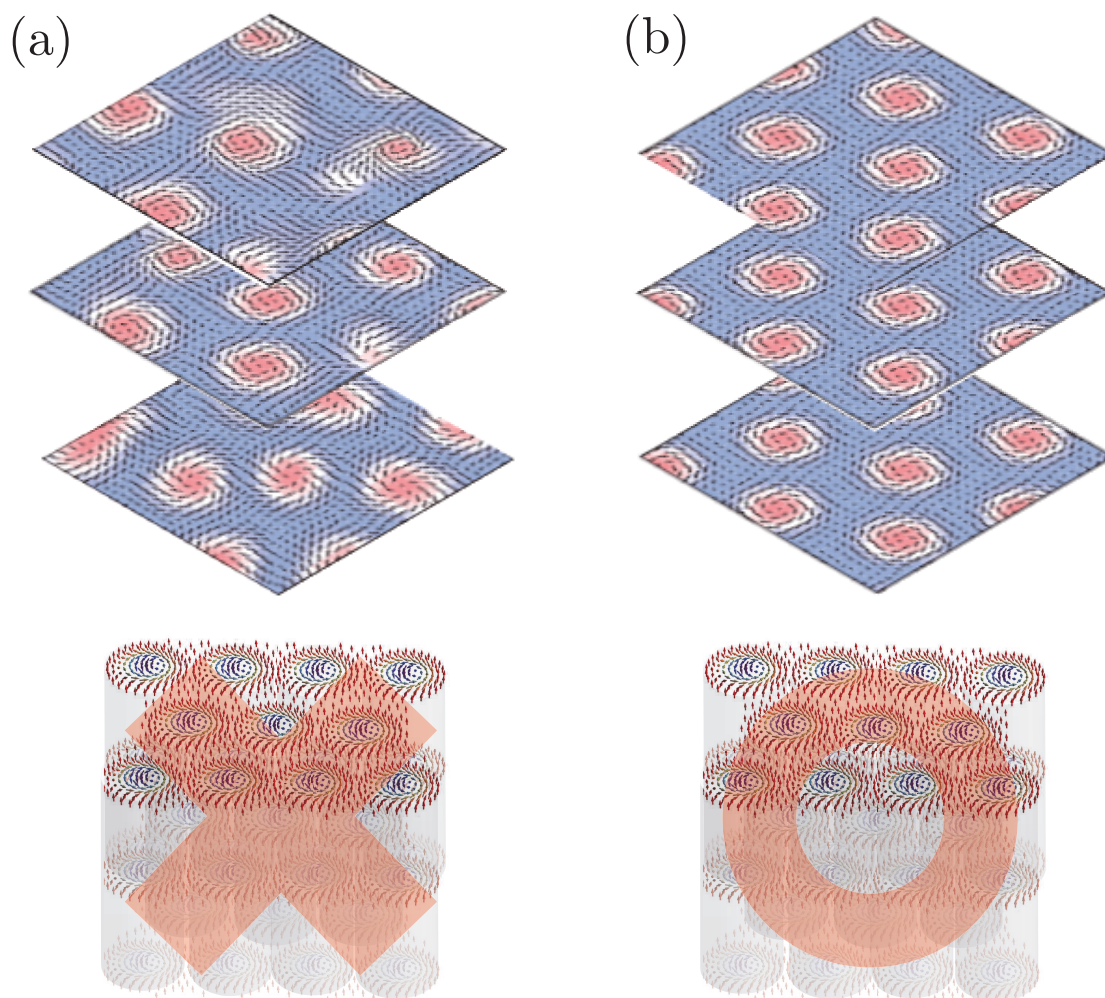


図 3.2: 三次近接相互作用の影響。三次近接の相互作用を加えていない時は、図 (a) のようにスキルミオンのチューブが確認されなかった。一方、三次近接の相互作用を入れた場合は、図 (b) のようにスキルミオンのチューブ構造が確認された。

次に歪みにより誘起される磁化配置の安定性についてより詳しく議論するために、各方向の DM 相互作用によるエネルギーの利得  $E_{\text{DM}}^{\alpha}$ , ( $\alpha = x, y, z$ ) の磁場  $H$  依存性を調べた (図 3.3)。図 3.3 の結果は Case B, つまり磁場と引っ張り歪みを垂直に加えた場合 ( $D_x = 0.8, D_y = D_z = 0.727$ ) の結果である。計算により、ヘリカル磁性が安定化する磁場の強さでは、 $E_{\text{DM}}^x$  が相対的に小さく (つまりエネルギーの利得が大きい), スキルミオンが安定化する磁場の強さでは  $E_{\text{DM}}^x$  と  $E_{\text{DM}}^y$  が相対的に



小さいことがわかった。一方、 $E_{\text{DM}}^z$  によるエネルギーの利得はヘリカル磁性、スキルミオンに対して生じていないことがわかった。これらの結果は、ヘリカル磁性、スキルミオン格子で伝播ベクトルが面内に倒れており、磁場 ( $z$  軸方向) と垂直な面内で磁化がねじれて DM 相互作用によるエネルギー分得していると考えられる。このことから、引っ張り歪み  $\sigma$  を磁場と垂直に加えることにより、面内の DM 相互作用の成分  $D_x$  もしくは  $D_y$  を大きくすることで、スキルミオンが安定化すると考えられる。対照的に、コニカル磁性が安定化する磁場領域では、 $E_{\text{DM}}^z$  によるエネルギー利得があり、 $E_{\text{DM}}^x$  および  $E_{\text{DM}}^y$  によるエネルギー利得はほとんど生じていない。このことは、コニカル磁性で磁場方向に伝播ベクトルが向いており、 $z$  軸方向に対して磁化が巻くことでこの方向の DM 相互作用による利得があることを示している。これにより、磁場と平行な方向に引っ張り歪みを加えると、コニカル磁性が相対的に安定化すると考えられる。

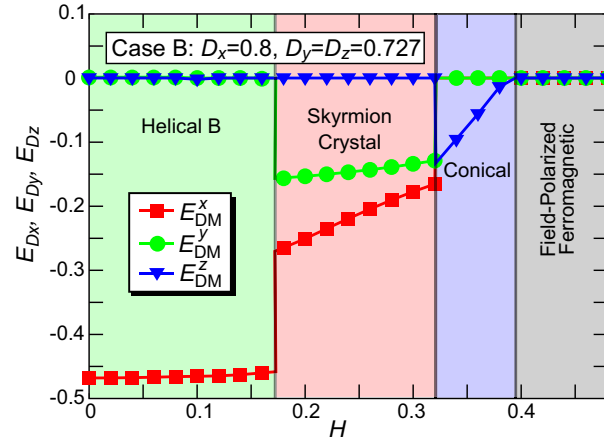


図 3.3: Case B における、各方向の DM 相互作用によるエネルギー利得  $E_{\text{DM}}^\alpha$ ,  $\alpha = x, y, z$  の磁場  $H$  依存性。ヘリカル磁性では  $E_{\text{DM}}^x$  による利得があり、スキルミオンでは  $E_{\text{DM}}^x$  および  $E_{\text{DM}}^y$  による利得がある。これらはどちらも磁場 ( $z$  軸方向) に対して垂直な面内の DM 相互作用の成分による。対照的に、コニカル磁性では磁場に平行な成分の DM 相互作用による利得がある。筆者らの論文より転載 [61] (K. Tanaka, R. Sugawara, and M. Mochizuki. Theoretical study on stabilization and destabilization of magnetic skyrmions by uniaxial-strain-induced anisotropic Dzyaloshinskii-Moriya interactions. *Physical Review Materials*, 4(3), 034404, 2020)。

さらに、引っ張り歪みによるスキルミオン相の安定性変化のパラメータ依存性を調べるため、図 3.4 に示すように横軸に DM 相互作用の強さ、縦軸に磁場の強さをとった  $T = 0$  における相図を作成した。 $D_x$  の値がある程度  $D_y = D_z = 0.727$  に近く、系をほとんど等方的とみなせる時にはスキルミオン相が現れない。 $D_x$  が 0.735 程度に DM 相互作用の異方性が強くなるとスキルミオン相が現れる。つまり、1.1% 程度の小さい異方性で、十分にスキルミオン相が発現するということである。また計算の結果から、磁場と垂直に引っ張り歪みを加えた際はスキルミオン相がか

なり広いパラメータ範囲で安定化することがわかる。他方で磁場と平行に引っ張り歪みを加えた際に相当する、 $D_z$  を強くした系では、図 3.4(b) に示すようにどの広いパラメータ範囲でもスキルミオン相が現れないことがわかった。この場合は  $D_z$  を少しでも強くすると、等方的な場合に弱磁場で見られているヘリカル磁性は不安定化する。

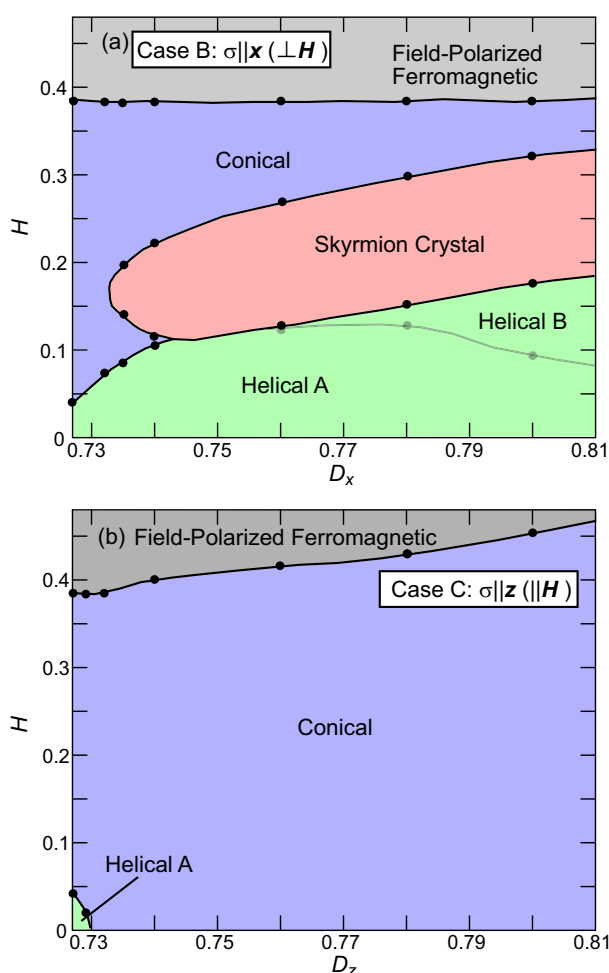


図 3.4: 引っ張り歪みを磁場と垂直に加えた場合 ((a), 横軸は DM ベクトルの  $x$  成分), 引っ張り歪みを磁場と平行に加えた場合 ((b), 横軸は DM ベクトルの  $z$  成分) の相図。縦軸は磁場の強さを表す。磁場と垂直に引っ張り歪みを加えた場合は、広い範囲でスキルミオン格子 (赤領域) が安定化している。また 1.1% (横軸 0.73 程度) の異方性を加えるだけで、スキルミオン格子が安定化し始める。磁場と平行に引っ張り歪みを加えた場合は、ほとんどの領域でコニカル磁性が安定化する。筆者らの論文より転載 [61] (K. Tanaka, R. Sugawara, and M. Mochizuki. Theoretical study on stabilization and destabilization of magnetic skyrmions by uniaxial-strain-induced anisotropic Dzyaloshinskii-Moriya interactions. *Physical Review Materials*, 4(3), 034404, 2020)。

次に、有限温度の系におけるスキルミオン相の安定性変化を調べるために、レプリカ交換法を用いて温度 - 磁場相図を調べた。相の判別では比熱および磁化率

の温度依存性を用いた。比熱および磁化率の温度依存性の一例を図 3.5 に示す。図 3.5 は外部磁場と垂直に引っ張り歪みを加えた際の計算結果であり、 $D_x = 0.8$ ,  $D_y = D_z = 0.727$  として設定している。図 3.5(a), (b) を見ると、磁場の強さが  $H = 0$  および  $0.2$  の時には、比熱に鋭いピーク、磁化率にキックが見られる。 $H = 0$  におけるこのふるまいはヘリカル磁性への相転移に相当し、 $H = 0.2$  のものはスキルミオン相への相転移に対応する。次に図 3.5(b) に注目すると、 $H = 0.26$  における磁化率に二つのピークが見られる。これはそれぞれ、温度を低くしていく時の常磁性からコニカル磁性への相転移、コニカル磁性からスキルミオンへの相転移に対応する。また  $H = 0.34$  の時にも磁化率の方にキックが見られ、これはコニカル磁性への相転移に対応する。

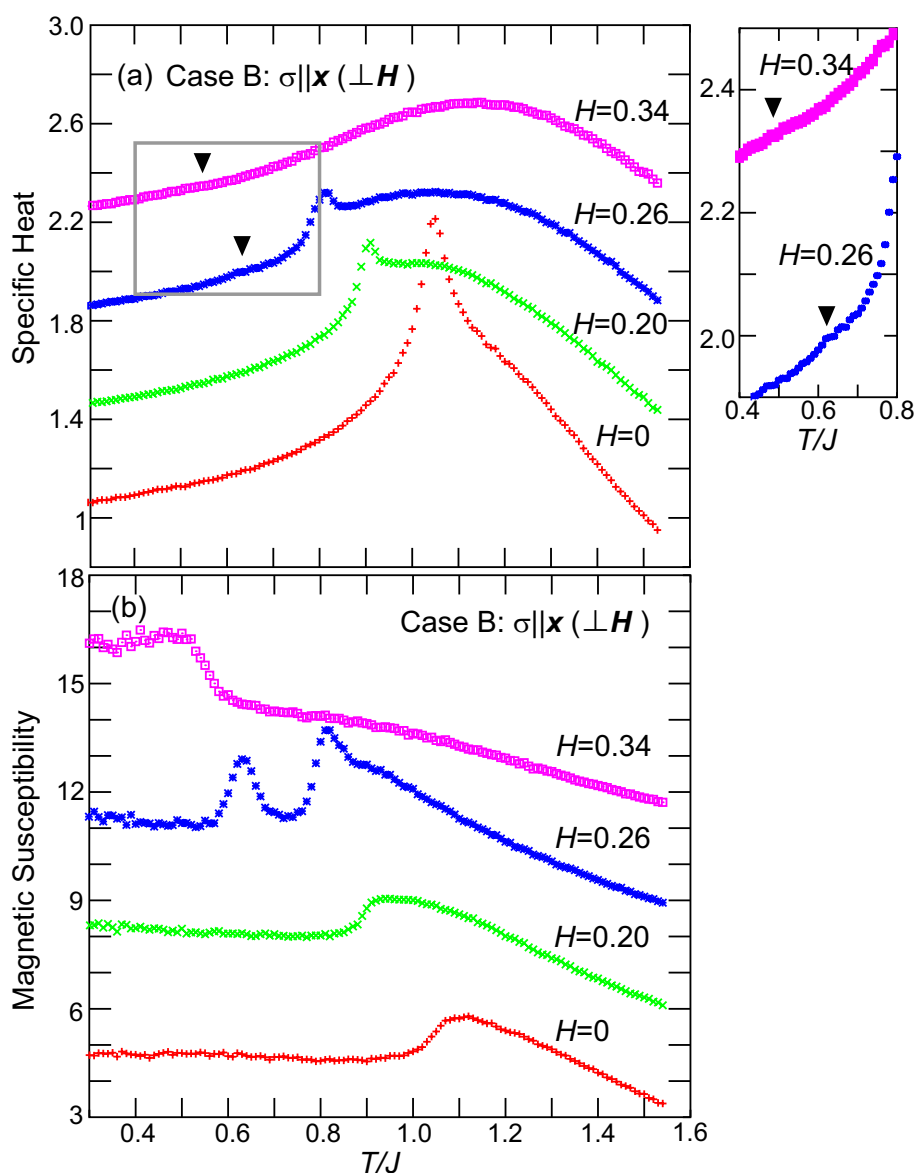


図 3.5: 磁場と引っ張り歪みを垂直に加えた場合の、(a) 比熱と温度の関係および (b) 磁化率と温度の関係。磁場  $H=0, 0.20, 0.26, 0.34$  でそれぞれ変えた場合の結果が示されている。 $H=0.26, 0.34$  の場合の磁化率における強磁性 - コニカル, コニカル - スキルミオン相転移に対応するピークおよびキックに対応する特徴的振る舞いは、比熱の方では観測されなかった。筆者らの論文より転載 [61] (K. Tanaka, R. Sugawara, and M. Mochizuki. Theoretical study on stabilization and destabilization of magnetic skyrmions by uniaxial-strain-induced anisotropic Dzyaloshinskii-Moriya interactions. *Physical Review Materials*, 4(3), 034404, 2020)。

これをもとに温度 - 磁場相図を作成すると図 3.6(b), (c) のようになった。図 3.6 (a) は引っ張り歪みなしの等方的な系の計算結果で、すでに報告されている文献 [49] のものを転載している。また、図 3.6(d)~(f) に Seki らによる実験の結果参考のた

めに転載した [48]。 (a) および本研究で得られた理論相図 (b) から (c) と，過去 Seki らにより報告された  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$  の相図を比較すると，相の概形がほとんど一致している。この結果から， $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$  中の磁化構造の相図が引っ張り歪みにより変化し，特に磁場との相対角度に依存してスキルミオン相の安定性が変化するのには，DM 相互作用の変調が大きな原因になっていることが計算により裏付けられた。

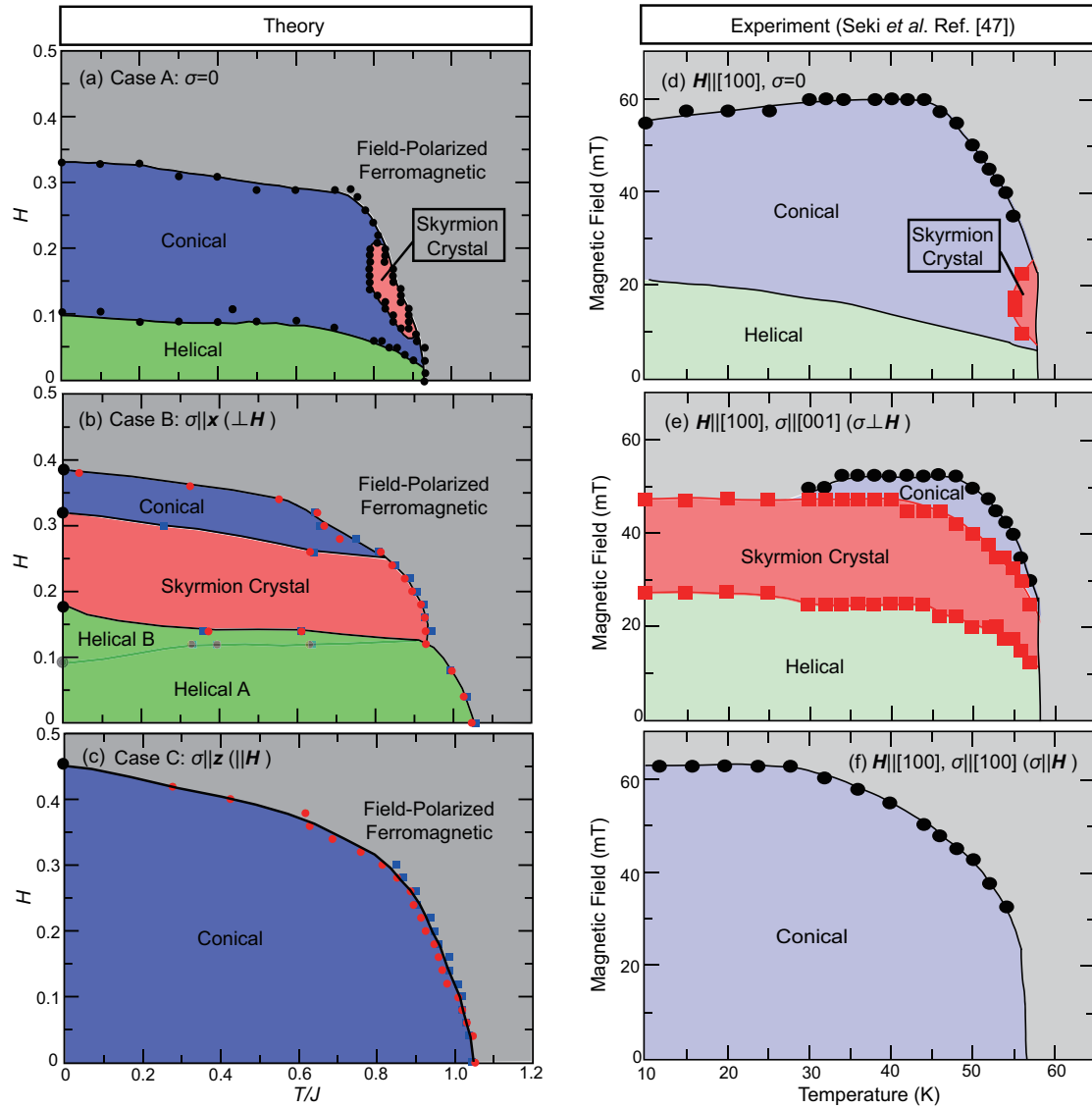


図 3.6: 温度 - 磁場相図 ( (a) 引っ張り歪みなしの理論相図。[49] のものから再現した。 (b) 引っ張り歪みと磁場を垂直に加えた場合の理論相図。 (c) 引っ張り歪みと磁場を平行に加えた場合の理論相図。 (d) 引っ張り歪みなしの実験相図。 (e) 引っ張り歪みと磁場を垂直に加えた場合の実験相図。 (f) 引っ張り歪みと磁場を平行に加えた場合の実験相図。 (d), (e), (f) は [48] から転載。 )。理論相図と実験相図が非常によく合致している。 (b) および (c) については筆者らの論文より転載 [61] (K. Tanaka, R. Sugawara, and M. Mochizuki. Theoretical study on stabilization and destabilization of magnetic skyrmions by uniaxial-strain-induced anisotropic Dzyaloshinskii-Moriya interactions. *Physical Review Materials*, 4(3), 034404, 2020) )。

### 3.2 考察

この DM 相互作用の変調による磁気スキルミオンの安定性の変調については、すでに Seki らが提案している通り、コニカル磁性の伝播ベクトルが面内に倒れる効果によるものであると思われる。本研究では、実験に直接対応する状況として DM 相互作用が歪みによって強くなる場合を想定した。一方、系によっては DM 相互作用が歪みにより弱くなる場合も考えられる。この場合については、本研究で得られた相図により、ある程度予測できる。まず DM 相互作用の磁場に平行な成分である  $D_z$  を、 $D_x, D_y$  に比べて小さくした場合は、DM 相互作用の磁場に垂直な成分である  $D_x, D_y$  が相対的に強くなるために、面内に伝播ベクトルが倒れやすくなると考えられる。その場合磁気スキルミオンは相対的に安定化する。一方、例えば  $D_x$  を弱くして  $D_x < D_y = D_z$  としたとすると、この場合は  $y$  軸方向に伝播ベクトルを持つヘリカル磁性、 $z$  軸方向に伝播ベクトルを持つコニカル磁性が安定化しうると考えられる。歪みによる DM 相互作用の変調の度合いは、MnSi と  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$  の例からもわかるように、物質により異なる。スキルミオンが発現しうるほかの物質に対して同様の歪みによる効果を実験で探ること、あるいは第一原理計算に基づく物質依存の変調の度合いを探ることにより、歪み由来でスキルミオンの安定性をコントロールしやすい対象の物質を明らかにすることは、応用の観点から重要であると思われる。

加えて、DM 相互作用は歪み以外のメカニズムによっても変調しうる。一つ目の例として、近年 DM 相互作用は系に内在するスピン流で表せるということが Kikuchi らにより報告されている [62]。スピン流の非断熱成分  $j_{s,i}^\perp$  により誘起されるゲージ場  $\mathbf{A}_{s,\mu}$  のハミルトニアンは、

$$H_A^\perp = - \int d^3r j_{s,i}^\perp \cdot \mathbf{A}_{s,\mu}^\perp \quad (3.1)$$

で表される。これを回転行列で実験室系に戻す事で、

$$\int \frac{d^3r}{a^3} D_i^\alpha (\mathbf{n} \times \nabla_i \mathbf{n}), \quad D_i^\alpha \equiv \hbar a^3 j_{s,i}^{\perp(L),\alpha} \quad (3.2)$$

のように、連続体モデルの DM 相互作用に対応する形のハミルトニアンが得られる。本研究では DM 相互作用の変調のみを考慮するとスキルミオン相が安定化することが示されたが、この DM 相互作用の変調の原因は必ずしも引っ張り歪みでなくても良い。もし Kikuchi らの報告のように、DM 相互作用をスピン流で変調できるとすれば、実験系によってはスピン流によりスキルミオンの安定性を変化させられる可能性がある。

また、本研究では一軸方向の引っ張り歪みを考えたが、例えば他の変形として、磁性体にねじれを加えることもできる。近年ではねじれを磁性体に加えた場合の DM 相互作用に対する効果も理論的に研究されている。Fujimoto らの報告 [63] に

よると、磁性体に力学的なねじれを加えた結果、

$$\mathcal{H} = \int \frac{d^3r}{a_0^3} [-J \mathbf{A}_i \cdot (\tilde{\mathbf{S}} \times \partial_i \tilde{\mathbf{S}})], \quad i = x, y, z \quad (3.3)$$

$$\mathbf{A}_i^\alpha = (\partial_i \chi) \delta^{\alpha, z}, \quad \mathbf{A}_t = \dot{\chi} \hat{z} \quad (3.4)$$

のように、スピングージ場で表され、磁性体のねじれ角  $\chi$  と結びついた形の **DM** 相互作用が誘起される。この **DM** 相互作用の発生に伴いマグノン流が誘起されるが、この現象は伝導電子を介することなく力学と磁性を結びつけたものとなっている。

このように、**DM** 相互作用の変調は様々な形で誘起されうる。本研究では最も簡単な場合として、立方晶から正方晶への変形の結果、一方向の **DM** 相互作用のみが変化する形を考えたが、実際の実験ではスピン流の存在や磁性体のねじれなどの誘起に伴い、より複雑に **DM** 相互作用が変化する系を考えられる。これに伴うより豊かな物性の発現は今後の研究課題である。



## 第4章 非整合ブロッホラインの形成

### 4.1 計算結果

M型ヘキサフェライトにおける連続体モデルのハミルトニアンを考える。非整合ブロッホラインの形成に主要な寄与を与える相互作用として磁気双極子-双極子相互作用、六回対称性の異方性を考慮すると、ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = & A \int d\mathbf{r} (\nabla \mathbf{m})^2 \\
 & + \frac{\mu_0 M_s^2}{4\pi} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \left\{ \frac{\mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} + \frac{\mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{m}(\mathbf{r}') \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^5} \right\} \\
 & - K_u \int d\mathbf{r} m_z^2 \\
 & + K_{\text{hex}} \int d\mathbf{r} (9m_x^4 m_y^2 - 6m_x^2 m_y^4 + m_y^6)
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

のように与えられる。ここで、 $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ は規格化された古典的な磁気モーメントベクトルである。第一項が交換相互作用で、 $A$ が交換スティッフネス定数を表す。第二項は磁気双極子-双極子相互作用で、 $\mu_0$ と $M_s$ はそれぞれ真空の透磁率、飽和磁化を表す。第三項は計算対象の二次元面に対して垂直に設定した $z$ 軸方向の異方性である。第四項はM型ヘキサフェライトの $c$ 面内における結晶構造の六回対称性を反映した異方性である。容易軸方向および困難軸方向は図4.1(a)のようになっている。6回対称性を反映した異方性のハミルトニアンについては、図4.1(a)の

グラフを再現するように

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2}(1 - \cos 6\theta) \\
&= \sin^2(3\theta) \\
&= (3\sin\theta - 4\sin^3\theta)^2 \\
&= 9\sin^2\theta - 24\sin^4\theta + 16\sin^6\theta \\
&= 9\sin^2\theta(\sin^2\theta + \cos^2\theta)(\sin^2\theta + \cos^2\theta) - 24\sin^4\theta(\sin^2\theta + \cos^2\theta) + 16\sin^6\theta \\
&= 9\sin^2\theta(\sin^4\theta + 2\sin^2\theta\cos^2\theta + \cos^4\theta) - 24\sin^6\theta - 24\sin^4\theta\cos^2\theta + 16\sin^6\theta \\
&= 9\sin^6\theta + 18\sin^4\theta\cos^2\theta + 9\sin^2\theta\cos^4\theta - 24\sin^6\theta - 24\sin^4\theta\cos^2\theta + 16\sin^6\theta \\
&= 9\cos^4\theta\sin^2\theta - 6\cos^2\theta\sin^4\theta + \sin^6\theta \\
&= 9m_x^4m_y^2 - 6m_x^2m_y^4 + m_y^6
\end{aligned} \tag{4.2}$$

として決めた。六回対称性の異方性の強さ  $K_{\text{hex}}$  以外のパラメータは実験的に決めており、 $A = 1.3 \times 10^{-11}$  [J/m],  $M_s = 2.86 \times 10^5$  [A/m],  $K_u = 5.3 \times 10^4$  [J/m<sup>3</sup>] のようになっている。薄膜型のサンプルの形状は 960 nm × 720 nm × 12 nm のように仮定している。

連続空間を格子定数  $a^3$ ,  $a = 12$  nm で離散化して、 $80 \times 60 \times 1$  サイトからなる離散空間のモデルが得られる。

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} = & - J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j \\
& + I_{\text{dip}} \sum_{(i,j)} \left\{ \frac{\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j}{|\mathbf{i} - \mathbf{j}|^3} + \frac{\mathbf{m}_i \cdot (\mathbf{i} - \mathbf{j}) \mathbf{m}_j \cdot (\mathbf{i} - \mathbf{j})}{|\mathbf{i} - \mathbf{j}|^5} \right\} \\
& - \kappa_u \sum_i m_{iz}^2 \\
& + \kappa_{\text{hex}} \sum_i \left( 9m_{ix}^4m_{iy}^2 - 6m_{ix}^2m_{iy}^4 + m_{iy}^6 \right)
\end{aligned} \tag{4.3}$$

ここでそれぞれの相互作用の強さのパラメータは  $J = 2aA$ ,  $I_{\text{dip}} = \mu_0 M^2 a^3 / 4\pi$ ,  $\kappa_u = K_u a^3$  であり、それぞれ  $J = 1950$  meV,  $\kappa_u = 572$  meV,  $I_{\text{dip}} = 88.4$  meV である。エネルギーの単位として  $J=1$  とすると、 $\kappa_u = 0.29$ ,  $I_{\text{dip}} = 0.045$  となる。また  $\kappa_{\text{hex}} = 0.003$  とする。

この格子スピンモデルにおけるブロッホラインの構造を調べるために、図 4.1(b) と (c) に与えられるような初期状態を考え、上向き磁化の領域と下向き磁化の領域を二本の線で分ける。それぞれの二本の線は磁化容易軸の一本に沿っており、それぞれの線上の磁化は **head-to-head**, **tail-to-tail** の磁気構造をとる。加えて、二つの線が出会う領域周辺の磁化はランダムにした。この初期状態から始めて、低温 ( $T/J=0.01$ ) におけるブロッホラインの構造を調べるためにレプリカ交換モンテカ

ルロ法により緩和した。シミュレーション条件は開放端境界条件である。

シミュレーションにより、二つのブロッホ磁壁が出会う地点で互いに入れ違った構造である図 4.1(d) および (e) のようなブロッホラインの構造が得られた。また、双極子双極子相互作用を入れない場合  $I_{\text{dip}}=0$  のシミュレーションも行った。この場合図 4.1(f) のように非整合なブロッホラインは見られなかった。この結果から、静磁場のエネルギーを小さくする上で双極子双極子相互作用が重要な役割を持つことがわかる。加えて、異なるパラメータによる計算を行ったことで、六回対称性の磁気異方性も重要な役割を持つことがわかった。通常のブロッホラインでは、ある容易軸の方向から別の容易軸の方向へ、困難軸を介して 120 度その方向を回転させる。この磁化の配列は大きなエネルギー損を伴い、結果通常のブロッホラインを不安定化し、非整合なブロッホラインが相対的に安定化する。

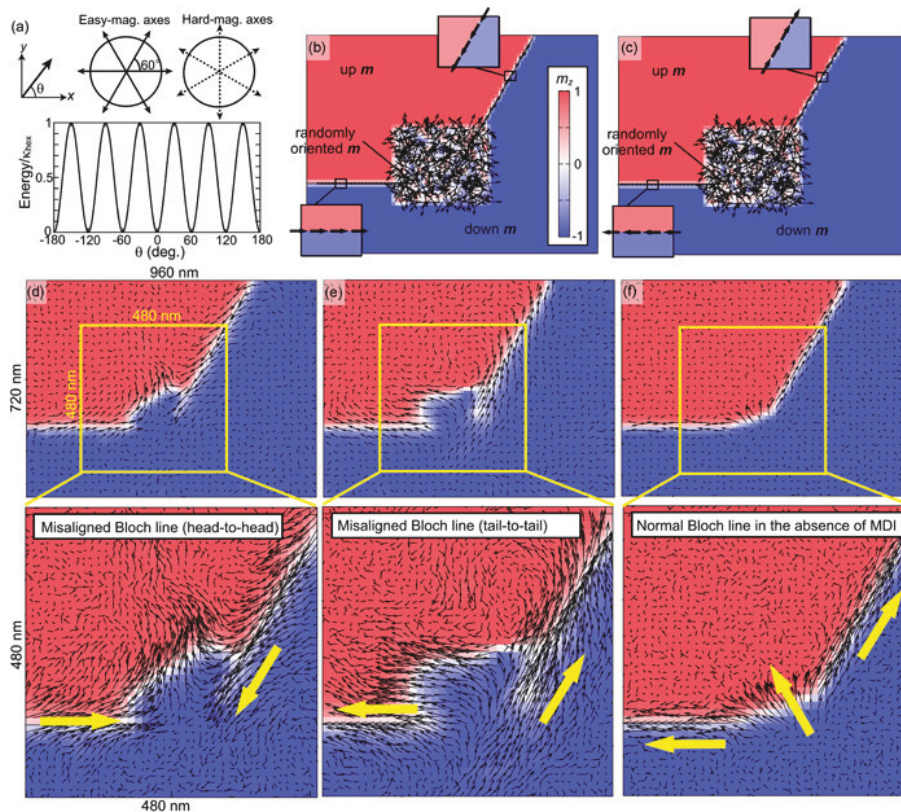


図 4.1: (a) 六回軸対称異方性の概念図。(b), (c) 初期状態としてはランダムな磁化を仮定した。(d) head-to-head および (e) tail-to-tail の非整合ブロッホラインの確認。(f) 磁気双極子相互作用を入れない時の磁気構造。この際は非整合ブロッホラインが確認されないため、非整合ブロッホラインの形成では磁気双極子相互作用が重要になりうる。筆者らの論文より転載 [53] (K. Kurushima, K. Tanaka, H. Nakajima, M. Mochizuki, and S. Mori. Microscopic magnetization distribution of Bloch lines in a uniaxial magnet. *Journal of Applied Physics*, 125(5), 053902, 2019)。

## 4.2 考察

本研究では、上記の結果に加えて六回対称な異方性を加えていない場合でも計算を行なったが、その場合もブロッホラインは形成されるものの、非整合なブロッホラインとはならなかった。これらの結果から、非整合ブロッホラインの形成において、六回対称な異方性、磁気双極子相互作用のいずれもが必要であることが示唆される。計算では、六回対称な異方性の存在のもとに、磁気モーメントの面内成分が60度ごとに安定な方向を有するようになり、これに加えて初期状態を磁気モーメントの相対角度が120度をなすようにしたことで、ブロッホラインに互いに120度をなして「折れ曲がる部分」を生じさせた。さらに、磁気双極子相互作用の存在により、磁化が互いに入れ違った構造が安定化しうる。これら二つの相互作用がうまく作用した結果、実験で観察されたような非整合なブロッホラインが形成されたと考えられる。ただし、本研究ではその他の対称性を有した異方性のもとでの計算は行なっておらず、実験系によっては他の対称性を持った異方性のもとで、同様の非整合なブロッホラインが形成される可能性もある。いろいろな異方性のもとでの計算により、非整合なブロッホラインが現れる傾向を一般的に考察することは今後の研究課題になる。

なお、通常ブロッホラインを情報担体として用いる際は、局所面内磁場をかけるなどしてブロッホラインを読み出し部に移動させたのち、ブロッホラインの存在する部分を磁気バブルとして切断して読み出す方法がとられる [51]。このように機械的可動部分を持たないというのがブロッホラインメモリの一つの特徴であるが、非整合ブロッホラインは磁化の先頭同士が互いに入れ違った構造で非対称になっていることから、この磁場による転送および読み出しのための切り出しの際のふるまい、安定性が変わってくる可能性がある。切り出し後の安定性については、Kurushimaらの顕微鏡観察の結果からある程度予想できる。Kurushimaらは外部磁場を強めていって図4.2に示すようにType II バブル(図4.2 (f)のように、二つのブロッホラインが端にブロッホラインを有して平行に並んだ状態)にした状態でも端で非整合ブロッホラインが生じていることを確認した。このため、転送、切り出しの途中で非整合ブロッホラインが壊れない場合は、切り出し後も安定的に非整合ブロッホラインが存在する可能性があるが、これについては実験やLLG方程式によるシミュレーションなどを通じてより詳細な考察を加える必要がある。



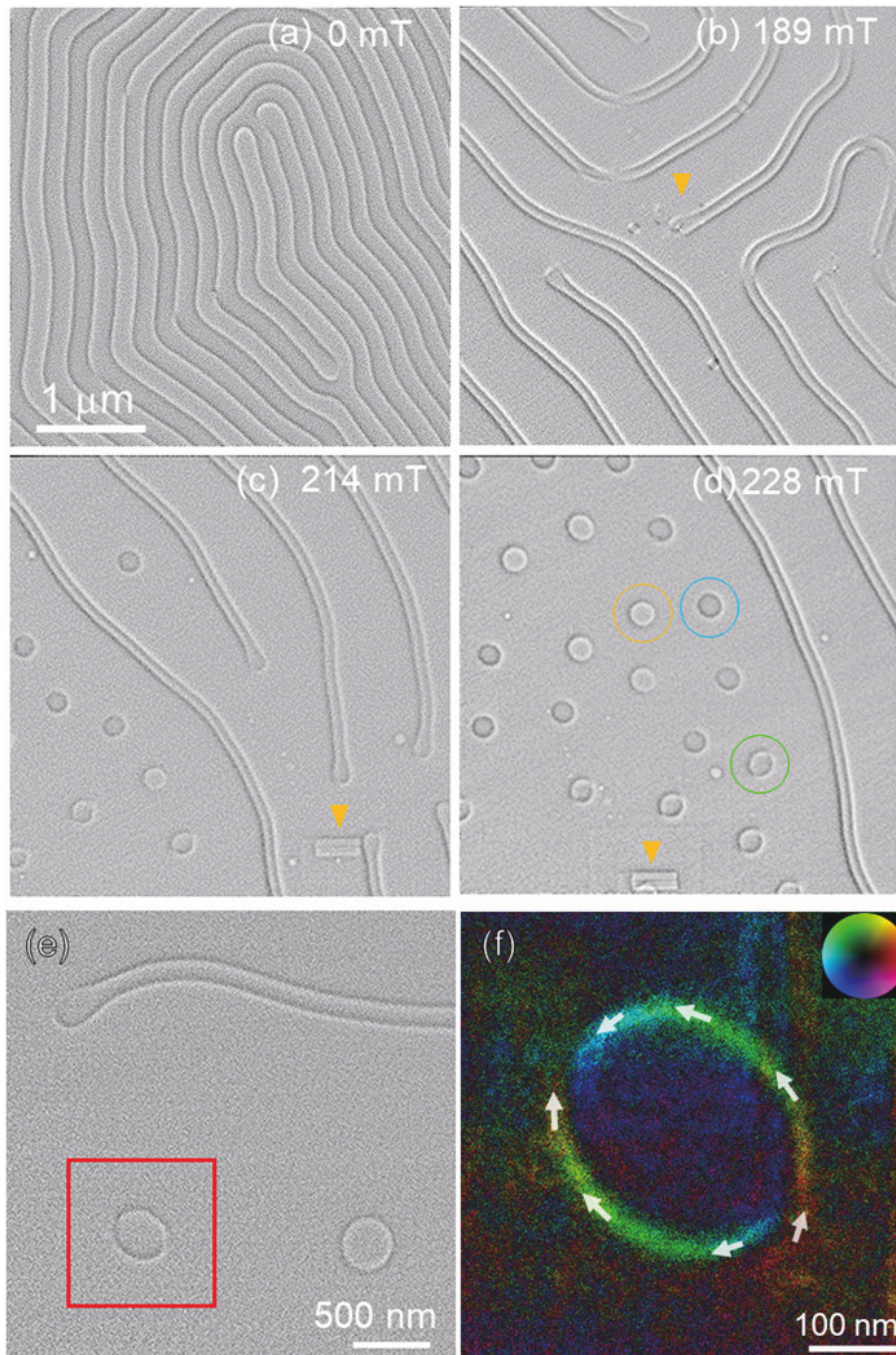


図 4.2: 面直方向の磁場を強めていった際に発生する磁気バブル。(f) が Type II 磁気バブルで、この端では非整合なブロッホラインが生じている。Kurushima らの論文(筆者が共著者)より転載 [53] (K. Kurushima, K. Tanaka, H. Nakajima, M. Mochizuki, and S. Mori. Microscopic magnetization distribution of Bloch lines in a uniaxial magnet. *Journal of Applied Physics*, 125(5), 053902, 2019)

。

## 第5章 総括

本研究では、トポロジカル磁気構造として、スキルミオン、非整合ブロッホラインの形成の起源に関する理論的研究を行った。

第一章では、特に本研究に関わるものを中心に、トポロジカル磁気構造の具体例について述べた。スキルミオンについては、通常磁場 – 温度相図における存在領域が非常に狭いことが問題であり、一つの解決策として磁性体に引っ張り歪みを加える方法があり得ることを述べた。また非整合ブロッホラインについては、本研究で注目するヘキサフェライトの系で高解像度の顕微鏡データを得た実験の研究で、従来確認されてこなかった磁壁が互いに入れ違ったブロッホラインの存在が確かめられていることを述べた。また本研究の目的についても述べた。

第二章では、本研究で用いた LLG 方程式、モンテカルロ計算の詳細について述べた。また研究で考慮したモデルのハミルトニアンについても詳細を述べた。一軸引っ張り歪みによるスキルミオンの安定化に関する研究では、DM 相互作用の変調として引っ張り歪みの効果を取り入れたモデルを使用した。また非整合ブロッホラインの形成に関する研究では、非整合ブロッホラインの形成に重要な寄与をもたらすと思われる磁気双極子 – 双極子相互作用、六回対称異方性を考慮したモデルを使用した。

第三章では、一軸引っ張り歪みによるスキルミオンの安定化に関する数値計算の結果について報告した。引っ張り歪みの効果として DM 相互作用の変調を考慮したモデルでは、実験で報告された最低温度付近までのスキルミオンの安定化を、定量的によく説明できることを示した。スキルミオン安定化のメカニズムとしては先行研究で報告されている通り、DM 相互作用の面内成分が強くなったことでらせんの伝播ベクトルが面内に倒れやすくなる結果、コニカル磁性に比べてスキルミオンが安定化したと考えられる。

第四章では、非整合ブロッホラインの形成に関する数値計算の結果について報告した。磁気双極子 – 双極子相互作用、六回対称異方性を考慮したヘキサフェライトのモデルに対する LLG 方程式の数値計算により、非整合ブロッホラインの計算が理論的に説明できることが明らかとなった。

## 参考文献

- [1] 芳田奎, 磁性, 岩波書店 (1991)
- [2] 川村光, スピンと磁性, サイエンス社 (2016)
- [3] J. J. Sakurai, サクライ 上級量子力学, 丸善出版 (2010)
- [4] I. Dzyaloshinsky, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **4**(4), 241-255 (1958)
- [5] T. Moriya, *Physical Review* **120**(1), 91 (1960)
- [6] T. Koretsune, N. Nagaosa, R. Arita, *Scientific reports* **5**, 13302 (2015)
- [7] T. Koretsune, T. Kikuchi, R. Arita, *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**(4), 041011 (2018)
- [8] 多々良源, 物質・材料テキストシリーズ「スピントロニクス of 物理 場の理論の立場から」, 内田老鶴圃 (2019)
- [9] J. H. Han, *Skyrmions in Condensed Matter*, Springer (2017)
- [10] T. H. R. Skyrme, *Nuclear Physics* **31**, 556-569 (1962)
- [11] X. Z. Yu, Y. Tokunaga, Y. Kaneko, W. Z. Zhang, K. Kimoto, Y. Matsui, Y. Taguchi and Y. Tokura, *Nat. Commun.* **5**(1), 1-7 (2014)
- [12] R. Ozawa, S. Hayami, Y. Motome, *Phys. Rev. Lett.* **118**(14), 147205 (2017)
- [13] Y. Ishikawa, K. Tajima, D. Bloch and M. Roth, *Solid State Communications* **19**(6), 525-528 (1976)
- [14] Y. Ishikawa, G. Shirane, J. A. Tarvin and M. Kohgi, *Phys. Rev. B* **16**(11), 4956 (1977)
- [15] P. Bak and M. H. Jensen, *Journal of Physics C: Solid State Physics* **13**(31), L881 (1980)
- [16] A. N. Bogdanov and D. A. Yablonskii, *Zh. Eksp. Teor. Fiz* **95**(1), 178 (1989)
- [17] A. Bogdanov and A. Hubert, *J. Magn. Magn.* **138**(3), 255-269 (1994)
- [18] A. Bogdanov and A. Hubert, *J. Magn. Magn.* **195**(1), 182-192 (1999)

- [19] A. N. Bogdanov and U. K. Rößler, *Phys. Rev. Lett.* **87**(3), 037203 (2001)
- [20] A. N. Bogdanov, U. K. Rößler, M. Wolf and K. -H. Müller, *Phys. Rev. B* **66**(21), 214410 (2002)
- [21] U. K. Rößler, A. N. Bogdanov and C. Pfleiderer, *Nature* **442**(7104), 797-801 (2006)
- [22] U. K. Rößler, A. A. Leonov, A. N. Bogdanov and N. Alexei, *Journal of Physics: Conference Series* **303**(1), 012105 (2011)
- [23] S. Mühlbauer, B. Binz, F. Jonietz, C. Pfleiderer, A. Rosch, A. Neubauer, R. Georgii, and P. Böni, *Science* **323**(5916), 915-919 (2009)
- [24] M. Lee, Y. Onose, Y. Tokura and N. P. Ong, *Phys. Rev. B* **75**(17), 172403 (2007)
- [25] Y. S. Do, S. Onoda, N. Nagaosa and J. H. Han, *Phys. Rev. B* **80**(5), 054416 (2009)
- [26] X. Z. Yu, Y. Onose, N. Kanazawa, J. H. Park, J. H. Han, Y. Matsui, N. Nagaosa and Y. Tokura, *Nature* **465**(7300), 901-904 (2010)
- [27] X. Z. Yu, N. Kanazawa, Y. Onose, K. Kimoto, W. Z. Zhang, S. Ishiwata, Y. Matsui and Y. Tokura, *Nat. Mater.* **10**(2), 106 (2011)
- [28] S. Seki, X. Z. Yu, S. Ishiwata and Y. Tokura, *Science* **336**(6078), 198-201 (2012)
- [29] A. Neubauer, C. Pfleiderer, B. Binz, A. Rosch, R. Ritz, P. G. Niklowitz and P. Böni, *Phys. Rev. Lett.* **102**(18), 186602 (2009)
- [30] M. Mochizuki, *Phys. Rev. Lett.* **108**(1), 017601 (2012)
- [31] M. Mochizuki, X. Z. Yu, S. Seki, N. Kanazawa, W. Koshibae, J. Zang, M. Mostovoy, Y. Tokura and N. Nagaosa, *Nat. Mater.* **13**(3), 241-246 (2014)
- [32] F. Jonietz, S. Mühlbauer, C. Pfleiderer, A. Neubauer, W. Münzer, A. Bauer, T. Adams, R. Georgii, P. Böni, R. A. Duine, and others, *Science* **330**(6011), 1648-1651 (2010)
- [33] X. Z. Yu, N. Kanazawa, W. Z. Zhang, T. Nagai, T. Hara, K. Kimoto, Y. Matsui, Y. Onose and Y. Tokura, *Nat. Commun.* **3**(1), 1-6 (2012)
- [34] T. Schulz, R. Ritz, A. Bauer, M. Halder, M. Wagner, C. Franz, C. Pfleiderer, K. Everschor, M. Garst, and A. Rosch, *Nat. Phys.* **8**(4), 301-304 (2012)



- [35] I. Kézsmárki, S. Bordács, P. Milde, E. Neuber, L. M. Eng, J. S. White, H. M. Rønnow, C. D. Dewhurst, M. Mochizuki, K. Yanai and others, *Nat. Mater.* **14**(11), 1116 (2015)
- [36] Y. Tokunaga, Y. Kaneko, D. Okuyama, S. Ishiwata, T. Arima, S. Wakimoto, K. Kakurai, Y. Taguchi and Y. Tokura, *Phys. Rev. Lett.* **105**(25), 257201 (2010)
- [37] M. Ikka, A. Takeuchi, M. Mochizuki, *Phys. Rev. B* **98**(18), 184428 (2018)
- [38] T. Koide, A. Takeuchi and M. Mochizuki, *Phys. Rev. B* **100**(1), 014408 (2019)
- [39] 多々良源, スピントロニクス理論の基礎, 培風館 (2009)
- [40] 望月維人, まぐね **10**(4), 192 (2015)
- [41] D. Prychynenko, M. Sitte, K. Litzius, B. Krüger, G. Bourianoff, M. Kläui, J. Sinova and K. Everschor-Sitte, *Phys. Rev. Appl.* **9**(1), 014034 (2018)
- [42] S. Seki, M. Garst, J. Waizner, R. Takagi, N. D. Khanh, Y. Okamura, K. Kondou, F. Kagawa, Y. Otani and Y. Tokura, *Nat. Commun.* **11**(1), 1-7 (2020)
- [43] X. Xing, Y. Zhou and H. B. Braun, *Phys. Rev. Applied* **13**(3), 034051 (2020)
- [44] P. Milde, D. Köhler, J. Seidel, L.M. Eng, A. Bauer, A. Chacon, J. Kindervater, S. Mühlbauer, C. Pfleiderer, S. Buhrandt and others, *Science*, **340**(6136), 1076-1080 (2013)
- [45] Y. Tokunaga, X. Z. Yu, J. S. White, H. M. Rønnow, D. Morikawa, Y. Tokunaga, and Y. Tokura, *Nat. Commun.* **6**(1), 1-7 (2015)
- [46] Y. Nii, T. Nakajima, A. Kikkawa, Y. Yamasaki, K. Ohishi, J. Suzuki, Y. Taguchi, T. Arima, Y. Tokura, and Y. Iwasa, *Nat. Commun.* **6**(1), 1-7 (2015)
- [47] A. Chacon, A. Nauer, T. Adams, F. Rucker, G. Brandl, R. Georgii, M. Garst, and C. Pfleiderer, *Phys. Rev. Lett.* **115**(26), 267202 (2015)
- [48] S. Seki, Y. Okamura, K. Shibata, R. Takagi, N.D. Khanh, F. Kagawa, T. Arima and Y. Tokura, *Phys. Rev. B* **96**(22), 220404 (2017)
- [49] S. Buhrandt and L. Fritz, *Phys. Rev. B* **88**(19), 195137 (2013)
- [50] 小西進, 応用物理 **4**, 326-330 (1983)
- [51] 鈴木良, 丸山洋治, テレビジョン学会誌 **42**(1), 41-48 (1988)
- [52] 宮田謙一, 神島謙二, 柿崎浩一, 平塚信之, 日本応用磁気学会誌 **30**(3), 383-386 (2006)

- [53] K. Kurushima, K. Tanaka, H. Nakajima, M. Mochizuki and S. Mori, *J. Appl. Phys.* **125**(5), 053902 (2019)
- [54] J. Shi and L. Q. Chen, *AIP Advances* **9**(3), 030701 (2019)
- [55] C. Schindler, J. Noky, M. Schmidt, C. Felser, J. Wosnitza and J. Gooth, *Phys. Rev. B* **102**(3), 035132 (2020)
- [56] J. D. Torres, R. Hidalgo-Sacoto, S. Varela and E. Medina, *Phys. Rev. B* **102**(3), 035426 (2020)
- [57] 宮下精二, 物理学基礎シリーズ4「熱・統計力学」, 培風館(1993)
- [58] R. H. Swendsen and J. S. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **57**(21), 2607 (1986)
- [59] K. Hukushima, K. Nemoto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**(6), 1604-1608 (1996)
- [60] S. Seki, M. Mochizuki, *Skyrmions in Magnetic Materials*, Springer (2016)
- [61] K. Tanaka, R. Sugawara, and M. Mochizuki, *Phys. Rev. Materials* **4**(3), 034404 (2020)
- [62] T. Kikuchi, T. Koretsune, R. Arita, G. Tatara, *Phys. Rev. Lett.* **116**(24), 247201 (2016)
- [63] J. Fujimoto and M. Matsuo, *Phys. Rev. B*, **102**(2), 020406 (2020)

## 謝辞

まず本研究の実施に関しまして直接のご指導をいただきました，朝日 透教授，望月 維人教授には深く感謝申し上げます。朝日先生には私が学部四年生の頃からお世話になりましたが，当時から私に特に人間的に足りない部分を厳しく指摘してくださる貴重な存在として，七年という非常に長い期間お世話になり，感謝してもきれないと思っております。私は生命医科に進学しながら物理をやりたいですとか，他にも色々意見を言い，口を挟んで反抗的になっては先生を困らせることも多数あったと思っております。そんな中，ちゃんと時間をとって向き合ってください先生姿勢には私自身学ばせていただくことが多数ありました。学部修士含め，ここでは書ききれないほどとても学ぶことの多い七年だったと思っております。本当にお世話になりました。

望月先生には，私が博士一年時，通常なら受け入れがたいであろう他学科，他研究室の所属の学生である私を受け入れていただき，また研究テーマも頂いてしまい，本当に感謝しております。先生は日頃から「99点ではだめであること」，「ミスは仕事では特に見逃してはいけないこと」の重要性をお話しされていたかと思いますが，その大事さが，随所随所で様々なことに関わる中で今痛感しております（ただ恥ずかしがらなかなか100点の何かを作る，ということがまだできていませんが。今後の人生を通しての課題かと思っております。）。研究，物理についてはもちろんですが，その他プレゼン資料の作り方に始まり，学部，修士と研究に関わってきていながら私が習得できていなかった様々なことを，一から丁寧にご指導いただきました。物性物理の第一線で活躍される先生の発言，人間性からは一つ一つ学ばせていただくことばかりでした。まだまだ私自身物理，物性物理ではわからないことだらけで未熟ですが，それでも未熟なりに理論がこんなにも面白い世界なのかと体感できたのは，間違いなく先生のおかげだと思っております。本当にお世話になりました。

ナノ理工学専攻長谷川 剛教授，物理学専攻勝藤 拓郎教授には，お忙しい中本論文の副査をご担当いただき，先生方のご専門に基づく様々なご指摘，勉強になるアドバイスを多数いただきました。心より感謝申し上げます。ありがとうございました。

朝日研究室秘書前田 愛子さんには，私が学部四年生の頃から何度となくお世話になりました。手続き面だけでなく，たまに教授室で雑談して下さったり，学生全体に向けてご自身の経験からくるアドバイスを色々とお話しくださり，私自

身自分を省みる上で勉強になることが多数ありました。また毎回の学会出張やTAの件など、手続き面大変お手数をおかけしました。ありがとうございました。

朝日研究室の皆様、特に先生方、先輩方には、私が学部四年の頃から大変お世話になりました。一人一人お名前、エピソードを挙げて感謝申し上げたいほど、多くの方々に深くお世話になったと思っておりますが、紙面の都合上ここでは特に、「旧サリドマイド班」でお世話になった下澤 東吾先生、荻野 禎之博士、後藤(旧姓高田)成海修士、乙川 光平博士、鳥山 廣樹修士、また何かと関わらせていただき、ご飯などを通じて色々相談に乗ってくださった中川 鉄馬博士、松本 匡貴博士、修士課程まで在籍していた朝日研同期の川井 聡子修士、藤原 美紅修士、中村 美利修士、「他グループ」ではありましたがゼミの時など、ご自身の専門に基づく助言をくださった小島 秀子招聘研究員、澤村 直哉教授に改めて感謝申し上げたいと思います。ありがとうございました。

望月研究室の学生の皆様には、他研究室でお邪魔した形の私を非常に暖かく迎えてくださり、とても感謝しております。特に三宅 将之君、北山 圭亮君、清水 宏太郎君には、私が年上でありながら皆さんから教わることばかりであったと思っております。博士一年当時教科書を読むだけでは理解できていなかった物理の随所随所のところで、輪講を通じて嫌な顔一つせずこちらの疑問について教えてくださる皆さんの姿勢について、「望月研の学生本当優秀だわ」とただただ感心するばかりでした。輪講の一個一個の数式をとっても突っ込みが深く、一つのことを正確に理解するというのがどれほど難しいかを皆さんの姿勢から学ばせていただきました。ありがとうございました。

望月研究室講師田中 康寛先生、研究員の Rico POHLE さん、早稲田大学高等研究所中 惇先生には、ゼミや居室にいる時、食事会などの時に、先生方のご経験からくる様々なお話を聞けて私自身とても楽しい時間を過ごさせて頂きました。特にゼミのディスカッションではただただ先生方の洞察力、知識の深さに驚いてばかりおり、研究者の研究に対する向き合い方を学生最後の三年間で知ることができたことは、今後の私の人生に大きく影響を与えてくれることと思います。

望月研究室秘書高橋 洋子さんには、主に居室にいる時にたくさん雑談のお相手になっていただきました。一つ一つの仕事が正確であり、その丁寧さ、姿勢に多くのことを学ばせて頂きました。ありがとうございました。

その他、修士課程時大変お世話になった産業技術総合研究所中部センターの尾崎 公洋センター長、高木 健太チーム長、曾田 力央研究員はじめ、紙面の都合上ここに書けなかった、研究で関わらせて頂いた多くの皆様にも、改めて感謝申し上げます。

最後に、父克彦、母洋子に、この場を借りて深く感謝申し上げます。高校生の時に想定していたより学生期間が非常に長くなってしまいましたが、おかげさまで本当に学びの多い、楽しい十年間でした。ありがとうございました。

## 研究業績

### 論文

- 1) Theoretical study on stabilization and destabilization of magnetic skyrmions by uniaxial-strain-induced anisotropic Dzyaloshinskii-Moriya interactions, Kohei Tanaka, Ryosuke Sugawara, Masahito Mochizuki, *Physical Review Materials*, **4**, 034404 (2020).
- 2) Microscopic magnetization distribution of Bloch lines in a uniaxial magnet,, Kosuke Kurushima, Kohei Tanaka, Hiroshi. Nakajima, Masahito Mochizuki, and Shigeo Mori, *Journal of Applied Physics*, **125**, 053902 (2019).

### 学会発表

#### 国内学会

- 1) 田中康平, 朝日透, 望月維人, 「張力歪み由来の異方性ジャロシンスキー守谷相互作用による磁気スキルミオンの安定化・不安定化の理論研究」, 日本物理学会 2020 年秋季大会, [口頭] 9aH2-4, 2020 年 9 月 9 日, オンライン
- 2) 田中康平, 朝日透, 望月維人, 「一軸張力ひずみによるスキルミオン相安定化・不安定化の理論研究: 基底状態相図と有限温度相図」, 日本物理学会第 75 回年次大会, [資料アップロード] 18pB21-9, 2020 年 3 月 18 日, オンライン
- 3) 田中康平, 朝日透, 望月維人, 「一軸張力歪みによるスキルミオン相安定化の数値的研究」, 日本物理学会第 74 回年次大会, [口頭], 17aF201-8, 2019 年 3 月 17 日, 福岡

#### 国際学会

- 1) Kohei Tanaka, Toru Asahi, Masahito Mochizuki, “ Theoretical study of the stabilization of magnetic skyrmion induced by anisotropic Dzyaloshinskii-Moriya interaction ” [poster] Molecular Chirality Asia 2020, P-08, 1, November, 2020, Tokyo, Japan