

非線形共役勾配法を用いた永久磁石の マイクロマグネティクスシミュレーションの高速化

田中智大、古屋篤史、上原裕二、清水香壺、藤崎淳、安宅正、大島弘敬*、
Norbert Požár**、小俣正朗**

(富士通株式会社、*株式会社富士通研究所、**金沢大学)

The Nonlinear Conjugate Gradient Method: An Energy Minimization Algorithm for the Speedup of Micromagnetic Simulation of the Permanent Magnets

T. Tanaka, A. Furuya, Y. Uehara, K. Shimizu, J. Fujisaki, T. Ataka, H. Oshima*, N. Požár**, S. Omata**
(Fujitsu Limited, *Fujitsu Laboratories Limited, **Kanazawa Univ.,)

はじめに

マイクロマグネティクスシミュレーションでは LLG 方程式を時間発展に従って解く手法 (以下、陽解法と呼ぶ) が一般的であるが、エネルギー最小化手法の一つである最急降下法を用いて高速に磁化反転過程を計算する手法が報告されている[1]。今回我々は、最急降下法より効率的なエネルギー最小化手法とされている非線形共役勾配法を用いて陽解法との計算速度及び計算精度の比較を行った。発表では永久磁石の磁化反転過程のシミュレーションを例に、非線形共役勾配法と陽解法それぞれにおける計算速度と計算精度についての比較を報告する。

計算方法

系の全エネルギーは異方性エネルギー、静磁界エネルギー、交換結合エネルギー、ゼーマンエネルギーからなる。非線形共役勾配法では、各ステップにおいて有効磁界による各磁化の勾配方向 \mathbf{g}^{now} に、以下の式で表される補正を加えて探索方向 \mathbf{d}^{now} を得る。

$$\mathbf{d}^{now} = P(-\mathbf{g}^{now} + \beta \mathbf{d}^{old})$$

ここで β は前のステップでの勾配方向等により決まるパラメータ、 \mathbf{d}^{old} は前のステップで使用した探索方向、 P は磁化ベクトルの法線方向への射影演算子である。 \mathbf{d}^{now} に沿って磁化を動かしてエネルギーの最小化を繰り返すことにより、補正がない場合に比べて少ない反復回数での収束が可能になる。本計算では、外部磁界を変化させ、各外部磁界ごとにエネルギー最小化を行い定常状態を求めることで磁化反転過程を計算した。計算に使用したモデルは一辺 34nm の $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ の多結晶構造であり、メッシュサイズは 1nm^3 である (Fig.1)。青色の部分は $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 結晶粒であり、黄色の部分は粒界層である。粒界層は軟磁性とした。

結果

Table 1 に非線形共役勾配法と陽解法での計算結果の比較を示す。保磁力は両手法で同じ値が得られている。さらに、非線形共役勾配法を使用した場合は陽解法に比べて高速になることがわかる (約 24 倍)。以上のことからマイクロマグネティクスシミュレーションにおいて非線形共役勾配法の優位性が確認された。

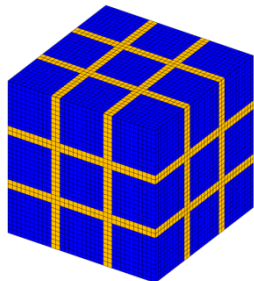


Fig.1: The structure of multi-grain permanent magnets.

Method	Coercivity [A/m]	#Evaluations	CPU-time [sec]
LLG	4.11×10^6	148344	40699
Present	4.11×10^6	3375	1647

Table 1: The comparisons between solving the LLG equation explicitly and the present nonlinear conjugate gradient method are shown. #Evaluation represents the number of evaluations of the magnetostatic potential.

参考文献

- 1) Exl, Lukas, et al. *Journal of Applied Physics* 115.17 (2014): 17D118.

LLG 方程式を用いた磁化反転時間と磁化反転確率の計算

秋田谷尚紀, 村岡裕明, Simon Greaves

東北大学電気通信研究所

Calculation of Magnetization Reversal Times and Probabilities Using the LLG Equation

Naoki Akitaya, Hiroaki Muraoka, Simon Greaves

RIEC, Tohoku University

まえがき

ハードディスクドライブ(HDD)の大容量化に伴い, 転送レートの向上も求められている. すでに HDD の転送レートは 1Gbps を超えており, これ以上の向上には記録磁化の反転時間を検討しておく必要がある. 磁化反転時間はダンピング定数に大きく依存するが, HDD の記録媒体のダンピング定数は 0.01 から 0.05 と小さいため, 反転が安定するのに時間がかかり, 歳差運動も激しい. そこで, ダンピング定数の磁化反転時間依存性についてマイクロマグネティックシミュレーションにより調べる.

計算方法

ここでは LLG 方程式によるシミュレーション[1]を行った. 最初に直方体の粒子をモデリングし, ダンピング定数を変化させて磁化反転時間を計算した. ダンピング定数は 0.01 から 0.1 まで変化した. 主な計算条件を表 1 に示す. 次に, 同じモデルで初期状態が上向きに磁化に短時間だけ下向きの磁界パルスを印加し, 印加が終了してから上下どちらに収束するかを調べて, 磁界パルス印加したときの反転確率についてシミュレーションを行った.

Table.1 Calculation Conditions

モデル	7 nm × 7 nm × 10 nm
異方性磁界定数	5.0×10^6 erg/cm ³
飽和磁化	500 emu/cm ³
印加磁界	20 kOe
印加磁界の角度	30 degree
温度	4.2 K

結果と考察

Fig.1 にダンピング定数の大きさによる反転時間への影響を示す. ダンピング定数が小さくなると反転時間が長くなった. 特に, HDD で使われている記録媒体のダンピング定数である 0.01 から 0.05 までの反転時間の増加が著しく, 0.01 のときには約 500 ps と非常に長くなった.

Fig.2 にダンピング定数が 0.01 のときの磁界パルスによる反転確率を示す. 横軸が印加した時間, 縦軸が反転確率となっている. Fig.1 からダンピング定数が 0.01 のときの反転時間は約 500 ps となっているが, Fig.2 では 300 ps 以下の領域でも粒子が反転している. これは, 印加磁界に角度があることから容易軸方向にも振動しながら歳差運動しているため, 磁化が下向きを向いているときに印加磁界がなくなるとそのまま下向きに収束し, 短時間の磁界パルスでも反転できたと考えられる.

以上より, 斜めに磁界パルス印加することでダンピング定数が小さい媒体でも反転時間を短くすることができると考えられる.

参考文献

- 1) S.Greaves, "Micromagnetic Simulations of Magnetic Recording Media", High Performance Computing on Vector Systems 2007, pp.229-244(2008)

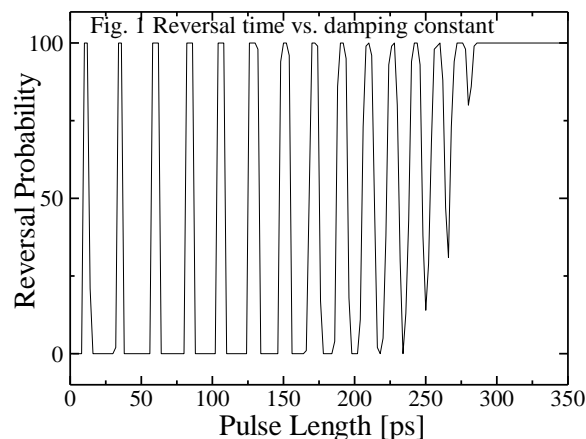
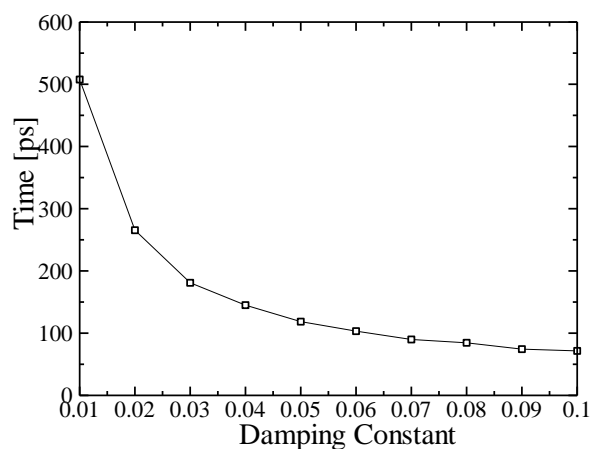


Fig. 2 Reversal probability vs. pulse length

ナノ Fe₃O₄ 粒のヒステリシス損シミュレーションと ハイパーサーミアへの適用性

小畑修二、米田守重*
(電機大理工, *日本電子専門)

Hysteresis loss simulations of Fe₃O₄ nanoparticles and adaptability for hyperthermia
S. Obata and M. Yoneda
(Tokyo Denki University, *Japan Electronic College)

はじめに

近年、ナノ磁性体の磁化特性の研究が飛躍的に進み、多くの実験結果が示されている。ナノ磁性は形状依存性を持ち、バルク磁性とは異なる様々な特徴を有することが明らかにされた。磁性アルブミンなども製造され、ナノ磁性体の人体への挿入が可能と成って、ヒステリシス損による癌の温熱療法が盛んに検討されている。しかしながら、こうしたヒステリシス損を求める計算理論は長らく存在せず、理論的な裏付けは皆無であった。本発表では、磁気双極子モーメント相互作用に基づき、ナノ磁性体のヒステリシス特性のシミュレーションを行い、ナノ Fe₃O₄ ヒステリシス損による癌の温熱療法の適用性を理論的に検討する。

計算理論

一般的スピン系の相互作用エネルギーは演算子@と磁気双極子モーメント μ を用いて

$$\hat{H} = \sum_{i>j} (J_{ij} \mu_i @ \mu_j + W_{ij}) - (\sum_i \mu_i) \cdot H \quad \dots (1)$$

と表され、磁気双極子モーメント間相互作用エネルギー W_{ij} は2点間の位置ベクトルを $d_{ij} e_{ij}$ として

$$W_{ij} = \frac{1}{4\pi\mu_0 d_{ij}^3} \{(\mu_i \cdot \mu_j) - 3(\mu_i \cdot e_{ij})(\mu_j \cdot e_{ij})\} \quad \dots (2)$$

と表される。演算子@にはハイゼンベルグモデル、イジングモデル、X-Yモデルなど様々な演算形式が有るが、本研究では古典スピン系とする。 J_{ij} は分子結合に於ける電子の静電場のエネルギーで形成され、量子化した分子軌道の電場エネルギーから固有状態として定まる。その為、スピン結合のエネルギーを与えるが磁場に対するヒステリシス特性は持たない。 W_{ij} と μH は磁場のエネルギーで、 W_{ij} は古典磁気双極子によるエネルギーを表す。ヒステリシス損は外部磁場と磁気モーメント磁場の為すエネルギーとして磁性体により消費され、熱エネルギーに変換される。この様に磁性に直接関わるエネルギーは W_{ij} となり、ヒステリシスは $W_{ij} - \mu H$ で決定される。従って、ヒステリシス特性だけを論ずるならば $W_{ij} - \mu H$ だけで良く、ヒステリシス損はこの項だけで求まる。エネルギー消費はこのシミュレーションのヒステリシス損から求める。

計算方法

計算は外場 H の変化ごとに全空間の W_{ij} について μ_i のモーメント方位を変え、最小状態を選択する。全スピンについてエネルギー計算を繰り返し行い、変化が無くなるまで繰り返し、基底状態を求める。系全体のエネルギーを決定する。 J_{ij} による磁化はキュリー温度 T_C に関わるがヒステリシス特性には大きく関わらないので Fig.1 では省いた。

1) Shuji Obata: Materials Transactions, **55** (2014) 1591-8.

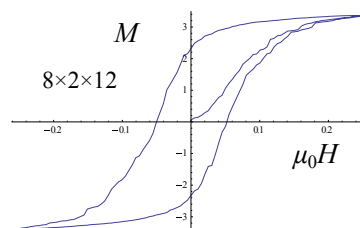


Fig.1 M-H curve of nano-Fe₃O₄

ハイパーサーミアの為のナノ Fe_3O_4 のヒステリシス計算法

米田守重、小畑修二*

(日本電子専門学校、*電機大理工)

Hysteresis calculation method in nano Fe_3O_4 for hyperthermia

M.Yoneda, S.Obata

(Japan Electronics College, *Tokyo Denki University.& School of Science & Engineering)

はじめに

最近、癌治療の手法として、癌細胞に磁性体を Implant して、交流磁場中の印加による誘導加熱で熱死させる磁性ハイパーサーミアに関する研究が注目されている。本講演では、誘導加熱過程について、使用する磁性ナノ粒子として、フェリ磁性体である Fe_3O_4 (マグネタイト) を想定した磁気ヒステリシス損の計算手法を理論的に検討し、その計算機シミュレーション結果について報告する。

シミュレーション手法と結果

Fe_3O_4 ナノ粒子は粒子合成が簡便で、粒子径の制御が容易であること、高い生体適合性を有していること等から、磁性ハイパーサーミア用 Implant 磁性体として用いられている。粒子径が約 20 nm 程度で超常磁性になることが知られ、交流磁場中で磁気モーメントの緩和遅れが生じることで、磁気ヒステリシス損が生じ、磁気エネルギーが熱に変換されると考えられている。磁気モーメントの緩和機構としては、Brown 緩和機構と Néel 緩和機構の二種類が存在することが知られている。我々は、独自に開発したシミュレーションの手法である Retarded Trace method^{1),2)}を用い、 Fe_3O_4 ナノ粒子に交流磁場を印加した場合の磁化のシミュレーションを行った。以下の図1と図2は、温度が $T=300[\text{K}]$ で、印加磁場の周波数がそれぞれ $2[\text{kHz}]$ と $10[\text{kHz}]$ の場合に結果を示している。

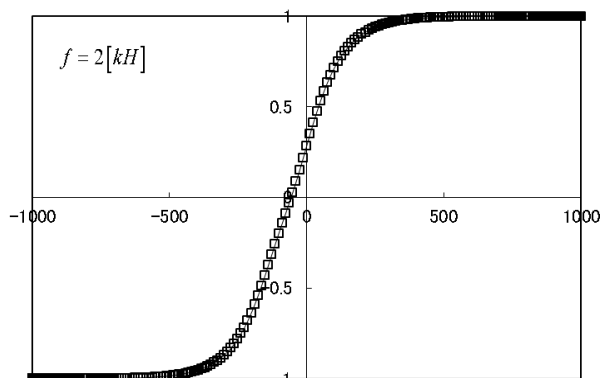


図 1

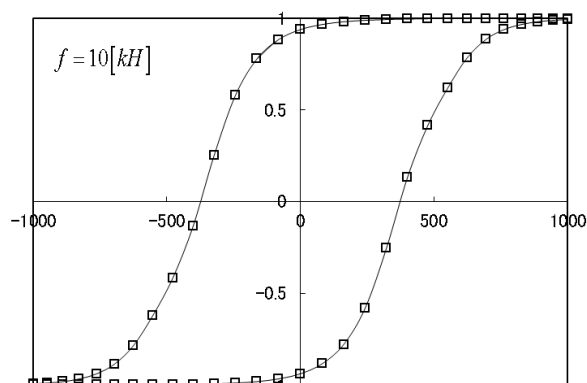


図 2

本講演でこのモデルをシミュレーションの手法として、一般化された Retarded Trace method を用い、温度、周波数、緩和時間等の各種条件及び、様々なナノ粒子内部とナノ粒子間の相互作用の各種パラメータによる磁化過程のシミュレーション結果について報告する予定である。

参考文献

- 1) S. Obata. Journal of the Magnetics Society of Japan 36(3), 161-168, 2012
- 2) S. Obata. IEEJ Transactions on Fundamentals and Materials, Vol.131(2011)No.10 P 838-845

マイクロマグネティック計算に依拠した渦電流発熱計算

吉田 和悦、 赤城 文子
(工学院大学)

Calculation method of eddy-current heat embedded in micromagnetic simulator

K. Yoshida, F. Akagi
(Kogakuin Univ.)

はじめに

導電性強磁性体の磁化変化に伴い生じる渦電流はその磁化過程に影響を与えることが知られている。一方近年、電気自動車の分野ではロータ部に用いられる永久磁石内部に生じる渦電流による発熱量を評価することが一つの課題となっている。本発表では、先に開発したマイクロマグネティックシミュレータに渦電流を導入し、そこから生じる熱量と昇温過程を計算することを試みた。

計算方法

磁束密度の時間変化により生じる電場 \vec{E}_1 をビオサバールの式を変形した式(1)から求める。この解では対象領域の表面で電場が法線成分をもつた

$$\vec{E}_1 = \frac{1}{4\pi} \int \frac{-\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \times \vec{r}}{|\vec{r}|^3} dv \quad (1)$$

め、表面に $\frac{2}{\epsilon_0} \cdot \frac{\partial \vec{E}_1}{\partial n}$ の量をもつ電荷を分布させたときに生じる電場 \vec{E}_2 を計算

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} \quad (2)$$

し、 $\vec{E} = \vec{E}_1 + \vec{E}_2$ をもって境界条件を満たす電場とした¹⁾。渦電流 \vec{j} は式(2)

$$q = \frac{1}{\sigma} |\vec{j}|^2 \quad (3)$$

のオームの法則から求め、再度ビオサバールの式を用いて渦電流磁界を計算し、LLG 方程式の実効磁界に加えた。このとき発生するジュール熱 q と

$$q = CT_{rise} \quad (4)$$

昇温温度 T_{rise} は式(3),(4)により計算できる。式中 σ と C はそれぞれ導電率と比熱を表す。ビオサバールの式は差分法では重畳の理が成り立つので、高速フーリエ変換を適用して計算の高速化を図った。

計算結果

図1に導電性強磁性体を断熱環境中で1秒間高周波磁界に曝したときの上昇温度 T_{rise} の周波数依存性を示す。図に示すように温度 T_{rise} と周波数 f との間には、破線で示した $\log T_{rise} \propto 2 \times \log f$ の関係がおおむね成り立っているように見てとれる。この両者の関係を数値で比較したのが、表1である。表には、計算から求めた昇温温度 T_{rise} と、 $f=5$ MHzにおける昇温温度を基準として温度が周波数の2乗に比例すると仮定したときの予想温度を T_{pro} を記した。表に示した T_{pro} と T_{rise} とのずれを示す、 $deviation (= 1 - T_{rise}/T_{pro})$ は周波数が高くなるにつれて大きくなる。これは、高周波になるにつれ磁化が磁界変化についていけず、式(1)に示した磁束の時間微分値が減少するためである。このように本シミュレータでは微細領域における磁化の時間変化を忠実に反映して渦電流熱を計算することが可能であり、一般的に解析的な計算が困難な、磁壁移動による磁化過程にも適用することが可能である。

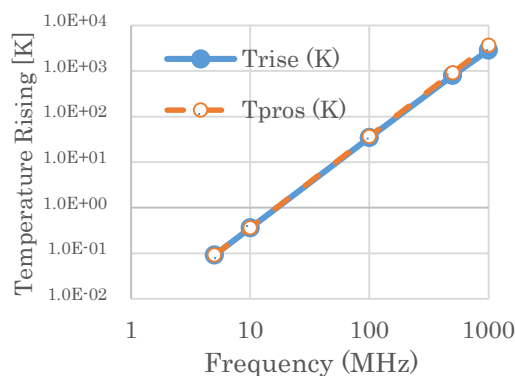


Fig.1 Relationships between temperature rising and frequency.

Amplitude of field = 50 kA/m,
Ku=5k J/m³, Ms= 1.0 T

Table 1 Deviation from the square of frequency.

Frequency [MHz]	Trise [K]	Tpro [K]	Deviation
5	0.09	0.09	0
10	0.36	0.37	0.02
100	34.3	36.5	0.062
500	878.8	913.3	0.137
1000	2833.0	3653.2	0.225

参考文献

- Edward Della Torre and Jason G. Eicke, *IEEE Trans. Magn.* **33**, 1251(1997).

磁石内部の磁化反転過程における反磁場の効果

塚原宙、井波暢人、岩野薫、三俣千春¹、小野寛太
(高エネ研,¹ 物材機構)

Theoretical study of dipole field effects for reversal process within permanent magnet

H. Tsukahara, N. Inami, K. Iwano, C. Mitsumata¹, K. Ono
(KEK, ¹NIMS)

はじめに

高保磁力と大きな磁化を併せ持った永久磁石の開発には保磁力機構の詳細な解明が不可欠である。保磁力機構の解明には磁石内部も含めた磁化の情報が重要であり様々な研究がなされている。しかしながら Kerr 顕微鏡などの観測では磁石内部の磁化を直接観察する事は難しく、有限要素法を用いたマイクロマグネティクスシミュレーションにおいてもシミュレーションモデルの大きさの制限から磁石内部の磁化ダイナミクスを正確に計算する事は困難である。我々は周期境界条件を用いた有限差分法により磁石内部のマイクロマグネティクスシミュレーションを実行し、磁化反転の様子を磁気的エネルギーの変化も含め詳細に調べた。

計算手法

平均の厚みおよび結晶粒径が 32nm および 160nm の扁平粒子を z 軸方向 (Fig. 1 (c) 参照) に積み重ね、ナノサイズの粒子からなる磁石のモデルを作成した。また各粒子毎に容易軸方向に揺らぎを与え、粒子内および粒子間で異なる交換スティフネス係数を設定し粒子内および粒子間交換相互作用を区別した。磁化ダイナミクスは Landau-Lifshitz-Gilbert 方程式を周期境界条件下で解く事により求めた。また粒子の自己相互作用を防ぐために粒子の大きさに比べ非常に大きな周期系でシミュレーションを実行する必要があるため KEK のスーパーコンピュータを使用して計算した。シミュレーションでは $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ を想定し、飽和磁化 1281 emu/cm^3 、磁気異方性定数 $4.0 \times 10^7 \text{ erg/cm}^3$ およびギルバートダンピング定数 1.0 を用いた。また交換スティフネス定数は粒子内および粒子間交換相互作用に対して $7.7 \times 10^{-7} \text{ erg/cm}$ および $7.7 \times 10^{-9} \text{ erg/cm}$ を用いた。容易軸は平均で z 軸から 11.6° 傾いている。

結果

シミュレーション結果から計算された z 軸方向の磁化 m_z の平均値を Fig. 1 (a) に、着磁状態からの各エネルギーの変化を Fig. 1 (b) に外部磁場の関数として示す。外部磁場の大きさが小さくなると各粒子の磁化が容易軸方向に傾くため異方性エネルギーは減少するが、保磁力近傍では急激に値を増す。これに対し反磁場エネルギーは保磁力に近づくと徐々に値を下げ、保磁力で不連続に値を下げる。保磁力での磁化の状態を Fig. 1 (c) に示す。磁化は粒子内でほぼ同じ向きを向いており m_z の符号が同じ粒子同士が領域を作り interaction domain が形成されている [1]。

謝辞

本研究は、(独) 科学技術振興機構 (JST) による産学共創基礎基盤研究「革新的次世代高性能磁石」の支援を受けて行われたものである。スーパーコンピュータシミュレーションは、高エネルギー加速器研究機構 (KEK) の大型シミュレーション研究 (課題番号 14/15-01) により行われた。

[1] J. Thielsch, H. Stopfel, U. Wolff, V. Neu, T. G. Woodcock, K. Güth, L. Schultz, and O. Gutfleisch, J. Appl. Phys. **111** 103901 (2012).

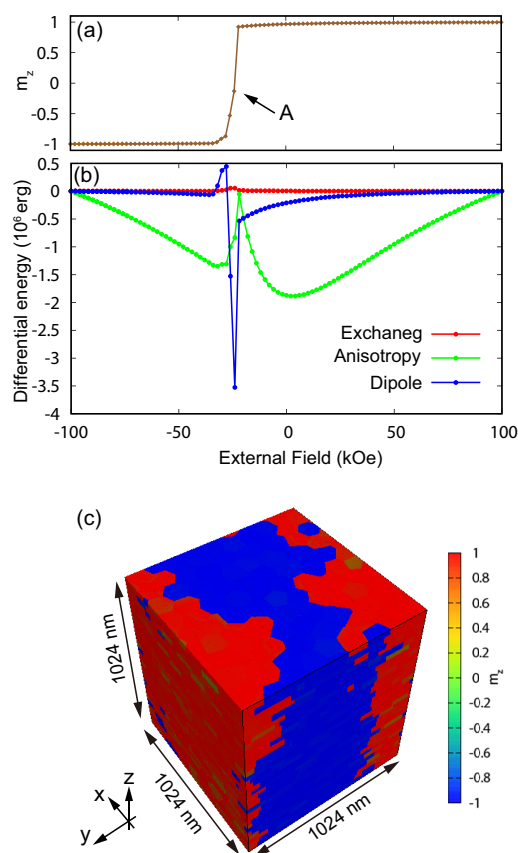


Fig 1: (a) The averaged m_z and (b) the differential energy as a function of the external field. (c) The magnetization at A which is located near the coercivity shown in (a).