

確率的 Landau-Lifshitz-Gilbert 方程式による $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 磁石の原子論的モデルにおける磁化反転ダイナミクス

西野正理¹、宮下精二²

(¹ 物材機構、² 東大院理)

Dynamics of magnetization reversal in atomistic models of $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ magnets by the Stochastic

Landau-Lifshitz-Gilbert equation

Masamichi Nishino¹ and Seiji Miyashita²

(¹NIMS, ²Univ. of Tokyo)

イントロダクション

Landau-Lifshitz-Gilbert(LLG)方程式は、磁化ダイナミクスを記述する基礎方程式である。マイクロマグネティクスにおいては、しばしば連続体モデルによる LLG シミュレーションが行われるが、我々は結晶格子上の各原子がもつ磁気モーメントを考慮して磁氣的相互作用をモデル化する原子論的な立場からの LLG 法によるダイナミクスを調べている[1,2]。この方法の長所は微視的に磁化反転ダイナミクスを調べることが出来る点にある。一方、連続体で有利な大きな系の取り扱いには困難が生じる。LLG 方程式そのままでは温度による効果を記述できない。我々は LLG 方程式に stochastic noise を導入することにより、不均一磁化系への温度効果を正確に取り込んだ方法論を得て[1]、磁化反転における核生成や depinning 機構などについて研究を進めている。ここでは、この Stochastic Landau-Lifshitz-Gilbert (SLLG)法による不均一磁化系のダイナミクスへの適用と $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 磁石 系のモデル系へ適用して得られた磁化の動的特性について報告する。

磁化ダイナミクス

熱平衡を実現するダイナミクスにおいて、SLLG 方程式の緩和定数とノイズの大きさの選び方に任意性があり、揺動散逸関係を満たす限り平衡状態に漸近するが、その選択によってダイナミクスには一般に相違が現われることが分かっている[1]。この事に注意して、Nd-Fe-B 系の原子論的スピンモデルに対して、SLLG 法による有限温度のダイナミクスシミュレーションを行った。赤井らによる第一原理計算から見積もったパラメータを用いることで、Nd-Fe-B 系固有の磁化反転や自発磁化などの物性に関して、定性的のみならず定量的な解析が可能となった。まず、SLLG 法での定常状態は熱平衡状態であるが、この手法を用いて熱平衡状態のシミュレーションを行い、モンテカルロ計算で得た値と比べて一致することを確認した。そして、実験値に近い転移温度の見積もりや磁気再配列転移の特徴を再現することが出来た。また、Nd-Fe-B の一辺 10 ユニットセル程度の境界条件の異なるいくつかの系に対して、磁化反転ダイナミクスのシミュレーションを行った。その結果、Nd サイトの磁化反転がしやすい事や、境界条件により反転の様子が変わることなどが分かった(図 1)。またドメインウォール幅は 2~3 ユニットセル程度の大きさ(400K)を持つことや (図 2)、核生成的な反転過程が現われる事が観察された。また、ドメインは必ずしも c 軸方向に成長しやすいのではなく、条件により異なる成長の可能性が観察された。

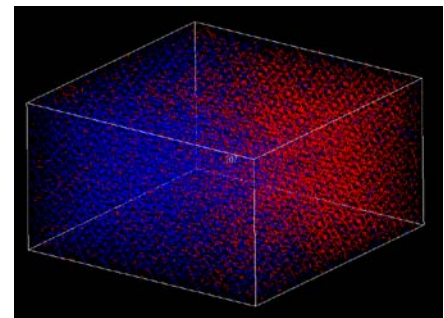


図 1 磁化反転の様子
(open boundary)

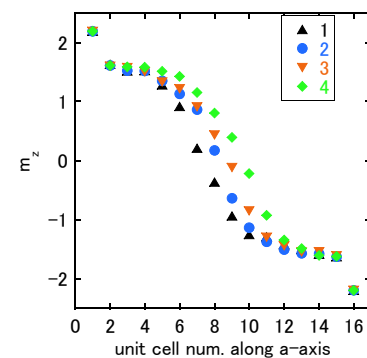


図 2 ドメインウォール幅

参考文献

- 1) M. Nishino and S. Miyashita, Phys. Rev. B. 91, 134411 (2015).
- 2) S. Mohakud, S. Andraus, M. Nishino, A. Sakuma, S. Miyashita, arXiv:1602.03285