大規模シミュレーションによる熱間加工磁石モデルの初磁化過程

塚原宙、岩野薫、三俣千春 [1]、小野寛太
(高エネ研, [1] 物材機構)

Large-scale micromagnetics simulation for initial magnetization process of hot-deformed permanent magnet

H. Tsukahara, K. Iwano, C. Mitsumata[1], K. Ono
(KEK, [1]NIMS)

はじめに

高い保磁力と大きな磁化を持つ高性能永久磁石の開発には磁石内で起こる磁化ダイナミクスの解明が不可欠である. マイクロマグネティックスシミュレーションは磁性体の磁化ダイナミクスを明らかに出来るため永久磁石研究でも利用されてきた. しかしながら永久磁石は数 100 nm 以上の粒径を持つ多数の粒子から構成され、磁壁の厚みは数 nm であるので、正確な磁化ダイナミクスの計算には必然的に大規模なシミュレーションが不可欠となる. 先行研究において我々はマイクロマグネティックスシミュレーターを改良し、1億セルを超えるシミュレーションを可能とした [1]. 本発表では改良したシミュレーターを用い熱消磁状態からの初磁化における磁化ダイナミクスついて報告する.

計算手法

平均の厚みおよび結晶粒径が 32nm および 200nm の扁平粒子を z 軸方向（Fig. 1 (a) 参照）に積み重ね、ナノサイズの粒子からなる熱間加工磁石モデルを作成した. この磁石モデルの大きさは $2048 \times 2048 \times 512\mathrm{nm}^3$ であり、1辺の長さが 2nm の立方体セルで分割した. シミュレーションでは 3384 個の粒子からなる系を約 3 億個の計算セルを用いて計算している. 初期状態ではランダムに磁化を配置した. 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. 磁石を構成する物質は $Nd_2Fe_{14}B$ を想定し、飽和磁化 1281 emu/cm^3、磁気異方性定数 4.0×10^7 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 7.7×10^{-7} erg/cm および 7.7×10^{-9} erg/cm を用いた. シミュレーションは KEK のスーパーコンピューティングシステム Blue Gene/Q で実行した.

結果

完全にランダムな磁化配置から計算された熱消磁状態を Fig. 1(b) に示す. 熱消磁状態では多磁区構造が現れる. 磁化は容易軸 (z 軸) 方向では、反磁場の影響により、向きを揃える傾向を示す. これに対し容易軸垂直方向 (xy 面内) ではランダムに配置される. 磁区は粒子内を区切り、磁壁を内部に持つ粒子が存在している. 熱消磁状態から外部磁場を変化させて計算した磁化曲線を Fig. 1(c) に示す. 磁化は初め急激に増加するが、その後ほとんど変化しなくなり、更に外部磁場を大きくすると再度増加する傾向を示した.

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 15/16-01）により行われた.

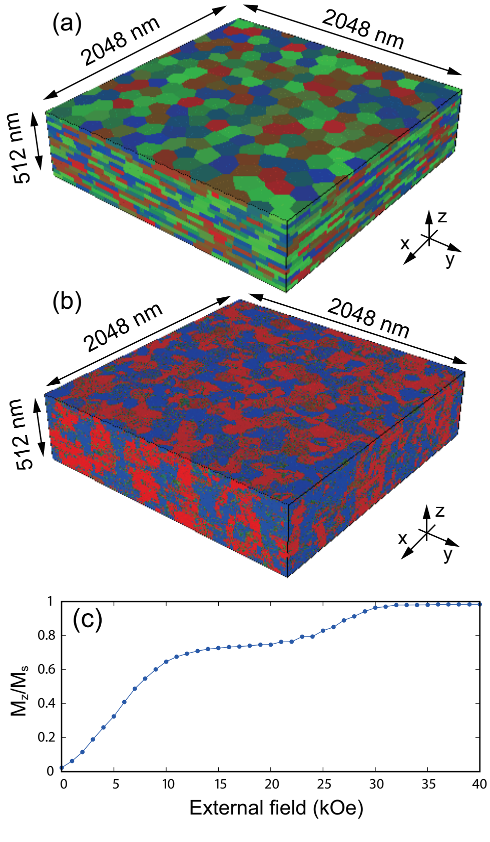

Fig 1: (a) The schematic of the simulation model, (b) the thermal demagnetization state and (c) the initial magnetization curve.

[1] H. Tsukahara, S.-J. Lee, K. Iwano, N. Inami, T. Ishikawa, C. Mitsumata, H. Yanagihara, E. Kita, and K. Ono, AIP Advances 6, 056405 (2016).