磁気エネルギー評価と単位系について

by T.Koyama

１．磁気モーメント等の定義

ある物体全体（ある領域でも良い）の磁気モーメントを $M[\mathrm{Wb\cdot m}]$ とすると、磁化の強さ $I[\mathrm{Wb/m^2}]$ は単位体積当たりの磁気モーメント

$$I[\mathrm{Wb/m^2}] = I[\mathrm{T}] = \frac{M[\mathrm{Wb\cdot m}]}{V[\mathrm{m^3}]} \tag{1-1}$$

にて定義される。長さ $l[\mathrm{m}]$ で断面積 $s[\mathrm{m^2}]$ の円柱状磁性体が長さ方向に沿って一様に磁化している場合を考え、両端面の磁極の強さを $\pm m[\mathrm{Wb}]$ とする。磁気モーメントは $M[\mathrm{Wb\cdot m}] = m[\mathrm{Wb}]l[\mathrm{m}]$ であるので、磁化の強さは、

$$I[\mathrm{Wb/m^2}] = I[\mathrm{T}] = \frac{M[\mathrm{Wb\cdot m}]}{V[\mathrm{m^3}]} = \frac{ml}{sl} = \frac{m}{s} \tag{1-2}$$

となる。つまりこの場合、磁化の強さは両端面における磁極の単位面積当たりの強さに等しい。

磁界 $\mathbf{H}[\mathrm{A/m}]$ に比例して、磁化 $\mathbf{I}[\mathrm{Wb/m^2}]$ が発生する場合、

$$\mathbf{I}[\mathrm{Wb/m^2}] = \chi\mathbf{H}[\mathrm{A/m}] \tag{1-3}$$

この比例係数 χ を磁化率と呼ぶ。χ の次元は、

$$\frac{[\mathrm{Wb/m^2}]}{[\mathrm{A/m}]} = \frac{[\mathrm{Wb/A}]}{[\mathrm{m}]} = [\mathrm{H/m}]$$

である。

さて真空中に磁界 $\mathbf{H}$ が存在する場合、真空の透磁率 μ_0 を用いて

$$\mathbf{B} = \mu_0\mathbf{H} \tag{1-4}$$

の磁束密度が生じる。つまり $\mathbf{B}$ は真空の磁化と見ることが出来る。これより、磁界 $\mathbf{H}$ 内の磁性体の正味の磁束密度は、

$$\mathbf{B} = \mu_0\mathbf{H} + \mathbf{I} = \mu_0\mathbf{H} + \chi\mathbf{H} = (\mu_0 + \chi)\mathbf{H} = \mu\mathbf{H} \tag{1-5}$$

にて与えられる。ここで

$$\mu = \mu_0 + \chi \tag{1-6}$$

である。もちろん μ は χ と同じ次元を持つ。特に、

$$\bar{\mu} = \frac{\mu}{\mu_0} = 1 + \frac{\chi}{\mu_0} = 1 + \bar{\chi} \tag{1-7}$$

において、$\bar{\mu}$ と $\bar{\chi}$ はそれぞれ透磁率および磁化率と呼ばれる無次元量である。

２．磁気エネルギーの評価

位置 $\mathbf{r}$ および時間 t における単位体積当たりの磁気モーメントを $\mathbf{M}(\mathbf{r},t)$ とする（ベクトルである

点に注意。また以下において時間の記号tを省略し$\mathbf{M}(\mathbf{r})$と記す場合もある。単位体積当たりであるので、$\mathbf{M}(\mathbf{r},t)$は磁化の強さ$\mathbf{I}(\mathbf{r},t)$に等しい)。物体の全磁気エネルギーは、

$$E_{total} = E_0 + E_{ext} + E_{exch} + E_{an} + E_d \tag{2-1}$$

にて表現され、E_0は常磁性状態から強磁性状態へ変化した時の磁気エネルギー変化（均一場のスピンダイナミクスでは、この項は定数と置くことが出来るので、これをエネルギーの基準に取り0とする場合が多い)、E_{ext}は外部磁場に起因するエネルギー、E_{exch}は交換積分に起因するエネルギーで、ここでは磁壁エネルギーに対応する（平均場の交換エネルギーはE_0に含まれている点に注意)。E_{an}は磁気異方性エネルギーで、E_dは反磁界エネルギーである。

$\mathbf{M}(\mathbf{r})$の絶対値

$$\left|\mathbf{M}(\mathbf{r})\right| = \sqrt{M_1^2(\mathbf{r}) + M_2^2(\mathbf{r}) + M_3^2(\mathbf{r})}$$

の最大値（=飽和磁化）をM_sとし、M_sにて$\mathbf{M}(\mathbf{r},t)$を規格化した磁気モーメントを

$$\mathbf{m}(\mathbf{r},t) = \frac{\mathbf{M}(\mathbf{r},t)}{M_S} \tag{2-2}$$

にて定義する。したがって、$-1 \le \mathbf{m}(\mathbf{r},t) \le 1$である。また各種の磁場$\mathbf{H}(\mathbf{r},t)$も$M_s$を用いて規格化し、

$$\mathbf{h}(\mathbf{r},t) = \frac{\mathbf{H}(\mathbf{r},t)}{M_S/\mu_0} = \frac{\mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r},t)}{M_S} \tag{2-3}$$

と置く。なお本来、M_sは位置$\mathbf{r}$に存在する物質の種類・状態（濃度や規則度）に依存する。

個々のエネルギーは

$$\begin{aligned}
E_{ext} &= -K_d \int_{\mathbf{r}} \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{h}_{ext}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
E_{exch} &= A \int_{\mathbf{r}} \left\{ \left|\nabla m_1\right|^2 + \left|\nabla m_2\right|^2 + \left|\nabla m_3\right|^2 \right\} d\mathbf{r} = -A \int_{\mathbf{r}} \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \Delta \mathbf{m}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
E_{an} &= K_u \int_{\mathbf{r}} \left\{ 1 - \{\mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{e}_{uan}(\mathbf{r})\}^2 \right\} d\mathbf{r} \\
E_d &= -\frac{1}{2} K_d \int_{\mathbf{r}} \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{h}_d(\mathbf{r}) d\mathbf{r}
\end{aligned} \tag{2-4}$$

のように与えられる。$K_d = M_s^2/\mu_0$である（$\mathbf{M}(\mathbf{r},t)$と$\mathbf{h}(\mathbf{r},t)$を無次元化した操作を戻している)。$K_d = M_s^2/\mu_0$の次元は、

$$\frac{[\mathrm{Wb/m^2}][\mathrm{Wb/m^2}]}{[\mathrm{H/m}]} = \frac{[\mathrm{Wb/m^2}][\mathrm{Wb/m^2}]}{\dfrac{[\mathrm{Wb^2}]}{[\mathrm{N \cdot m^2}]}} = \frac{[\mathrm{N \cdot m^2}]}{[\mathrm{m^4}]} = \frac{[\mathrm{N}]}{[\mathrm{m^2}]} = [\mathrm{J/m^3}]$$

よりエネルギーの次元を持つことがわかる。また$K_u = K_{u0} M_s^2/\mu_0$および$A = A_0 M_s^2/\mu_0$である（これも$\mathbf{M}(\mathbf{r},t)$を無次元化した操作を戻している。さらにA_0には(距離)^{2}の次元も含まれている点に注

意）。$\mathbf{e}_{uan}(\mathbf{r})$ は磁化容易軸方向を表す単位ベクトルで、磁気異方性エネルギーはその定義から $0 \le 1-\{\mathbf{m}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{e}_{uan}(\mathbf{r})\}^2 \le 1$ であり、$\mathbf{m}(\mathbf{r}) // \mathbf{e}_{uan}$ の時に $1-\{\mathbf{m}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{e}_{uan}(\mathbf{r})\}^2 = 0$ となるので、このエネルギーが位置 $\mathbf{r}$ におけるスピンの優先方向を第一近似的に決めている。つまりスピンの方向は位置 $\mathbf{r}$ における $\mathbf{e}_{uan}(\mathbf{r})$ の方向に強く依存する。重要な点は、$\mathbf{e}_{uan}(\mathbf{r})$ の方向が Phase-field 変数から決定される点である。

反磁界エネルギー E_d は具体的に、静磁場の双極子-双極子相互作用エネルギーとして、

$$\begin{aligned}
E_d &= \frac{1}{2}K_d\int_{\mathbf{r}}\int_{\mathbf{r}'}\mathbf{m}(\mathbf{r})\mathbf{g}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\mathbf{m}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}K_d\int_{\mathbf{r}}\int_{\mathbf{r}'}m_i(\mathbf{r})\left[\frac{\delta_{ij}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}-\frac{3(r_i-r_i')(r_j-r_j')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}\right]m_j(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}K_d\int_{\mathbf{r}}\int_{\mathbf{r}'}\mathbf{m}(\mathbf{r})\cdot\left[\frac{\mathbf{m}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}-\frac{3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\{\mathbf{m}(\mathbf{r}')\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}\right]d\mathbf{r}'d\mathbf{r} \\
&= -\frac{1}{2}K_d\int_{\mathbf{r}}\mathbf{m}(\mathbf{r})\cdot\left\{-\int_{\mathbf{r}'}\left[\frac{\mathbf{m}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}-\frac{3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\{\mathbf{m}(\mathbf{r}')\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}\right]d\mathbf{r}'\right\}d\mathbf{r} \\
&= -\frac{1}{2}K_d\int_{\mathbf{r}}\mathbf{m}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{h}_d(\mathbf{r})d\mathbf{r}
\end{aligned} \tag{2-5}$$

にて与えられるので、反磁界は、

$$\mathbf{h}_d(\mathbf{r}) = -\int_{\mathbf{r}'}\left[\frac{\mathbf{m}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}-\frac{3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\{\mathbf{m}(\mathbf{r}')\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}\right]d\mathbf{r}' \tag{2-6}$$

にて表現される。なお本来、磁気歪エネルギーも考慮すべきであるがここでは無視する（最終的には、磁気歪エネルギーは、磁気歪に伴う格子定数の変化を通じて弾性歪エネルギーに組み入れることにする)。

式(2-4)において、$E_{ext} \le 0,\quad E_{exch} \ge 0,\quad E_{an} \ge 0,\quad E_d \ge 0$ である。特に E_{ext} については $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ と $\mathbf{h}_{ext}(\mathbf{r})$ が同じ方向を向いた場合に最小値を取る。

また式(2-6)は長距離相互作用であるので、フーリエ変換を用いて逆空間にて計算する。まず式(2-6)を書き下すと、

$$h_1^d(\mathbf{r}) = -\int_{\mathbf{r}'}\left[\frac{m_1(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3} - \frac{3(r_1-r_1')\{m_1(\mathbf{r}')(r_1-r_1')+m_2(\mathbf{r}')(r_2-r_2')+m_3(\mathbf{r}')(r_3-r_3')\}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}\right]d\mathbf{r}'$$

$$= -\int_{\mathbf{r}'}\left[\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3} - \frac{3(r_1-r_1')^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}\right]m_1(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' - \int_{\mathbf{r}'} -\frac{3(r_1-r_1')(r_2-r_2')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}m_2(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' - \int_{\mathbf{r}'} -\frac{3(r_1-r_1')(r_3-r_3')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}m_3(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'$$

$$h_2^d(\mathbf{r}) = -\int_{\mathbf{r}'}\left[\frac{m_2(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3} - \frac{3(r_2-r_2')\{m_1(\mathbf{r}')(r_1-r_1')+m_2(\mathbf{r}')(r_2-r_2')+m_3(\mathbf{r}')(r_3-r_3')\}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}\right]d\mathbf{r}'$$

$$= -\int_{\mathbf{r}'}\left[\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3} - \frac{3(r_2-r_2')^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}\right]m_2(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' - \int_{\mathbf{r}'} -\frac{3(r_2-r_2')(r_1-r_1')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}m_1(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' - \int_{\mathbf{r}'} -\frac{3(r_2-r_2')(r_3-r_3')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}m_3(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'$$

$$h_3^d(\mathbf{r}) = -\int_{\mathbf{r}'}\left[\frac{m_3(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3} - \frac{3(r_3-r_3')\{m_1(\mathbf{r}')(r_1-r_1')+m_2(\mathbf{r}')(r_2-r_2')+m_3(\mathbf{r}')(r_3-r_3')\}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}\right]d\mathbf{r}'$$

$$= -\int_{\mathbf{r}'}\left[\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3} - \frac{3(r_3-r_3')^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}\right]m_3(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' - \int_{\mathbf{r}'} -\frac{3(r_3-r_3')(r_1-r_1')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}m_1(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' - \int_{\mathbf{r}'} -\frac{3(r_3-r_3')(r_2-r_2')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}m_2(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' \quad (2\text{-}7)$$

となる。ここで、$\mathbf{m}(\mathbf{r})$ のフーリエ変換を、

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\tilde{\mathbf{m}}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \quad (2\text{-}8)$$

にて定義すると、

$$\begin{aligned}
&\frac{\delta_{ij}}{r^3} - \frac{3r_ir_j}{r^5} = 4\pi\int\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{k_ik_j}{k^2}\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \\
&\frac{\delta_{ij}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3} - \frac{3(r_i-r_i')(r_j-r_j')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5} = \int 4\pi\frac{k_ik_j}{k^2}\exp\{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&\therefore\ 4\pi\frac{k_ik_j}{k^2} = \int_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'}\left\{\frac{\delta_{ij}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3} - \frac{3(r_i-r_i')(r_j-r_j')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}\right\}\exp\{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\}d(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \\
&\qquad\qquad = \int_{\mathbf{r}'}\left\{\frac{\delta_{ij}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3} - \frac{3(r_i-r_i')(r_j-r_j')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}\right\}\exp\{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\}d\mathbf{r}'
\end{aligned} \quad (2\text{-}9)$$

である（この式の変形については別紙「双極子の計算」を参照されたい）ので、

$$\int_{\mathbf{r}'}\left[\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}-\frac{3(r_1-r_1')^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}\right]m_1(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'$$

$$=\int_{\mathbf{r}'}\left[\int 4\pi\frac{k_1^2}{k^2}\exp\{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\right]\left[\int \tilde{m}_1(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}')\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\right]d\mathbf{r}'$$

$$=\int_{\mathbf{k}}\int_{\mathbf{k}'}4\pi\frac{k_1^2}{k^2}\tilde{m}_1(\mathbf{k}')\left\{\int_{\mathbf{r}'}\exp\{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}'\}d\mathbf{r}'\right\}\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3}$$

$$=\int_{\mathbf{k}}\int_{\mathbf{k}'}4\pi\frac{k_1^2}{k^2}\tilde{m}_1(\mathbf{k}')(2\pi)^3\delta(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3}$$

$$=\int_{\mathbf{k}}4\pi\frac{k_1^2}{k^2}\tilde{m}_1(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}=\int_{\mathbf{k}}4\pi n_1^2\tilde{m}_1(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

および

$$\int_{\mathbf{r}'}\left[-\frac{3(r_1-r_1')(r_2-r_2')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}\right]m_2(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'$$

$$=\int_{\mathbf{r}'}\left[\int 4\pi\frac{k_1k_2}{k^2}\exp\{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\right]\left[\int \tilde{m}_2(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}')\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\right]d\mathbf{r}'$$

$$=\int_{\mathbf{k}}\int_{\mathbf{k}'}4\pi\frac{k_1k_2}{k^2}\tilde{m}_2(\mathbf{k}')\left\{\int_{\mathbf{r}'}\exp\{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}'\}d\mathbf{r}'\right\}\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3}$$

$$=\int_{\mathbf{k}}\int_{\mathbf{k}'}4\pi\frac{k_1k_2}{k^2}\tilde{m}_2(\mathbf{k}')(2\pi)^3\delta(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3}$$

$$=\int_{\mathbf{k}}4\pi n_1n_2\tilde{m}_2(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

から、

$$\begin{aligned}
h_1^d(\mathbf{r})&=-\int_{\mathbf{r}'}\left[\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}-\frac{3(r_1-r_1')^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}\right]m_1(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'-\int_{\mathbf{r}'}-\frac{3(r_1-r_1')\,(r_2-r_2')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}m_2(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'-\int_{\mathbf{r}'}-\frac{3(r_1-r_1')(r_3-r_3')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}m_3(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'\\
&=-4\pi\int_{\mathbf{k}}\{n_1n_1\tilde{m}_1(\mathbf{k})+n_1n_2\tilde{m}_2(\mathbf{k})+n_1n_3\tilde{m}_3(\mathbf{k})\}\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\\
h_2^d(\mathbf{r})&=-\int_{\mathbf{r}'}-\frac{3(r_2-r_2')(r_1-r_1')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}m_1(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'-\int_{\mathbf{r}'}\left[\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}-\frac{3(r_2-r_2')^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}\right]m_2(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'-\int_{\mathbf{r}'}-\frac{3(r_2-r_2')(r_3-r_3')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}m_3(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'\\
&=-4\pi\int_{\mathbf{k}}\{n_2n_1\tilde{m}_1(\mathbf{k})+n_2n_2\tilde{m}_2(\mathbf{k})+n_2n_3\tilde{m}_3(\mathbf{k})\}\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\\
h_3^d(\mathbf{r})&=-\int_{\mathbf{r}'}-\frac{3(r_3-r_3')(r_1-r_1')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}m_1(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'-\int_{\mathbf{r}'}-\frac{3(r_3-r_3')(r_2-r_2')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}m_2(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'-\int_{\mathbf{r}'}\left[\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}-\frac{3(r_3-r_3')^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5}\right]m_3(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'\\
&=-4\pi\int_{\mathbf{k}}\{n_3n_1\tilde{m}_1(\mathbf{k})+n_3n_2\tilde{m}_2(\mathbf{k})+n_3n_3\tilde{m}_3(\mathbf{k})\}\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}
\end{aligned}\tag{2-10}$$

を得る。つまり、FFT によって $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ から $\tilde{\mathbf{m}}(\mathbf{k})$ を数値計算し、これに n_in_j をかけ、その後、逆フーリエ変換をすることによって、$\mathbf{h}_d(\mathbf{r})$ を求めることが出来る(-4π を忘れないように)。

３．有効磁場の定式化

有効磁場$\mathbf{h}_{eff}(\mathbf{r},t)$は、ベクトル場であり、

$$\mathbf{h}^{eff}(\mathbf{r},t) = -\frac{\delta E_{total}}{\delta \mathbf{m}(\mathbf{r},t)}$$

$$(h_1^{eff}(\mathbf{r},t), h_2^{eff}(\mathbf{r},t), h_3^{eff}(\mathbf{r},t)) = \left(-\frac{\delta E_{total}}{\delta m_1(\mathbf{r},t)}, -\frac{\delta E_{total}}{\delta m_2(\mathbf{r},t)}, -\frac{\delta E_{total}}{\delta m_3(\mathbf{r},t)}\right)$$

にて定義されるので、

$$E_{total} = E_{ext} + E_{exch} + E_{an} + E_d$$

$$\frac{\delta E_{total}}{\delta \mathbf{m}(\mathbf{r},t)} = \frac{\delta E_{ext}}{\delta \mathbf{m}(\mathbf{r},t)} + \frac{\delta E_{exch}}{\delta \mathbf{m}(\mathbf{r},t)} + \frac{\delta E_{an}}{\delta \mathbf{m}(\mathbf{r},t)} + \frac{\delta E_d}{\delta \mathbf{m}(\mathbf{r},t)}$$
$$= -K_d \mathbf{h}_{ext}(\mathbf{r}) - 2A\Delta\mathbf{m}(\mathbf{r}) - 2K_u \mathbf{e}_{uan}(\mathbf{m}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{e}_{uan}) - K_d \mathbf{h}_d(\mathbf{r})$$

より、

$$\mathbf{h}^{eff}(\mathbf{r},t) = -\frac{\delta E_{total}}{\delta \mathbf{m}(\mathbf{r},t)} = K_d \mathbf{h}_{ext}(\mathbf{r}) + 2A\Delta\mathbf{m}(\mathbf{r}) + 2K_u \mathbf{e}_{uan}(\mathbf{m}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{e}_{uan}) + K_d \mathbf{h}_d(\mathbf{r}) \tag{14}$$

となる。なお

$$\begin{aligned}\mathbf{e}_{uan}(\mathbf{m}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{e}_{uan}) &= \mathbf{e}_{uan}\{m_1(\mathbf{r})\cdot e_1^{uan} + m_2(\mathbf{r})\cdot e_2^{uan} + m_3(\mathbf{r})\cdot e_3^{uan}\} \\ &= \{m_1(\mathbf{r})\cdot e_1^{uan} + m_2(\mathbf{r})\cdot e_2^{uan} + m_3(\mathbf{r})\cdot e_3^{uan}\}\left(e_1^{uan} \quad e_2^{uan} \quad e_3^{uan}\right)\end{aligned} \tag{15}$$

である。

５．各パラメータの設定

まず、単位換算についてまとめておく。

μ_0 ：
$$\frac{[\mathrm{Wb/m^2}]}{[\mathrm{A/m}]} = \frac{[\mathrm{Wb/A}]}{[\mathrm{m}]} = [\mathrm{H/m}] = \frac{[\mathrm{Wb^2}]}{[\mathrm{N\cdot m^2}]} = [\mathrm{N/A^2}]$$
$$[\mathrm{H}] = [\mathrm{Wb/A}]$$

$B = \mu_0 H$ ： $[\mathrm{Wb/m^2}]=[\mathrm{Wb^2/(N\cdot m^2)}][\mathrm{N/Wb}]=\mathrm{T}=[\mathrm{N/A^2}][\mathrm{A/m}]=[\mathrm{N/(A\cdot m)}]$

B^2/μ_0
$(I^2/\mu_0, M^2/\mu_0)$ ：
$$\frac{[\mathrm{Wb/m^2}][\mathrm{Wb/m^2}]}{[\mathrm{H/m}]} = \frac{[\mathrm{Wb/m^2}][\mathrm{Wb/m^2}]}{\dfrac{[\mathrm{Wb^2}]}{[\mathrm{N\cdot m^2}]}} = \frac{[\mathrm{N\cdot m^2}]}{[\mathrm{m^4}]} = \frac{[\mathrm{N}]}{[\mathrm{m^2}]} = [\mathrm{J/m^3}]$$

I : 1G=10^{-4}T
H : 1Oe=$10^3/(4\pi)$A/m

IH :1G Oe=(10^{-4}T)(10^3/(4π)[A/m]) =1/(40π) [T・A/m]
= 1/(40π) [N/(A・m)][A/m]=1/(40π) [J/m^3]=7.958x10-3[J/m^3]
40π[G Oe]=1 [T・A/m]=1 [J/m^3]

電磁単位系との換算

$$1\mathrm{emu/cm}^2 = \frac{4\pi}{10^4}\mathrm{Wb/m}^2, \quad \left(1\mathrm{emu}\cdot\mathrm{cm/cm}^3 = \frac{4\pi}{10^4}\mathrm{Wb}\cdot\mathrm{m/m}^3\right)$$

さて物質パラメータは、K_d, A, K_u である。個々の値は、

FePt(L1$_0$)の場合

$$K_d = M_s^2/\mu_0(\mathrm{J/m}^3) = 1.273\times 10^5(\mathrm{J/m}^3), \quad M_s = 0.4(\mathrm{T}), \quad \mu_0 = 4\pi\times 10^{-7}(\mathrm{H/m}), \quad (\mathrm{T}^2/(\mathrm{H/m})=\mathrm{J/m}^3)$$
$$A = \qquad (\mathrm{J}\cdot\mathrm{m}^2/\mathrm{m}^3=\mathrm{J/m})$$
$$K_u = 7\times 10^6(\mathrm{J/m}^3)$$

である。
Fe の場合、磁壁エネルギーはおよそ $4\times 10^{-3}[\mathrm{J/m}^2]$ で、磁壁幅は $5\times 10^{-8}[\mathrm{m}]$ である。

また始めに設定する境界条件は $\mathbf{H}_{ext}(\mathbf{r})$ と $\mathbf{e}_{uan}(\mathbf{r})$ である。$\mathbf{H}_{ext}(\mathbf{r})$ は通常空間的に一様に設定され（つまり $\mathbf{r}$ 依存性なし）、$\mathbf{H}_{ext}(\mathbf{r}) = (H_1^{ext}, H_2^{ext}, H_3^{ext})$ と置かれる。ここでは、

$$\mathbf{H}_{ext}(\mathbf{r}) = (H_1^{ext}, 0, 0), \quad h_1^{ext} = 15(\mathrm{kOe})$$

と置く。A/m に単位換算すると、H=15kOe=15000x10^3/(4π)A/m=1.194x10^6 A/m である。外部磁場は、$\mathbf{h} = \mathbf{H}/(M_S/\mu_0)$ によって無次元化する。すなわち、

$$h_1^{ext} = \frac{H_1^{ext}}{M_S/\mu_0} = \frac{\mu_0 H_1^{ext}}{M_S} = \frac{4\pi\times 15000\times 10^{-7}\times 10^3/(4\pi)}{0.4} = \frac{1.5}{0.4} = 3.75$$

である。次に $\mathbf{e}_{uan}$ は磁気異方性の方向であるから、ヘテロ組織を考える場合、場所の関数となり（例えば c 軸の方向）、

$$\mathbf{e}_{uan}(\mathbf{r}) = (e_1^{uan}(\mathbf{r}), e_2^{uan}(\mathbf{r}), e_3^{uan}(\mathbf{r}))$$

と置く。重要な点は、この変数が Phase-field 変数から決まる（例えば、Phase-field 変数が結晶方位を表している場合、位置 $\mathbf{r}$ によって c 軸はどちらを向いているかの情報は、Phase-field 変数から得られる。すなわち、Phase-field 自体が本解析の境界条件を与えているのである。）。
速度定数は、γ_0 と α_0 の 2 つである。近似的式

$$16\tau^2\omega_0^2\alpha_0^2 = 1, \quad \omega_0 = \gamma_0 h_1^{ext}$$
$$\to 4\tau\omega_0\alpha_0 = 4\tau\gamma_0 h_1^{ext}\alpha_0 = 1, \quad \therefore\ \alpha_0 = \frac{1}{4\tau\gamma_0 h_1^{ext}}$$

の関係を用いる。γ_0を用いて時間を無次元化するので$\gamma_0 = 1$となり、緩和時間τを設定すればα_0が求まる。すなわち、

$$\alpha_0 = \frac{1}{4\tau\gamma_0 h_1^{ext}} = \frac{1}{4\tau \times 3.75} = \frac{1}{15\tau}$$

である。
*** 参考 **
Co の場合

$K_d = M_s^2 / \mu_0$, $M_s = 0.43\text{(T)}$, $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}\,\text{(H/m)}$

$A = 1.0 \times 10^{-11}\,(\text{J} \cdot \text{m}^2/\text{m}^3 = \text{J/m})$

$K_u = 2.2 \times 10^5\,(\text{J/m}^3)$

$\mathbf{h}_{ext}(\mathbf{r}) = (h_1^{ext}, 0, 0)$, $h_1^{ext} = 255\text{(kA/m)}$等
****