

LLG 方程（铁磁体）:

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = -\frac{\gamma}{M_s} \mathbf{m} \times \left(-\frac{\partial \hat{H}}{\partial \mathbf{m}} + \alpha \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} \right)$$

式中 γ 为旋磁比，单位 $\text{s}^{-1} \text{T}^{-1}$ ，一般为 $10^{11} \text{s}^{-1} \text{T}^{-1}$ ， M_s 为饱和磁化强度，单位 A m^{-1} ， \hat{H} 为单
位体积的哈密顿量，单位 J m^{-3} ， α 为 Gibrert 阻尼常数，无量纲， \mathbf{m} 为约化磁矩，方向和磁
矩方向相同，模为 1。一般来说 \hat{H} 的形式为

$$\hat{H} = K \sum_i m_{i,z}^2 + J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j$$

式中 K 和 J 分别为各向异性能和交换相互作用能，它们的单位都是 J m^{-3} 。因此通过观察上
面两个式子，我们可以发现，只要知道材料参数的旋磁比，饱和磁化强度，各向异性能，交
换相互作用能，就能计算出磁矩的动力学演化过程。但是由于国际上没有一个表示各向异性
能和交换相互作用能的确切定义，导致在文献中出现用不同单位的物理量来表示材料的这两
个性质，常见的单位有(1) A m^{-1} , (2) J m^{-1} , (3) erg cm^{-3} , (4) meV , (5) J m^{-3} ，其中我们想要
的是第(5)中单位表示的数值，下面我将给出如何将前四个单位的数值转化为第五个单位的数
值：

$$(1) \rightarrow (5) \mu_0 M_s A_{(1)} = A_{(5)}$$

$$(2) \rightarrow (5) A_{(2)} / a^2 = A_{(5)}$$

$$(3) \rightarrow (5) 0.1 A_{(1)} = A_{(5)}$$

$$(4) \rightarrow (5) A_{(1)} / a^3 = A_{(5)}$$

式中 a 是材料的晶格常数。

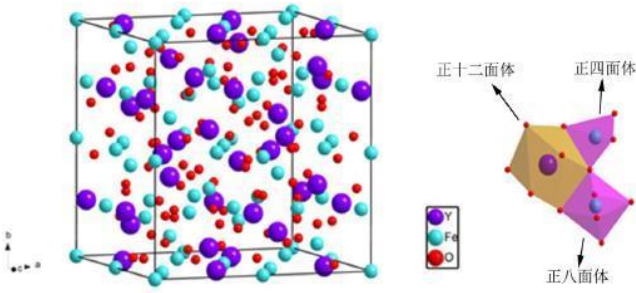
同时我们也注意到，对于反铁磁体，饱和磁化强度接近零，此时 LLG 方程应写成单个磁矩
的形式

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = -\frac{\gamma}{\mu_s} \mathbf{m} \times \left(-\frac{\partial \hat{H}_s}{\partial \mathbf{m}} + \alpha \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} \right)$$

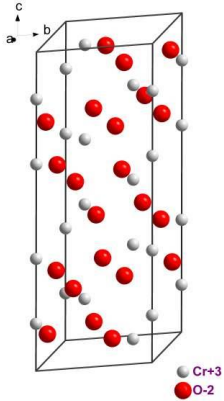
式中 μ_s 为单个磁性原子的磁矩，单位 A m^2 ， \hat{H}_s 为单个磁性原子的哈密顿量，单位 J 。这时我
们要将前文所述的五种单位的数值转化为以 J 为单位的数值，这一过程很简单，只需要按照
之前的步骤转化为 J m^{-3} 的数值之后再乘以单个晶胞的体积就行了。

下面给出常见的一些磁性材料的磁性参数。

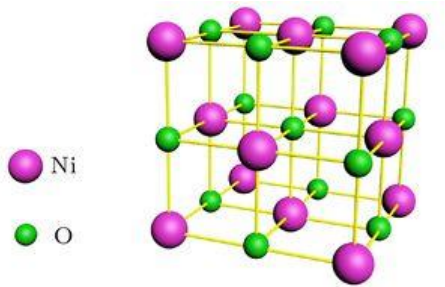
Yttrium Iron Garnet (YIG), $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$

各向异性能 K	$0.388 \times 10^5 \text{ A m}^{-1}$ (10.1103/PhysRevLett.107.177207)
交换相互作用能 A	$0.4 \times 10^{-11} \text{ J m}^{-1}$ (10.1103/PhysRevLett.107.177207)
饱和磁化强度 M_s	$0.194 \times 10^6 \text{ A m}^{-1}$ (10.1103/PhysRevLett.107.177207)
Gilbert 阻尼常数 α	6×10^{-4} (10.1103/RevModPhys.90.015005) 10^{-5} (10.1103/PhysRevLett.107.177207)
居里温度 T_c	553 K (10.1103/PhysRevX.4.041023)
晶格结构	<p>bcc $a=12.376 \text{ \AA}$ (yig 晶体的晶格常数 - 百度文库 (baidu.com))</p> 
旋磁比 γ	$2.21 \times 10^5 \text{ A m}^{-1} \text{ s}^{-1}$ (10.1103/PhysRevLett.107.177207)

Cr₂O₃

各向异性能 K	$2 \times 10^5 \text{ erg cm}^{-3}$ (10.1016/0375-9601(69)90243-6)
交换相互作用能 A	15 meV (10.1063/1.4865780)
Gilbert 阻尼常数 α	4×10^{-4} (10.1103/RevModPhys.90.015005)
奈尔温度 T_N	523 K (10.1143/JPSJ.13.579)
晶格结构	<p>三方晶系</p> <p>$a=b=4.96 \text{ \AA}$, $c=13.17 \text{ \AA}$ (氧化铬晶体结构 - 百度文库 (baidu.com))</p> 

NiO

各向异性能 K	$0.92 \times 10^6 \text{ erg cm}^{-3} = 0.92 \times 10^5 \text{ J m}^{-3}$ (10.1063/1.4750026)
交换相互作用能 A	1.37 meV (Phd: NiO 及相关体系的奇异物性)
Gilbert 阻尼常数 α	1.8×10^{-3} (10.1103/RevModPhys.90.015005)
居里温度 T_c	307 K (三氧化二铬 - 维基百科，自由的百科全书 (wikipedia.org))
晶格结构	fcc $Fm\bar{3}m$ $a = 4.19 \text{ \AA}$ (mp-19009: NiO (Cubic, Fm-3m, 225) (materialsproject.org)) 
带隙 ΔE	4 eV (Phd: 基于氧化镍空穴传输层的反式钙钛矿太阳能电池研究)
磁矩	$1.14 \mu_B$ (Phd: NiO 及相关体系的奇异物性)

CoFeB

各向异性能 K	0.85 T (10.1103/PhysRevApplied.9.064005)
饱和磁化强度 M_s	1.3×10^6 A m ⁻¹ (10.1103/PhysRevApplied.9.064005)
Gilbert 阻尼常数 α	0.015 (10.1103/PhysRevApplied.10.044057)

α -Fe₂O₃

奈尔温度 T_N	960 K (10.1103/PhysRevLett.130.096701)
Gilbert 阻尼常数 α	10-5 (10.1103/PhysRevLett.130.096701)