

位相的データ解析を用いた強磁性形状記憶合金 における自由エネルギー推定

仙井 遼平¹, Alexandre Lira Foggiatto¹, 小嗣 真人¹

(東京理科大学¹)

Prediction of free energy in ferromagnetic shape memory alloy by using topological data analysis

Ryohei Seni¹, Alexandre Lira Foggiatto¹, Masato Kotsugi¹

(Tokyo Univ. of Sci.¹)

はじめに

近年、IoTの急速な普及に伴い、デバイスの電源を安定的に確保する方法として注目されているのが、強磁性体形状記憶合金(FSMA)の磁歪を用いた環境発電である^[1]。FSMAはマルテンサイト変態によるマルチバリエーション組織を有しており金属組織と磁区構造の間には複雑な自由エネルギーのやりとりがあるため、微視的な組織構造と巨視的な機械的特性の対応関係は未だ完全に明らかにされていない。

そこで我々は位相的データ解析を用いて微視的な磁区構造と巨視的な弾性ひずみの対応関係を構築することを試みた。パーシステントホモロジー(PH)は上記の微細組織の特徴抽出をする上で有用な手法である^[2]。また本研究では弾性ひずみの背後にある弾性エネルギーに対し、教師なし学習による推定を試みた。

実験方法

研究ではFePdの磁区構造をLandau-Lifshitz-Gilbert(LLG)方程式で、マルテンサイト組織を時間依存のGinzburg-Landau(TDGL)方程式によって計算し、内部応力を共有することで、FSMAのマルチバリエーションと磁区構造を計算した(Fig. 1)^[3]。得られた磁区構造は実際に観察されたFe-31.2at%Pdの磁区と近い構造を有しており^[4]、妥当な計算結果と考えられる。得られた磁区構造に対してPHを適用し、パーシステンス図の主成分分析(PCA)を行った。

実験結果

第一主成分と磁気弾性エネルギーの間には相関があることが分かった(Fig. 2)。また他のエネルギー項についても、同様に正の相関があることが分かった。これによって磁区構造の幾何学的情報のみから内在する全エネルギー項の推定が可能であることが示唆された。

参考文献

- [1] T.Ueno, *Journal of Applied Physics* **117** (2015), 17A740.
- [2] T. Yamada, et al. *J. Vac. Surf. Sci.* **62**, (2019), 153.
- [3] Li, L. J., et al. *Acta Materialia* **59** (2011), 2648-2655.
- [4] Y.Murakami, et al. *Acta Materialia* **54** (2006), 1233-1239.

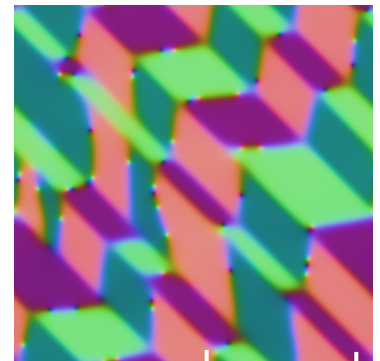


Fig.1 The magnetic domain structure simulated by LLG equation.

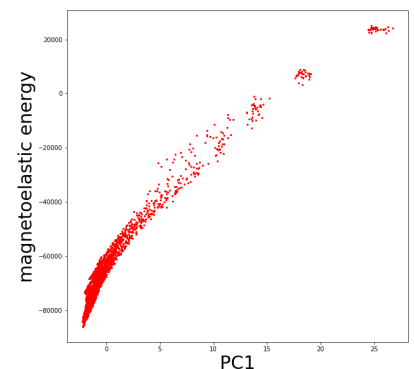


Fig.2 The plot diagram of first principal component (PC1) vs magnetoelastic energy

位相的データ解析を用いた磁化反転過程における

拡張型ランダウ自由エネルギー地形の描画

國井創太郎、Alexandre Lira Fogiatto、三俣千春、小嗣真人
(東理大基礎工、物質・材料研究機構)

Drawing of Extended-Landau free energy in magnetic reversal process using
Topological data analysis

Sotaro Kunii, Alexandre Lira Fogiatto, Chiharu Mitsumata, Masato Kotsugi
(Tokyo Univ. of Science, NIMS)

はじめに

電気自動車の急速な普及 (EV シフト) を背景に、モータのエネルギー変換効率の向上が求められている。モータでは軟磁性材料の保磁力の抑制が求められており、保磁力を決定付ける磁化反転現象の理解は極めて重要である。磁化反転は自由エネルギー地形の鞍点によって特徴づけられ、伝統的には磁化と外部磁場を説明変数とするランダウ理論が広く知られている。その一方、ランダウ理論では平均場を仮定しているため、磁化分布の空間不均一性を取り扱うことが困難であり、実材料の磁化反転現象を説明することは困難であった。そこで本研究では、Persistent homology (PH) を用いて磁区構造の形状を特徴抽出し、得られた特徴量を説明変数とする新たなモデル「拡張型ランダウ自由エネルギー地形」を描画した。特に、磁化分布の不均一性を取り扱え、磁化反転挙動の説明が可能なモデルを教師なし機械学習によって定めた。

実験方法

実験は、LLG 方程式を用いて、異なる位置に点欠陥を持つパーマロイ薄膜の正方形の系に対してシミュレーションを行った。磁区画像は PH 解析を行い、Persistence Diagram (PD) を出力し特徴抽出を行った。教師なし機械学習は多次元尺度構成法 (MDS) を用い、2次元に次元削減を行った。

実験結果

Fig.1 に中央に 10 px の正方形の欠陥を入れた、シミュレーションで生成された前駆現象の z 成分の磁区画像 (左) と対応する 0 次元の PD (右) を示した。PD では、z 成分への漏れ磁場による欠陥周囲の磁化の変化及びブロッホ磁壁、磁化の回転を特徴抽出した。

Fig.2 に MDS で得られた散布図を示す。静磁エネルギーと交換エネルギーを合計した自由エネルギーは、中央から円錐状に連続的に分布することが確認できた。また、飽和磁化領域のデータ点は中心に集中し、磁化反転に伴い中心から外側に移動し、保磁力近傍では中心から大きく離れた領域に円周上に分布することが確認できた。MDS におけるデータ間の距離は形の違いを反映するため、本図では磁区構造変化と自由エネルギーの変化を同時に表現できたと示唆される。

参考文献

- 1) A. Vansteenkiste *et al.*, AIP Advances **4**, 107133 (2014)
- 2) T. Yamada and M. Kotsugi *et al.*, Vac. Surf. Sci. **62**, (2019) 153
- 3) I. Obayashi, Y. Hiraoka, and M. Kimura J. Appl. Comp. Topo. **1** (2018) 421-449

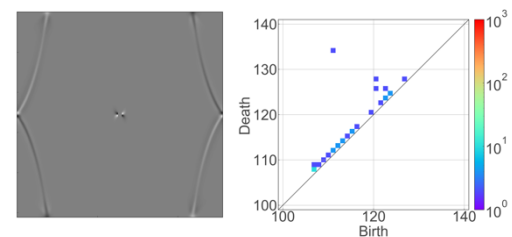


Fig.1 Generated magnetic domain image(left) and PD(right)

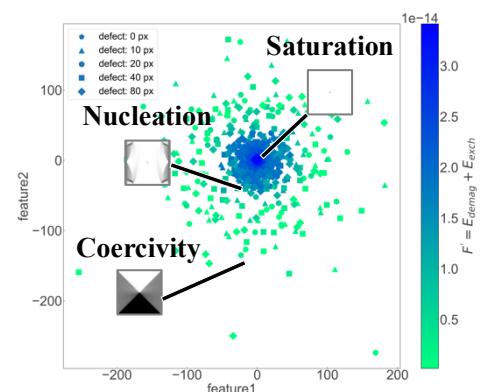


Fig.2 Scatter plot using MDS (dots show magnitude of sum of exchange and demagnetization energy)

磁気光学測定によるコバルトフェライト薄膜の局所歪みの評価

王 世浩、西川 雅美、石橋 隆幸
(長岡技科大)

Characterization of local structure in cobalt ferrite thin films by magneto-optical spectroscopy
Shihao Wang, Masami Nishikawa, Takayuki Ishibashi
(Nagaoka Univ. of Tech.)

コバルトフェライト(CFO)薄膜は正方歪みを導入することにより、大きな垂直磁気異方性を示す。この原因は、 Co^{2+} を含む8面体の歪みが原因と考えられている²⁾。しかし、磁気異方性増大のメカニズムに関して局所的な歪みとの関係は、これまで実験的に明らかになっていない。そこで本研究では、歪みの異なるCFO薄膜³⁾について、可視から近赤外領域の磁気光学スペクトルを測定し、 Co^{2+} に関連した光学遷移について調査を行った。

CFO薄膜は、有機金属分解(MOD)法を用いて作製した。ガラス基板へMOD溶液($\text{CoFe-O4}(1:2)$)、(株)高純度化学研究所)をスピコートにより塗布(3000 rpm, 30 sec)し、乾燥(100°C, 10 min)をホットプレートで行った。その後、管状炉を用いて仮焼成(T_{pre} :310~350°C, 30 min)および本焼成(730°C, 10 h; N_2 流量:400 mL/min)を行った。磁気光学スペクトルの測定は、円偏光変調法を用いたマルチチャンネル磁気光学スペクトロメーター⁴⁾を使用した。測定の本波長範囲は350~2100 nmとした。

Fig.1にCFO薄膜のFaraday楕円率スペクトルを示す。すべての試料について、400~900 nmの波長範囲に $\text{Co}^{2+}(\text{Oh})\text{-Fe}^{3+}(\text{Oh})$ 電荷移動遷移(CT遷移)と $\text{Co}^{2+}(\text{Td})^4\text{A}_2\text{-}^4\text{T}_1(\text{P})$ 結晶場遷移(d-d遷移)が重畳した信号と1300~1700 nmに $\text{Co}^{2+}(\text{Td})^4\text{A}_2\text{-}^4\text{T}_1(\text{F})$ d-d遷移による信号が観察された。また、仮焼成温度が異なると、400~900 nmのスペクトル構造が大きく変化した。一方、1300~1700 nmの $\text{Co}^{2+}(\text{Td})$ のd-d遷移は、仮焼成温度の変化に対して変化しないため、400~900 nm範囲における変化は $\text{Co}^{2+}(\text{Oh})\text{-Fe}^{3+}(\text{Oh})$ CT遷移による信号強度が変化したものと考えられる。

Fig.2にCFO薄膜の仮焼成温度と面外方向の格子定数および540 nmにおけるファラデー楕円率の関係を示す。このグラフから、格子定数は仮焼成温度が高くなると、格子定数が小さくなり、340°Cの時に最低となり、350°Cでは少し大きくなっている。楕円率の大きさにも同じ傾向が見られたため、CFO薄膜に生じた歪みと楕円率の大きさとの間に相関があることが示唆された。

本研究の一部は、JST委託研究「電子論に基づいたフェライト磁石の高磁気異方性化指針の確立」の助成を受けて行われた。

参考文献

- 1) T. Niizeki et al., Appl. Phys. Lett., 103(16), 2013, 162407.
- 2) J. Inoue, H. Yanagihara, E. Kita. Mat. Res. Exp., 1(4), 2014, 046106.
- 3) K. Yasuda, M. Nishikawa, T. Ishibashi, Jpn. J. Appl. Phys., 59(SE), 2019, SEEA01.
- 4) S. Wang et al., Jpn. J. Appl. Phys., 59(SE), 2019, SEEA02.

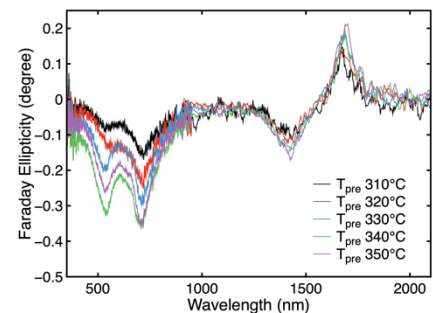


Fig.1 Faraday ellipticity spectra of CFO thin films.

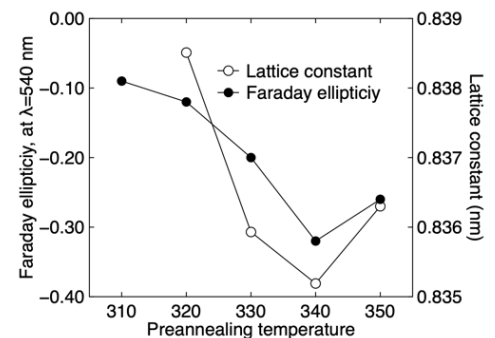


Fig.2 Faraday ellipticity at 540 nm and lattice constant of CFO thin films.

ナノワイヤーAg/Bi:YIG 複合構造体におけるファラデー効果の FDTD シミュレーション

Ilham Surya Priasmoro, 高田一紀, Nanda Aulia Rahma, 水戸慎一郎*, 後藤太一, 中村雄一, P. B. Lim, 井上光輝**, 内田裕久
(豊橋技科大, *東京高専, **高専機構)

FDTD simulation of the Faraday effect on nanowire Ag / Bi: YIG composite structure
S. P. Ilham, K. Takada, A. R. Nanda, S. Mito*, T. Goto, Y. Nakamura, P. B. Lim, M. Inoue**, H. Uchida
(Toyohashi Univ. of Tech., *NIT, Tokyo College, **National Institute of Technology)

はじめに

ビスマス置換イットリウム鉄ガーネット(Bi:YIG)は強い磁気光学効果と高い透過率を備えた、磁気光学用途に適した材料である。しかし Bi:YIG はファラデー回転角がそれほど大きくないため、大きな回転角を得るためには厚い材料が必要になる。よって薄膜の磁気光学デバイスでは利用できる角度に制限がある。これを解決する1つの方法は貴金属粒子で発生する局在型表面プラズモン共鳴を利用することである。しかしファラデー回転角の増加が得られるが透過率が低くなってしまいうという欠点があった。したがって、本研究では、この欠点を克服することを目的として、断面が長方形のナノワイヤーAg/Bi:YIG 複合構造体について FDTD シミュレーションを用いて透過率が高く、ファラデー回転角が大きくなる構造について考察する。

磁気光学応答の FDTD シミュレーション

シミュレーションで用いた構造のモデルを Fig. 1 に示す。ナノワイヤーAgの断面は長方形であり、その周囲に Bi:YIG がある複合薄膜である。Bi:YIG の膜厚は 110 nm であり、Ag の断面は幅 85 nm、高さ 110 nm、Ag ナノワイヤーの周期は 340 nm である。垂直に入射する偏光の電界面が x 軸方向と同じ向きを 0 deg. とし、90 deg. (y 軸方向) まで変化させた。

Fig. 2 に計算で求めた(a)透過率と(b)ファラデー回転角のスペクトルを示す。Fig. 2(a)より、どの角度でも 620 nm 以上の波長では高い透過率を示している。また偏光の角度が 40 deg、波長 605 nm のとき、波長 600 nm で透過率 47.5% が得られ、ファラデー回転角は -3.17 deg まで増大した。またこの波長では楕円率が 0.05 deg. とたいへん小さかった。このことから、この構造では、高い透過率と大きなファラデー回転角が得られるだけでなく、透過光もほぼ直線偏光になっている結果が得られた。ファラデー回転角の増大のメカニズムを理解するために、この構造の電界強度分布の解析を行なったところ、この構造では Ag ナノワイヤでの光吸収が起き、局在型表面プラズモン共鳴が発生していることがわかった。

参考文献

- 1) H Uchida et al, J. Phys. D: Applied Physics. 44, No. 6, p.064014. (2011).

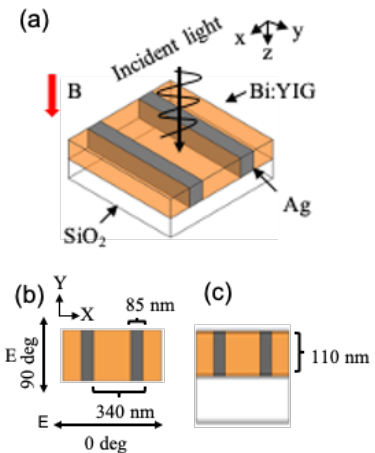


Fig. 1 Model of nanowire Ag / Bi: YIG composite structure (a) 3D view (b) Top view (c) Front view

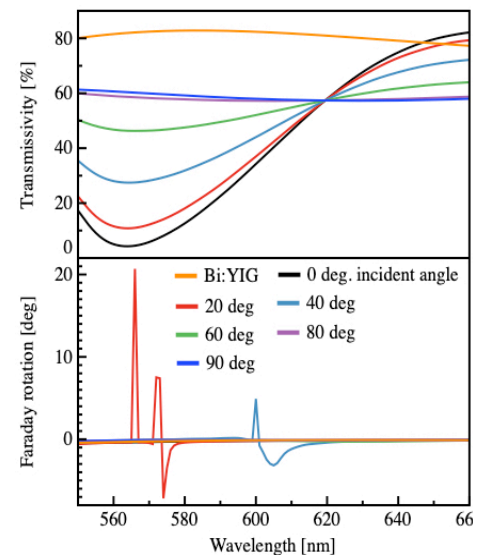


Fig. 2 Calculated transmissivity and Faraday rotation spectra when the angle of the incident polarization plane is changed from 0 to 90 deg.