

TDAによる強磁性体磁区構造形成過程の分析

本武 陽一 統計的機械学習研究センター 特任助教

概要

パターン形成過程の計測や数値計算では、系の第一原理的な素過程における最小単位である、スピンや原子、分子そのものではなく、それらの微小領域における平均値や平均密度・濃度比などを単位とした計測・計算することが多い。そのような構造データは、よくある閾値で2値化して構成したドメイン構造の繋がり方や、ドメイン数といったトポロジカルな特徴量を用いて分析される。一方で、連続値としての場の分布構造には、ドメイン内のゆらぎなどの情報が埋め込まれている可能性がある。パーシステントホモロジーを用いた位相的データ解析を用いることで、アモルファスのガラス状態をはじめとした非周期的な秩序構造が特徴付けられることが報告されている。パーシステントホモロジーとは、穴の数のようなトポロジカルな構造に、その構造の空間スケールやグレースケール画像の閾値による変化等の情報を付加した不変量のことである。我々は、このパーシステントホモロジーから導かれる特徴量を用いることで、非線形・非平衡なパターン形成過程の分析を試みた。具体的には、高速に変動する外部磁場下の強磁性体の磁区構造形成過程を対象として、そこで発生する磁区構造やその形成過程を分析した。その結果、パーシステントホモロジーから導かれる特徴量で、物性値を高精度で予測できることや、島構造と迷路構造が混合した混合相が生じること、類似した迷路構造を形成する磁区構造形成過程には、不連続に逆磁区が発生する型と連続に逆磁区が発生する型の二通りがあるといった、これまでのTDGLによる磁区形成過程の分析研究では得られなかった知見を得た。

Time dependent Ginzburg Landau equations

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r})}{\partial t} = -\frac{\delta(H_{\text{ani}} + H_J + H_{\text{di}} + H_{\text{ex}})}{\delta \phi(\mathbf{r})}, \quad (1)$$

$$H_{\text{ani}} = \alpha \int d\mathbf{r} \lambda(\mathbf{r}) \left(-\frac{\phi(\mathbf{r})^2}{2} + \frac{\phi(\mathbf{r})^4}{4} \right), \quad (2)$$

$$\lambda(\mathbf{r}) = 1 + \frac{\mu(\mathbf{r})}{4}, \quad (3)$$

ここで、 $\mu(\mathbf{r})$ は平均0分散 σ^2 の正規分布に従う乱数である。また、 $\lambda(\mathbf{r})$ は、結晶構造の欠陥や不純物の存在などに起因した、磁性材料の空間的な不均質性を現している。

$$H_J = \beta \int d\mathbf{r} \frac{|\nabla \phi(\mathbf{r})|^2}{2}, \quad (4)$$

$$H_{\text{di}} = \gamma \int_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|>d} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (5)$$

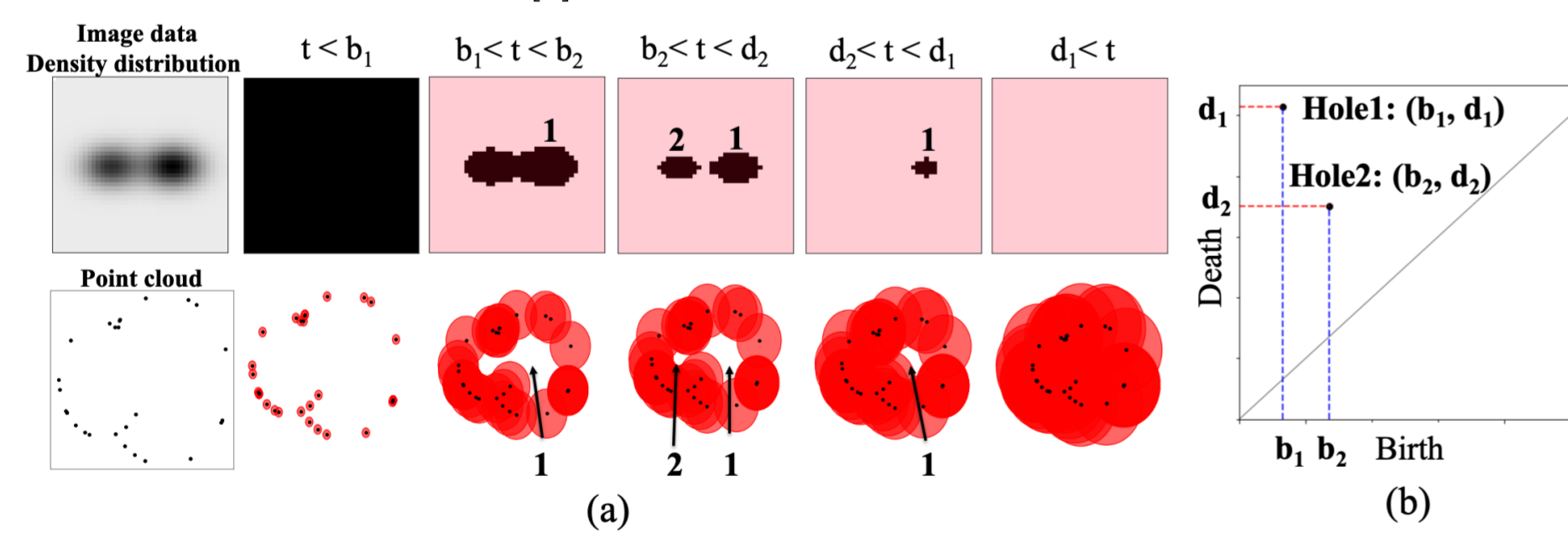
$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}, \quad (6)$$

H_{ex} は外部磁場の効果を表すエネルギー項で、次で与えられる。

$$H_{\text{ex}} = -h(t) \int d\mathbf{r} \phi(\mathbf{r}), \quad (7)$$

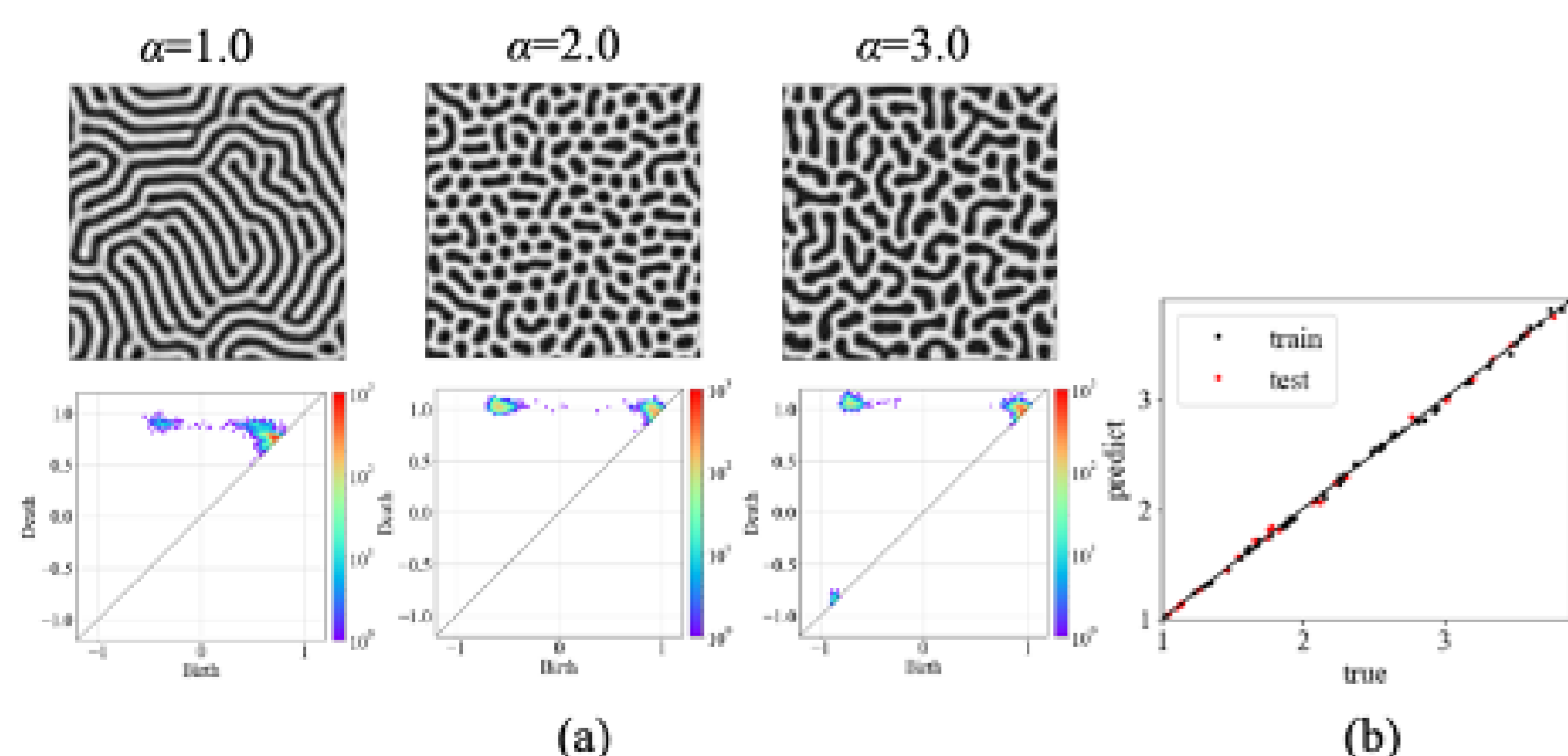
外場は時間 t に依存して $h(t) = 1.5 - vt$ と減少するものとした。

位相的データ分析[1]

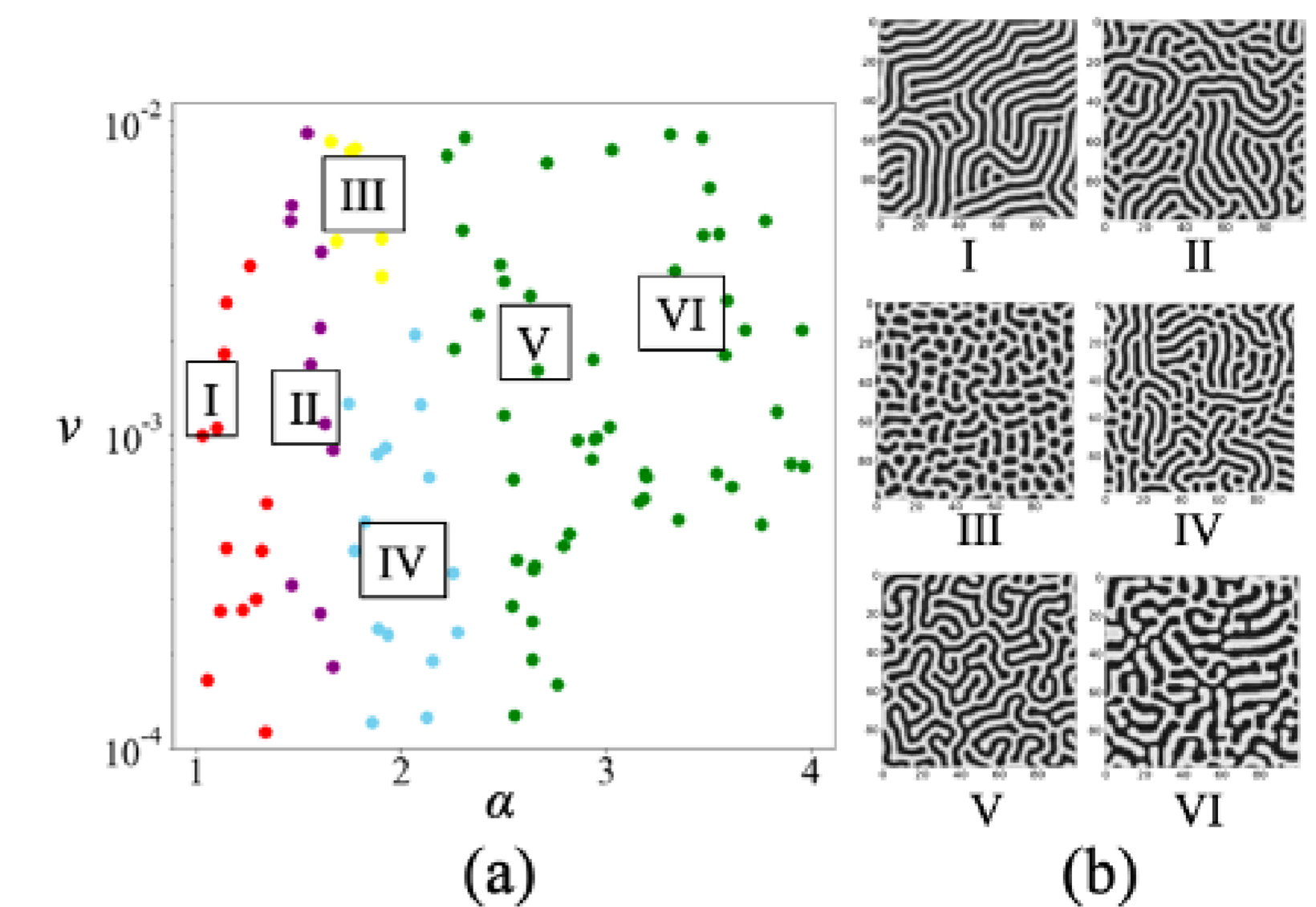


結果

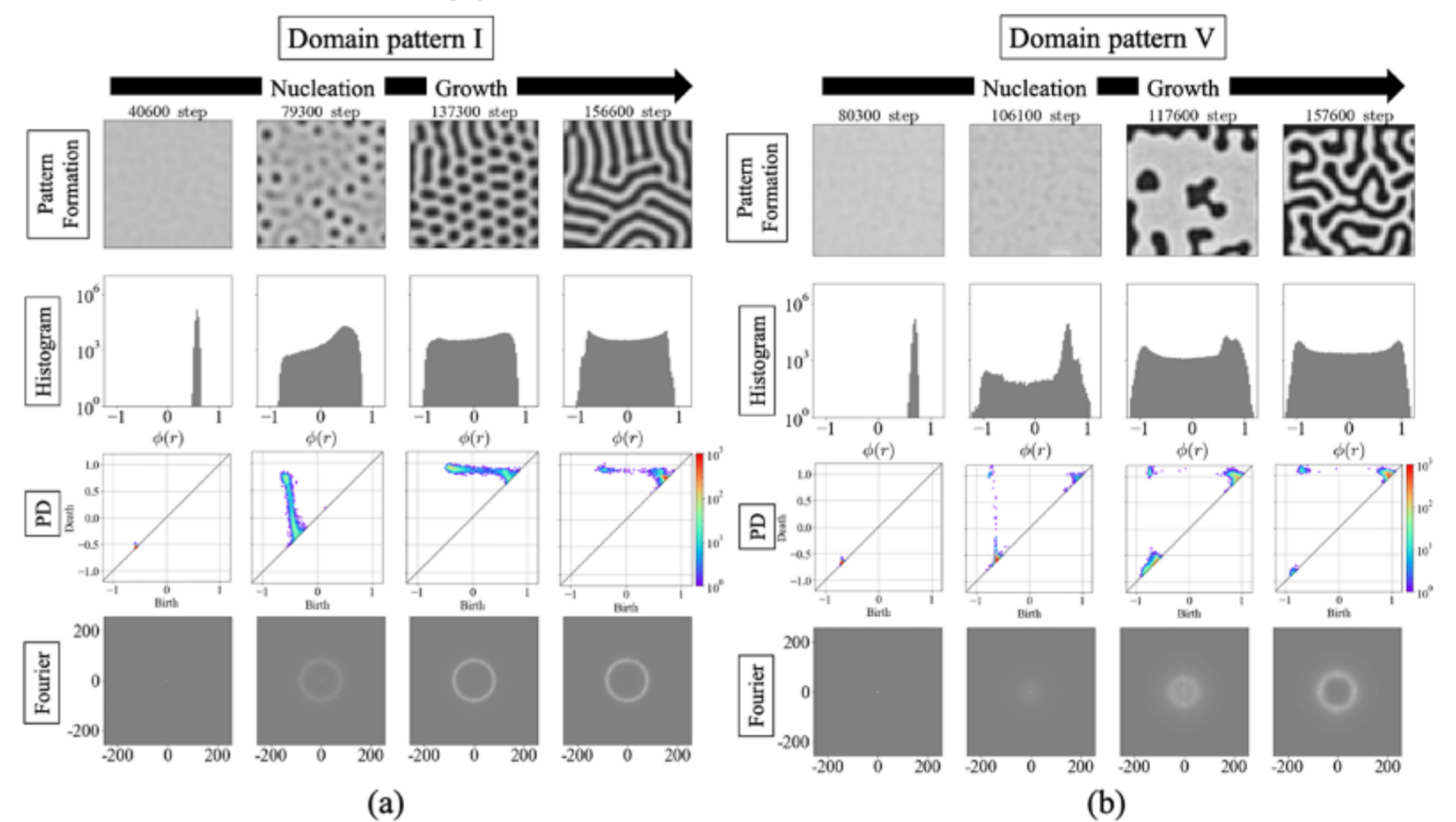
●物性値の予測[1]:



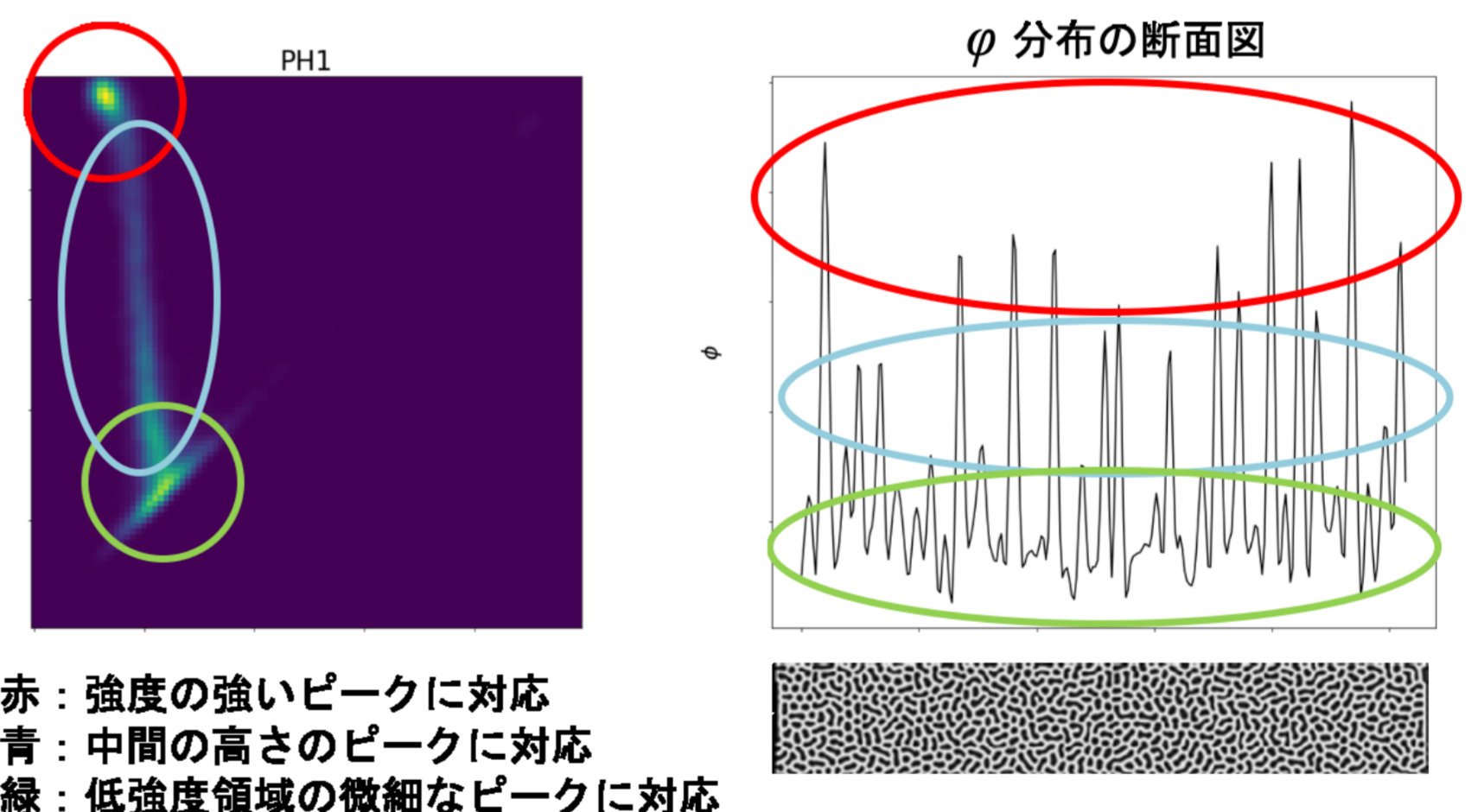
●パーシステントホモロジーによる相図作成[1]:



●磁区構造の時間発展[1]:



●磁区構造の時間発展の急激な遷移:



赤: 強度の強いピークに対応
青: 中間の高さのピークに対応
緑: 低強度領域の微細なピークに対応

まとめと考察

本研究では、 $\phi(\mathbf{r})$ を連続値として扱う位相的な特徴量であるパーシステントホモロジーによって、これまでのTDGLによる磁区形成過程の分析研究では得られなかった次のような知見を得た。

- ドメイン内の強度揺らぎは、物性値 α と強い相関を持つ。
- α の連続的な変化に応じて、磁区構造が迷路構造から島構造、あるいはそれらの混合相に変化し、そして再度迷路構造に戻るような特異な変化をする。
- 類似した迷路構造を形成する磁区構造形成過程には、不連続に逆磁区が発生する型と連続に逆磁区が発生する型の二通りがある。それらの機序は、島構造を形成する α の値を境に急激に遷移する。

<引用文献>

[1] 本武陽一, 水牧仁一郎, 工藤和恵, 福水健次, "位相的データ分析法による材料構造形成過程の分析", スマートプロセス学会誌, 10(3) (2021). [※スマートプロセス学会より転載許諾を取得]