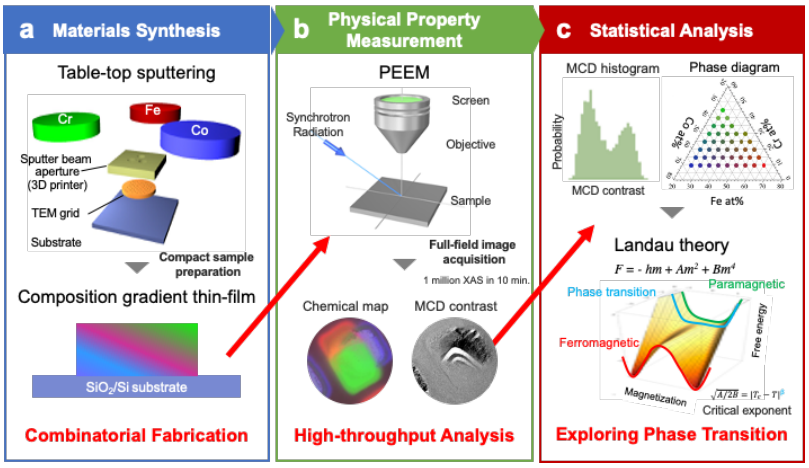
ハイスループット材料合成・計測・統計解析による磁気相転移における臨界指数の導出

Estimation of the critical exponent in magnetic phase transition by high-throughput materials fabrication, characterization, and statistical analysis

東理大 [1], JASRI [2]
○小嗣真人 [1]、西尾直 [1]、山本雅大 [1]、大河内拓雄 [2]
Tokyo Univ. of Sci. [1], JASRI [2],
°Masato Kotsugi, Tadashi Nishio, Masahiro Yamamoto, Takuo Ohkochi
E-mail: kotsugi@rs.tus.ac.jp

マテリアルズインフォマティクス(MI)の発展を背景に、ハイスループットの新規材料探索やプロセス条件の最適化が活発に行われている[1,2]。しかしながら、現状では、合成と計測と解析の連携が不十分なことに加え、相図の網羅的な探索に留まっており、MI による新規材料発見には未だに多くの課題が残されている。

そこで本研究では機能の端緒である相転移の解析に着目し、磁気相転移を特徴づける臨界指数を、合成・計測・解析の連携を通じて定量的に算出したので報告する (図 1)。実験では Fe-Co-Cr 三元合金を対象に[3]、テーブルトップスパッタ装置と放射光光電子顕微鏡とランダウ理論に基づく統計解析を組合わせて、強磁性／常磁性相転移のハイスループット解析を行った。



実験では、斜方蒸着と TEM グリッドの組合わせにより、Fe-Cr-Co 三元系組成傾斜薄膜を簡便に作成することができた。光電子顕微鏡解析の結果、Fe と Co, Cr の組成が薄膜内で連続的に変化し､MCD コントラストの明瞭な変化を確認できた。各ピクセルに記録された MCD コントラストを Fe-Cr-Co 組成比に対して整理・集計し、Fe-Co-Cr 三元系磁気相図を作成した。その結果、得られた相図は強磁性／常磁性相転移、および混和性ギャップと良く一致していることが明らかとなった。さらに MCD ヒストグラムをランダウ理論に基づく擬自由エネルギーを用いてフィッティングした。その結果、臨界指数 β は 0.36 ± 0.028 と見積もられ、先行研究と良く一致する結果が得られた。

[1]Lookman,Turab *et al.*, ”Information Science for Materials Discovery and Design”, Springer cf.3 (2016)
[2]Alfred Ludwig *et al.*, npj Computational Materials (2019)
[3]H.Kaneko,M.Homma,K.Nakamura, AIP Conf. Proc. 5, 1088 (1972)

© 2020年 応用物理学会