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弾性自由エネルギー推定

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

東理大 [1]　○(M1)仙井　遼平 [1], (P)Alexandre Lira Foggiatto[1], 小嗣　真人 [1]

Tokyo Univ. of sci. [1], °Ryohei Seni[1], (P)Alexandre Lira Foggiatto[1], Masato Kotsugi[1]

E-mail: 8220520@ed.tus.ac.jp

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アント組織を有する形状記憶合金として知られており、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。

研究では FePd の磁区構造を Landau–Lifshitz–Gilbert(LLG)方程式によるマイクロマグネティクスシミュレーションで、マルテンサイト組織を時間依存の Ginzburg–Landau(TDGL)方程式によるフェーズフィールドシミュレーションで計算し、内部応力を共有することで、FSMA のマルチバリアント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。その結果、第一主成分と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。

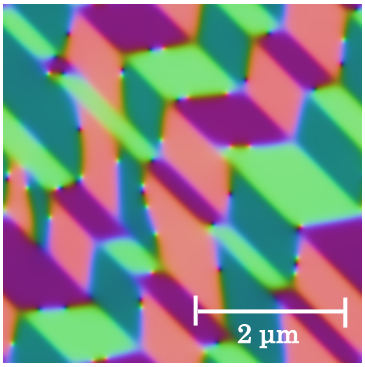

Fig.1 The magnetic domain structure simulated by LLG equation.

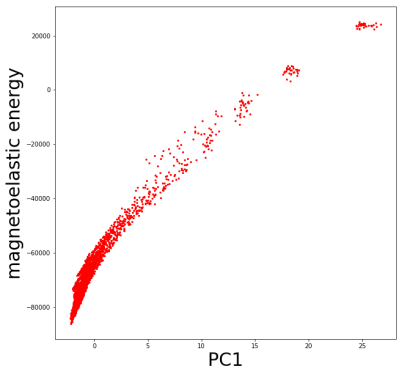

Fig.2 The plot diagram of first principal component (PC1) vs magnetoelastic energy

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.

© 2020年 応用物理学会