

拡張フーリエ像を用いたリバースモンテカルロ法による磁区構造の再構成

時井真紀、喜多英治、三俣千春*、小野寛太**、柳原英人、松本紳
筑波大、*物質・材料研究機構、**高エネルギー加速器研究機構

Reconstruction of magnetic domain structure using Reverse Monte Carlo method with extended Fourier image

M.Tokii, E.Kita, C.Mitsumata*, K.Ono**, H.Yanagihara, M.Matsumoto

Univ. of Tsukuba, *National Institute for Materials Science,

**High Energy Accelerator Research Organization

中性子回折実験において得られた逆格子空間での情報から実空間での磁区構造を再構成することは、磁化過程の解釈に有用である。しかし、位相情報が欠落しているため、磁区構造への再構成は困難である。そこで回折データ分析に広く用いられ、3次元構造モデルの再構築にも利用されているリバースモンテカルロ法^{1,2)}を用いた磁区構造の可視化を試みた。これまで、実空間像として、ストライプ構造や迷路構造を仮定し、リバースモンテカルロ法により、磁区構造の再構成を試みてきた。ボルツマン関数を用いたシミュレーテッドアニールの手法を取り入れることにより逆空間像と一致する磁区構造を得ることはできた。しかし、位相情報の欠落が原因で、磁区構造にずれが生じてしまう結果となった。そこで、逆空間像を拡張することで、実空間の位相のずれを回避する方法をリバースモンテカルロ法に取り入れた。実空間像と逆空間像を拡張した際の関係性から、未知の領域の算出方法を検討した結果、隣接する既知の値の平均を使用することで、Fig.1の計算結果に示すように実空間像における位相のずれを改善することができた。今後、さらに有効な手法を検討する予定である。

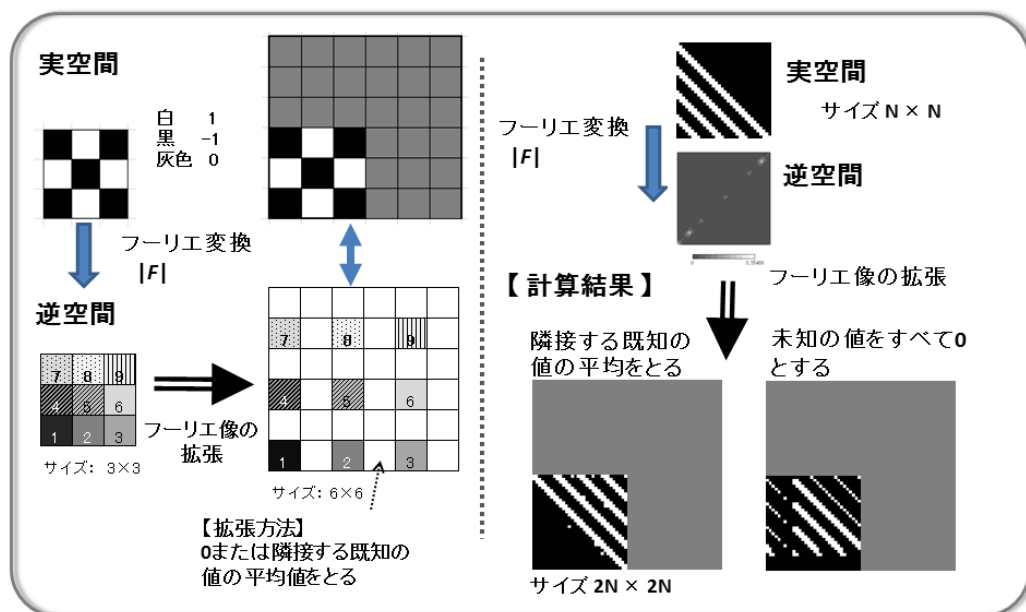


Fig.1 拡張フーリエ像を用いたリバースモンテカルロ法による計算手法と結果

謝辞

本研究は、(独) 科学技術振興機構(JST)による産学共創基礎基盤研究「革新的次世代高性能磁石」の支援を受けて行われたものである。

参考文献

- 1) K.Hagita, H.Okamoto, T. Arai, H.Kishimoto, N.Umesaki, Y.Shinohara, Y.Amemiya, AIP Conf. Proc. 368(2006) .
- 2) O.Gereben, L.Pusztai and R.L.McGreevy, J. Phys.: Condens.Matter, 22, 404216(2010).