

インフォーマティブな磁気構造解析法

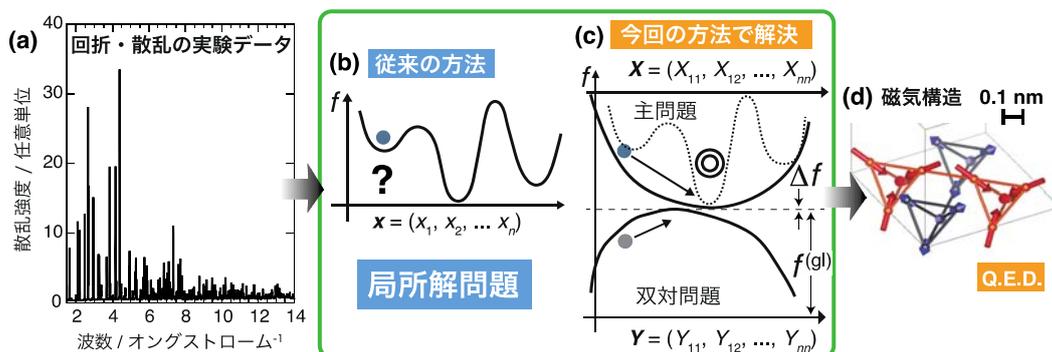
A new mathematical approach to finding global solutions of the magnetic structure determination problem

富安 啓輔・(株) 日産アーク

磁気構造は、結晶構造と並ぶ最重要基本情報であり、磁性材料の磁気特性のみならず、磁気を媒介した熱・圧力・電磁場・光・化学環境等に対する応答など、材料・物質の様々な機能に直結している。

磁気構造は、中性子回折データを測定し、そのデータに最も合致する候補として得られる（磁気構造解析）。しかしながら、最小二乗法をはじめとする従来の解析方法では、与えた候補のうちどれがより良いかの相対的な評価はできるものの、大域解（真に実験データと最も合致する磁気構造）であるという保証が出来なかった。そのため、これまで産業・応用上のターゲットとなるより複雑でパラメータ数の多い材料について磁気構造を解くことは、局所解問題に阻まれ、極めて困難であった。

そこで、研究チームはこの局所解問題の数理科学的解決に取り組んだ [1]。その結果、非線形最適化分野で発展してきた「半正定値計画緩和法」を適用するという手法を着想した。図に概要を示す。さらに、本手法を、酸化物磁性材料に関する実測の粉末中性子回折データに適用し、大域解であることが数学的に証明された磁気構造を実験的に決定するという初の事例を得た。本手法の収束がかなり高速であることも付記する。



図：磁気構造の決定の流れ。(a) 実験データの例。(b)(c) 実験データ解析（最適化問題）の概念図。解析結果が狭い変数領域における最適解にすぎないかもしれないという局所解問題が、今回の方法で解決されることを表す。(d) 得られた磁気構造の例。Q.E.D.は数理科学において証明終了を表す記号である。

[1] K. Tomiyasu, R. Oishi-Tomiyasu, M. Matsuda, and K. Matsuhira: *Sci. Rep.* 8, 16228 (2018) [東北大・山形大よりプレスリリース]. 本成果は、JST さきがけ、科研費基盤(B, S, C)、ISSP と米国 DOE の日米協力事業「中性子散乱」の支援を受けた。