

京都大学教育研究振興財団助成事業
成果報告書

2024年7月26日

公益財団法人京都大学教育研究振興財団
会長 藤 洋作 様

所属部局・研究科 工学研究科

職名・学年 博士後期課程2年

氏名 中井 慎司

助成の種類	令和6年度 ・ 国際研究集会発表助成			
研究集会名	International Conference on Magnetism			
発表形式	<input type="checkbox"/> 招待 ・ <input type="checkbox"/> 口頭 ・ <input checked="" type="checkbox"/> ポスター ・ <input type="checkbox"/> その他()			
発表題目	Effect of local distortion around divalent iron on magnetic anisotropy in M-type ferrite: First-principles calculations			
開催場所	Bologna, Italy			
渡航期間	2024年6月27日 ~ 2024年7月8日			
成果の概要	タイトルは「成果の概要／報告者名」として、A4版2000字程度・和文で作成し、添付して下さい。「成果の概要」以外に添付する資料 <input checked="" type="checkbox"/> 無 <input type="checkbox"/> 有()			
会計報告	交付を受けた助成金額	350,000 円		
	使用した助成金額	350,000 円		
	返納すべき助成金額	0 円		
	助成金の使途内訳 (差し支えなければ要した 経費総額をご記入ください)	費目	金額(円)	
		航空運賃	150,000	
		宿泊費	80,000	
		滞在費(日当)	20,000	
		学会参加費	80,000	
その他		20,000		
	以上に助成金を充当			
当財団の助成について	(今回の助成に対する感想、今後の助成に望むこと等お書き下さい。助成事業の参考にさせていただきます。)採用の決定が学会の開催直前にも関わらず、対応をしていただきました。本助成により、非常に実りある経験を得ることができました。心より感謝申し上げます。			

成果の概要 / 中井慎司

[会議の概要]

International Conference on Magnetism (ICM)は磁性分野における世界最大規模の国際学会である。基礎から応用までを含めた、磁性のあらゆる分野で活躍する研究者が集まり、活発な議論が行われた。新型コロナウイルス流行の影響により、本会議は6年ぶりの開催であった。

[講演概要]

Hard magnetic materials という領域にて、”Effect of local distortion around divalent iron on magnetic anisotropy in M-type ferrite: First-principles calculations” (和文：M型フェライトの磁気異方性に対する2価Feの局所歪の影響：第一原理計算) という題目で、ポスター発表を行った。以下に講演内容の概要を示す。

M型フェライト($A\text{Fe}_{12}\text{O}_{19}$, $A = \text{Sr, Ba, Ca, ...}$)はフェライト磁石用の硬磁性材料である。AカチオンをLaで置換した $A_{1-x}\text{La}_x\text{Fe}_{12}\text{O}_{19}$ の低温での磁気異方性は2価Fe濃度に線形ではなく、 $A\text{Fe}_{12}\text{O}_{19}$ や $\text{LaFe}_{12}\text{O}_{19}$ よりも弱くなり、 $x \sim 0.5$ でスピン再配列転移のような異常な磁化の不連続を示す。遷移金属の局所磁気異方性は配位多面体の歪みに敏感であることが理論的に示唆されており、 $A_{1-x}\text{La}_x\text{Fe}_{12}\text{O}_{19}$ ($x \sim 0.5$)の磁化の不連続は Fe^{2+} カチオン周辺の局所歪みによる局所的な磁気異方性に起因すると考えられるが、この局所歪を実験的に検証することは困難である。そこで本研究では Fe^{2+} が占有する2a八面体サイトの局所歪みをDFT計算を用いて求めた。2aサイトの $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ 比をパラメータとすることで、2aサイトのFeカチオンの半数が2価の場合に観測される異常な振る舞いの起源を考察した。

2a八面体サイトに Fe^{2+} と Fe^{3+} が同時に存在する場合、 Fe^{2+} が占有する2aサイトは局所的な歪みを伴って構造が最適化された。 Fe^{2+} カチオンの数が半分(残りは Fe^{3+})のとき、八面体の2a- Fe^{2+} は縮小し($V = 10.8164 \text{ \AA}^3$)、2a- Fe^{2+} は対角線方向に圧縮歪みを伴ってわずかに拡大した($V = 12.1271 \text{ \AA}^3$)。これは2a- Fe^{2+} の C_3 対称性の破れを意味する。2a- Fe^{2+} の圧縮方向はランダムであり、この対称性の破れがc軸を指向する一軸磁気異方性を弱める可能性が示唆される。2a- Fe^{2+} 周辺の局所歪みは $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ 比に依存しており、局所歪みの大きさと組成に含まれる Fe^{2+} 濃度の関係から中間組成($x \sim 0.5$)での磁化の異常な振る舞いが説明される。

[その他の成果]

上記の講演において多くの研究者と議論を交わすことができた。特にErnst Abbe University of Applied Sciences JenaのProf. Töpferとは報告者が行った研究手法に関する詳細な議論ができ、また今後の方針としてメスバウア分光を用いた実験的手法の提案や、その手法の専門家の紹介をいただいた。

本会議では関連分野の講演を数多く聴講することができ、最新の研究動向や新たな知見を得ることができた。またポスター講演においては、同年代の研究者を含め、関連分野の研究者と意見を交換し、自身の研究ネットワークを新たに形成することができた。

[謝辞]

以上のように、本会議では自身の研究内容を世界の研究者と議論を交わすことに加えて、新たな研究ネットワークを形成することができた。京都大学教育研究振興財団にお礼申し上げます。