

平成 27 年 3 月 31 日

プログラム名：無充電で長期間使用できる究極のエコ IT 機器の実現

PM 名：佐橋 政司

プロジェクト名：交差相関電界書き込み磁気記録プロジェクト

委 託 研 究 開 発

実 施 状 況 報 告 書 ( 成 果 )

平成 2 6 年 度

研究開発課題名：

高性能電気磁気効果薄膜材料の開発

研究開発機関名：

福島工業高等専門学校

研究開発責任者

小田 洋平

# 当該年度における計画と成果

## 1. 当該年度の担当研究開発課題の目標と計画

平成 26 年度は  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  のネール温度に対する静水圧効果の検討および  $\text{Cr}_2\text{O}_3 \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$  の磁気異方性定数の決定を実施する計画であった。 $\text{Cr}_2\text{O}_3$  のネール温度に対する静水圧効果の検討では、実験と定量的に比較が可能な理論計算の結果を提示し、 $\text{Cr}_2\text{O}_3$  のネール温度向上のための方向性を示すことを目標とした。また  $\text{Cr}_2\text{O}_3 \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$  の磁気異方性定数の決定では、 $\text{Cr}_2\text{O}_3 \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$  の結晶磁気異方性を詳細に解析し、その機構を理解するための知見を示すことを目標とした。

## 2. 当該年度の担当研究開発課題の進捗状況と成果

### 2-1 進捗状況

平成 26 年度は  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  のネール温度に対する静水圧効果の検討および  $\text{Cr}_2\text{O}_3 \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$  の磁気異方性定数の決定を計画していたが、 $\text{Cr}_2\text{O}_3$  のネール温度に対する静水圧効果について重点的に研究を行った。 $\text{Cr}_2\text{O}_3$  のネール温度に対する静水圧効果の検討に関する計画における本研究開発責任者の理論計算は、静水圧下における交換相互作用定数の評価の段階まで完了した。また  $\text{Cr}_2\text{O}_3 \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$  の磁気異方性定数の決定については計算機使用環境の制約から次年度に持ち越しとした。

### 2-2 成果

はじめに  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  のネール温度に対する静水圧効果について調べるために、初めに  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  結晶の体積を圧縮した場合の結晶軸の収縮に関する第一原理計算を行った。図 1 は圧縮された体積比  $V/V_{\text{exp}}$  に対する  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  の面内・面直格子定数  $a \cdot c$  の計算結果である。格子定数  $a \cdot c$  は体積圧縮により等方的に収縮することが確認される。なおこの等方圧縮の傾向は x 線回折から評価される  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  の格子定数への静水圧効果の実験でも観測されており、本課題での理論計算の結果と実験結果が一致していることが確認された。

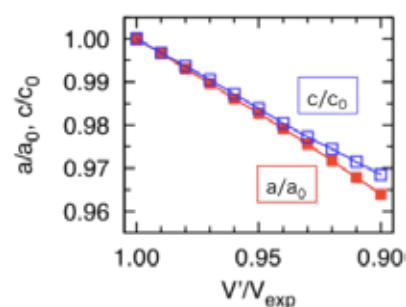
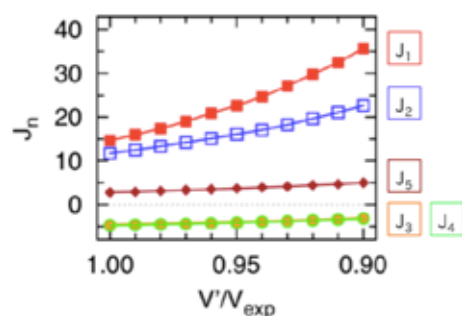


図1

次にネール温度を理論計算で求めるために必要な交換相互作用定数を第一原理計算によって評価したところ、体積圧縮によって第 1・第 2 近接の交換相互作用定数が顕著に増大することがわかった。図 2 -a は  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  結晶中の第 1 近接から第 5 近接までの交換相互作用定数 ( $J_1 \sim J_5$ ) の体積比依存性の計算結果である。ここで交換相互作用定数の評価手法については、本研究開発責任者が産総研ポスドク研究員時代に開発した手法を用いた。図 2 -a から体積の圧縮により特に第 1・第 2 近接相互作用



定数  $J_1 \cdot J_2$  が一様に増大する傾向がみられる。このことから  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  のネール温度は静水圧効果によって増大する傾向を示すことが推測される。

### 2-3 新たな課題など

$\text{Cr}_2\text{O}_3$  のネール温度に対する静水圧効果について検討を進めた結果、交換相互作用定数は  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  結晶の体積のほか Cr イオンの位置に対しても敏感に変化する可能性が示唆された。したがって、Cr イオンの位置が最適構造からずれている場合の交換相互作用定数やネール温度について再度検討を行う必要があるものと考えられる。

また  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  のネール温度向上指針として、本研究課題責任者は  $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{Cr}_2\text{O}_3$  積層によるスピン相関の増強というアプローチを別途提案してきた。こちらのアプローチに関して、 $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{Cr}_2\text{O}_3/\text{Fe}_2\text{O}_3$  サンドイッチ構造などの新たな積層構造系におけるスピン相関増強の可能性についても次年度以降の検討項目に加える必要がある。

## 3 . アウトリーチ活動報告

特になし